

Ricardo Rodrigues Justino da Silva

**Análise de Fenômenos Críticos no Modelo**  
***Rock-Paper-Scissors***

São Carlos - SP, Brasil

Julho de 2019

Ricardo Rodrigues Justino da Silva

**Análise de Fenômenos Críticos no Modelo**  
***Rock-Paper-Scissors***

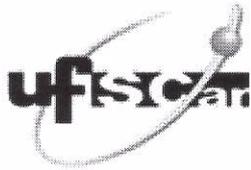
Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de São Carlos como parte dos requisitos necessários para a obtenção do título de Mestre em Física.

Universidade Federal de São Carlos  
Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia  
Programa de Pós-Graduação em Física

Orientador: Prof. Dr. Francisco Ednilson Alves dos Santos

São Carlos - SP, Brasil

Julho de 2019



# UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS

Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia  
Programa de Pós-Graduação em Física

---

## Folha de Aprovação

---

Assinaturas dos membros da comissão examinadora que avaliou e aprovou a Defesa de Dissertação de Mestrado do candidato Ricardo Rodrigues Justino da Silva, realizada em 03/07/2019:

---

Prof. Dr. Francisco Ednilson Alves dos Santos  
UFSCar

---

Prof. Dr. Dionísio Bazeia Filho  
UFPB

---

Prof. Dr. Leonardo Kleber Castelano  
UFSCar

Certifico que a defesa realizou-se com a participação à distância do(s) membro(s) Dionísio Bazeia Filho e, depois das arguições e deliberações realizadas, o(s) participante(s) à distância está(ão) de acordo com o conteúdo do parecer da banca examinadora redigido neste relatório de defesa.

---

Prof. Dr. Francisco Ednilson Alves dos Santos

*Aos meus pais e amigos.*

# Suporte Financeiro

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

# Agradecimentos

Agradeço aos meus pais Cícero Justino e Rita de Cássia, que com todo seu amor sereno sempre me apoiaram, ainda que sem saber ao certo qual era meu objeto de trabalho e, mesmo com recursos limitadíssimos, investiram todo o necessário para que eu continuasse perseguindo meus sonhos.

Aos meus irmãos Bruno e Maria de Fátima e toda minha família pelo apoio.

À Professora Dra. Silvia Chiacchiera pela oportunidade de ter minha primeira vivência profissional na área de simulação computacional no estágio de verão na Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade de Coimbra em Portugal.

Aos meus amigos, membros e atletas da Atlética da Física e Engenharia Física da UFSCar, pessoas empenhadas em difundir a cultura do esporte para a melhoria de vida e saúde mental dos estudantes do Departamento de Física e agregados.

Aos meus amigos Renan, Caique e Jeferson pela paciência e companheirismo nos momentos de lazer e principalmente nos momentos difíceis.

Ao meu grande amigo Marcos Alberto, cuja paciência e ajuda foram imprescindíveis para à realização do presente trabalho. Obrigado Marcão, de coração!

Ao Professor Dr. Dionisio Bazeia pela colaboração.

Por fim, gostaria de expressar minha imensa admiração e gratidão ao Professor Dr. Francisco Ednilson, meu orientador e amigo que, quando ninguém acreditou no meu potencial, nem mesmo eu, ele acreditou e com toda sua paciência e experiência me fez acreditar que eu era capaz, conseguindo, portanto, realizar esse presente trabalho.

*"Os circuitos de consagração social serão tanto mais eficazes quanto maior a distância social do objeto consagrado."*

*Pierre Bourdieu*

# Resumo

O presente trabalho foi desenvolvido com o propósito de analisar fenômenos críticos no modelo *Rock-Paper-Scissors*, constituído por três espécies e o espaço vazio, distribuídos inicialmente de maneira aleatória numa rede quadrada, em que uma célula ativa pode interagir com apenas um de seus quatro vizinhos próximos (células passivas), onde as possíveis interações são: movimentação (célula ativa e passiva trocam de lugar), reprodução (célula ativa preenche um espaço vazio) e predação (célula ativa elimina a célula passiva, criando um espaço vazio). Em suma, trata-se de um modelo com interação cíclica sem direção privilegiada, mas que apresenta assinaturas de uma transição de fase contínua do estado de diversidade (fase simétrica) para o de uniformidade (fase assimétrica). Com isso, fomos motivados a estudar esse tipo de sistema e analisar como a variação de um de seus parâmetros de controle, a reprodução  $\mu$ , influencia o sistema quando  $\mu \rightarrow \mu_c$ , sendo  $\mu_c$  a reprodução crítica. E a partir da realização de experimentos numéricos calcular os expoentes críticos do sistema. Por fim, amparados na teoria abordada nos primeiros capítulos desse presente trabalho, tentar identificar qual a classe de universalidade que o modelo *Rock-Paper-Scissors* com três espécies e o espaço vazio pertence.

**Palavras-chave:** Fenômenos Críticos. Expoentes Críticos. Modelo *Rock-Paper-Scissors*. Biodiversidade. Formação de Padrões. Dinâmica de Populações.

# Abstract

This present work was developed with the purpose of analyzing critical phenomena in the *Rock-Paper-Scissors* model, consisting of three species and the empty site, initially distributed randomly in a square lattice, in which an active cell can interact with only one of its four neighbors (passive cells). The possible interactions are classified as motion (active and passive switch their positions), reproduction (active reproduces filling an empty site), or predation (active predaes the passive generating an empty site). In summary, it is a cyclic interaction model with no privileged direction, however it shows signatures of a continuous phase transition from the diversity (symmetric phase) to uniformity (non symmetric phase). This way, we were motivated to study this type of system and analyze how the variation of one of its control parameters, the reproduction parameter  $\mu$ , influences the system when  $\mu \rightarrow \mu_c$ , where  $\mu_c$  is the critical reproduction, and by performing numerical experiments identify to which universality class of the *Rock-Paper-Scissors* model with three species and the empty site belongs.

**Keywords:** Critical Phenomena, Critical Exponents, Rock-Paper-Scissors Model. Biodiversity. Pattern formation. Population Dynamics.

# Lista de ilustrações

Figura 1 – Configuração inicial do sistema: $B$ representa a espécie azul, $R$ representa a espécie vermelha, $Y$ representa a espécie amarela e $e$ representa o espaço vazio. <i>Fonte:</i> Próprio autor. . . . .	18
Figura 2 – Gráfico da Probabilidade de extinção, $P_{ext}$ , em função da mobilidade, $M$ , das espécies. A mobilidade abaixo do valor crítico $M_c$ induz à biodiversidade, enquanto que acima deste valor a diversidade é comprometida e o sistema tende à uniformidade. Simulações realizadas para redes de $N_s = 20 \times 20$ (verde), $N_s = 30 \times 30$ (vermelho), $N_s = 40 \times 40$ (roxo), $N_s = 100 \times 100$ (azul), $N_s = 200 \times 200$ (preto). Simulações realizadas para o tempo da ordem de $N_s$ , para cada caso. <i>Fonte:</i> Figura retirada da referência [26]. . . . .	19
Figura 3 – Formação de padrões espirais para diferentes valores de mobilidade. <i>Fonte:</i> Figura retirada da referência [29]. . . . .	20
Figura 4 – Exemplo de transformação de escala <b>(a)</b> Função original. <b>(b)</b> Reescala dos eixos e da função $f(\mathbf{r})$ . <i>Fonte:</i> Figura retirada da referência [2]. . . . .	22
Figura 5 – Esquema do modelo de Ising na rede quadrada quando a temperatura se aproxima da temperatura crítica. Cada célula escura é associada a um spin <i>up</i> e cada célula branca um spin <i>down</i> . O comprimento de correlação $\xi$ pode ser pensado como sendo aproximadamente a dimensão linear de uma ilha de spins alinhados. <b>(a)</b> $T \gg T_c$ . <b>(b)</b> $T \gtrsim T_c$ . <b>(c)</b> $T = T_c$ . <i>Fonte:</i> Figura retirada da referência [2]. . . . .	26
Figura 6 – Vetores apontando em $q$ direções simétricas de um hipertetraedro de dimensão $q - 1$ . <b>(a)</b> $q = 2$ . <b>(b)</b> $q = 3$ . <b>(c)</b> $q = 4$ . <i>Fonte:</i> Figura retirada da referência [6]. . . . .	27
Figura 7 – Esquema de interação entre as três espécies, com predação à direita. <i>Fonte:</i> Próprio autor. . . . .	29
Figura 8 – Ilustração das regras de interação do modelo <i>rock-paper-scissors</i> . <b>(a)</b> Matriz inicial gerada aleatoriamente. <b>(b)</b> Espécie vermelha (R) predadora a espécie azul (B). <b>(c)</b> Espécie amarela (Y) troca de lugar com a espécie azul (B). <b>(d)</b> Espécie vermelha (R) se reproduz. . . . .	32
Figura 9 – Ilustração da distância mínima entre células ativas, os círculos azuis representam as células ativas, os quadrados vermelhos representam os vizinhos próximos (células passivas) e os triângulos pretos são os pontos que serão processados quando quando outras submatrizes forem consideradas. <i>Fonte:</i> Próprio autor. . . . .	32

Figura 10 – Fluxograma do processamento computacional de acordo com a biblioteca <i>multiprocessing</i> do <i>Python</i> . <b>(a)</b> Ilustração da estrutura de processamento de um código serial, onde $m$ é um núcleo qualquer e $n$ o número total de núcleos do computador. <b>(b)</b> Ilustração da estrutura de processamento de um código em paralelo; <i>map</i> : é a rotina responsável por dividir o programa principal e distribuí-lo nos núcleos disponíveis; <i>reduce</i> : é a rotina responsável por reagrupar os resultados obtidos em cada núcleo. . . . .	33
Figura 11 – Esquema dos anéis gerados para o cálculo das médias angulares. A região escura representa os pontos selecionados para cálculo das médias. <i>Fonte</i> : Próprio autor. . . . .	34
Figura 12 – Formação de padrões espaciais para diferentes valores de reprodução em uma rede quadrada. <b>(a)</b> Distribuição inicial das espécies para qualquer valor de $\mu$ . <b>(b)</b> $\mu \gg \mu_c$ . <b>(c)</b> $\mu > \mu_c$ . <b>(d)</b> $\mu \gtrsim \mu_c$ . <b>(e)</b> $\mu < \mu_c$ <i>Fonte</i> : Próprio autor. . . . .	40
Figura 13 – Comportamento das abundâncias globais das espécies em função do tempo. <b>(a)</b> $\mu \gg \mu_c$ . <b>(b)</b> $\mu > \mu_c$ . <b>(c)</b> $\mu \gtrsim \mu_c$ . <b>(d)</b> $\mu < \mu_c$ <i>Fonte</i> : Próprio autor. . . . .	41
Figura 14 – Comportamento do parâmetro de ordem em função do tempo. <b>(a)</b> $\mu \gg \mu_c$ . <b>(b)</b> $\mu > \mu_c$ . <b>(c)</b> $\mu \gtrsim \mu_c$ . <b>(d)</b> $\mu < \mu_c$ . <i>Fonte</i> : Próprio autor. . . . .	41
Figura 15 – Comportamento do módulo ao quadrado do parâmetro de ordem global $\Psi_g$ em função do tempo. <b>(a)</b> $\mu \gg \mu_c$ . <b>(b)</b> $\mu > \mu_c$ . <b>(c)</b> $\mu \gtrsim \mu_c$ . <b>(d)</b> $\mu < \mu_c$ <i>Fonte</i> : Próprio autor. . . . .	42
Figura 16 – Função de correlação no espaço recíproco. <i>Fonte</i> : Próprio autor. . . . .	43
Figura 17 – Comparação qualitativa da função de correlação no espaço recíproco. <b>(a)</b> Dados numéricos de uma única realização sem médias temporais. <b>(b)</b> Dados numéricos com médias temporais. <i>Fonte</i> : Próprio autor. . . . .	43
Figura 18 – Concentração dos momentos ao redor de $\mathbf{k} = 0$ . <b>(a)</b> $\mu \gg \mu_c$ . <b>(b)</b> $\mu > \mu_c$ . <b>(c)</b> $\mu \gtrsim \mu_c$ . <i>Fonte</i> : Próprio autor. . . . .	44
Figura 19 – Função de correlação com as médias angulares no espaço de $k$ . <b>(a)</b> Função de correlação para diferentes $\mu$ . <b>(b)</b> $\mu \gg \mu_c$ . <b>(c)</b> $\mu > \mu_c$ . <b>(d)</b> $\mu \gtrsim \mu_c$ . <i>Fonte</i> : Próprio autor. . . . .	45
Figura 20 – Comparação entre a função de correlação com o método de reescala com o <i>Ansatz</i> . <b>(a)</b> $\mu \gg \mu_c$ . <b>(b)</b> $\mu > \mu_c$ . <b>(c)</b> $\mu \gtrsim \mu_c$ . <i>Fonte</i> : Próprio autor. . . . .	46
Figura 21 – Gráfico dos parâmetros do <i>Ansatz</i> em função do módulo da diferença entre $\mu$ e $\mu_c$ . <b>(a)</b> Gráfico para o calculo de $\nu$ . <b>(b)</b> Gráfico para o calculo de $\eta$ . <i>Fonte</i> : Próprio autor. . . . .	46
Figura 22 – Método de reescala puro da função de correlação. <b>(a)</b> Gráfico da função de correlação para diferentes valores de $\mu$ . <b>(b)</b> Gráfico da função de correlação reescalada. <i>Fonte</i> : Próprio autor. . . . .	47

Figura 23 – Gráfico dos parâmetros de reescala puro. **(a)** Gráfico para o cálculo de  $\nu$ . **(b)** Gráfico para o cálculo de  $\eta$ . *Fonte:* Próprio autor. . . . . 47

# Lista de tabelas

Tabela 1	– 1 - Método de reescala com <i>Ansatz</i> . 2 - Método de reescala puro. 3 - Modelo de Potts padrão de acordo com a referência [35]. 4 - Modelo do Potts planar de acordo com a referência [32]. . . . .	45
Tabela 2	– Valores dos parâmetros iniciais da simulações numéricas - <i>Parte 1</i> . . .	57
Tabela 3	– Valores dos parâmetros iniciais da simulações numéricas - <i>Parte 2</i> . . .	58

# Sumário

1	<b>INTRODUÇÃO</b>	10
1.1	Desenvolvimento da Teoria de Fenômenos Críticos	10
1.2	Modelo e Algoritmo	12
1.3	Diversidade, Uniformidade e a formação de padrões	15
1.4	Panorama Geral	16
2	<b>FENÔMENOS CRÍTICOS</b>	18
2.1	Funções Homogêneas	18
2.2	Hipótese de Escala	19
2.3	Função de Correlação	19
2.4	Transição de Fase de Segunda Ordem	20
2.5	Modelo de Potts	23
2.6	Parâmetros de Ordem e Simetria $Z_N$	25
3	<b>METODOLOGIA</b>	27
3.1	Geração dos Dados	27
3.2	Paralelização	28
3.3	Algoritmo de leitura e tratamento dos dados	29
4	<b>RESULTADOS E DISCUSSÃO</b>	34
4.1	Distribuição das Espécies	34
4.2	Espaço Recíproco	38
5	<b>CONSIDERAÇÕES FINAIS</b>	44
	<b>REFERÊNCIAS</b>	46
	<b>APÊNDICES</b>	49
	<b>APÊNDICE A – FUNÇÃO DE CORRELAÇÃO</b>	50
	<b>APÊNDICE B – DELTA DE DIRAC</b>	51
	<b>APÊNDICE C – DADOS DAS SIMULAÇÕES</b>	53

# 1 Introdução

Neste capítulo será apresentada uma abordagem histórica para o surgimento da teoria de fenômenos críticos e transições de fase, com o intuito de ambientar o leitor as principais ideias dessas teorias. Será discutido brevemente o conceito de *classe de universalidade* com alguns exemplos de modelos físicos que serviram de base para a construção da teoria. Por fim, uma discussão introdutória do modelo *Rock-Paper-Scissors* e da formação de padrões espaciais que serão discutidos com mais detalhes nos próximos capítulos. Para fechar a seção teremos um panorama geral do que será abordado ao longo desse presente trabalho.

## 1.1 Desenvolvimento da Teoria de Fenômenos Críticos

A existência do ponto crítico foi primeiramente observada por Andrews em 1869 [1], em um experimento envolvendo  $CO_2$  ( $T_c \sim 304 K$ ) chamado de *opalescência crítica*, fenômeno comumente observado em misturas binárias de fluidos, no qual a medida que a temperatura crítica é aproximada, os tamanhos das regiões de líquido e gás começam a flutuar em escalas de comprimentos cada vez maiores, ou seja, o comprimento de correlação diverge. À medida que as flutuações da densidade adquirem um tamanho da ordem do comprimento de onda da luz, faz com que a luz seja fortemente espalhada, de modo que o líquido normalmente transparente, pareça opaco [2]. Alguns anos mais tarde, Van der Waals [3] propôs a equação de estado para gases reais. Uma teoria análoga para ferromagnetismo foi construída em 1907 por Weiss [4], subsequentemente, outros sistemas com transição de fase foram observados e modelos que os descrevessem foram construídos.

Em 1933 Ehrenfest propôs uma classificação para transições de fase. Sabe-se atualmente, que essa classificação é imprecisa e, na prática, é utilizada somente para distinções básicas entre transições de primeira ordem, com um *salto* finito no parâmetro de ordem (a densidade na transição líquido-gás, por exemplo) e transições de segunda ordem, onde o parâmetro de ordem é contínuo. Na classificação moderna de transição de fase, temos dois tipos, cuja classificação depende se o potencial termodinâmico varia continuamente ou não no ponto de transição. Transições que envolvem o calor latente são associadas com a descontinuidade do potencial termodinâmico e são chamadas de transições de fase de primeira ordem, ou descontínuas. Por outro lado, se a transição não envolve o calor latente, o potencial termodinâmico é contínuo na transição e é definido como transição de segunda ordem ou contínua [5].

A partir de experimentos é conhecido que ao aproximarmos de um determinado ponto crítico grandezas que descrevem um sistema termodinâmico divergem e algumas ano-

malias surgem. A teoria dos fenômenos críticos é dedicada a descrever tal comportamento. Uma das ideias mais importantes que contribuiu para essa teoria é a de *universalidade*, na qual diferentes sistemas manifestam comportamentos críticos parecidos. Uma classe de universalidade é um conjunto de modelos matemáticos que apresentam um único limite invariante de escala sob o processo de renormalização de grupo. Embora os modelos dentro de uma mesma classe possam diferir radicalmente longe dos pontos críticos, seus comportamentos tendem a ser cada vez mais semelhantes à medida que o sistema se aproxima dos pontos críticos. Em particular, características assintóticas, como expoentes críticos, serão os mesmos para todos os modelos da mesma classe. O modelo de Ising [6, 7] e a teoria de percolação [6] são exemplos de modelos utilizados para definir classes de universalidade específicas em diferentes dimensões espaciais. Um outro exemplo são os modelos de  $q$ -Potts (padrão e planar) [6], onde para cada  $q$  e cada modelo padrão ou planar, se tem uma classe de universalidade. De acordo com a teoria do grupo de renormalização compreende-se que este comportamento é determinado somente por algumas propriedades gerais do sistema, como dimensão espacial, a natureza dos parâmetros de ordem (número de componentes, propriedades tensoriais, etc), simetria do problema e a natureza geral das interações (longo ou curto alcance) [8].

Uma teoria unificada de fenômenos críticos que explica a universalidade foi desenvolvida em 1937 por Landau [9]. Onde nela, é postulado que o valor de equilíbrio  $\alpha_0$  do parâmetro de ordem  $\alpha$  pode ser encontrado a partir da energia livre, tratada como um funcional de  $\alpha$  e outras variáveis que descrevem o estado macroscópico do sistema. O segundo postulado é que a energia livre é uma função analítica em todas variáveis na vizinhança do ponto crítico, propriedade que será explorada com afinco neste trabalho. Como os desvios dessas variáveis dos valores críticos podem ser sempre assumidos pequenos, apenas os primeiros termos devem ser mantidos na expansão de *Taylor* da energia livre. No final, a forma explícita da energia livre para um determinado conjunto de variáveis e uma dada simetria são equivalentes, o que explica a universalidade [8].

Intensivos estudos teóricos e experimentais de singularidades críticas se iniciaram na década de 1960. Logo verificou-se que a maioria das singularidades são, na verdade, singularidades de *lei de potência* e os expoentes, agora chamados de *expoentes críticos* [8].

Muitos modelos teóricos foram criados com o intuito de explicar os fenômenos observados, entre eles o modelo de Ising, que desempenhou um papel importante na construção da teoria moderna de fenômenos críticos [10]. Basicamente, o modelo aproxima um material ferromagnético utilizando interações entre spins adjacentes localizados em sítios de uma dada rede. A primeira informação precisa de transição de fase no modelo Ising foi obtida em 1941 por Kramers e Wannier [11], que encontraram o valor da temperatura crítica para uma rede quadrada a partir de considerações de simetria. Muitas tentativas de resolver o modelo em três dimensões e mesmo em duas com o campo externo não nulo [12]

falhavam em obter um resultado consistente. Contudo, os resultados dos cálculos numéricos se provaram importantes [13]. Primeiramente, os resultados numéricos confirmaram a ideia de universalidade [8]: as temperaturas críticas obtidas para várias redes (cúbica simples, volume centrado, face centrada, entre outras) se mostraram diferentes uma das outras, enquanto os expoentes críticos se mostraram idênticos, mas diferentes dos calculados para o modelo em duas dimensões. Além disso, a análise dos expoentes [14] levou à ideia de *critical scaling*, ou *hipótese de escala*, na qual a teoria moderna de fenômenos críticos é baseada.

A hipótese de escala foi formulada simultaneamente e independentemente por Domb e Hunter [14] para o modelo de Ising, por Window [15] para o modelo de transição líquido-gás e por Patashinskiĭ e Pokrovskiĭ [16] para sistemas ferromagnéticos. Em sistemas magnéticos, a hipótese de escala equivale essencialmente à afirmação de que a parte da energia livre por unidade de volume responsável pelas singularidades críticas pode ser considerada uma função homogênea da variável  $\tau = T - T_c$  e do campo externo  $h$ , então todos os expoentes podem ser expressos exclusivamente em termos de dois parâmetros: os valores críticos de  $\tau$  e  $h$ . Tal abordagem mostrou-se consistente com os expoentes encontrados no modelo de Ising e essa observação é o principal argumento em favor da hipótese de escala.

Kadanoff [17] generalizou a hipótese de escala para as funções de correlação e apresentou argumentos heurísticos explicando o mecanismo que dá origem a escala crítica. A construção da explicação de Kadanoff, mais tarde, desempenhou um importante papel na fundamentação conceitual do método do grupo de renormalização assim como os estudos de Patashinskiĭ e Pokrovskiĭ [18] dedicados à transição de fase do hélio (superfluidade) também contribuíram [8].

## 1.2 Modelo e Algoritmo

Estudar a dinâmica de uma população, entendendo a biodiversidade e a coevolução das espécies constitui um grande desafio, de modo que modelos matemáticos surgiram ao longo do tempo, buscando explicar o processo de competição entre espécies. Mesmo que não lineares, mas ainda determinísticos, modelos desenvolvidos por Lotka e Volterra [19, 20, 21, 22, 23] e outras de suas variantes, de modo geral, falhavam em suas previsões, uma vez que não levavam em conta efeitos estocásticos [19]. Consequentemente, somos motivados a explorar um modelo que possa nos aproximar de situações realísticas, onde efeitos estocásticos são predominantes e as características genéricas podem ser obtidas [19].

Um exemplo deste tipo de interação é encontrado na natureza com a observação do lagarto de mancha lateral da espécie *Uta stansburiana* [24], nativo da região seca da costa

oeste dos Estados Unidos e do norte do México. Esses lagartos se destacam por conta de seu polimorfismo, marcado por diferentes cores de manchas laterais que podem ser *laranjas*, *azuis* ou *amarelas* e que estão diretamente relacionadas a, diferentes estratégias de acasalamento com as fêmeas.

Os machos de manchas *laranjas* são maiores, agressivos e *ultradominantes* [25], defendem uma maior área e mantêm um maior número de parceiras. Comumente roubam as parceiras dos machos de garganta azulada, mas são vulneráveis a perder suas fêmeas para os machos de garganta amarelada.

Os machos de manchas *azuis* têm tamanho intermediário e são *dominantes*, guardam uma área menor que os machos de manchas laranjas e costumam ter poucas ou apenas uma parceira. Os lagartos com este morfo têm maior sucesso em proteger suas fêmeas dos lagartos invasores de garganta amarela, uma vez que conhecem melhor suas companheiras, mas são suscetíveis a perder para os machos de garganta alaranjada, que são maiores e mais agressivos.

Os machos de manchas *amarelas* têm sua coloração semelhante à das fêmeas, o que é aproveitado para simular *rejeição* quando invadem territórios alheios e encontram o macho dominante de morfo laranja ou azul. Ao contrário dos outros morfos, os machos de manchas amarelas não possuem território, em vez disso, eles ocupam amplos territórios que podem se sobrepor aos de outros lagartos. Esse morfo tem mais sucesso em copular com fêmeas pertencentes ao território do macho de manchas laranjas do que com as fêmeas do território guardado pelo lagarto de manchas azuis. Este morfo ainda, em casos específicos, pode assumir o comportamento de machos de garganta azul ao longo da estação reprodutiva, transformação que é, geralmente, desencadeada pela morte de um macho dominante nas proximidades. Nem todos os machos desse morfo assumem esse comportamento, mas uma vez assumido, não voltam a apresentar o comportamento anterior. De modo geral, com o intuito de perpetuar seu morfo, temos que a estratégia do lagarto de manchas amarelas ganha da estratégia ultradominante do macho de manchas laranjas, mas perde para a estratégia de guarda territorial do macho de manchas azuis; e para fechar a dinâmica cíclica, a estratégia do macho de garganta laranja ganha da estratégia do macho de garganta azul [24].

Para lidar com a complexidade desse tipo de problema, adotamos um modelo de presa-predador cíclico numa simulação estocástica de rede com condições de fronteira periódica, conhecido na literatura como modelo *Rock-Paper-Scissors (RPS)*. Este modelo descreve de maneira não hierárquica a interação entre três diferentes espécies, de modo que podemos verificar sob quais condições é possível a coexistência dessas espécies no mesmo ecossistema. As interações básicas na rede deste modelo são: movimentação, reprodução e predação, onde uma espécie selecionada pode interagir com um de seus quatro vizinhos próximos [26, 27, 28].

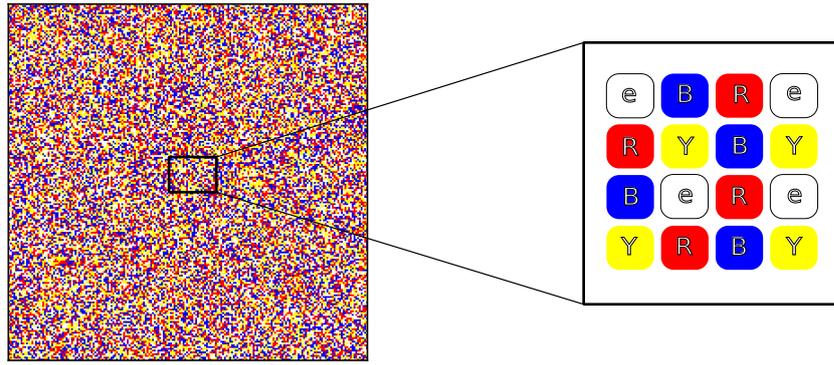


Figura 1 – Configuração inicial do sistema:  $B$  representa a espécie azul,  $R$  representa a espécie vermelha,  $Y$  representa a espécie amarela e  $e$  representa o espaço vazio. *Fonte:* Próprio autor.

As simulações desenvolvidas neste trabalho foram realizadas a partir das regras de interação baseadas no modelo  $RPS$ , no qual as regras de predação precisam de uma atenção maior, de modo geral são baseadas no jogo pedra, papel e tesoura, na qual pedra quebra a tesoura, tesoura corta o papel e o papel embrulha a pedra [28]. Consideramos então, três espécies distintas nomeadas de espécie 1, 2 e 3 representadas visualmente pelas cores *azul*, *vermelho* e *amarelo* inicialmente distribuídas aleatoriamente em uma rede quadrada de tamanho  $\mathcal{N} \times \mathcal{N}$ . Em nosso modelo consideramos também o espaço vazio descrito por  $\emptyset$  representado pela cor *branca*, como esquematizado na figura 1.

Ao longo dos últimos anos, muitos trabalhos foram desenvolvidos com o intuito de modelar sistemas biológicos baseados no modelo  $RPS$ . Um dos pioneiros em estudar como a biodiversidade do sistema pode ser comprometida ou promovida ao se variar um dos parâmetros foi Reichenbach [26], que realizou análises da influência da mobilidade na rede, definida como  $M = 2\varepsilon N_s^{-1}$ , onde  $N_s$  é o número total de sítios e  $\varepsilon$  é probabilidade de vizinhos próximos trocarem de lugar. Em seu trabalho, calculou o valor crítico da mobilidade,  $M_c = (4.5 \pm 0.5) \times 10^{-4}$ , que quando excedida faz com que a biodiversidade seja comprometida e o sistema tenda ao estado de uniformidade, sobrando apenas uma espécie, enquanto quando mantida abaixo desse limiar crítico observa-se a coexistência estável das espécies e a formação de ondas espirais em movimento no decorrer do tempo [26].

Mais tarde, estudos dessas espirais e generalizações do modelo surgiram, como realizado em [28], no qual os autores investigaram a dinâmica populacional para um número arbitrário de espécies distribuídas na rede, com o propósito de observar como o sistema se comportava com números pares e ímpares de espécies, ou seja, com diferentes simetrias do tipo  $Z_N$ . Em [27], os autores utilizaram simulação estocástica de rede bidimensional para investigar o comportamento das interfaces separando espécies distintas para o números de espécies maior ou igual a quatro, com regra de predação cíclica, onde pode ser observada

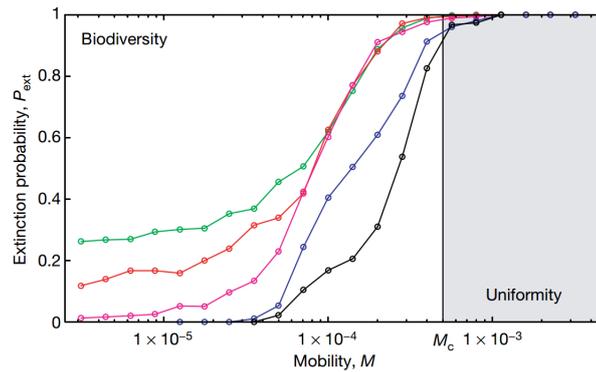


Figura 2 – Gráfico da Probabilidade de extinção,  $P_{ext}$ , em função da mobilidade,  $M$ , das espécies. A mobilidade abaixo do valor crítico  $M_c$  induz à biodiversidade, enquanto que acima deste valor a diversidade é comprometida e o sistema tende à uniformidade. Simulações realizadas para redes de  $N_s = 20 \times 20$  (verde),  $N_s = 30 \times 30$  (vermelho),  $N_s = 40 \times 40$  (roxo),  $N_s = 100 \times 100$  (azul),  $N_s = 200 \times 200$  (preto). Simulações realizadas para o tempo da ordem de  $N_s$ , para cada caso. *Fonte:* Figura retirada da referência [26].

a presença de parcerias entre as espécies. Por exemplo, para o número de espécies  $N = 6$ , temos a formação de duas parcerias  $\{1, 3, 5\}$  e  $\{2, 4, 6\}$  cada uma ocupando regiões separadas na rede. Por conseguinte, foram realizadas simulações utilizando uma teoria de campo médio, onde se observou os mesmos resultados, concluindo que se o número de espécies  $N$  aumenta, o número de parcerias pacíficas também aumentam, induzindo geração de estruturas dinâmicas estáveis nas interfaces, cuja complexidade também aumenta com  $N$ , tanto para simulações estocásticas de rede, quanto em simulações de campo médio em uma e duas dimensões. Por fim, foi mostrado que os detalhes das estruturas internas aos domínios aparentam não produzir mudanças significativas em relação à evolução das interfaces.

### 1.3 Diversidade, Uniformidade e a formação de padrões

A formação de padrões tem se mostrado crucial para a manutenção da biodiversidade [29]. A formação de clusters de cooperação pode contribuir para a defesa do território, “derrotando” e “expulsando” os invasores. Os limites críticos da mobilidade foram investigados em [19]. Neste trabalho, optamos investigar os efeitos no sistema quando se varia o parâmetro de reprodução  $\mu$  e fixando os outros dois, que como verificado, também obtemos a transição entre o estado de *diversidade* e *uniformidade*.

Neste trabalho conseguimos estimar o valor aproximado da reprodução crítica  $\mu_c$ . Temos, portanto, que acima dessa reprodução crítica encontramos a formação de espirais complexas, caracterizando a diversidade (ou biodiversidade) do sistema. Observa-se também que, quanto mais longe da reprodução crítica, menores serão os braços das espirais, enquanto que quando nos aproximamos da reprodução crítica o comprimento

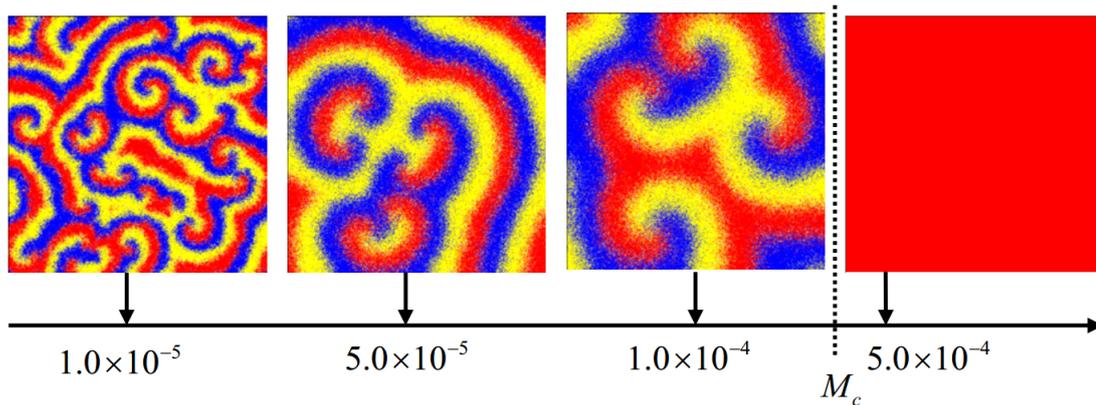


Figura 3 – Formação de padrões espirais para diferentes valores de mobilidade. *Fonte:* Figura retirada da referência [29].

desses braços tende a aumentar, ou seja, a estrutura dessas espirais cresce até o ponto em que supera o tamanho da rede. Com isso os padrões de diversidade deixam de existir e o sistema tende ao estado de uniformidade. Desse modo, durante o processo, apenas uma espécie sobrevive, enquanto que as outras duas são eliminadas, sendo que a espécie que permanece e preenche todos os sítios é determinada aleatoriamente [29]. Com isso, vamos analisar esse tipo de problema calculando numericamente os expoentes críticos.

## 1.4 Panorama Geral

Com o propósito de organizar as principais ideias do texto e guiar seu entendimento, apontam-se aqui os tópicos centrais que serão abordados ao longo dos próximos capítulos. Os primeiros dois capítulos, incluindo essa introdução, são necessários para entender o escopo geral do trabalho. As principais contribuições do presente trabalho são apresentadas nos três últimos capítulos.

No Capítulo 2 são abordadas as principais teorias que foram utilizadas no presente trabalho como o conceito de funções homogêneas, funções de correlação, transições de fase de segunda ordem, e uma explicação dos diferentes modelos de Potts e as definições matemáticas dos parâmetros de ordem do nosso sistema.

No Capítulo 3 é apresentada a metodologia para a obtenção dos dados e das técnicas de análise desenvolvidas e utilizadas no presente trabalho.

No Capítulo 4 são apresentados nossos principais resultados amparados nos fundamentos teóricos apresentados no capítulo 2. Com o intuito de apresentar de forma clara nossos resultados, o capítulo foi separado em duas partes. Na primeira, são apresentados os resultados iniciais da pesquisa, entre eles a distribuição espacial das espécies no espaço real e como ela é influenciada por um parâmetro de controle (no caso, a variação da reprodução das espécies) enquanto que os outros dois parâmetros, a movimentação e a

predação permanecem fixados. Na segunda parte são apresentados os resultados obtidos no espaço recíproco e a importância das médias temporais e angulares para a construção da função de correlação. Por fim, são apresentados os resultados das leis de potência para as funções de correlação e os resultados referentes ao objetivo do presente trabalho: os expoentes críticos.

No capítulo 5, recapitulamos nossos objetivos alcançados concluindo assim o presente trabalho e propondo estudos futuros com os resultados obtidos.

Por fim, com o intuito de elucidar alguns cálculos e propriedades apresentadas ao longo do presente trabalho, foram adicionados os Apêndices A e B, bem como o Apêndice C com os parâmetros utilizados nas simulações numéricas dispostos em tabelas.

## 2 Fenômenos Críticos

Neste capítulo serão abordados as principais teorias utilizadas no presente trabalho como o conceito de funções homogêneas, funções de correlação, transições de fase de segunda ordem, também uma explicação dos diferentes modelos de Potts e as definições matemáticas dos parâmetros de ordem do nosso sistema.

### 2.1 Funções Homogêneas

A abordagem em fenômenos críticos chamada lei de escala, ou abordagem de função homogênea, envolve fazer algumas simples suposições sobre o potencial termodinâmico, entre elas, que o potencial termodinâmico na vizinhança do ponto crítico pode ser escrito como uma função homogênea. Uma função  $f(\mathbf{r})$  é definida como homogênea, se para todos os valores do parâmetro  $\lambda$  tivermos

$$f(\lambda \mathbf{r}) = \lambda^p f(\mathbf{r}), \quad (2.1)$$

sendo  $\lambda$  o parâmetro de escala e  $p$  o grau de homogeneidade.

Uma função homogênea  $f(\mathbf{r})$  tem a propriedade de que se conhecida em um ponto qualquer e conhecendo  $p$ , então conhecemos a função para qualquer vetor  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_0$  como ilustrado na figura 4. Ou seja,

$$f(\mathbf{r}) = f(\lambda \mathbf{r}_0) = \lambda^p f(\mathbf{r}_0). \quad (2.2)$$

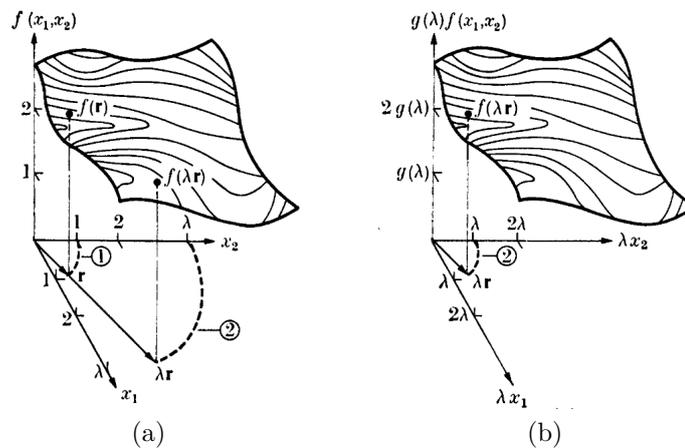


Figura 4 – Exemplo de transformação de escala **(a)** Função original. **(b)** Reescala dos eixos e da função  $f(\mathbf{r})$ . Fonte: Figura retirada da referência [2].

Como o parâmetro  $\lambda$  é arbitrário, o conhecimento da função ao redor da origem é suficiente para conhecer a função em todos os pontos. De modo geral, seja  $f$  uma função

homogênea de  $n$  variáveis,

$$f(\lambda x_1, \lambda x_2, \dots, \lambda x_{n-1}, \lambda x_n) = \lambda^p f(x_1, x_2, \dots, x_{n-1}, x_n), \quad (2.3)$$

tomando a escolha  $\lambda = x_n^{-1}$ , temos

$$f\left(\frac{x_1}{x_n}, \frac{x_2}{x_n}, \dots, \frac{x_{n-1}}{x_n}, 1\right) = x_n^{-p} f(x_1, x_2, \dots, x_{n-1}, 1). \quad (2.4)$$

Como podemos verificar na equação (2.4), a função  $f$  de  $n$  variáveis pode ser representada como o produto de uma função de escala e uma função  $F$  de  $n-1$  argumentos adimensionais

$$f\left(\frac{x_1}{x_n}, \frac{x_2}{x_n}, \dots, \frac{x_{n-1}}{x_n}, 1\right) = x_n^{-p} F(x_1, x_2, \dots, x_{n-1}), \quad (2.5)$$

observa-se que  $\lambda = x_n^{-1}$  foi tomado de forma arbitrária, mas podemos tomar qualquer  $x_i^{-1}$ , com  $i = 1, \dots, n$ .

## 2.2 Hipótese de Escala

A hipótese de escala nos permite relacionar as leis de potência com grandezas termodinâmicas e a função de correlação.

Seja  $w(q, t)$  uma função homogênea, onde  $q$  e  $t$  são dois parâmetros de controle do sistema, e composta por uma parte singular e outra regular,  $w = w^{(s)} + w^{(r)} \rightarrow w^{(s)} = w - w^{(r)}$ , onde a parte singular é responsável pelo comportamento crítico. De modo que podemos reescrever de tal modo que  $w^{(s)}(q, t) \rightarrow w^{(s)}(\epsilon, t)$ , onde  $\epsilon = q - q_c$ , tal que

$$w^{(s)}(\lambda^{a_\epsilon} \epsilon, \lambda^{a_t} t) = \lambda^p w^{(s)}(\epsilon, t), \quad (2.6)$$

para qualquer valor de  $\lambda$ . É importante enfatizar que a hipótese de escala não especifica os parâmetros  $a_\epsilon$  e  $a_t$ , mas podemos relacioná-los com os expoentes críticos. Por outro lado, o fato de todos os expoentes críticos poderem ser expressos em termos de somente dois parâmetros de escala  $a_\epsilon$  e  $a_t$  significa que, se dois expoentes críticos forem especificados, todos os outros podem ser determinados [2].

## 2.3 Função de Correlação

As funções de correlações são, em geral, obtidas como variáveis microscópicas (como spins, densidade, etc ...) em diferentes posições estão relacionadas. No nosso caso consideramos  $\Gamma(\mathbf{r})$  um campo em um sistema com simetria de translação tal que a função de correlação é dada por

$$G(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) = \langle \Gamma^*(\mathbf{r}_i) \Gamma(\mathbf{r}_j) \rangle. \quad (2.7)$$

Considerando então  $\rho$  como um parâmetro geral de controle e  $\rho_c$  como o valor na linha de transição, no limite em que  $\rho \rightarrow \rho_c$ , qualquer quantidade termodinâmica pode ser decomposta em uma parte regular, que permanece finita, mais uma parte singular que absorve todas as singularidades desta quantidade. Esta parte singular é assumida como sendo homogênea em  $\rho - \rho_c$  e nas demais variáveis. Temos então que para valores de  $\rho$  próximos de  $\rho_c$  podemos aproveitar as propriedades de homogeneidade da função de correlação [30]. Para  $\rho \gtrsim \rho_c$ , a função de correlação pode ser expressa no espaço real [31] como

$$G(r) \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}} g(r/\xi), \quad (2.8)$$

onde,  $d$  é a dimensão espacial,  $\eta$  um expoente crítico e  $\xi$  o comprimento de correlação. Para  $\rho$  próximo de  $\rho_c$  o comprimento de correlação diverge, de acordo com o seguinte comportamento

$$\xi \sim |\rho - \rho_c|^{-\nu}, \quad (2.9)$$

onde  $\nu$  descreve a singularidade do comprimento de correlação na vizinhança do ponto crítico. No espaço recíproco [31] a função de correlação é dada como

$$G(k) \sim k^{\eta-2} F(\xi k). \quad (2.10)$$

As propriedades críticas ao redor de  $\rho = \rho_c$ , são independentes da natureza microscópica para sistemas dentro de uma mesma classe de universalidade. Neste caso a função de correlação assume o comportamento descrito em (2.10). Com isso, podemos distinguir diferentes sistemas pela classe de universalidade de seus expoentes críticos no ponto crítico ou na sua vizinhança próxima. No limite que  $\rho \rightarrow \rho_c$ , temos que  $\xi \rightarrow \infty$ , ou seja, o comprimento de correlação torna-se muito maior que os demais comprimentos característicos do sistema. De modo que as principais propriedades do sistema próximo ao ponto crítico não dependem de sua estrutura de curta distância. Os demais expoentes críticos podem ser escritos em termos de  $\nu$  e  $\eta$ . Existe uma relação entre eles e são restringidos pelas relações de escala para funções termodinâmicas. Essas leis são derivadas da *hipótese de escala* [2] que afirma que, próximo ao ponto crítico, o comprimento de correlação  $\xi$  é o único comprimento relevante do sistema em termos do qual os outros comprimentos podem ser medidos [30].

## 2.4 Transição de Fase de Segunda Ordem

Na nomenclatura antiga proposta por Ehrenfest, as transições de fase eram nomeadas como sendo de ordem  $N$ , tal que a  $N$ -ésima derivada da energia livre que apresentasse uma descontinuidade [2] e sendo todas as derivadas de ordem menor que  $N$  bem definidas. Na classificação moderna de transição de fase temos dois tipos, dependendo se um potencial termodinâmico varia continuamente ou não no ponto de transição [5]. Exemplos

de transições de fase descontínuas (ou de primeira ordem) são de sólido para líquido e de líquido para gás. Enquanto que para transição de fase contínua temos por exemplo a de sistemas ferromagnéticos para paramagnéticos. O surgimento de propriedades não analíticas de sistemas próximos a região de transição de fase contínua são chamadas de *fenômenos críticos* e o ponto no diagrama de fase, onde ocorre a transição, é chamado de *ponto crítico* [5].

Em transições de fase de segunda ordem, a simetria de uma das fases é reduzida quando cruzamos a linha de fase e a outra fase é alcançada. Devido a esta redução de simetria, um parâmetro extra é necessário para descrever o sistema na fase menos simétrica, este parâmetro extra é chamado de *parâmetro de ordem*. O parâmetro de ordem é uma medida do grau de ordem para um sistema que passa por uma transição de fase, que normalmente tem seu valor nulo na fase simétrica e não nulo na fase não simétrica. Alguns exemplos de parâmetro de ordem são as densidades nas transições de sólido/líquido ou líquido/gás, e a magnetização em sistemas ferromagnéticos. Dependendo do sistema considerado, o parâmetro de ordem pode assumir a forma de um número complexo, um vetor, ou mesmo um tensor.

Uma característica interessante das transições de fase de segunda ordem é que a falta de analiticidade também está presente em quantidades que podem ser expressas como segunda derivada da energia livre, como o calor específico ou a compressibilidade, uma vez que eles exibem um comportamento singular de lei de potência na vizinhança do ponto crítico. Em geral, todas as não analiticidades de quantidades termodinâmicas em relação a um conjunto de parâmetros são descritos por um conjunto de expoentes na forma de lei de potência. Tais expoentes são chamados de *expoentes críticos*.

Transições de fase de segunda ordem apresentam a divergência no comprimento de correlação  $\xi$ , de acordo com a equação (2.9). Um exemplo onde podemos observar a divergência do comprimento de correlação é o modelo de *Ising*. Como apresentado na figura 5, temos a esquematização de uma parte do sistema quando a temperatura  $T$  se aproxima da temperatura crítica  $T_c$  submetendo o sistema a uma transição de segunda ordem. Para temperaturas menores que  $T_c$ , o sistema magnetiza e o estado é chamado de ferromagnético, ou ordenado. Isso equivale a um estado ordenado globalmente devido à presença de interações locais entre spins. Para temperaturas superiores a  $T_c$ , o sistema está no estado paramagnético, ou desordenado, nessa configuração não há correlações de longo alcance entre os spins.

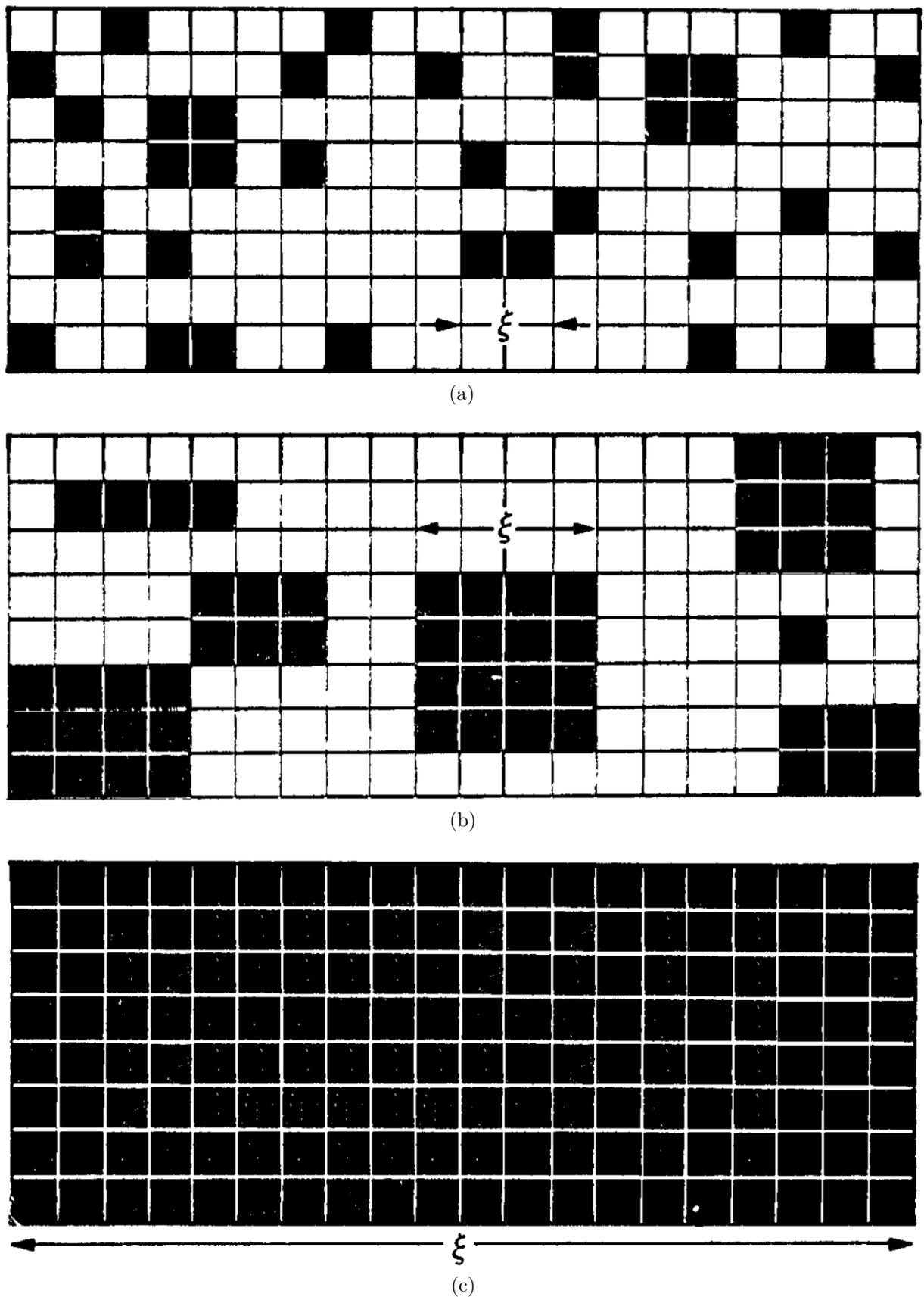


Figura 5 – Esquema do modelo de Ising na rede quadrada quando a temperatura se aproxima da temperatura crítica. Cada célula escura é associada a um spin *up* e cada célula branca um spin *down*. O comprimento de correlação  $\xi$  pode ser pensado como sendo aproximadamente a dimensão linear de uma ilha de spins alinhados. (a)  $T \gg T_c$ . (b)  $T \gtrsim T_c$ . (c)  $T = T_c$ . Fonte: Figura retirada da referência [2].

## 2.5 Modelo de Potts

A ampla influência do modelo de Ising motivou outras generalizações, como por exemplo o modelo de Potts [32]. O problema originalmente proposto por Domb (1951) ao seu aluno R. B. Potts era que as transformações propostas por Kramers e Wannier (1941) [11] para o modelo de Ising em duas dimensões, poderiam ser generalizadas para um modelo vetorial planar tendo três orientações simétricas no plano com os ângulos  $0, 2\pi, \frac{4\pi}{3}$  com os eixos. Potts sugeriu então, que a generalização proposta para um modelo vetorial planar com  $q$  orientações simétricas poderia ser modificada. Após um estudo detalhado, Potts (1952) [33] veio a concluir que a generalização poderia ser feita não só para o modelo vetorial planar com  $q$  orientações, mas também para um modelo de  $q$  estados no qual existem duas diferentes energias de interação que correspondem as possibilidades dos spins vizinhos se encontrarem no mesmo estado ou não [34].

Ao longo dos estudos de outros autores como Kasteleyn (1964), com o intuito de diferenciar os dois tipos do modelo, nomenclaturas foram propostas como, por exemplo, modelo de duas energias de  $q$  estados para *modelo de Potts* e o modelo de  $q$  orientações de *modelo vetorial de Potts* [34]. Essa nomenclatura não agradou Domb e Potts, uma vez que ambos os modelos são vetoriais [34], de modo que a sugestão do próprio Domb para a diferenciação entre os modelos foi *Modelo Planar de Potts*, ao invés de modelo vetorial de Potts, e *Modelo Padrão de Potts* ou somente *Modelo de Potts*, sendo este último também conhecido por modelo *Ashkin-Teller-Potts*, por razões históricas [6].

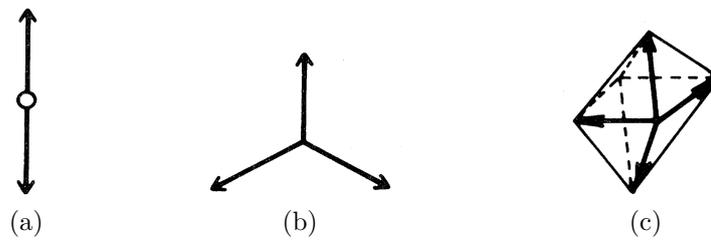


Figura 6 – Vetores apontando em  $q$  direções simétricas de um hipertetraedro de dimensão  $q - 1$ . **(a)**  $q = 2$ . **(b)**  $q = 3$ . **(c)**  $q = 4$ . *Fonte:* Figura retirada da referência [6].

Para ambos modelos de Potts, cada sítio de uma dada rede está relacionado a uma variável de spin  $\sigma_n$  que interagem com seus vizinhos próximos, com o hamiltoniano geral do sistema dado por

$$-\beta\mathcal{H} = -K \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{\sigma_i \sigma_j} + h \sum_i \sigma_j, \quad (2.11)$$

onde  $\beta = \frac{1}{kT}$ ,  $k$  constante de Boltzmann,  $K$  é uma constante de acoplamento adimensional relacionada à temperatura adimensional,  $K = \frac{1}{T}$ ,  $h$  é o campo externo aplicado e  $\sigma_n$  definido no Modelo Planar de Potts como

$$\sigma_n = e^{i\theta_n}, \quad (2.12)$$

no presente modelo, como esquematizado na figura 6, consideramos um sistema de spins confinados em um plano, cada spin apontando para uma das direções  $q$  igualmente espaçadas especificadas pelos ângulos

$$\theta_n = \frac{2\pi n}{q}, \quad (2.13)$$

com  $n = 0, 1, 2, \dots, q - 1$ . De modo que a forma mais geral de interação entre os vizinhos próximos depende somente do ângulo relativo entre os dois vetores. Isto é comumente conhecido como um sistema de simetria  $Z(q)$  e o hamiltoniano simplificado pode ser escrito como

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J(\theta_{ij}), \quad (2.14)$$

onde  $J(\theta)$  é uma função periódica com período de  $2\pi$  e  $\theta_{ij} = \theta_{n_i} - \theta_{n_j}$  é o ângulo entre os dois spins vizinhos localizados nos sítios  $i$  e  $j$  respectivamente [6]. Enquanto que para o *Modelo Padrão de Potts* a variável de spin  $\sigma_n$  assume valores inteiros iguais a  $1, 2, \dots, q$ . Os sítios adjacentes têm uma energia de interação atrativa igual à  $-J$ , com  $J > 0$ , quando os estados são iguais e nula caso contrário. Para baixas temperaturas o regime do sistema é ordenado e tende a desordenar com o aumento da temperatura. Em duas dimensões,  $d = 2$ , para  $q \leq 4$  a transição de fase é contínua e descontínua para  $q \geq 5$  [35], com o parâmetro de ordem dado por

$$\phi_s(t) = \frac{q \left( \frac{N_q(t)}{N_s} \right) - 1}{q - 1}, \quad (2.15)$$

onde  $N_q$  é o número de sítios ocupados pelos spins do estado  $q$  no tempo de geração  $t$  e  $N_s$  é o número total de sítios da rede.

Para o modelo planar, definimos o parâmetro de ordem como a média de todos os spins individuais [32]

$$\phi_p(t) = \frac{1}{N_s} \sum_{n=1}^{N_s} e^{\frac{i2\pi n}{q}}. \quad (2.16)$$

No modelo planar o acoplamento é dado como

$$J(\theta_{ij}) = -\epsilon_1 \cos(\theta_{n_i} - \theta_{n_j}), \quad (2.17)$$

para o modelo padrão

$$J(\theta_{ij}) = -\epsilon_2 \delta_{n_i, n_j}, \quad (2.18)$$

com  $\epsilon_2 > 0$  para sistemas ferromagnéticos e  $\epsilon_2 < 0$  para sistemas antiferromagnéticos. O modelo planar e o padrão são equivalentes para  $q = 2$  (Ising) e  $q = 3$  com as relações

$$\epsilon_2 = 2\epsilon_1, \quad (2.19)$$

para  $q = 2$  e para  $q = 3$  temos a relação [6]

$$\epsilon_2 = 3 \frac{\epsilon_1}{2}. \quad (2.20)$$

Com isso, pretendemos explorar as propriedades de simetria do nosso problema e encontrar equivalências com o modelo de Potts. Nossos esforços foram concentrados em analisar o *Modelo Planar de Potts*, uma vez que nosso parâmetro de ordem é um campo complexo, como será averiguado na próxima seção e discutido nos próximos capítulos.

## 2.6 Parâmetros de Ordem e Simetria $Z_N$

Uma vez que assumimos o sistema homogêneo (invariante por translação), no caso podemos também expressar um dos parâmetros de ordem do sistema como a combinação de uma amplitude e uma fase do tipo  $\psi = Ae^{i\theta}$ , onde  $A$  representa a densidade das espécies (ou abundância) e  $\theta$  uma fase referente a cada espécie. Na fase desordenada, diversidade, onde a simetria é conservada temos que na média  $\psi = 0$ , enquanto que na fase ordenada (uniformidade) espera-se que a média de  $\psi$  assumira um valor diferente de zero. Nesse processo o sistema tende a passar por uma quebra espontânea de simetria, de modo que  $\theta$  assumira uma certa direção preferencial, que a *priori* é determinada em um processo aleatório.

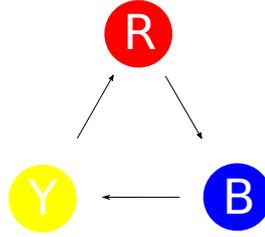


Figura 7 – Esquema de interação entre as três espécies, com predação à direita. *Fonte:* Próprio autor.

A figura 7 corresponde a forma de interação entre espécies, onde atribuímos pesos iguais de interação, de forma que nenhuma espécie tenha uma preferência a *priori* sobre as demais. Com isso podemos explorar a simetria  $Z_3$  do modelo *RPS* com três espécies [28], que como se verifica, o sistema é invariante sobre uma rotação de  $\frac{2\pi}{3}$  em  $\theta$ , levando assim à simetria  $Z_3$ .

Para cada espécie  $l$  temos um campo escalar real local  $A^l(\mathbf{r}_{ij})$  associado, que definimos como abundância da espécie  $l$ , podendo assumir valores:

$$A^l(\mathbf{r}_{ij}) = \begin{cases} 1, & \text{se espécie } l \text{ em } \mathbf{r}_{ij}. \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Por conveniência vamos utilizar em nossa análise os novos campos definidos através da transformada discreta de *Fourier*, como

$$\psi_n(\mathbf{r}_{ij}) = \sum_{l=1}^3 A^{(l)}(\mathbf{r}_{ij}) e^{i\frac{2\pi}{3}nl}, \quad (2.21)$$

com  $n = 0, 1, 2$ . Para  $n = 0$  obtemos o seguinte campo escalar:

$$\psi_0(\mathbf{r}_{ij}) = A^{(1)}(\mathbf{r}_{ij}) + A^{(2)}(\mathbf{r}_{ij}) + A^{(3)}(\mathbf{r}_{ij}), \quad (2.22)$$

para  $n = 1$  obtemos o seguinte campo complexo:

$$\psi_1(\mathbf{r}_{ij}) = A^{(1)}(\mathbf{r}_{ij})e^{i\frac{2\pi}{3}} + A^{(2)}(\mathbf{r}_{ij})e^{i\frac{4\pi}{3}} + A^{(3)}(\mathbf{r}_{ij}). \quad (2.23)$$

E para  $n = 2$ , temos que  $\psi_2 = \psi_1^*$ . Sendo  $\psi_2$ , portanto, dependente de  $\psi_1$ , de modo que podemos extrair qualquer informação de  $\psi_2$  a partir de  $\psi_1$ . Desse modo substituímos os três campos reais  $A^l$  ( $l = 1, 2$  e  $3$ ) por um campo real, renomeado como  $\phi = \psi_0$  e um campo complexo como  $\Psi = \psi_1$ . Realizando a transformada inversa de *Fourier*, também podemos expressar as densidades populacionais em termos dos campos  $\phi$  e  $\Psi$ :

$$A^{(l)}(\mathbf{r}_{ij}) = \frac{1}{3} \sum_{n=0}^2 \psi_n(\mathbf{r}_{ij}) e^{-i\frac{2\pi}{3}nl}, \quad (2.24)$$

de modo que,

$$A^{(l)}(\mathbf{r}_{ij}) = \frac{1}{3} [\phi(\mathbf{r}_{ij}) + \Psi(\mathbf{r}_{ij})e^{-i\frac{2\pi}{3}l} + \Psi^*(\mathbf{r}_{ij})e^{i\frac{2\pi}{3}l}]. \quad (2.25)$$

Para analisar o sistema macroscopicamente, precisamos definir grandezas globais calculadas por cada passo temporal, de modo que:

$$A_g^{(l)} = \frac{1}{N_s} \sum_{ij} A^{(l)}(\mathbf{r}_{ij}), \quad (2.26)$$

$$\phi_g = \frac{1}{N_s} \sum_{ij} \phi(\mathbf{r}_{ij}), \quad (2.27)$$

e por fim,

$$\Psi_g = \frac{1}{N_s} \sum_{ij} \Psi(\mathbf{r}_{ij}). \quad (2.28)$$

Conhecendo essas grandezas, podemos acompanhar a evolução do nosso sistema definindo e analisando os parâmetros de ordem  $\phi_g$  e  $\Psi_g$ . Com essas grandezas definidas, podemos também, calcular as respectivas funções de correlação e explorar o comportamento assintótico do nosso sistema. As técnicas desenvolvidas e utilizadas para o cálculo numérico dessas grandezas são apresentadas no próximo capítulo.

## 3 Metodologia

Neste capítulo é apresentada a metodologia para a obtenção dos dados e as técnicas de análise desenvolvidas e utilizadas no presente trabalho pautadas nos fundamentos teóricos citados no capítulo anterior.

### 3.1 Geração dos Dados

Este trabalho foi baseado em experimentos numéricos onde geramos nossos próprios resultados para análise, após o levantamento bibliográfico dos principais resultados de autores que trabalham com esse objeto de estudo. A obtenção dos dados se deram através de simulações computacionais com códigos desenvolvidos pelo próprio autor na linguagem *Python* e norteados pelo modelo *RPS* [28, 27, 26].

Com as condições iniciais do nosso sistema utilizamos uma matriz quadrada de ordem  $\mathcal{N} \times \mathcal{N}$  com condições periódicas de contorno e preenchida aleatoriamente. Cada sítio da rede é ocupado por um número inteiro que representa os indivíduos das espécies 1 (azul), 2 (vermelho), e 3 (amarelo) ou 0 (espaço vazio). Cada ciclo de  $\mathcal{N} \times \mathcal{N}$  interações na rede, definimos como uma unidade de tempo. Durante cada interação, um indivíduo é aleatoriamente escolhido e definido como *célula ativa*, podendo interagir com apenas um de seus quatro vizinhos próximos, este definido como *célula passiva*. As possíveis interações entre as células ativas e seus vizinhos são: *movimentação*, *reprodução* e *predação* que podem ocorrer com probabilidades  $\mathcal{P}_\epsilon$ ,  $\mathcal{P}_\mu$ ,  $\mathcal{P}_\sigma$  respectivamente, fixadas inicialmente no programa. As possíveis interações são classificadas como [28]:

**Movimentação:** A célula ativa e passiva trocam de lugar,

$$l\odot \rightarrow \odot l.$$

**Reprodução:** A célula ativa se duplica, caso a célula passiva seja um espaço vazio,

$$l\otimes \rightarrow ll.$$

**Predação:** A célula ativa elimina a célula passiva, gerando um espaço vazio,

$$l(l+1) \rightarrow l\otimes.$$

Onde  $\odot$  pode representar qualquer espécie  $l$  ou sítio vazio  $\otimes$ . O modelo *RPS* nos permite definir qual tipo de predação, se à direita ou à esquerda, e até mesmo a possibilidade simultânea dos dois tipos, mas para o presente trabalho utilizamos apenas a predação à direita por conveniência.

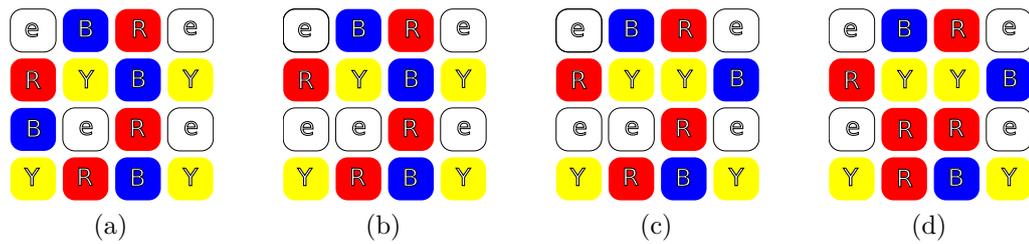


Figura 8 – Ilustração das regras de interação do modelo *rock-paper-scissors*. **(a)** Matriz inicial gerada aleatoriamente. **(b)** Espécie vermelha (R) preda a espécie azul (B). **(c)** Espécie amarela (Y) troca de lugar com a espécie azul (B). **(d)** Espécie vermelha (R) se reproduz.

## 3.2 Paralelização

Com o intuito de aproveitar melhor o poder de processamento dos computadores e economizar tempo de cálculo, paralelizamos o código construído utilizando a biblioteca *multiprocessing* no *Python*, com isso é possível reduzir a matriz geral em submatrizes e distribuí-las em função da quantidade de núcleos disponíveis no computador. Atentando para o fato da interação entre os vizinhos ser o limitante inferior para o número de submatrizes, ou seja, a distância entre as células ativas deve ser maior ou igual a três e o tamanho da rede total deve ser múltiplo da distância mínima selecionada.

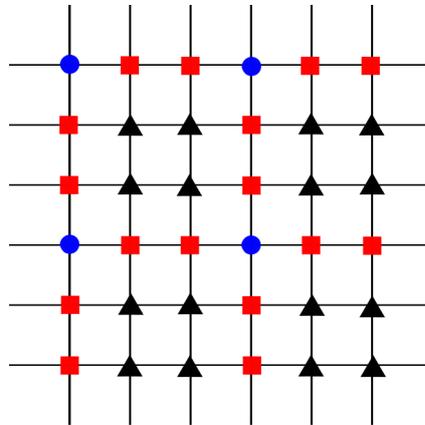


Figura 9 – Ilustração da distância mínima entre células ativas, os círculos azuis representam as células ativas, os quadrados vermelhos representam os vizinhos próximos (células passivas) e os triângulos pretos são os pontos que serão processados quando outras submatrizes forem consideradas. *Fonte:* Próprio autor.

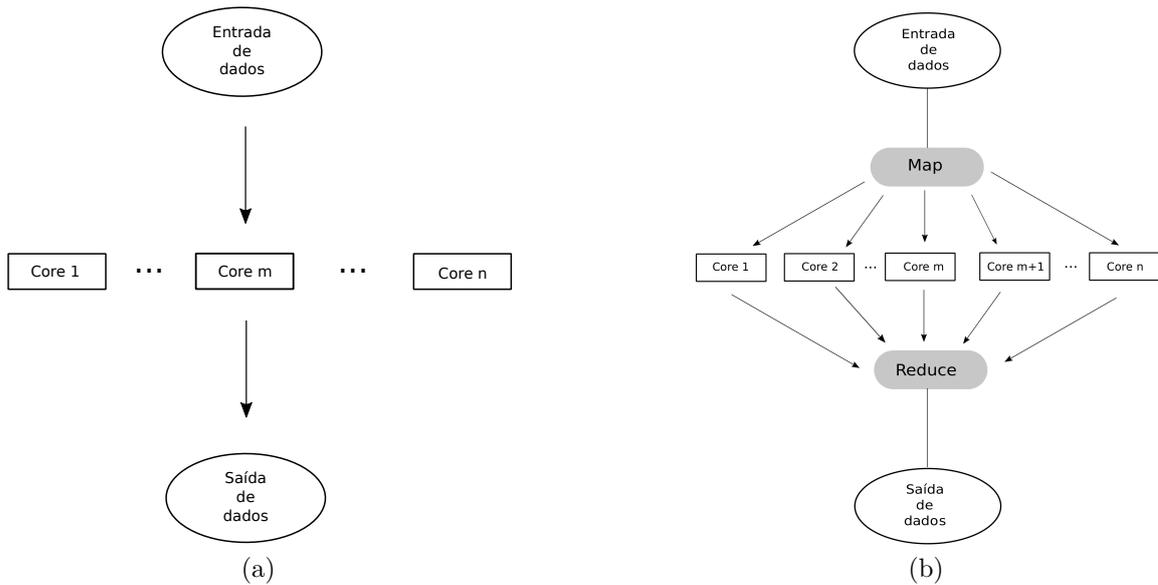


Figura 10 – Fluxograma do processamento computacional de acordo com a biblioteca *multiprocessing* do *Python*. (a) Ilustração da estrutura de processamento de um código serial, onde  $m$  é um núcleo qualquer e  $n$  o número total de núcleos do computador. (b) Ilustração da estrutura de processamento de um código em paralelo; *map*: é a rotina responsável por dividir o programa principal e distribuí-lo nos núcleos disponíveis; *reduce*: é a rotina responsável por reagrupar os resultados obtidos em cada núcleo.

### 3.3 Algoritmo de leitura e tratamento dos dados

Para acompanhar a evolução temporal do nosso sistema, construímos o código que calcula as densidades populacionais para cada espécie por geração de tempo e esquematiza as distribuições espaciais das espécies, com isso é possível calcular as abundâncias globais  $A_g^{(l)}$  e os parâmetros de ordem  $\phi_g$  e  $\Psi_g$  por unidade de tempo. Tais evoluções temporais são importantes para serem acompanhadas, uma vez que a partir dessas informações temos o indicativo de um possível fenômeno crítico e, como já definido, temos então:

$$A_g^{(l)} = \frac{1}{N_s} \sum_{ij} A^{(l)}(\mathbf{r}_{ij}), \quad (3.1)$$

$$\phi_g = \frac{1}{N_s} \sum_{ij} \phi(\mathbf{r}_{ij}), \quad (3.2)$$

e por fim,

$$\Psi_g = \frac{1}{N_s} \sum_{ij} \Psi(\mathbf{r}_{ij}). \quad (3.3)$$

Os parâmetros de ordem  $\phi_g$  e  $\Psi_g$  são obtidos computacionalmente com bibliotecas disponíveis para o *Python* da Transformada de Fourier Discreta (DFT).

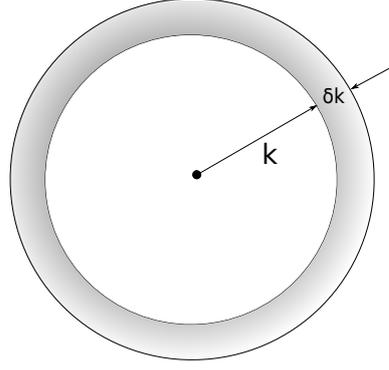


Figura 11 – Esquema dos anéis gerados para o cálculo das médias angulares. A região escura representa os pontos selecionados para cálculo das médias. *Fonte:* Próprio autor.

Para calcular as funções de correlação no espaço recíproco utilizamos as seguintes relações

$$G_{\phi_g}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \langle \phi_g \phi_g \rangle, \quad (3.4)$$

para o campo real  $\phi_g$ , e para o campo complexo  $\Psi_g$

$$G_{\Psi_g}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \langle \Psi_g^* \Psi_g \rangle. \quad (3.5)$$

No presente trabalho não foi possível realizar uma análise criteriosa da função de correlação do campo real  $\phi_g$  equação (3.4), de modo que todas as análises serão realizadas para o campo complexo  $\Psi_g$  de acordo com a equação (3.5), com isso será suprimido o subscrito de  $G$ , por conseguinte  $G_{\Psi_g} = G$ . Devido a propriedade de invariância de translação no espaço real, podemos escrever  $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  e representar a função de correlação no espaço recíproco como

$$G(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') g(\mathbf{k}), \quad (3.6)$$

para mais detalhes da equação (3.6) ver apêndice A. Com isso, ainda podemos relacionar  $\delta(\mathbf{k} = 0)$  com o número total de sítios da rede  $N_s$ , como

$$\delta(\mathbf{k} = 0) = \left( \frac{a}{2\pi} \right)^2 N_s, \quad (3.7)$$

com  $a$  igual ao espaçamento da rede. Devido à isotropia do sistema no limite termodinâmico, no espaço recíproco não temos dependência da direção de  $\mathbf{k}$ , podemos então realizar médias angulares com o intuito de diminuir os ruídos numéricos e ainda obter resultados dependentes apenas do módulo de  $\mathbf{k}$ ,  $|\mathbf{k}| = k$ .

Para o cálculo dos expoentes críticos, com o auxílio dos gráficos obtidos das funções de correlação, utilizamos um *Ansatz* tal que  $g = g(k, a_1, a_2)$ , onde  $a_1$  e  $a_2$  são parâmetros ajustáveis em função do parâmetro de controle utilizado, em particular  $(a_1, a_2) \rightarrow f(\mu)$ , com  $\mu$  sendo o parâmetro de reprodução

$$g(k) = \frac{1}{(a_1 + a_2 k^2)^{\frac{3}{2}}}, \quad (3.8)$$

$$g(k) = \frac{a_1^{-\frac{3}{2}}}{\left(1 + \left[\left(\frac{a_2}{a_1}\right)^{\frac{1}{2}} k\right]^2\right)^{\frac{3}{2}}}, \quad (3.9)$$

tal forma é motivada por parecer descrever bem os nossos resultados numéricos (ver figura 19). Com o intuito de relacionar a equação (3.9) com a equação da função de correlação no espaço recíproco (2.10) e aplicar as propriedades e relações das funções homogêneas (2.1), (2.5) e (2.6), precisamos reescrever a equação (3.9) para encontrar as relações diretas dos expoentes de  $a_1$  e  $a_2$  com os expoentes críticos  $\nu$  e  $\eta$ .

Pela observação dos gráficos de  $a_1$  e  $a_2$  em função da distância do parâmetro de controle  $\mu$  à  $\mu_c$ , vemos que

$$a_1 \sim |\mu - \mu_c|^\lambda, \quad (3.10)$$

$$a_2 \sim |\mu - \mu_c|^\chi, \quad (3.11)$$

substituindo as relações (3.10) e (3.11) na equação (3.9)

$$g(k) \sim \frac{|\mu - \mu_c|^{-\frac{3\lambda}{2}}}{\left(1 + \left[|\mu - \mu_c|^{\frac{\chi-\lambda}{2}} k\right]^2\right)^{\frac{3}{2}}}, \quad (3.12)$$

$$g(k) \sim \frac{\left(|\mu - \mu_c|^{\frac{\chi-\lambda}{2}} k\right)^{-\frac{3\lambda}{\chi-\lambda}} k^{\frac{3\lambda}{\chi-\lambda}}}{\left(1 + \left[|\mu - \mu_c|^{\frac{\chi-\lambda}{2}} k\right]^2\right)^{\frac{3}{2}}}, \quad (3.13)$$

comparando a equação (3.13) com as equações (2.10) e (2.9), temos as seguintes relações

$$\xi \sim |\rho - \rho_c|^{-\nu} \sim |\mu - \mu_c|^{-\nu} \sim |\mu - \mu_c|^{\frac{\chi-\lambda}{2}} \sim \left(\frac{a_2}{a_1}\right)^{\frac{\chi-\lambda}{2}} \quad (3.14)$$

portanto,

$$\nu = \frac{\lambda - \chi}{2}. \quad (3.15)$$

Temos também que

$$k^{\eta-2} \sim k^{\frac{3\lambda}{\chi-\lambda}}, \quad (3.16)$$

portanto,

$$\eta = 2 + \frac{3\lambda}{\chi - \lambda}. \quad (3.17)$$

Outro método utilizado no presente trabalho para o cálculo dos expoentes críticos, sem recorrer a um *Ansatz*, foi explorar as propriedades da hipótese de escala para funções homogêneas e reescalar as funções de correlação como em (2.1), (2.5) e (2.6) e encontrar relações para os expoentes críticos. Uma vez que para cada valor do parâmetro  $|\mu - \mu_c|$

temos uma função de correlação associada,  $(\mu_1, \dots, \mu_n) \rightarrow (g_1, \dots, g_n)$ , com as propriedades de funções homogêneas podemos escrever os  $\mu_{n's}$  em termos de  $\mu_1$ , conseqüentemente  $g_{n's}$  em termos de  $g_1$

$$g(|\mu_1 - \mu_c|, k') = b_1 g\left(|\mu_n - \mu_c|, \frac{k'}{b_2}\right), \quad (3.18)$$

com o auxílio dos gráficos de  $b_1$  e  $b_2$  em função da distância do parâmetro de controle  $\mu$  à  $\mu_c$ , temos que

$$b_1 \sim |\mu_n - \mu_c|^\zeta, \quad (3.19)$$

$$b_2 \sim |\mu_n - \mu_c|^\Lambda, \quad (3.20)$$

substituindo as relações (3.19) e (3.20) na equação (3.18), temos

$$g(|\mu_1 - \mu_c|, k') \sim |\mu_n - \mu_c|^\zeta g\left(|\mu_n - \mu_c|, \frac{k'}{|\mu_n - \mu_c|^\Lambda}\right), \quad (3.21)$$

tomando,

$$k = \frac{k'}{|\mu_n - \mu_c|^\Lambda} \Rightarrow k' = |\mu_n - \mu_c|^\Lambda k, \quad (3.22)$$

$$g(|\mu_1 - \mu_c|, |\mu_n - \mu_c|^\Lambda k) \sim |\mu_n - \mu_c|^\zeta g(|\mu_n - \mu_c|, k), \quad (3.23)$$

$$g(|\mu_n - \mu_c|, k) \sim |\mu_n - \mu_c|^{-\zeta} g(|\mu_1 - \mu_c|, |\mu_n - \mu_c|^\Lambda k), \quad (3.24)$$

$$g(|\mu_n - \mu_c|, k) \sim k^{\frac{\zeta}{\Lambda}} [|\mu_n - \mu_c|^\Lambda k]^{-\frac{\zeta}{\Lambda}} g(|\mu_1 - \mu_c|, |\mu_n - \mu_c|^\Lambda k), \quad (3.25)$$

comparando a equação (3.25) com as equações (2.10) e (2.9), chegamos às seguintes relações para os expoentes críticos

$$\xi \sim |\rho - \rho_c|^{-\nu} \sim |\mu - \mu_c|^{-\nu} \sim |\mu - \mu_c|^\Lambda, \quad (3.26)$$

portanto,

$$\nu = -\Lambda. \quad (3.27)$$

Temos também que

$$k^{\eta-2} \sim k^{\frac{\zeta}{\Lambda}}, \quad (3.28)$$

portanto,

$$\eta = 2 + \frac{\zeta}{\Lambda}. \quad (3.29)$$

Este último procedimento foi realizado numericamente com o *software* computacional *Mathematica*, onde foram reescaladas diferentes funções de correlação de modo que passassem por pontos específicos. Por fim, calculamos os coeficientes angulares dos gráficos de  $b_1$  e  $b_2$  em função do parâmetro de controle  $|\mu - \mu_c|$  de reprodução. O intuito

de realizar diferentes procedimentos para o cálculo dos expoentes críticos tanto algébrico quanto numérico, é validar os resultados obtidos e evitar possíveis conclusões precipitadas. Os resultados obtidos com as técnicas desenvolvidas no presente trabalho podem ser apreciados no próximo capítulo.

## 4 Resultados e Discussão

Neste capítulo são apresentados nossos principais resultados amparados nos fundamentos teóricos apresentados no capítulo 2. Com o intuito de apresentá-los de forma clara, este capítulo será separado em duas partes. Na primeira, são apresentados os resultados iniciais da pesquisa, entre eles a distribuição espacial das espécies no espaço real e como é influenciada por um parâmetro de controle, no caso, a variação da reprodução das espécies, enquanto os outros dois parâmetros, a movimentação e predação estando fixados. Na segunda parte são apresentados os resultados obtidos no espaço recíproco e a importância das médias temporais e angulares para a construção da função de correlação. Por fim, apresentaremos os resultados das leis de potência para as funções de correlação e os resultados referentes ao principal objetivo do presente trabalho: os expoentes críticos.

### 4.1 Distribuição das Espécies

Como discutido na metodologia, capítulo 3, as espécies foram inicialmente distribuídas aleatoriamente numa rede quadrada com a mesma proporção. O sistema então evolui no tempo enquanto as espécies interagem com um de seus próximos vizinhos, de modo que formam-se padrões espaciais conforme se verifica na figura 12.

No presente trabalho o tamanho da rede é fixa em  $N_s = 200 \times 200$  e o tempo total foi da ordem de  $t \sim 10N_s$ , de modo que o sistema alcance o equilíbrio estatístico como nas figuras 12b, 12c e 12d, exceto no caso da figura 12e onde  $\mu < \mu_c$ , no qual o tempo total foi menor  $t \sim 4N_s$ . Com o propósito de melhorar a fluidez da leitura, os resultados serão apresentados em termos qualitativos e, ao final do presente capítulo, os valores numéricos das simulações serão dispostos na tabela 2 e 3 no Apêndice C. Para cada passo temporal uma imagem da distribuição espacial é gerada, como na figura 12, e para todos os casos a distribuição inicial é determinada aleatoriamente seguindo o mesmo critério, como descrito no capítulo 3, indiferente de  $\mu$  como na figura 12a. Os pesos das distribuições iniciais são iguais para todas as espécies e nulos para o espaço vazio, uma vez que foi observado que a configuração inicial não influencia diretamente no resultado final.

Como observado em [26] as distribuições espaciais assumem um comportamento que, na literatura é, conhecido como formação de espirais complexas e tais padrões são fundamentais para a coexistência das espécies, regime conhecido como *diversidade* e nomeado aqui como a fase *simétrica* do sistema, observado nas figuras 12a, 12b, 12c e 12d. Nessa fase o sistema não assume nenhuma direção preferencial e o parâmetro de ordem  $\Psi_g$  tem sua média temporal aproximadamente nula.

Conforme  $\mu$  se aproxima da região em que  $\mu_c$  se encontra, o tamanho dos braços das espirais crescem, de modo que é possível observar frentes de ondas planas ao longo de toda a extensão do sistema, como na figura 12d. A medida que  $|\mu - \mu_c| \rightarrow 0$  o comprimento de correlação diverge,  $\xi \rightarrow \infty$ , e o sistema tende a fase com simetria quebrada, onde um valor específico da fase do parâmetro de ordem torna-se privilegiado em relação às outras. Regime também conhecido como *uniformidade*, no qual a diversidade, ou coexistência das espécies, foi comprometida e uma das espécies domina toda a rede, enquanto as outras espécies são extintas, o que se observa no padrão espacial exposto na figura 12e.

Para acompanhar a evolução do sistema, uma vez que as imagens das distribuições espaciais nos auxiliam apenas para uma abordagem qualitativa e classificação do regime do sistema, diversidade ou uniformidade, precisamos acompanhar a evolução temporal da abundância global das espécies  $A_g^l(t)$  e o parâmetro de ordem  $\Psi_g(t)$ . Apesar de definirmos o campo real  $\phi_g(t)$ , não foi possível analisá-lo detalhadamente, mas uma de suas aplicações seria acompanhar a evolução dos espaços vazios na rede a partir da relação  $A_g^0(t) = 1 - \phi_g(t)$ , um estudo detalhado dessa grandeza pode ser encontrado em [28] e [27]. Para os propósitos deste trabalho, o conhecimento apenas da grandeza  $A_g^0(t)$  já foi suficiente, onde nos indicava se toda a rede foi preenchida ou não e, pela construção do problema, foi possível calcular diretamente essa grandeza.

Podemos verificar nos gráficos da figura 13 o comportamento oscilatório das abundâncias globais das espécies em função do tempo, onde quanto mais longe  $\mu$  estiver de  $\mu_c$  menor será o período de oscilação. Verifica-se também que quanto mais  $\mu$  se aproxima de  $\mu_c$ , a intensidade de  $A_g^0(t)$  aumenta e observa-se uma densidade maior de espaços vazios e menor das espécies, consequentemente aumentando a distância entre elas e, assim mais tempo o sistema leva para atingir o equilíbrio estatístico. Quando ultrapassa-se a linha de transição,  $\mu < \mu_c$ , as abundâncias globais das espécies variam lentamente até o ponto em que uma das espécies se sobrepõe as outras, de tal modo que uma delas termina eliminando as outras e preenchendo toda a rede, como observado em 12e.

Analisando os gráficos da parte real do parâmetro de ordem  $\Psi_g$  em função do tempo, figura 14, observa-se que, quanto mais distante  $\mu$  estiver de  $\mu_c$ , mais rápidas serão suas variações em torno de zero, ou seja, no caso ideal a média temporal de  $\Psi_g$  é nula. Enquanto quando  $\mu$  se aproxima de  $\mu_c$  o sistema tende ao ordenamento até o ponto que  $\mu < \mu_c$  e o sistema se ordena, atingindo assim a uniformidade. Assim como se observa para o módulo ao quadrado do parâmetro de ordem na figura 15, quanto mais longe da linha de transição, menores são os períodos de oscilação, enquanto que próximo da linha de transição maiores serão esses períodos.

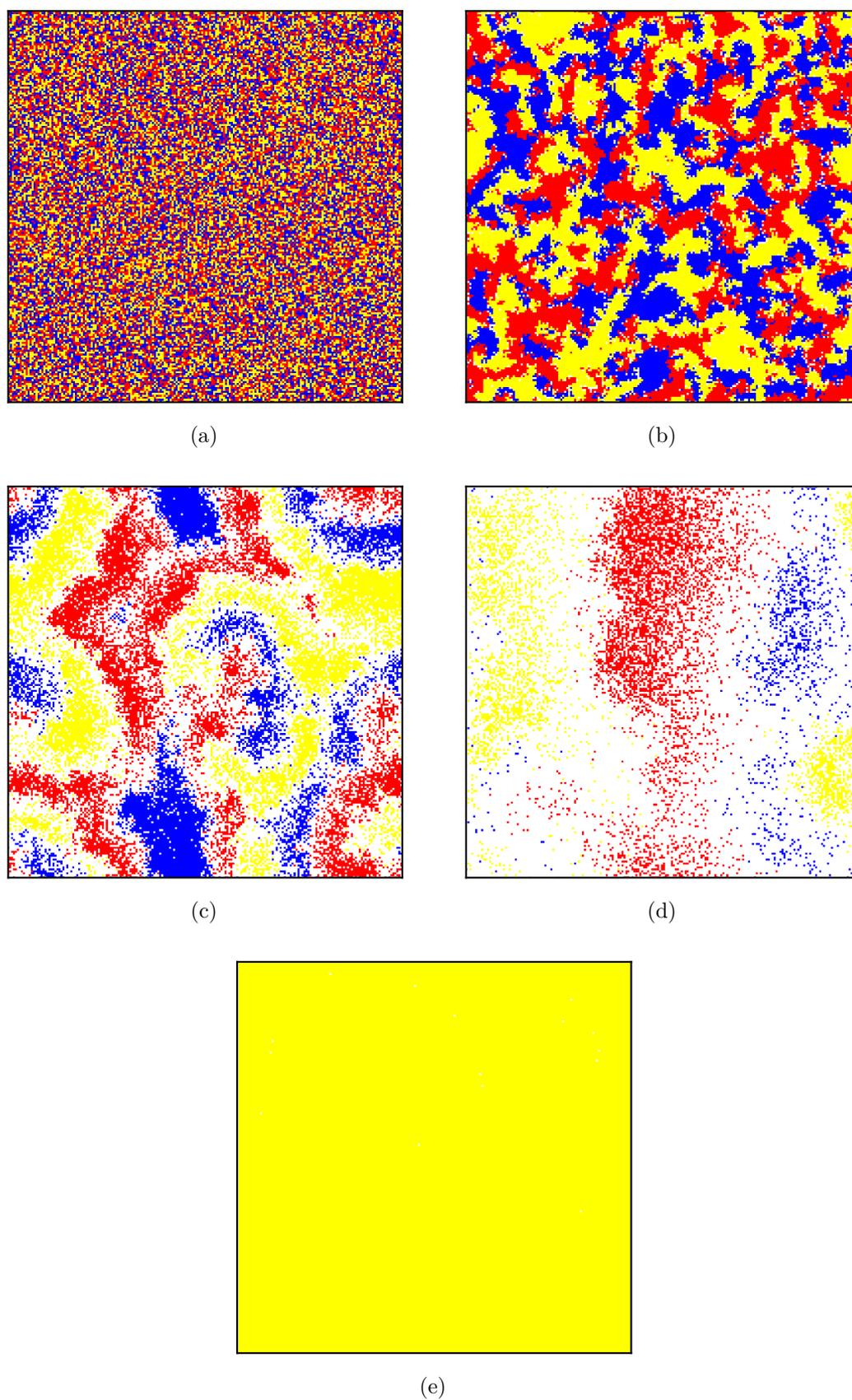


Figura 12 – Formação de padrões espaciais para diferentes valores de reprodução em uma rede quadrada. **(a)** Distribuição inicial das espécies para qualquer valor de  $\mu$ . **(b)**  $\mu \gg \mu_c$ . **(c)**  $\mu > \mu_c$ . **(d)**  $\mu \gtrsim \mu_c$ . **(e)**  $\mu < \mu_c$  Fonte: Próprio autor.

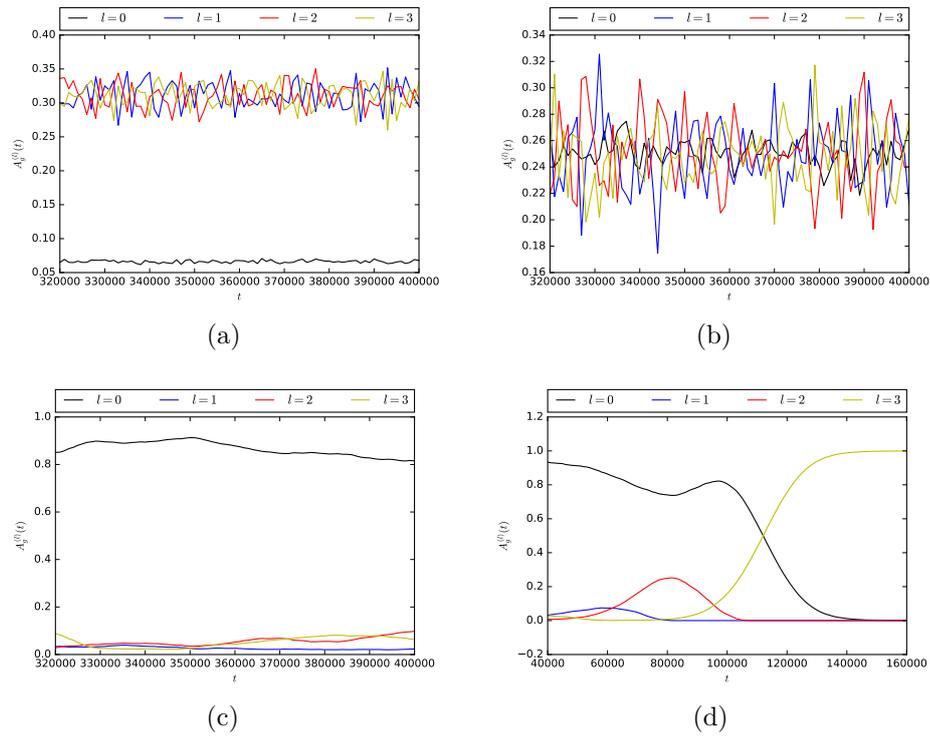


Figura 13 – Comportamento das abundâncias globais das espécies em função do tempo. **(a)**  $\mu \gg \mu_c$ . **(b)**  $\mu > \mu_c$ . **(c)**  $\mu \gtrsim \mu_c$ . **(d)**  $\mu < \mu_c$  Fonte: Próprio autor.

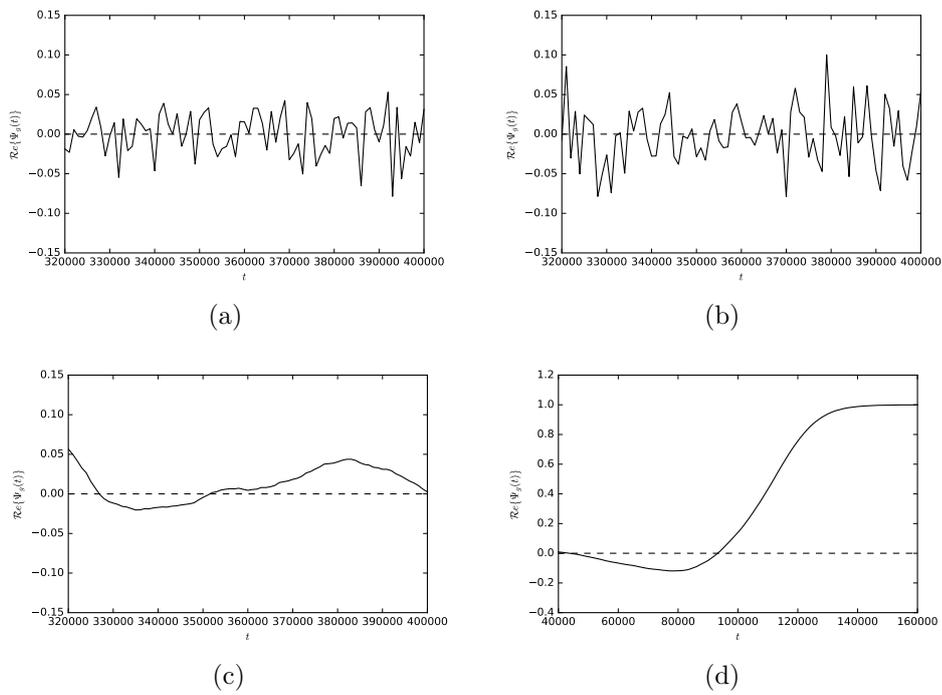


Figura 14 – Comportamento do parâmetro de ordem em função do tempo. **(a)**  $\mu \gg \mu_c$ . **(b)**  $\mu > \mu_c$ . **(c)**  $\mu \gtrsim \mu_c$ . **(d)**  $\mu < \mu_c$ . Fonte: Próprio autor.

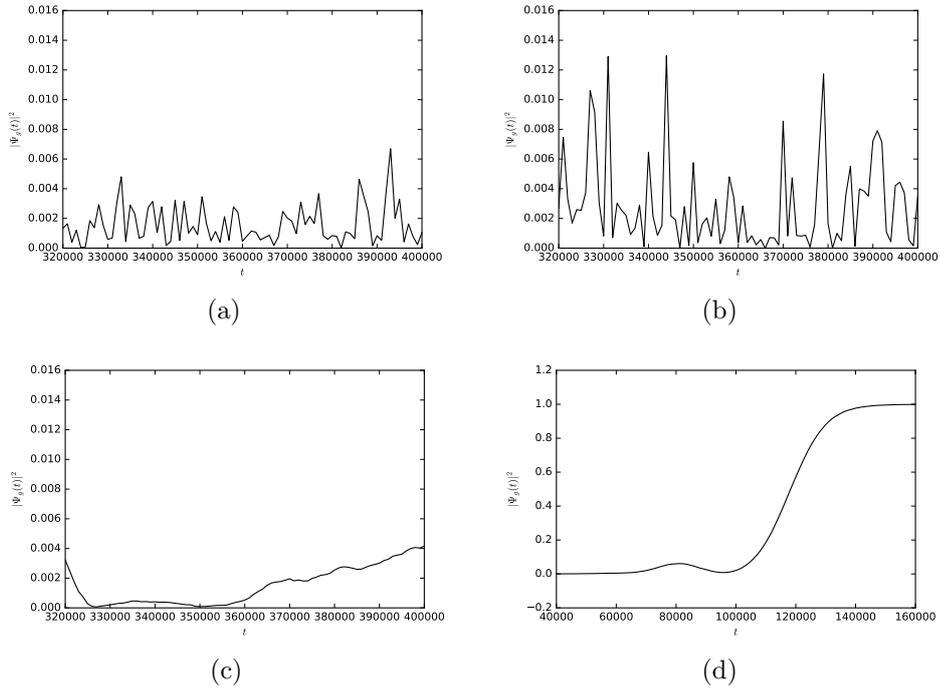


Figura 15 – Comportamento do módulo ao quadrado do parâmetro de ordem global  $\Psi_g$  em função do tempo. **(a)**  $\mu \gg \mu_c$ . **(b)**  $\mu > \mu_c$ . **(c)**  $\mu \gtrsim \mu_c$ . **(d)**  $\mu < \mu_c$  Fonte: Próprio autor.

## 4.2 Espaço Recíproco

Uma vez que supomos nosso sistema com simetria de translação, a função de correlação tende a ficar mais simples se for calculada no espaço recíproco. Após o cálculo das transformadas de Fourier numéricas para cada passo de tempo do parâmetro de ordem local  $\Psi(\mathbf{r}_{ij})$  calculamos as médias temporais com o intuito de limpar as flutuações numéricas e obtivemos os resultados apresentados nas figuras 16 e 17. A figura 16 representa a superfície da função de correlação  $g(k_x, k_y)$ , com as curvas de nível projetadas no plano  $k_x - k_y$  podemos observar a isotropia da função de correlação, o que motivou os procedimentos aqui executados. Na figura 17, apresentamos um gráfico da função de correlação, onde na horizontal temos o eixo  $k_x$ , na vertical  $k_y$  e a magnitude da função de correlação é representada pela intensidade das cores, nota-se também a importância das médias temporais para a análise dos dados obtidos. Verifica-se também com o auxílio das figuras 16 e 17b a isotropia esperada para a função de correlação a menos de algumas flutuações estatísticas no espaço recíproco, devido à simetria de rotação esperada para a função de correlação no espaço recíproco. Devido à essa propriedade, a função de correlação no espaço recíproco depende apenas do módulo de  $\mathbf{k}$  e não de sua direção, quando  $|\mathbf{k}| \ll \frac{2\pi}{a}$ , portanto, sem dependência angular. Por causa dessas características, foi possível calcular as médias angulares, eliminando qualquer dependência angular residual devido às flutuações estatísticas, e expressar a função de correlação apenas em termos de  $k$ ,  $g = g(k)$ , com

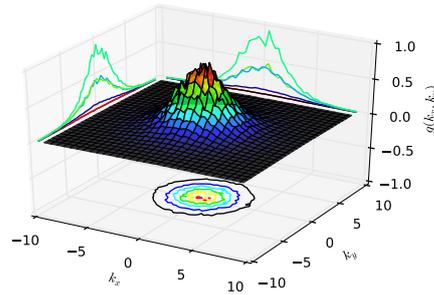


Figura 16 – Função de correlação no espaço recíproco. *Fonte:* Próprio autor.

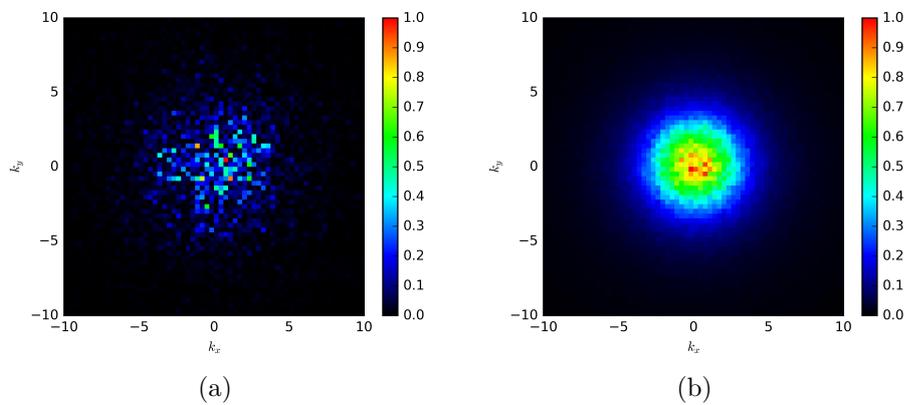


Figura 17 – Comparação qualitativa da função de correlação no espaço recíproco. **(a)** Dados numéricos de uma única realização sem médias temporais. **(b)** Dados numéricos com médias temporais. *Fonte:* Próprio autor.

$$k = |\mathbf{k}|.$$

Na figura 18, podemos observar como a distribuição de momentos se concentra ao redor de  $\mathbf{k} = 0$  quando  $\mu$  se aproxima de  $\mu_c$ , o que está de acordo com o observado também nos gráficos da figura 19. Como podemos ver na figura 19, os cálculos da função de correlação nos mostram que ela é composta por uma região de platô, uma de decaimento com alguma lei de potência e, por último, uma parte associada aos erros devido à estrutura microscópica da rede. Não foi possível realizar medidas precisas da extensão da região de platô, apenas a observação qualitativa de que quando nos aproximamos da linha de transição esta região diminui e aumenta ao passo que nos afastamos da linha de transição. Enquanto que para a região de decaimento, realizamos cálculos para encontrar com qual lei de potência a função de correlação decai e a partir de medidas do coeficiente angular  $\varphi$ , concluímos que a função de correlação decai exponencialmente com o valor do expoente sendo próximo de  $\varphi \sim -3$ .

Sendo assim, podemos comparar a função de correlação calculada numericamente com o *Ansatz* da equação (3.9) e extrair os expoentes dos coeficientes  $a_1$  e  $a_2$  a partir do

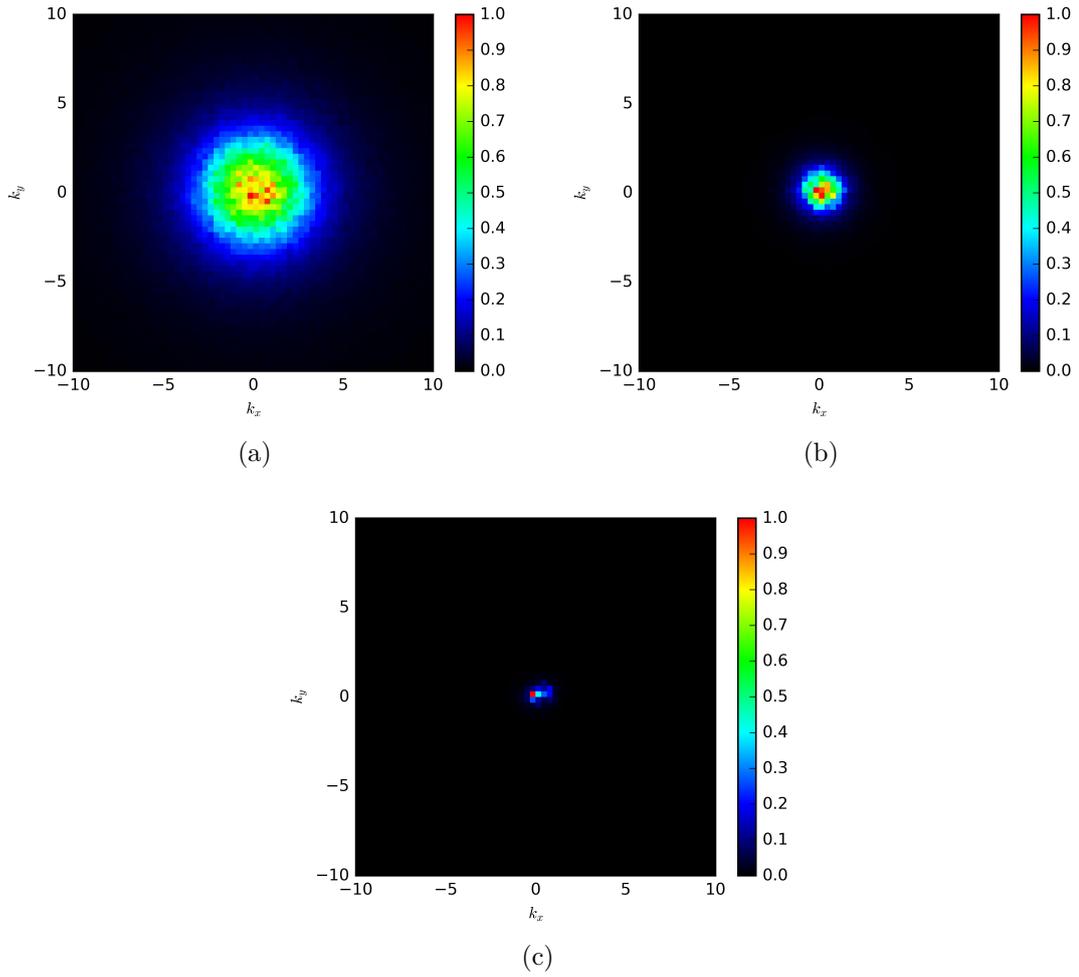


Figura 18 – Concentração dos momentos ao redor de  $\mathbf{k} = 0$ . (a)  $\mu \gg \mu_c$ . (b)  $\mu > \mu_c$ . (c)  $\mu \gtrsim \mu_c$ . Fonte: Próprio autor.

cálculo dos coeficientes angulares nos gráficos *log-log* em função da distância de  $\mu$  à  $\mu_c$  como descrito no capítulo 3 nas equações (3.10) e (3.11). Apesar dos pequenos desvios dos dados originais, podemos notar na figura 20 que a função descrita pelo *Ansatz* apresenta uma boa concordância com os dados numéricos, exceto quando  $k \sim 0$ . A figura 21 nos mostra como os expoentes críticos  $\nu$  e  $\eta$  podem ser extraídos diretamente a partir das relações (3.15) e (3.17) respectivamente. Além do mais, foi possível calcular os outros coeficientes críticos  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  e  $\delta$  indiretamente em termos de  $\nu$  e  $\eta$  com o auxílio das relações descritas em [5]. Os valores dos expoentes obtidos no presente trabalho com o auxílio do *Ansatz* estão dispostos na tabela 1.

Os resultados obtidos através do método de reescala puro das funções de correlação para diferentes valores de  $\mu$ , como descrito na equação (3.18), também foram obtidos com o cálculo dos coeficientes angulares a partir dos gráficos *log-log* dos coeficientes  $b_1$  e  $b_2$  em função da distância de  $\mu$  à  $\mu_c$  e extraídos seus respectivos expoentes com o auxílio das equações (3.19) e (3.20), respectivamente, como mostrado na figura 23. Com o auxílio das relações (3.27) e (3.29) calculamos diretamente os expoentes críticos  $\nu$  e  $\eta$ . Por fim,

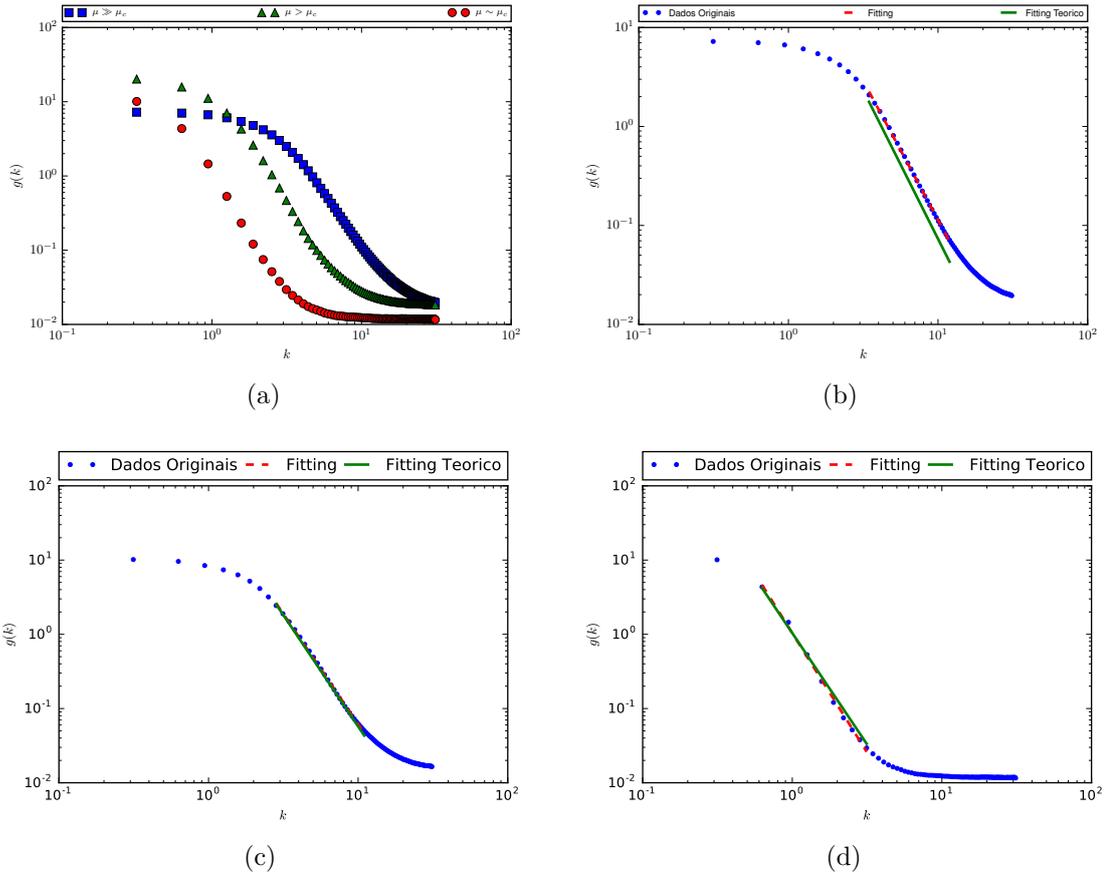


Figura 19 – Função de correlação com as médias angulares no espaço de  $k$ . **(a)** Função de correlação para diferentes  $\mu$ . **(b)**  $\mu \gg \mu_c$ . **(c)**  $\mu > \mu_c$ . **(d)**  $\mu \gtrsim \mu_c$ . Fonte: Próprio autor.

novamente com relações descritas em [5] calculamos indiretamente os outros expoentes críticos  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  e  $\delta$  em termos de  $\nu$  e  $\eta$ . Os valores dos expoentes obtidos no presente trabalho com o auxílio do método de reescala puro também estão dispostos na tabela 1.

	$\nu$	$\eta$	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	$\delta$
1	0.39	1.02	1.23	0.20	0.38	2.93
2	0.40	0.19	1.19	0.04	0.73	20.44
3	0.819	0.236	0.337	0.108	1.445	14.387
4	0.822	0.270	0.355	0.111	1.422	13.812

Tabela 1 – 1 - Método de reescala com *Ansatz*. 2 - Método de reescala puro. 3 - Modelo de Potts padrão de acordo com a referência [35]. 4 - Modelo do Potts planar de acordo com a referência [32].

Observamos uma concordância no cálculo do expoente  $\nu$  quando utilizamos o método de reescala com o *Ansatz* ou o método de reescala puro. Entretanto, a concordância entre os dois métodos para o expoente  $\eta$  é bastante ruim. Acreditamos que isso se deve ao fato de que no método de reescala com o *Ansatz* estamos impondo uma forma funcional

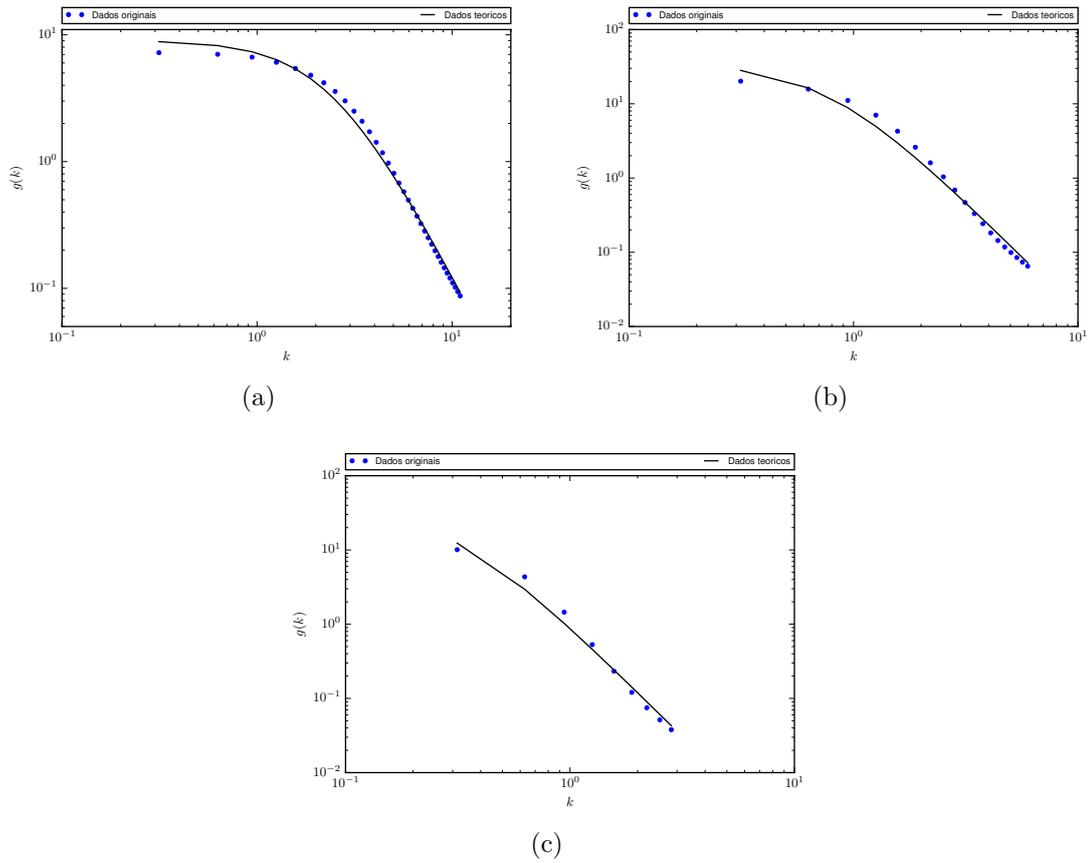


Figura 20 – Comparação entre a função de correlação com o método de reescala com o *Ansatz*. **(a)**  $\mu \gg \mu_c$ . **(b)**  $\mu > \mu_c$ . **(c)**  $\mu \gtrsim \mu_c$ . *Fonte:* Próprio autor.

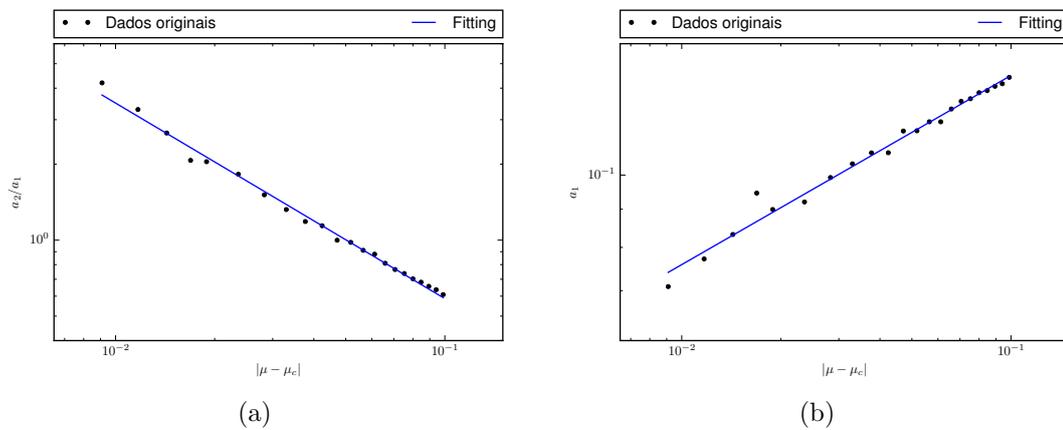


Figura 21 – Gráfico dos parâmetros do *Ansatz* em função do módulo da diferença entre  $\mu$  e  $\mu_c$ . **(a)** Gráfico para o cálculo de  $\nu$ . **(b)** Gráfico para o cálculo de  $\eta$ . *Fonte:* Próprio autor.

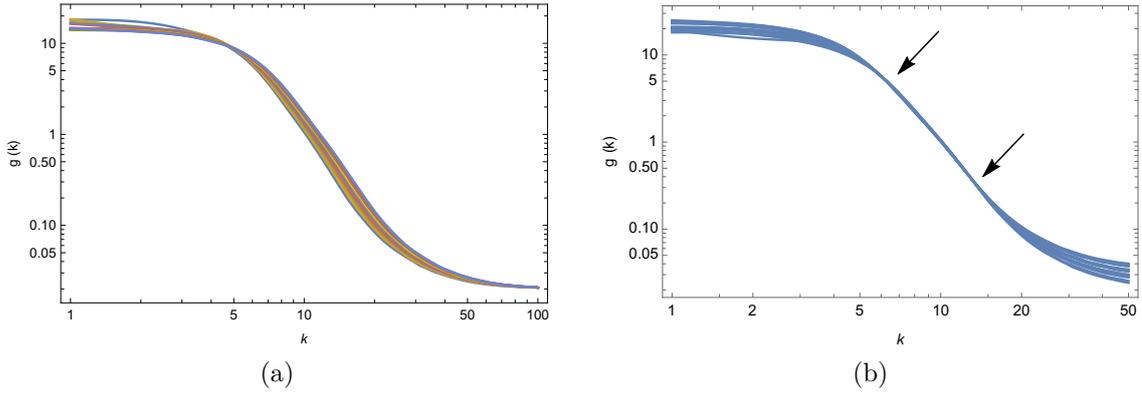


Figura 22 – Método de reescala puro da função de correlação. **(a)** Gráfico da função de correlação para diferentes valores de  $\mu$ . **(b)** Gráfico da função de correlação reescalada. *Fonte:* Próprio autor.

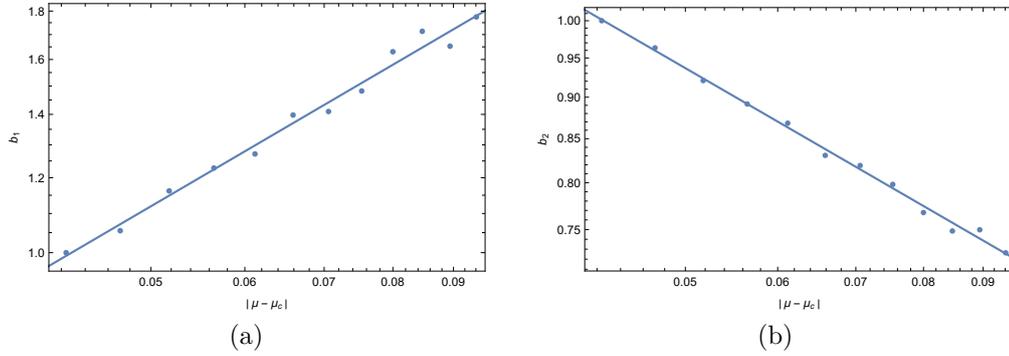


Figura 23 – Gráfico dos parâmetros de reescala puro. **(a)** Gráfico para o cálculo de  $\nu$ . **(b)** Gráfico para o cálculo de  $\eta$ . *Fonte:* Próprio autor.

específica à função de Green  $g(k)$ . Tal aproximação é deficiente para  $k \sim 0$  como podemos ver na figura 20. Essa deficiência tem um impacto maior no coeficiente  $\eta$  visto que este descreve o comportamento assintótico de  $g(k)$  quando  $k \rightarrow 0$  de acordo com a equação (2.10). Para o método de reescala puro não temos esse problema de modo que os expoentes críticos calculados dessa maneira podem ser considerados como confiáveis. Com os dados apresentados na tabela 1, comparando nossos dados obtidos no *item 2* com os referenciados no *item 4*, podemos concluir que o modelo *RPS* analisado no presente trabalho não pertence a classe de universalidade *3-Potts Planar* de duas dimensões. Uma possível explicação para essa divergência se dá pelo fato do modelo *q-Potts Planar*, com  $q = 3$ , ter como seu único parâmetro de ordem um campo complexo  $\psi_p$  conforme equação (2.16), enquanto o parâmetro de ordem do nosso modelo é composto por um campo real e um complexo  $\phi_g$  e  $\Psi_g$  descritos pelas equações (2.27) e (2.28) respectivamente, o que abre caminhos para estudos mais aprofundados e o possível desenvolvimento de uma teoria que possa abranger esse modelo.

## 5 Considerações finais

O presente trabalho foi desenvolvido com o propósito de analisar fenômenos críticos no modelo *RPS*, constituído por três espécies e o espaço vazio, distribuídos inicialmente de maneira aleatória numa rede quadrada, em que uma célula ativa pode interagir com apenas um de seus quatro vizinhos próximos (células passivas) e as possíveis interações são: movimentação (célula ativa e passiva trocam de lugar), reprodução (célula ativa preenche um espaço vazio) e predação (célula ativa elimina a célula passiva, criando um espaço vazio). Em suma, trata-se de um modelo com interação cíclica sem direção privilegiada, mas que apresenta assinaturas de uma transição de fase contínua do estado de diversidade (fase simétrica) para o de uniformidade (fase assimétrica). Com isso, fomos motivados a estudar esse tipo de sistema e analisar como a variação de um de seus parâmetros de controle, a reprodução  $\mu$ , influencia o sistema quando  $\mu \rightarrow \mu_c$ , sendo  $\mu_c$  a reprodução crítica, e, a partir da realização de experimentos numéricos, calcular os expoentes críticos do sistema. Por fim, amparados na teoria abordada nos primeiros capítulos do presente trabalho, identificar a qual classe de universalidade o modelo *RPS* com três espécies e o espaço vazio pertence.

A partir dos experimentos numéricos e das análises assintóticas das funções de correlação, foi possível realizar esse trabalho, e calcular os expoentes críticos  $\nu$  e  $\eta$  diretamente com nossos dados e calcular os outros expoentes críticos com as relações de hipótese de escala. Levando-se em conta os resultados obtidos, observamos uma concordância no cálculo do expoente  $\nu$  quando utilizamos o método de reescala, seja com o *Ansatz* ou com o método de reescala puro. Contudo, existe uma divergência entre os dois métodos para o cálculo do expoente  $\eta$ , e isso se deve ao fato de que no método de reescala com o *Ansatz* estamos impondo uma forma funcional específica à função de Green  $g(k)$ . Esta aproximação é deficiente para  $k \sim 0$  e tal discordância tem um impacto maior no coeficiente  $\eta$ , visto que este descreve o comportamento assintótico de  $g(k)$  quando  $k \rightarrow 0$ . Para o método de reescala puro não há esse problema, de modo que os expoentes críticos calculados dessa maneira podem ser considerados como confiáveis.

Ao contrário do que pode-se inicialmente pensar, concluímos que o modelo *RPS* analisado no presente trabalho não pertence a classe de universalidade *3-Potts Planar* de duas dimensões. Por conseguinte, uma possível explicação para essa divergência se dá pelo fato do modelo *3-Potts Planar* em duas dimensões ter como seu único parâmetro de ordem um campo complexo, enquanto que o parâmetro de ordem do nosso modelo é composto por um campo real e um complexo. Portanto, este resultado abre caminhos para estudos mais aprofundados e o possível desenvolvimento de uma nova teoria que possa abranger esse modelo e contribuir para a literatura que aborda o conceito de fenômenos críticos.

Por fim, analisando os resultados obtidos no capítulo anterior e fundamentando-nos na teoria abordada nos primeiros capítulos, concluímos que o presente trabalho foi realizado com sucesso. Além do mais, vale ressaltar que fomos pioneiros na utilização de análises assintóticas para abordar esse tipo de problema.

# Referências

- [1] T. Andrews, “Xviii. the bakerian lecture.—on the continuity of the gaseous and liquid states of matter,” *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, no. 159, pp. 575–590, 1869.
- [2] H. E. Stanley, *Introduction to phase transitions and critical phenomena*. Clarendon Press, 1971.
- [3] J. D. v. d. J. D. Waals, *The continuity of the liquid and gaseous states*. [London]: [Taylor and Francis], [1890].
- [4] P. Weiss, “L’hypothèse du champ moléculaire et la propriété ferromagnétique,” *J. Phys. Theor. Appl.*, vol. 6, no. 1, pp. 661–690, 1907.
- [5] F. E. A. dos Santos, *Ginzburg-Landau Theory for Bosonic Gases in Optical Lattices*. PhD thesis, Freie Universität Berlin, 2011.
- [6] F.-Y. Wu, “The potts model,” *Reviews of modern physics*, vol. 54, no. 1, p. 235, 1982.
- [7] J. Zinn-Justin, *Quantum field theory and critical phenomena*. Clarendon Press, 1996.
- [8] A. N. Vasil’ev, *The field theoretic renormalization group in critical behavior theory and stochastic dynamics*. Chapman and Hall/CRC, 2004.
- [9] L. Landau, “Scattering of x rays by crystals near the curie point,” *Zh. Eksp. Teor. Fiz*, vol. 7, p. 1232, 1937.
- [10] S. G. Brush, “History of the lenz-ising model,” *Reviews of modern physics*, vol. 39, no. 4, p. 883, 1967.
- [11] H. A. Kramers and G. H. Wannier, “Statistics of the two-dimensional ferromagnet. part i,” *Physical Review*, vol. 60, no. 3, p. 252, 1941.
- [12] V. Popov, “Functional integrals in quantum field theory and statistical physics,” in *Functional integrals in quantum field theory and statistical physics*, 1983.
- [13] M. E. Fisher, “The theory of equilibrium critical phenomena,” *Reports on progress in physics*, vol. 30, no. 2, p. 615, 1967.
- [14] C. Domb and D. Hunter, “On the critical behaviour of ferromagnets,” *Proceedings of the Physical Society*, vol. 86, no. 5, p. 1147, 1965.
- [15] B. Widom, “Equation of state in the neighborhood of the critical point,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 43, no. 11, pp. 3898–3905, 1965.

- 
- [16] A. Patashinskii and V. Pokrovskii, “Behavior of ordered systems near the transition point,” *Soviet Physics JETP*, vol. 23, no. 2, pp. 292–297, 1966.
- [17] L. P. Kadanoff, “Scaling laws for ising models near  $t_c$ ,” *Physics Physique Fizika*, vol. 2, no. 6, p. 263, 1966.
- [18] A. Patashinskii and V. Pokrovskii, “Second order phase transitions in a bose fluid,” *Soviet physics JETP*, vol. 19, no. 3, pp. 677–691, 1964.
- [19] T. Reichenbach, M. Mobilia, and E. Frey, “Coexistence versus extinction in the stochastic cyclic lotka-volterra model,” *Physical Review E*, vol. 74, no. 5, p. 051907, 2006.
- [20] R. M. May, “Biological populations with nonoverlapping generations: stable points, stable cycles, and chaos,” *Science*, vol. 186, no. 4164, pp. 645–647, 1974.
- [21] H. Haken, *Synergetics: introduction and advanced topics*. Springer Science, 2004.
- [22] A. V. Suarez and N. D. Tsutsui, “The value of museum collections for research and society,” *BioScience*, vol. 54, no. 1, pp. 66–74, 2004.
- [23] A. J. Lotka, “Undamped oscillations derived from the law of mass action.,” *Journal of the american chemical society*, vol. 42, no. 8, pp. 1595–1599, 1920.
- [24] B. Sinervo and C. M. Lively, “The rock–paper–scissors game and the evolution of alternative male strategies,” *Nature*, vol. 380, no. 6571, p. 240, 1996.
- [25] B. Sinervo, D. B. Miles, W. A. Frankino, M. Klukowski, and D. F. DeNardo, “Testosterone, endurance, and darwinian fitness: natural and sexual selection on the physiological bases of alternative male behaviors in side-blotched lizards,” *Hormones and Behavior*, vol. 38, no. 4, pp. 222–233, 2000.
- [26] T. Reichenbach, M. Mobilia, and E. Frey, “Mobility promotes and jeopardizes biodiversity in rock–paper–scissors games,” *Nature*, vol. 448, no. 7157, p. 1046, 2007.
- [27] P. Avelino, D. Bazeia, L. Losano, J. Menezes, and B. de Oliveira, “Interfaces with internal structures in generalized rock-paper-scissors models,” *Physical Review E*, vol. 89, no. 4, p. 042710, 2014.
- [28] P. Avelino, D. Bazeia, L. Losano, J. Menezes, and B. Oliveira, “Junctions and spiral patterns in generalized rock-paper-scissors models,” *Physical Review E*, vol. 86, no. 3, p. 036112, 2012.
- [29] L.-L. Jiang, W.-X. Wang, and B.-H. Wang, “Pattern formation in spatial games,” *Physics Procedia*, vol. 3, no. 5, pp. 1933–1939, 2010.

- 
- [30] H. Kleinert and V. Schulte-Frohlinde, *Critical Properties of  $\phi^4$  - theories*. World Scientific, 2001.
- [31] R. Pathria and P. Beale, *Statistical Mechanics*. Elsevier Science.
- [32] N. Kurinsky, “Monte carlo simulation of the potts model in 2-5 dimensions,” 2015.
- [33] R. B. Potts, “Some generalized order-disorder transformations,” in *Mathematical proceedings of the cambridge philosophical society*, vol. 48, pp. 106–109, Cambridge University Press, 1952.
- [34] C. Domb, “Configurational studies of the potts models,” *Journal of Physics A: Mathematical, Nuclear and General*, vol. 7, no. 11, p. 1335, 1974.
- [35] A. Caparica, S. A. Leão, and C. J. DaSilva, “Static critical behavior of the q-states potts model: High-resolution entropic study,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 438, pp. 447–453, 2015.

# Apêndices

# APÊNDICE A – Função de Correlação

Este apêndice contém a derivação da função de correlação no espaço recíproco devido a propriedade de invariância de translação no espaço real.

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle h^*(\mathbf{r})f(\mathbf{r}') \rangle, \quad (\text{A.1})$$

realizando a Transformada Discreta de Fourier em duas dimensões:

$$G(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{1}{(2\pi)^2} \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{r}'} a^4 e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'} \langle h^*(\mathbf{r})f(\mathbf{r}') \rangle, \quad (\text{A.2})$$

onde,

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \langle h^*(\mathbf{r})f(\mathbf{r}') \rangle, \quad (\text{A.3})$$

de modo que,

$$G(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{1}{(2\pi)^2} \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{r}'} a^4 e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'} G(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (\text{A.4})$$

com a mudança de variáveis  $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}' \Rightarrow \mathbf{r} = \mathbf{R} + \mathbf{r}'$ , temos:

$$G(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{1}{(2\pi)^2} \sum_{\mathbf{r}'} \sum_{\mathbf{R}} a^4 e^{-i[\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}+\mathbf{r}')-\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}']} G(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (\text{A.5})$$

reagrupando os termos dos somatórios em termos de  $\mathbf{r}'$  e  $\mathbf{R}$ ,

$$G(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{1}{(2\pi)^2} \sum_{\mathbf{r}'} a^2 e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}'} \sum_{\mathbf{R}} a^2 e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} G(\mathbf{R}), \quad (\text{A.6})$$

onde o somatório em  $\mathbf{r}'$  é dado por:

$$\left(\frac{a}{2\pi}\right)^2 \sum_{\mathbf{r}'} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}'} = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'), \quad (\text{A.7})$$

a demonstração desse resultado é apresentada no apêndice B. Enquanto que para o somatório em  $\mathbf{R}$ , obtemos:

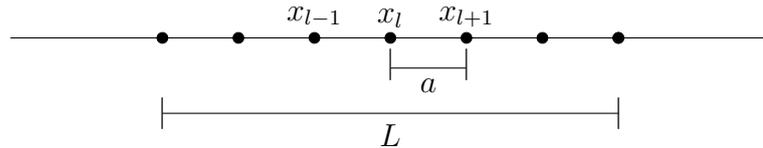
$$a^2 \sum_{\mathbf{R}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} G(\mathbf{R}) = g(\mathbf{k}), \quad (\text{A.8})$$

logo, obtemos como expressão final:

$$G(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') g(\mathbf{k}). \quad (\text{A.9})$$

## APÊNDICE B – Delta de Dirac

Para o cálculo da série  $\sum_{\mathbf{r}} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}}$  na primeira zona de Brillouin em uma dimensão, temos as seguintes relações:



$$\mathbf{r} = x_l \quad (\text{B.1})$$

$$x_l = al \quad (\text{B.2})$$

$$\mathbf{k} = k \quad (\text{B.3})$$

$$\mathbf{k}' = k' \quad (\text{B.4})$$

$$\kappa = k - k' \quad (\text{B.5})$$

temos então:

$$\sum_{l=-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} e^{-i\kappa al} = \sum_{l=-\frac{L}{2}}^{-1} e^{-i\kappa al} + \sum_{l=0}^{\frac{L}{2}} e^{-i\kappa al}, \quad (\text{B.6})$$

onde temos duas progressões geométricas de som finita na equação (B.6), podemos calcular separadamente:

$$\sum_{l=-\frac{L}{2}}^{-1} e^{-i\kappa al} = \sum_{l=-\frac{L}{2}}^0 e^{-i\kappa al} - 1, \quad (\text{B.7})$$

$$\sum_{l=-\frac{L}{2}}^{-1} e^{-i\kappa al} = \frac{e^{i\kappa a} - e^{i\kappa a(\frac{L}{2}+1)}}{1 - e^{i\kappa a}}, \quad (\text{B.8})$$

e agora o segundo termo,

$$\sum_{l=0}^{\frac{L}{2}} e^{i\kappa al} = \frac{1 - e^{i\kappa a(\frac{L}{2}+1)}}{1 - e^{i\kappa a}}, \quad (\text{B.9})$$

agrupando os resultados das equações (B.8) e (B.9) e voltando na equação (B.6), temos:

$$\sum_{l=-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} e^{-i\kappa al} = \frac{(e^{\frac{i\kappa aL}{2}} + e^{-\frac{i\kappa aL}{2}}) - (e^{i\kappa a(\frac{L}{2}+1)} + e^{-i\kappa a(\frac{L}{2}+1)})}{2 - (e^{i\kappa a} + e^{-i\kappa a})}, \quad (\text{B.10})$$

$$= \frac{\cos\left(\frac{\kappa aL}{2}\right) - \cos\left(\kappa a\left(1 + \frac{L}{2}\right)\right) + i \sin\left(\frac{\kappa aL}{2}\right) - i \sin\left(\kappa a\left(1 + \frac{L}{2}\right)\right)}{1 - \cos(\kappa a) - i \sin(\kappa a)}, \quad (\text{B.11})$$

simplificando a equação (B.11), obtemos

$$\sum_{l=-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} e^{-i\kappa al} = \csc\left(\frac{a\kappa}{2}\right) \sin\left(\frac{1}{2}a\kappa(1+L)\right), \quad (\text{B.12})$$

tomando o limite para  $\kappa \rightarrow 0$ , temos

$$\lim_{\kappa \rightarrow 0} \sum_{l=-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} e^{-i\kappa al} = 1 + L, \quad (\text{B.13})$$

e para  $\kappa \neq 0$  a série é indeterminada.

Na equação (B.13) podemos desconsiderar o fator de uma unidade somado, uma vez que podemos adicioná-lo ao valor total de  $L$ , de modo que no limite de  $L \rightarrow \infty$  a série se comporta como a  $\delta$  de Dirac

$$\delta(\kappa - \kappa') = \begin{cases} 0, & \text{se } \kappa \neq \kappa', \\ \infty, & \text{se } \kappa = \kappa'. \end{cases} \quad (\text{B.14})$$

Agora, sendo

$$f(\kappa) = \sum_{l=0}^L e^{-i\kappa al} \quad (\text{B.15})$$

podemos avaliar a integral de (B.15) e analisar seu comportamento na primeira zona de Brillouin,

$$\int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} f(\kappa) d\kappa = \sum_{l=0}^L \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} e^{-i\kappa al} d\kappa, \quad (\text{B.16})$$

para  $l = 0$ ,

$$\int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} d\kappa = \frac{2\pi}{a}, \quad (\text{B.17})$$

para  $l \neq 0$ ,

$$\int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} e^{-i\kappa al} d\kappa = \frac{2}{al} \sin(\pi l) = 0, \quad (\text{B.18})$$

temos, portanto,

$$\sum_{l=0}^L \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} e^{-i\kappa al} d\kappa = \begin{cases} 0, & \text{se } l \neq 0, \\ L \frac{2\pi}{a}, & \text{se } l = 0, \end{cases} \quad (\text{B.19})$$

de modo, que podemos relacionar  $\delta(\kappa = 0)$  com o tamanho da rede,

$$\delta(0) = \frac{aL}{2\pi}. \quad (\text{B.20})$$

Com isso, podemos generalizar os cálculos para os casos de dimensão  $d$ , de modo que obtemos as seguintes expressões:

$$\sum_i e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^d \delta^d(\mathbf{k}), \quad (\text{B.21})$$

e  $\delta^d(\mathbf{k} = \mathbf{0})$ ,

$$\delta^d(0) = \left(\frac{aL}{2\pi}\right)^d. \quad (\text{B.22})$$

# APÊNDICE C – Dados das Simulações

Figura	Distribuição Inicial				$\mu$	$\epsilon$	$\sigma$	$t$	$N_s$
	$l = 0$	$l = 1$	$l = 2$	$l = 3$					
12a	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0005	1.0	0.4	0	200 x 200
12b	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	1.0	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
12c	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.005239	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
12d	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.00053	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
12e	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0005175	1.0	0.4	$4N_s$	200 x 200
13a	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	1.0	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
13b	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.085	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
13c	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.00053	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
13d	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0005175	1.0	0.4	$4N_s$	200 x 200
14a	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	1.0	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
14b	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.085	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
14c	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.00053	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
14d	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0005175	1.0	0.4	$4N_s$	200 x 200
15a	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	1.0	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
15b	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.085	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
15c	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.00053	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
15d	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0005175	1.0	0.4	$4N_s$	200 x 200
16	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	1.0	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
17a	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	1.0	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
17b	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	1.0	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
18a	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	1.0	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
18b	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.007	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
18c	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.00053	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
19a	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	1.0	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
19a	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.1	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
19a	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0008	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
19b	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	1.0	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
19c	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.1	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
19d	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0008	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
20a	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	1.0	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
20b	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.1	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
20c	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0008	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
21	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0096	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
21	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0122	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
21	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0148	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
21	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0174	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200

Tabela 2 – Valores dos parâmetros iniciais da simulações numéricas - *Parte 1*.

Figura	Distribuição Inicial				$\mu$	$\epsilon$	$\sigma$	$t$	$N_s$
	$l = 0$	$l = 1$	$l = 2$	$l = 3$					
21	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0382	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
21	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0429	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
21	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0476	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
21	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0523	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
21	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.057	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
21	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0617	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
21	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0664	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
21	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0711	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
21	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0758	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
21	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0805	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
21	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0852	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
21	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0899	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
21	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0946	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
21	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0993	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
22	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0429	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
22	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0476	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
22	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0523	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
22	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.057	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
22	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0617	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
22	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0664	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
22	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0711	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
22	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0758	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
22	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0805	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
22	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0852	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
22	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0899	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
22	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0946	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
22	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0993	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
23	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0429	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
23	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0476	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
23	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0523	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
23	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.057	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
23	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0617	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
23	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0664	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
23	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0711	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
23	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0758	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
23	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0805	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
23	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0852	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
23	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0899	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
23	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0946	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200
23	0	$N_s/3$	$N_s/3$	$N_s/3$	0.0993	1.0	0.4	$10N_s$	200 x 200

Tabela 3 – Valores dos parâmetros iniciais da simulações numéricas - *Parte 2*.