



Universidade Federal da Paraíba
Centro de Informática
Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional

METAESTABILIDADE NA CRUZ

Jairo Carlos de Oliveira Quintans

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional, UFPB, da Universidade Federal da Paraíba, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Modelagem Matemática e Computacional.

Orientador: Sérgio de Carvalho Bezerra

João Pessoa
Fevereiro de 2018

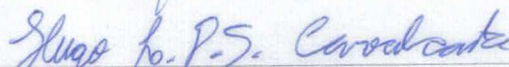
METAESTABILIDADE NA CRUZ

Jairo Carlos de Oliveira Quintans

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL (PPGMMC) DO CENTRO DE INFORMÁTICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL.

Examinada por:


Prof. Sérgio de Carvalho Bezerra, D.Sc.


Prof. Hugo Leonardo Davi de S. Cavalcante, D.Sc.


Prof. Alberto Masayoshi Faria Ohashi, D.Sc.

JOÃO PESSOA, PB – BRASIL
FEVEREIRO DE 2018

Catálogo na publicação
Seção de Catalogação e Classificação

Q7m Quintans, Jairo Carlos de Oliveira.
Metaestabilidade na cruz / Jairo Carlos de Oliveira
Quintans. - João Pessoa, 2018.
70 f. : il.

Orientação: Sérgio de Carvalho Bezerra.
Dissertação (Mestrado) - UFPB/CI.

1. Matemática. 2. Sistema de partículas -
Metaestabilidade. 3. Cadeias de Markov. I. Bezerra,
Sérgio de Carvalho. II. Título.

UFPB/BC

*A todas as pessoas que me
ajudaram a chegar até aqui*

Agradecimentos

Primeiramente, agradeço a Deus que pelo o dom da vida.

Ao IF-SERTÃO - PE por ter me dado as condições necessárias, cedendo-me afastamento total das minhas atividades, para realizar o curso de Mestrado.

A minha esposa Maria das Graças pela paciência e incentivo nas horas mais difíceis.

A minha família: pai, mãe e irmãos pelo apoio e incentivos nessa longa caminhada.

Em especial, agradeço ao orientador Sérgio de Carvalho Bezerra, pelas orientações recebidas e por toda atenção e paciência durante este o processo.

Agradeço a todos os amigos do PPGMMC que de alguma forma estiveram ao meu lado durante esta caminhada, colaborando com palavras de apoio e incentivo.

Aos amigos:

Vanlex pela ajuda não só agora durante o mestrado mais também em outras etapas da minha vida;

Em especial a André F. C. Castro por toda a paciência, dedicação e ensinamentos, não foram poucos, durante todo o mestrado.

Aos professores do programa, agradeço pelo aprendizado e experiências compartilhadas.

Aos professores Hugo Leonardo e Alberto Ohashi por terem aceitado, prontamente, a participar da banca examinadora na certeza de colaborar com o estudo.

Resumo da Dissertação apresentada ao PPGMMC/CI/UFPB como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

METAESTABILIDADE NA CRUZ

Jairo Carlos de Oliveira Quintans

Fevereiro/2018

Orientador: Sérgio de Carvalho Bezerra

Programa: Modelagem Matemática e Computacional

A Mecânica Estatística surgiu em meados de 1850, baseia-se na tentativa da utilização de modelos microscópicos, com o intuito de descrever fenômenos macroscópicos. Em geral, tais modelos tem uma dinâmica estocástica. Ou seja, as partículas do micro sistema evoluem estocasticamente. Neste trabalho estamos interessados em certos sistemas que são chamados de Cadeias de Markov à tempo contínuo, onde as partículas estão localizadas em pontos do plano cartesiano Z^2 . No nosso trabalho, a dinâmica utilizada é a de Kawasaki, a configuração original das partículas esta distribuídas em um formato de cruz. Em modelos da mecânica estatística existe uma função que é chamada por muitos por função energia (H). A cada movimento das partículas nós temos um novo valor de energia para esta nova configuração. O sistema abordado neste trabalho é tal que busca sempre o menor estado de energia. Nesta busca o sistema poderá ficar preso em um certo vale por muito tempo (tal fenômeno caracteriza um metaestado). Contudo, para um intervalo de tempo muito grande o sistema converge para um estado real de equilíbrio chamado de macro estado. No nosso trabalho temos como objetivo verificar a metaestabilidade do sistema de partículas, iniciando a partir do caso mais simples, onde o sistema é composto por somente doze partículas e posteriormente estudaremos a metaestabilidade do sistema com um número maior de partículas. Como resultado do trabalho vamos obter a probabilidade do sistema de partículas atingir um determinado macro estado.

Resumo da Dissertação apresentada ao PPGMMC/CI/UFPB como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

METAESTABILIDADE NA CRUZ

Jairo Carlos de Oliveira Quintans

Fevereiro/2018

Orientador: Sérgio de Carvalho Bezerra

Programa: Modelagem Matemática e Computacional

Statistical Mechanics appeared in the middle of 1850, is based on the attempt of the use of microscopic models, with the intention of describing macroscopic phenomena. In general, such models have stochastic dynamics. That is, the micro-system particles evolve stochastically. In this work we are interested in certain systems which are called Markov Chains at continuous time, where the particles are located at points of the cartesian plane Z^2 . In our work, the dynamics used is that of Kawasaki, the original configuration of the particles is distributed in the format a cross. In models of statistical mechanics there is a function that is called by many by function energy (H). At each movement of the particles we have a new energy value for this new configuration. The system addressed in this work is such that it always seeks the lowest state of energy. In this search the system may be stuck in a certain valley for a long time (such phenomenon characterizes a metastate). However, for a very long time interval the system converges to a real state of equilibrium called the macro state. In our work we aim to verify the metastability of the particle system, starting from the simplest case, where the system is composed of only twelve particles and later we will study the system metastability of a larger number of particles. As a result of the work we will get the probability of the particle system reaching a certain macro state.

Sumário

Lista de Figuras	ix
Lista de Tabelas	x
Lista de Símbolos	xi
1 Definições e Resultados Preliminares	3
1.0.1 Passeio Aleatório	4
1.0.2 Processos Estocásticos	5
1.0.3 Sisitemas Markovianos de Partículas	9
1.0.4 Movimento das Partículas	13
2 Metaestabilidade	15
2.0.1 Caracterização da metastabilidade	16
2.0.2 Algoritmo de Metropolis	19
2.0.3 Dinâmica de Glauber	20
2.0.4 Modelo para duas dimensões	21
2.0.5 O modelo de Ising para baixas temperaturas	21
3 Metaestabilidade na Cruz	26
3.1 Metaestabilidade de um sistema com 12 partículas.	28
4 Simulação Numérica	31
4.1 Simulação para um sistema com 12 partículas	31
4.2 Estados de equilíbrio 2×6 e 6×2	36
4.3 Simulação para um sistema com 14,16,18,20,22 partículas	38
4.4 Simulação para um sistema com 24 partículas	42
4.5 Estados de equilíbrio 12×2 e 2×12	48
4.6 Caso Geral com n-partículas.	49
Referências Bibliográficas	51
A Programas Utilizados	53

Lista de Figuras

1.1 Exemplo de processo estocástico de Markov	6
1.2 Exemplo de processo reversível	11
2.1 Configuração do modelo em duas dimensões	21
2.2 Simulação do modelo de Ising	23
2.3 Simulação do modelo de Ising	24
2.4 Simulação do modelo de Ising	24
2.5 Simulação do modelo de Ising	25
3.1 Configuração Geral da Cruz	26
3.2 Configuração do Modelo	28
3.3 Configuração $\eta^{x,y}$ com P_1 saltando para o vizinho V_{12}	29
4.1 Resultados	32
4.2 Resultados	32
4.3 Resultados	33
4.4 Resultados	33
4.5 Resultados	34
4.6 Resultados	34
4.7 Resultados	35
4.8 Resultados	35
4.9 Resultados	36
4.10 Resultados	37
4.11 Resultados	37
4.12 Resultados	38
4.13 Resultados	39
4.14 Resultados	39
4.15 Resultados	39
4.16 Resultados	40
4.17 Resultados	40
4.18 Resultados	40
4.19 Resultados	41

4.20 Resultados	41
4.21 Resultados	42
4.22 Resultados	42
4.23 Resultados	45
4.24 Resultados	46
4.25 Resultados	46
4.26 Resultados: Na configuração do lado esquerdo todas as partículas estão na fronteira com energia total igual a 66, enquanto que a configuração do lado direito apresenta todas as partículas na fronteira com energia máxima igual a 68.	47
4.27 Resultados: Note que a configuração de dimensões 3×8 não representa um macroestado, pois se fosse o sistema de partículas não sairia dessa configuração como acontece no caso de dimensões 2×12 ou 12×2 como mostraremos mais adiante.	47
4.28 Resultados: Na figura da esquerda temos uma configuração η com energia máxima e a esquerda η_1 onde fizemos a suposição que uma das quatro partículas com com duas ligações saltasse note que sua energia diminui em relação a configuração anterior.	48
4.29 Resultados: Neste caso se uma das 20 partículas com 3 ligações pudesse saltar teríamos uma configuração com energia inferior	49
A.1 Programa para gerar a cruz inicial	53
A.2 Dinâmica para as partículas saltarem.	54
A.3 Continuação da dinâmica para as partículas saltarem.	55
A.4 Continuação da dinâmica para as partículas saltarem.	56
A.5 Continuação da dinâmica para as partículas saltarem.	57
A.6 Continuação da dinâmica para as partículas saltarem.	58
A.7 Continuação da dinâmica para as partículas saltarem.	58

Lista de Tabelas

4.1	1ª partícula a saltar é a do ponto $(3, 2)$ para o vizinho $(3, 1)$	43
4.2	2ª partícula a saltar é a do ponto $(-2, 3)$ para o vizinho $(-2, 4)$	44

Lista de Símbolos

$\mathcal{P}(t)$	Conjunto das probabilidades de transição do processo de estado i para o estado j no instante t , p. 7
D_Λ	Conjunto de geradores infinitesimal, p. 7
λ_{ij}	Taxa ou intensidade de um processo de Markov, p. 5
\mathbb{S}	Conjunto de Vertices, p. 5

Introdução

Nesta dissertação apresentamos um estudo sobre a metaestabilidade num conjunto de partículas que estão dispostas inicialmente em formato de cruz, sujeitas a dinâmica de Kawasaki, esta faz com que as partículas se movimentem de forma que após certo tempo a cruz convergirá para uma configuração em formato de um retângulo. O trabalho consiste em obter as probabilidades de cada um dos possíveis retângulos ser a configuração final, para este trabalho fazemos uma simulação numérica através da linguagem de programação em Python onde o objetivo principal é verificarmos a validade dos resultados que temos sem a simulação numérica, por se tratar de um assunto pouco abordado na literatura existente e com poucos resultados em torno do assunto.

No capítulo 1 apresentamos alguns resultados que nos darão suporte para um melhor entendimento do modelo, mostrando inicialmente os conceitos de passeio aleatório, processos estocásticos, cadeias de Markov e sistemas Markovianos de partículas.

Em seguida, no capítulo 2, definimos a metaestabilidade de uma forma geral, apresentando alguns modelos e o comportamento dos mesmos sob certas condições. Nos modelos apresentados verificamos a interação entre as partículas que estão na fronteira do sistema com vizinhos mais próximos, onde as mesmas podem mudar a sua configuração de acordo com a dinâmica do sistema, no modelo Ising ferromagnético por exemplo os spins que fazem parte do sistema podem ser magnetizados ou não, de acordo com a magnetização dos spins que estão ao seu redor, enquanto para o modelo apresentado nesta dissertação a interação das partículas irá ocorrer estritamente sobre as partículas que estão na fronteira e os possíveis locais de saltos vizinhos.

No terceiro capítulo, mostramos o nosso modelo, apresentamos a dinâmica em que as partículas do sistema se movimentarão, cada partícula do sistema saltará para uma posição vizinha com base na energia da configuração atual em relação a configuração anterior, a primeira partícula a saltar será a que tiver o menor tempo de salto.

No quarto capítulo, apresentamos os resultados obtidos com a simulação numérica do sistema partindo do caso inicial onde o sistema apresenta apenas 12 partí-

culas, posteriormente vamos para casos com mais partículas.

Capítulo 1

Definições e Resultados Preliminares

A metaestabilidade está intimamente relacionada com um grande número de situações físicas no nosso cotidiano, situações essas que podem ser verificadas por exemplo nas reações químicas. Uma situação em que verificamos a existência de comportamento metaestável é no atraso na evaporação da água superaquecida, também no congelamento tardio da água sub-resfriada, o que acontece em ambas situações é que aparentemente o sistema parece estar num estado estável durante um certo intervalo de tempo, porém com o passar do tempo e o aumentar ou diminuir da temperatura o processo sai deste estado e converge para o verdadeiro estado do processo, a esse estado que o processo visitou antes de ir para o verdadeiro estado é o que chamamos de metaestado, ao estado de real equilíbrio do processo é o que chamamos de macroestado ou estado macro . De uma forma geral, a metastabilidade está relacionada com a existência de certos intervalos de tempo em que o sistema parece estar em um estado de equilíbrio, porém com o passar do tempo e a presença de pequenas perturbações fazem com que o sistema saia do estado de aparente equilíbrio e vá para o real estado de equilíbrio como abordado em [5], [3].

A metastabilidade é caracterizada pela existência de duas ou mais escalas de tempo bem separadas. Numa escala de tempo rápido, o sistema relaxa para um estado aparentemente estável e parece estar em equilíbrio, mas na verdade apenas explora uma porção significativamente restrita do espaço de fase. Numa escala de tempo muito mais longa, uma flutuação espontânea ou uma perturbação externa, faz com que o sistema escape do espaço de estado restrito e relaxe rapidamente para outro estado estável. Um exemplo que caracteriza muito bem o fenômeno da metaestabilidade é o que ocorre quando abrimos uma cerveja que está a uma baixa temperatura e a mesma sai do estado líquido e vai imediatamente para o estado sólido, este é um dos muitos exemplos de situações onde ocorrem a metaestabilidade.

A descrição matemática dos sistemas metaestáveis começou nas décadas de 1930 e 1940 e está ligada aos nomes de Eyring e Kramer, que estavam interessados em metaestabilidade no contexto de reações químicas. Kramer, em particular, introduziu

um processo de difusão unidimensional em um potencial de duplo poço como modelo de um sistema metaestável que ainda é usado hoje em muitas aplicações. Este trabalho estabeleceu o caminho para estudar a metastabilidade como um fenômeno que ocorre em processos estocásticos e, em particular, nos processos de Markov.

1.0.1 Passeio Aleatório

Inicialmente, estabelecemos as seguintes definições:

Definição 1.1. (*Experimento Aleatório*): É um experimento que pode ser repetido nas mesmas condições onde os resultados possíveis são conhecidos, porém não temos como afirmar qual o resultado exato do mesmo em cada repetição.

Definição 1.2. *Modelo Probabilístico* $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$:

1. Denotaremos por Ω o conjunto que contém todos os resultados possíveis de um experimento aleatório o qual chamamos de espaço amostral.
2. \mathcal{F} representa a sigma álgebra associada ao modelo. No caso de Ω é um conjunto discreto. Considera-se normalmente \mathcal{F} , como sendo o conjunto dos subconjuntos de Ω . Tais elementos de \mathcal{F} são chamados de eventos.
3. A função \mathbb{P} é uma medida de probabilidade, ou seja, \mathbb{P} satisfaz:
 - $\mathbb{P} : \mathcal{F} \rightarrow [0, 1]$,
 - $\mathbb{P}(\Omega) = 1$,
 - Se A_1, A_2, \dots elementos de \mathcal{F} e disjuntos entre si. Então:

$$\mathbb{P}(\cup_{i=1}^{\infty} A_i) = \sum_{i=1}^{\infty} \mathbb{P}(A_i).$$

Definição 1.3. (*Variável Aleatória*) Dado um modelo $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ definimos uma variável aleatória X como sendo uma função que associa um número real $X(\lambda)$ a cada resultado λ no espaço amostral e para qualquer intervalo aberto (a, b) a imagem inversa $X^{-1}(a, b) \in \mathcal{F}$ [17], [12].

Definição 1.4. Considere uma sequência de variáveis aleatórias (v. as.) definidas em algum espaço de probabilidades $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$. Neste caso as v. as. X_1, X_2, \dots, X_n terão uma distribuição de probabilidade conjunta para todo $n \geq 1$. Dizemos que as variáveis aleatórias são mutuamente independentes se e somente se

$$\mathbb{P}(X_1 \in B_1, X_2 \in B_2, \dots, X_n \in B_n) = \prod_{i=1}^n \mathbb{P}(X_i \in B_i)$$

para todo $B_i \in \beta$, $i = 1, \dots, n$, onde β é a menor σ -álgebra que contém todos os intervalos da reta real também conhecida como sendo a σ -álgebra de Borel.

Para $\{X_i : i \geq 1\}$ v. as. independentes e identicamente distribuídas vamos definir para $n = 1, 2, \dots$

$$S_n := X_1 + X_2 + \dots + X_n.$$

(o símbolo $:=$ refere-se a como S_n está sendo definido). Nessas condições $\{S_n; n \geq 1\}$ é dito um *Passeio Aleatório*.

No caso especial em que a distribuição de probabilidades comum dos X_1, X_2, \dots é dada por

$$\mathbb{P}(X_k = 1) = p \text{ e } \mathbb{P}(X_k = -1) = 1 - p, \forall k \geq 1,$$

para algum $0 \leq p \leq 1$, temos o *Passeio Aleatório Simples* em \mathbb{Z} . No caso em $p = \frac{1}{2}$, temos o *Passeio Aleatório Simétrico* em \mathbb{Z}

1.0.2 Processos Estocásticos

Definição 1.5. *Um processo estocástico é uma família de variáveis aleatórias indexadas no tempo.*

Vamos definir um processo de Markov homogêneo $\{\xi(t) : t \geq 0\}$ com valores em S enumerável, pelas seguintes duas condições nas probabilidades de transição $p_{ij}(t) := \mathbb{P}[\xi(t) = j | \xi(0) = i]$:

1. $p_{ij}(t - s) = \mathbb{P}[\xi(t) = j | \xi(s) = i]$ para todo $t > s$.
2. $p_{ij}(t - s) = \mathbb{P}[\xi(t) = j | \xi(s_1) = i_1, \dots, \xi(s_m) = i_m, \xi(s) = i]$ para todo $t > s$ e $s_1 < s_2 < \dots < s_m < s$.

Onde o item 1 satisfaz a condição de homogeneidade do processo de Markov no intervalo de s até t e o item 2 satisfaz a condição para que o processo seja um processo de Markov, isto é, a condição futura do processo depende apenas da situação presente do mesmo.

Exemplo 1.1. *Considere uma partícula realizando movimentos aleatórios sobre os vértices de um cubo. Suponha que a cada passo a partícula escolha saltar para um vértice vizinho, tendo a mesma probabilidade de saltar para cada um deles. Como mostra a figura abaixo*

Vamos denotar por \mathbb{S} o conjunto de vértices do cubo, isto é,

$$\mathbb{S} = \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8\}$$

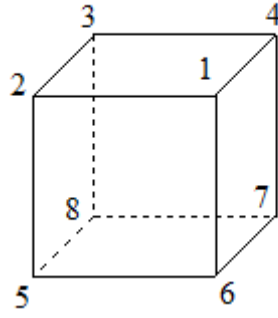


Figura 1.1: Exemplo de processo estocástico de Markov

sendo X_n a posição da partícula no instante n assim temos que

$$\mathbb{P}(X_{n+1} = j | X_n = i) = \begin{cases} \frac{1}{3} & \text{se } i \text{ e } j \text{ forem conectados} \\ 0 & \text{c.c.} \end{cases}$$

Nesse exemplo, como $\mathbb{P}(X_{n+1} = j | X_n = i)$ é independente de n , a cadeia de Markov possui probabilidades de transição estacionárias e o processo é chamado de cadeia de Markov homogênea. Assim, ter uma Cadeia Homogênea implica que as Probabilidades de Transição não mudam ao longo do tempo.

A distribuição de probabilidade para o estado inicial $\xi(0)$ é dada por: $\mathbb{P}[\xi(0) = i] = p_i^0$, $i \in S$. Desta forma a distribuição de probabilidade conjunta das variáveis aleatórias $\xi(t_1), \dots, \xi(t_n)$ para $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_n$ é dada por

$$\mathbb{P}[\xi(t_1) = j_1, \dots, \xi(t_n) = j_n] = \sum_{i=0}^{\infty} p_{j_{n-1}j_n}(t_n - t_{n-1}) \dots p_{ij_1}(t_1) p_i^0.$$

A probabilidade do processo estar em j no instante $t > 0$ é obtida por $p_j(t) = \sum_{i=0}^{\infty} p_{ij}(t) p_i^0$, $j \in S$. Observe que

$$p_j(s+t) = \sum_k p_k(s) p_{kj}(t), \text{ para } s < t.$$

Tomando $\xi(0) = i$, temos $p_{ij}(s+t) = \sum_k p_{ik}(s) p_{kj}(t)$, $s, t \geq 0$, conhecidas como as equações de Chapman-Kolmogorov.

Seja $\mathcal{P}(t) := \{p_{ij}(t) : t \geq 0\}$, e τ o tempo de permanência mínimo em qualquer estado com a restrição que $\mathbb{P}[\tau > 0] = 1$. então as $p_{ij}(t)$ são contínuas em $t = 0$, isto é, $\lim_{h \rightarrow 0} \mathcal{P}(h) = \mathcal{P}(0) = I$, onde I é a matriz identidade. Além disso, para todo

$i \neq j$ em S , existe o

$$\lim_{h \rightarrow 0^+} \frac{p_{ij}(h)}{h} := \lambda_{ij}.$$

Os λ_{ij} para $i, j \in S$ são ditas as taxas ou intensidades do processo. As probabilidades de transição satisfazem

$$\frac{d}{dt} p_{ij}(t) = \sum_k \lambda_{ik} p_{kj}(t), e$$

$$\frac{d}{dt} p_{ij}(t) = \sum_k p_{ik}(t) \lambda_{kj}(t),$$

com $i \neq j \in S$.

Para $S_0 \subset S$, com $i \notin S_0$, temos que

$$\sum_{j \in S_0} p_{ij}(h) + p_{ii}(h) \leq 1 \text{ e portanto}$$

$$\frac{1 - p_{ii}(h)}{h} \geq \frac{\sum_{j \in S_0} p_{ij}(h)}{h}.$$

Segue que $\lambda_{ii} \geq \sum_{j \in S_0} \lambda_{ij}$, quando $h \rightarrow 0^+$.

Se $\lambda_{ii} \sum_{j \neq i} \lambda_{ij}$ e $\lambda_{ii} < \infty$ o estado $i \in S$ é dito estável ou regular. O estado é dito instantâneo se $\lambda_{ii} = \infty$ e absorvente se $\lambda_{ii} = 0$.

Quando todos os estado são estáveis, o processo é estável, e neste caso temos que $p_{ij}(t)$ são diferenciáveis para todo $t \geq 0$ e todo $i, j \in S$. Além disso: $\frac{d}{dt} p_{ij}(t) =$

$$\sum_{k \neq i}^{\infty} \lambda_{ik} p_{kj}(t) - \lambda_{ii} p_{ij}(t).$$

A matriz $\Lambda := \{\lambda_{ij} : i, j \in S\}$ é dito o gerador infinitesimal do processo $\{\xi(t) : t \geq 0\}$.

Consideremos o caso em que S é não enumerável e $\{\xi(t) : t \geq 0\}$ é um processo de Markov homogêneo assumindo valores em S .

Definimos as probabilidades de transição por

$$\mathbb{P}(x, t, B) = \mathbb{P}[\xi(s+t) \in B | \xi(s) = x].$$

Vamos assumir que $\mathbb{P}(x, t, B)$ é contínua em zero, onde B é o conjunto das funções reais limitadas mensuráveis (isto é v. as. reais limitadas) definidas em Ω . Queremos caracterizar o comportamento do processo $\{\xi(t) : t \geq 0\}$ a partir da $\frac{\partial \mathbb{P}(x, t, B)}{\partial t} \Big|_{t=0}$.

Para $X \in B$, defina $\|X\| := \sup_{x \in \mathbb{R}} |X(x)|$. A transformação $T : B \rightarrow B$ é dita um operador linear se para quaisquer $X_1, X_2 \in B$, $\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{R}$ fixos, $T(\alpha_1 X_1 + \alpha_2 X_2) = \alpha_1 T(X_1) + \alpha_2 T(X_2)$.

T é limitado se existir uma constante positiva $M < \infty$ tal que $\|TX\| \leq M \|X\|$

para todo $X \in B$.

O menor M tal que a desigualdade acima acontece é dito a norma do operador T , denotado por $\|T\|$. Portanto, $\|T\| = \sup_{X \neq 0, X \in B} \frac{\|TX\|}{\|X\|}$. Segue que $\|TX\| \leq \|T\| \|X\|$. Se $\|T\| \leq 1$, o operador é dito ser contração.

Definição 1.6. Uma família $\{S(t) : t \geq 0\}$ de operadores lineares limitados definidos em B é dito um semigrupo de contração se

1. $\|S(t)\| \leq \|X\| \forall X \in B$.
2. $S(t+s) = S(t)S(s) = S(s)S(t) \forall s, t \geq 0$.

Um semigrupo é dito fortemente contínuo se

$$S(0) = I \text{ e } \|S(t) - I\| \rightarrow 0 \text{ quando } t \rightarrow 0^+.$$

Para cada $X \in B$ e $t \geq 0$ vamos definir

$$(S(t)X)(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} X(y) \mathbb{P}(x, t, dy) = \mathbb{E}[X(\xi(t))].$$

Dessa forma podemos verificar que é uma contração, isto é,

$$\|S(t)\| = \sup_{X \in B, X \neq 0} \frac{\|S(t)X\|}{\|X\|} = \sup_{X \in B, X \neq 0} \frac{\sup_{x \in \mathbb{R}} |S(t)X|}{\sup_{x \in \mathbb{R}} |X|} \leq \sup_{X \in B, X \neq 0} \frac{\sup_{x \in \mathbb{R}} |X(x)|}{\sup_{x \in \mathbb{R}} |X(x)|} = 1.$$

Usando Chapman-Kolmogorov temos:

$$\begin{aligned} (S(t+s)X)(x) &= \int_{-\infty}^{+\infty} X(y) \mathbb{P}(x, t+s, dy) = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} X(y) \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbb{P}(x, t, dz) \mathbb{P}(z, s, dy) = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbb{P}(x, t, dz) (S(s)X)(z) = (S(t)S(s)X)(x). \end{aligned}$$

Seja $\{S(t) : t \geq 0\}$ um semigrupo fortemente contínuo em B . Se a sequência $\{X_n : n \geq 1\}$ em B é tal que $\|X_n - X\| \rightarrow 0$ quando $n \rightarrow \infty$, dizemos que converge fortemente para X e escrevemos $X = \lim_{n \rightarrow \infty} X_n$.

Definição 1.7. [16] O gerador infinitesimal Λ do semigrupo é definido por

$$\Lambda X = \lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{S(t)X - X}{t}$$

para aqueles $X \in B$ tais que o limite existe.

Seja $D_\Lambda \subset B$ o conjunto dos elementos em B tais que o limite acima existe. Se $X_1, X_2 \in D_\Lambda$ então $\alpha_1 X_1 + \alpha_2 X_2 \in D_\Lambda$, isto é, λ é um operador linear em D_Λ .

Exemplo 1.2. Considere $\{\xi(t) : t \geq 0\}$ com valores em S finito. Temos que $\{\mathcal{P}(t) : t \geq 0\}$, onde $\mathcal{P}(t) = \{p_{ij}(t)\}$, $\mathcal{P}(0) = I$, é um semigrupo. Definimos para todo $s_i \in S$ e $X \in B$, com B o conjunto das funções reais e mensuráveis limitadas e definidas em Ω ,

$$(\mathcal{P}(t)X)(s_i) = \sum_{j=1}^N p_{ij}(t)X(s_j),$$

onde $N = |S|$ é o cardinal de S . Temos que $\{\mathcal{P}(t) : t \geq 0\}$ é um semigrupo de contração. Isto é,

$$\mathcal{P}(t)X(i) = \sum_j p_{ij}(t)X(j) = \mathbb{E}[X(\xi(t))/\xi(0) = i] = \mathbb{E}_i X(\xi(t)) = \mathbb{E}X(\xi^i(t))$$

Além disso:

$$\begin{aligned} \Lambda X(i) &= \sum_j \lambda_{ij}X(j) = \lambda X(i) + \sum_{j \neq i} \lambda_{ij}X(j) = \\ &= -\sum_{j \neq i} \lambda_{ij}X(i) + \sum_{j \neq i} \lambda_{ij}X(j) = \sum_{j \neq i} \lambda_{ij}[X(j) - X(i)]. \end{aligned}$$

Definição 1.8. Processos de Poisson -[15] Um processo de contagem $\{N(t) : t \geq 0\}$ é um processo de Poisson com intensidade λ , $\lambda > 0$, se

1. $N(0) = 0$ isto é, em instante inicial, nenhum evento ocorreu;
2. $N(t+s) - N(s)$ não depende do $N(s)$ para quaisquer $t, s \geq 0$, isto é, o processo tem incrementos independentes;
3. $P\{N(t+s) - N(s) = n\} = e^{-\lambda t} \frac{(\lambda t)^n}{n!}$, $0, 1, \dots$ isto é, o número de eventos que ocorreram durante o tempo t tem a distribuição de Poisson com média λt .

1.0.3 Sistemas Markovianos de Partículas

Os sistemas Markovianos de partículas são sistemas onde podemos realizar a contagem de processos de Markov que estão interagindo localmente. Cada sistema de partículas é definido em uma rede: um conjunto contável onde geralmente apresentam características bem definidas no que diz respeito a distância definida para o sistema. No modelo apresentado em nosso trabalho vamos considerar uma rede retangular, em cada ponto desta rede, está situado uma partícula ou não a depender disso as partículas que estão estritamente na fronteira podem ou não realizar os seus

saltos , cujas taxas de salto dependem dos estados do processo de Markov em cada local vizinho com possibilidade de salto.

De acordo com [18] um sistema de partículas consiste de muitas partículas onde cada uma delas, na ausência de interação, evolui de acordo com um processo estocástico bem definido no espaço e no tempo satisfazendo a propriedade de Markov.

Considere E um conjunto enumerável representando as possíveis posições da partícula e Ω um conjunto finito de estados para a mesmas. Consideremos $E = \mathbb{Z}^2$ o espaço e $\Omega = \{0, 1\}$ o espaço de estados da partícula. Denotaremos por Ω^E o conjunto de configurações possíveis que será o espaço de estados do processo.

Representamos por $\{\eta_t : t \geq 0\}$ o processo assumindo valores em Ω^E e sua evolução poderá ser descrita pelas taxas (intensidades) em que ocorre mudança de uma configuração para outra. No caso em que E é finito, descrever a transição de η para ξ , $\eta \rightarrow \xi$, com $\eta \neq \xi$, $\eta, \xi \in \Omega^E$, significa afirmar que

$$\mathbb{P}(\eta_t = \xi / \eta_0 = \eta) = ct + o(t) \text{ quando } t \rightarrow 0^+,$$

onde $c = c(\eta, \xi)$ é a taxa de transição de η para ξ , e $o(t)$ é alguma função $f(t)$ tal que $\lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(t)}{t} = 0$

A relação entre o processo e suas taxas de transição é dada pelo gerador infinitesimal Λ de $\{\eta_t : t \geq 0\}$, aplicado em funções cilíndricas, da forma

$$\Lambda f(\eta) = \sum_{\xi} c(\eta, \xi)[f(\xi) - f(\eta)];$$

onde f cilíndrica é uma função que depende de um número finito de coordenadas.

As escolhas das taxas satisfazem condições para que $\Lambda f(\eta) < \infty$ para todas f cilíndrica.

As distribuições estacionárias (ou invariantes) do processo são determinadas pelo gerador infinitesimal. Dizemos que μ é uma distribuição estacionária para $\{\eta_t : t \geq 0\}$ se e somente se $\int \Lambda f d\mu = 0$

Definição 1.9. (*Distribuição de probabilidade reversível*): Uma distribuição de probabilidades $\{\pi\}$ em S , onde S é o espaço de estados do processo, é dita ser reversível se, para todo $i, j \in \{1, 2, \dots, k\}$ tem-se

$$\pi_i P_{ij} = \pi_j P_{ji}.$$

Quando uma cadeia de Markov possui uma distribuição de probabilidade reversível é considerada uma cadeia de Markov reversível. Mais adiante esta definição reaparece como a condição de balanceamento detalhado

Definição 1.10. Uma cadeia de Markov é irredutível se dados quaisquer dois estados

i, j pertencente ao conjunto de estados do processo, existir $r \in \mathbb{N}$ tal que $p_{ij}^r > 0$, ou seja, é sempre possível ir de um estado para o outro, não necessariamente em um passo

Exemplo 1.3. Consideremos um grafo $G = \{V, A\}$ dessa forma constituído por um conjunto de vértices $V = \{V_1, V_2, \dots, V_m\}$ e arestas $A = \{A_1, A_2, \dots, A_n\}$, como mostra a figura abaixo:

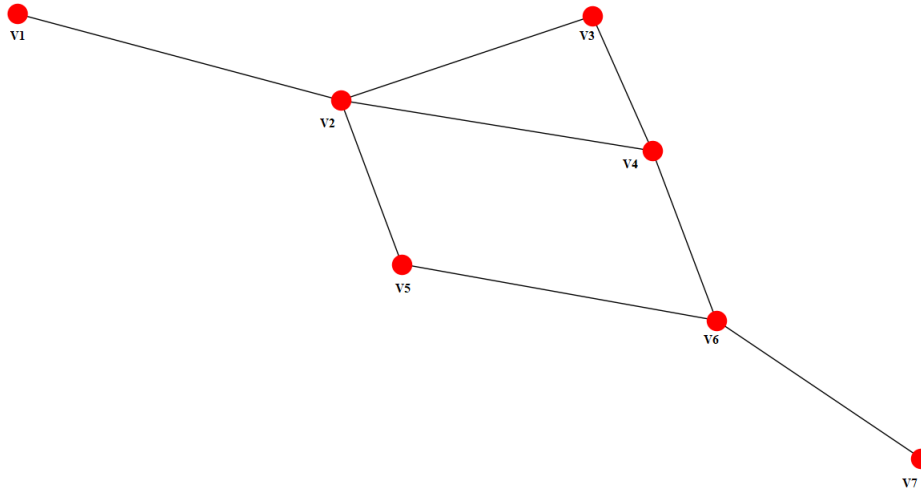


Figura 1.2: Exemplo de processo reversível

Dessa forma um passeio aleatório em um grafo G é uma cadeia de Markov com espaço de estados $V = \{V_1, V_2, \dots, V_m\}$, com o seguinte processo de transição. Suponhamos que uma partícula está se movendo sob o grafo, se a partícula se posiciona num vértice V_i , no instante n , então move-se no tempo $n + 1$ para um dos vizinhos escolhidos aleatoriamente, com a mesma probabilidade para cada um dos vizinhos. Logo se considerarmos o número de vizinhos de um vértice V_i , por d_i , então os elementos da matriz de transição são dados por

$$P_{ij} \begin{cases} \frac{1}{d_i}, & \text{se } V_k \text{ e } V_l \text{ são vizinhos} \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases}$$

Neste caso o passeio aleatório é reversível com distribuição dada por

$$\pi = \left(\frac{d_1}{d}, \frac{d_2}{d}, \dots, \frac{d_k}{d} \right),$$

com $d = \sum_{i=1}^k d_i$, vamos verificar se satisfaz a definição de processo reversível, temos que

$$P_{ij} \begin{cases} \frac{d_i}{d} \cdot \frac{1}{d_i} = \frac{1}{d} = \frac{d_j}{d} \cdot \frac{1}{d_j} = \pi_i P_{ji}, & \text{se } s_i \text{ e } s_j \text{ são vizinhos} \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases}$$

o que satisfaz a definição, assim para o grafo da figura temos

$$\pi = \left(\frac{d_1}{d}, \frac{d_2}{d}, \dots, \frac{d_k}{d} \right) = \left(\frac{1}{8}, \frac{4}{8}, \frac{2}{8}, \frac{3}{8}, \frac{3}{8}, \frac{1}{8} \right)$$

Assim o vértice mais provável para a partícula estar é o vértice V_2 e os vértices V_1 e V_7 são os menos prováveis da partícula estar.

Teorema 1.1. *Suponha que X_t^1, \dots, X_t^n são cadeias de Markov irredutíveis independentes no conjunto contável S com a seguinte propriedade: Para cada i , duas cópias independentes de X_t^i eventualmente se encontrarão com a probabilidade 1, se f for um função harmônica limitada para a cadeia de Markov $X_t = (X_t^1, \dots, X_t^n)$ em S^n , então f é constante.*

Demonstração. Vamos definir o acoplamento para dois processos de Markov X_t e Y_t da seguinte forma:

1. Supondo que X_t e Y_t evoluem independentemente até a primeira vez τ_1 que $X_t^1 = Y_t^1$
2. Para $t \geq \tau_1$, X_t^1 e Y_t^1 passeiam juntas e as outras $n - 1$ coordenadas passeiam de forma independente, até o primeiro tempo τ_2 que $X_t^2 = Y_t^2$
3. Continuando desta forma, vamos procurar o tempo finito de parada $\tau = \tau_n$ assim que para todo $t \geq \tau$, $X_t = Y_t$.

Agora fixemos $x, y \in S^n$ e usamos os estados iniciais X_0 e $y_0 = y$. Segue que

$$|f(x) - f(y)| = |\mathbb{E}f(X_t) - \mathbb{E}f(Y_t)| \leq \mathbb{E}|f(X_t) - f(Y_t)| \leq 2 \|f\|_\infty \mathbb{P}(\tau > t).$$

Para completar a demonstração, basta considerarmos $t \rightarrow \infty$

□

A suposição do Teorema [1.1](#) é satisfeita, por exemplo, para quaisquer passeios aleatórios irredutíveis em Z^1 ou Z^2 . Para ver isto, seja $p_t(x, y)$ a probabilidade de transição para X_t^i , e seja X_t^i e Y_t^i dois passeios aleatórios, e escrevemos

$$\begin{aligned}
p_{2t}(0, 0) &= \sum_u p_t(0, u)p_t(u, 0) \\
&\leq \sqrt{\sum_u p_t^2(0, u) \sum_u p_t^2(u, 0)} \\
&= \sum_u P_t^2(0, u) = \mathbb{P}^{(0,0)}(X_t^i = Y_t^i).
\end{aligned}$$

Por recorrência, a integral do lado esquerdo acima é infinita. Portanto, a integral do lado direito é infinita e assim o passeio aleatório $X_t^i - Y_t^i$ é recorrente.

1.0.4 Movimento das Partículas

Considere o espaço de estados do processo definido por $\{0, 1\}^E$, onde E é um conjunto enumerável. As partículas movem-se em E de acordo com a seguinte regra:

1. Existe no máximo uma partícula em cada posição de E .
2. A interação só ocorrerá com as partículas que estão na fronteira.
3. Para cada partícula que está na fronteira obtêm-se o tempo de salto de cada uma para o seu respectivo vizinho, a que tiver o menor tempo de salto é a primeira a pular.
4. Repete-se o mesmo processo para esta nova configuração.

Definimos o processo $\{\eta_t(i) : t \geq 0\}$ por:

$\eta_t(i) = 1$ se está ocupado no instante t e $\eta_t(i) = 0$ se i está vazio.

Para $\eta \in \{0, 1\}^E, i, j \in E$, defina $\eta^{ij} \in \{0, 1\}^E$ por

$$\eta^{ij}(k) = \begin{cases} \eta(j) & \text{se } k = i \\ \eta(i) & \text{se } k = j \\ \eta(k) & \text{se } k \neq i, j. \end{cases}$$

Para f cilíndrica seja $\Lambda f(\eta) = \sum_{i,j:\eta(i)=1-\eta(j)=1} p_{ij}[f(\eta^{i,j}) - f(\eta)]$.

Definindo para cada par $i, j \in E$, exponenciais independentes de parâmetro λ_{ij} , observe que $p_{ij} = \frac{\lambda_{ij}}{\sum_j \lambda_{ij}}$. De fato, temos que a distribuição de probabilidade do mínimo de exponenciais independentes é também uma exponencial com parâmetro dado pela soma dos parâmetros, e a probabilidade de que o mínimo ocorra na j -ésima variável é dada pelo seu parâmetro, λ_{ij} , dividido pela soma dos parâmetros das xponências envolvidas $\sum_j \lambda_{ij}$.

Uma condição para que tudo esteja bem definido é dada por: $\sup_j \sum_i p_{ij} < \infty$, o que ocorre em pelo menos duas situações importantes, a saber: $p_{ij} = p_{ji}$ (simétrica) e $p_{ij} = p_{0,j-i}$ (homogênea)

Neste capítulo vimos os conceitos fundamentais que serão usados para uma melhor compreensão dos resultados abordados no próximo capítulo, além disso nos dá uma boa fundamentação para entendermos como ocorre a interação entre as partículas do sistema apresentado em nosso modelo que será feito no capítulo 3.

A seguir veremos alguns resultados sobre a metaestabilidade, apresentamos também o modelo para duas dimensões e além disso mostramos o modelo Ising e como ocorre a interação entre as partículas desse sistema.

Capítulo 2

Metaestabilidade

Dizemos que um sistema está em uma situação metaestável se ele permanece um tempo macroscopicamente longo em um estado aparentemente estacionário, e em particular, se suas estatísticas ao longo de suas trajetórias se estabilizam em torno deste estado, e se além disso, a cabo de um tempo imprevisível, isto é, assintoticamente exponencial, as estatísticas do processo mudam devido a pequenas perturbações e fazem com que o processo se estabilize em torno de seu real estado de equilíbrio [2].

No nosso modelo vamos obter os estados metaestáveis inicialmente verificando uma medida de probabilidade em cada uma das configurações, e a partir daí descrever as propriedades estatísticas do sistema. Nessa estrutura consideramos a evolução temporal do sistema no intuito de obtermos as probabilidades do mesmo convergir ou permanecer em um determinado meta estado como visto em [4].

Consideremos o processo $\{\bar{\xi}_\Gamma^\eta(t) : t \geq 0\}$ com condição inicial $\eta \in \{0, 1\}^\Gamma$, restrito ao conjunto $\Gamma \subset \mathbb{Z}^d$, isto é, tal que os processos pontuais de Poisson em Γ^c não são considerados na evolução do processo.

Seja $\bar{T}_{\Gamma_N}^\eta = \inf\{t \geq 0 : \bar{\xi}_{\Gamma_N}^\eta(t) = 0\}$ o tempo da primeira e última visita do processo $\bar{\xi}_{\Gamma_N}^\eta$ ao estado absorvente, isto é, do processo restrito a $\Gamma_N = \{-N, \dots, N\}^d$ tal que $\bar{\xi}_{\Gamma_N}^\eta(0) = \eta$.

Definição 2.1. *Uma função $f : \{0, 1\}^{\mathbb{Z}^d}$ é dita cilíndrica se houver um conjunto finito $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ tal que $f(\eta) = f(\eta \cap \Lambda)$ para toda configuração $\eta \in \{0, 1\}^{\mathbb{Z}^d}$. O menor conjunto de \mathbb{Z}^d com esta propriedade é dito o suporte de f e será denotado por $\Lambda(f)$.*

Dado um número real $b > 0$, $N \in \mathbb{N}$ e f cilíndrica, as medidas temporais sobre trajetórias de f com respeito ao processo $\{\bar{\xi}_{\Gamma_N}^\eta : t \geq 0\}$ serão representadas pelo processo $\{A_b^N(s, f) : s \geq 0\}$ dado por:

$$A_b^N(s, f) = \frac{1}{b} \int_s^{s+b} f(\bar{\xi}_{\Gamma_N}^\eta(t)) dt.$$

Definição 2.2. *Definimos um processo ergódico como sendo um processo para o qual as médias de conjunto são iguais às médias temporais de qualquer função amostra, assim para um processo ergódico $X(t)$ temos*

$$\mathbb{E}[X(t)] = \overline{X(t, \xi_i)},$$

$$R_X(\tau) = R_x(\tau, \xi_i),$$

onde $\overline{X(t, \xi_i)}$ corresponde a média temporal de uma função amostra $X(t, \xi_i)$, isto é:

$$\overline{X(t, \xi_i)} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} X(t, \xi_i) dt$$

e $R_X(\tau, \xi_i)$ representa a função de autocorrelação temporal que é dada por

$$R_X(\tau, \xi_i) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} X(t, \xi_i) X(t + \tau, \xi_i) dt$$

2.0.1 Caracterização da metastabilidade

A configuração mais geral que consideramos pode ser descrita a seguir. Consideramos um processo de Markov X_t em um espaço de medida $\Gamma \supset X_t$ com tempo discreto ou contínuo t . Normalmente assumiremos que o processo é exclusivamente ergódico com uma medida invariante \mathbb{Q} . Denotaremos a lei desse processo por \mathbb{P} . Além disso, denotaremos por \mathbb{P}_x a lei do processo condicionada em $X_0 = x$. Denotaremos por τ_D , $D \subset \Gamma$, o primeiro tempo de entrada de X_t em D , ou seja,

$$\tau_D \equiv \inf\{t > 0, X(t) \in D\} \quad (2.1)$$

Uma definição de metastabilidade poderia ser a seguinte:

Uma família de processos de Markov é chamada metaestável, se existe uma coleção de conjuntos disjuntos $B_i \subset \Gamma$, Tal que

$$\frac{\sup_{x \notin \cup_i B_i} \mathbb{E}_x \tau_{\cup_i B_i}}{\inf_{x \in \cup_i B_i} \mathbb{E}_x \tau_{\cup_{k \neq i} B_k}} = o(1) \quad (2.2)$$

Aqui $o(1)$ deve ser pensado como um pequeno parâmetro intrínseco que caracteriza o "grau" de metastabilidade. Muitas vezes teremos que fazer com uma família de processos indexados por um parâmetro, que permite fazer (2.2) tão pequeno quanto quisermos.

Intuitivamente, esta definição diz que nosso processo permanece em torno de um dos subconjuntos B_i por um longo período de tempo (ou retorna a B_i muitas vezes) antes de visitar outro desses conjuntos, e assim por diante.

Definição 2.3. Diremos que um processo de Markov satisfaz a condição de balançamento detalhado se a probabilidade de um estado qualquer ξ atingir um estado η é igual a probabilidade do estado η atingir o estado ξ , isto é,

$$R(\xi)P(\xi) = R(\eta)P(\eta),$$

onde $R(\xi)$ e $R(\eta)$ são respectivamente as taxas de transição de sítio de ξ e η . $P(\xi)$, $P(\eta)$ representam respectivamente a distribuição de probabilidades estacionárias dos estados.

Definição 2.4. Dizemos que uma sequência de números reais positivos $(\alpha_N : N \geq 1)$ é de menor magnitude do que uma sequência semelhante $(\beta_N : N \geq 1)$, $\alpha_N \prec \beta_N$ ou $\beta_N \succ \alpha_N$, se α_N/β_N desaparecer com $N \rightarrow \infty$. Dizemos que duas sequências positivas $(\alpha_N : N \geq 1)$, $(\beta_N : N \geq 1)$ são da mesma magnitude, $\alpha_N \approx \beta_N$, se existe uma constante finita positiva C_0 tal que

$$C_0^{-1} \leq \liminf_{N \rightarrow \infty} \frac{\alpha_N}{\beta_N} \leq \limsup_{N \rightarrow \infty} \frac{\alpha_N}{\beta_N} \leq C_0$$

Finalmente, $\alpha_N \preceq \beta_N$ ou $\beta_N \succeq \alpha_N$ significa que $\alpha_N \prec \beta_N$ ou $\alpha_N \approx \beta_N$.

Definição 2.5. Dizemos que um conjunto de sequências $(\alpha_N(i) : N \geq 1)$, ..., $(\alpha_N(l) : N \geq 1)$ é comparável se para cada $i \neq j$ uma de três possibilidades ocorrem: $\alpha_N(i) \prec \alpha_N(j)$ ou $\alpha_N(j) \prec \alpha_N(i)$ ou $\alpha_N(i)/\alpha_N(j)$ converge para uma constante $c_{i,j} \in (0, \infty)$. Então, por exemplo, a possibilidade que a sequência $\alpha_N(i)/\alpha_N(j)$ oscile entre dois valores finitos e não convirja é excluída.

Consideremos um conjunto finito E e sequências $\{\lambda_N(j) : N \geq 1\}$, $0 \leq j \leq n$, tal que $\lambda_N(n) \prec \lambda_N(n-1) \prec \dots \lambda_N(0) \equiv 1$. Seja $\{\eta_t^N : t \geq 0\}$ em E um processo de Markov com taxas de salto denotadas por $R_N(x, y)$, $x \neq y \in E$. Assumimos que o processo é irreduzível, que o único estado estacionário, denotado por μ_N , é reversível, e que as taxas de salto satisfazem as nossas hipóteses. Assim existe $a : E \times E \rightarrow \{0, \dots, n\}$ tal que

$$R_N(x, y) = r_N(x, y)\lambda_N(a(x, y)), \quad x \neq y \in E, \quad (2.3)$$

onde $\lim_{N \rightarrow \infty} r_N(x, y) = r(x, y) \in (0, \infty)$, $x \neq y$. Sem perda de generalidade assumimos que $a(x, y) = 0$ mesmo para $x \neq y$, além disso consideramos também que o produto das taxas $\lambda_N(j)$ são comparáveis. Mais precisamente suponhamos que para cada $(k_1, \dots, k_n) \in \mathbb{Z}^n$,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{i=1}^n \lambda_N(i)^{k_i} = C_o \quad (2.4)$$

para alguma constante $C_0 \in [0, \infty]$ que depende de (k_0, \dots, k_n) .

Tomemos agora dois estados x, y em E . Por irreduzibilidade existe um caminho $x = x_0, x_1, \dots, x_n = y$ tal que $n \leq |E|$, $R_N(x_i, x_{i+1}) > 0$, $0 \leq i \leq n$. Pela condição de equilíbrio, temos que

$$\frac{\mu_N(y)}{\mu_N(x)} = \prod_{i=0}^{n-1} \frac{R_N(x_i, x_{i+1})}{R_N(x_{i+1}, x_i)}. \quad (2.5)$$

Deste modo segue de [2.3](#) e [2.4](#) que as sequências $\{\mu_N(x) : N \geq 1\}$, $x \in E$ são comparáveis. De fato existem $m \geq 1$ sequências $M_N(m) \prec \dots \prec M_N(0) \equiv 1$, uma função $b : E \rightarrow \{0, \dots, m\}$ e uma função $m : E \rightarrow (0, \infty)$ tal que

$$\mu_N(x) = m_N(x)M_N(b(x)), \quad x \in E, \quad (2.6)$$

onde $\lim_{N \rightarrow \infty} m_N(x) = m(x) \in (0, \infty)$. Podemos escolher uma sequência $M_N(j)$ para ser igual a $\prod_{i=1}^n \lambda_N(i)^{k_i}$ por uma escolha apropriada de (k_1, \dots, k_n) com $\sum_i |k_i| \leq 4|E|$.

Seja $G_N : E \times E \rightarrow \mathbb{R}_+$ dado por $G_N(x, y) = \mu_N(x)R_N(x, y)$ e note que G_N é simétrica. Daí pelas igualdades [2.3](#) e [2.4](#) as sequências $\{G_N(x, y) : N \geq 1\}$, $x \neq y \in E$, são comparáveis. Além disso existem $j \geq 1$, sequências $G_N(j) \prec \dots \prec G_N(1) \prec G_N(0) \equiv 1$, uma função $c : E \times E \rightarrow \{0, \dots, j\}$ e uma função $g : E \rightarrow (0, \infty)$ tal que

$$G_N(x, y) = g_N(x, y)G_N(c(x, y)), \quad x, y \in E, \quad (2.7)$$

onde $\lim_{N \rightarrow \infty} g_N(x, y) = g(x, y) \in (0, \infty)$. Podemos escolher uma sequência $G_N(j)$ para ser igual a $\prod_{i=1}^n \lambda_N(i)^{k_i}$ por uma escolha apropriada de (k_1, \dots, k_n) com $\sum_i |k_i| \leq 4|E| + 1$.

Tomemos por P_x^N , $x \in E$ a medida da probabilidade no caminho do espaço $D(\mathbb{R}_+, E)$ induzida pelo processo de Markov $\{\eta_t^N : t \geq 0\}$ iniciando a partir de x . A esperança em relação a P_x^N é denotada por E_x^N . Para um subconjunto A de E denotamos por T_A o tempo de retorno de A : $T_A = \inf\{t > 0 : \eta_t^N \in A\}$

Seja η_t^F um processo de Markov em F e denotemos por $R_N^F(x, y)$, $x, y \in F$ taxas de saltos. Consideremos $r_N^F(A, B)$, $A, B \subset F$, $A \cap B = \emptyset$ como sendo a média das taxas de salto de η_t^F de A para B :

$$r_N^F(A, B) = \frac{1}{\mu_N(A)} \sum_{x \in A} \mu_N(x) \sum_{y \in B} R_N^F(x, y). \quad (2.8)$$

Definição 2.6. *Em física, o fator de Boltzman é um fator de ponderação que determina a probabilidade relativa de um estado ξ , num sistema com múltiplos estados em equilíbrio termodinâmico a temperatura T*

$$e^{-\frac{H(\xi)}{k_B T}}$$

Onde k_B é a constante de Boltzmann, e $H(\xi)$ é a energia do estado ξ . A relação das probabilidades dos estados é dada pela relação (quociente) de seus fatores de Boltzmann.

O fator de Boltzmann não é em si mesmo uma probabilidade, já que não está normalizada. Para normalizar o fator de Boltzmann e converter-lo numa probabilidade, deve-se dividi-lo pela soma Z dos fatores de Boltzmann de todos os estados possíveis do sistema, o qual se denomina função de partição. Desta forma se obtém a distribuição de Boltzmann.

Definição 2.7. Definimos a *enérgia* de uma determinada configuração η como sendo uma grandeza escalar associada a um estado de uma ou mais partículas.

2.0.2 Algoritmo de Metropolis

Em [8] e [11] encontramos uma descrição bem detalhada do algoritmo de Metropolis, o algoritmo Metropolis baseia-se na noção de equilíbrio detalhado que descreve o equilíbrio para sistemas cujas configurações possuem probabilidade proporcional ao fator de Boltzmann. Busca uma amostra do espaço de possíveis configurações com base na temperatura associada a cada configuração, isto é, de uma maneira que concorda com a equação 2.9. Realizamos isso explorando possíveis transições entre as configurações.

Considere duas configurações ξ e η , cada uma das quais ocorre com probabilidade proporcional ao fator de Boltzmann. Então temos que

$$\frac{\mathbb{P}(\xi)}{\mathbb{P}(\eta)} = \frac{e^{-H(\xi)/T}}{e^{-H(\eta)/T}} = e^{-[(H(\xi)-H(\eta))/T]} \quad (2.9)$$

Onde H é função Hamiltoniana que fornece a enérgia da respectiva configuração do sistema, que será definida mais adiante. Podemos obter uma simulação, procedendo da seguinte forma:

1. A partir de uma configuração ξ , com energia $H(\xi)$ conhecida, faça uma alteração na configuração para obter uma nova configuração (próxima) η .
2. Calcule a enérgia $H(\eta)$ dessa nova configuração (tipicamente como uma pequena mudança de $H(\xi)$).
3. Se $H(\eta) < H(\xi)$, considera a nova configuração, uma vez que tem menor energia o que é desejável, de acordo com o fator de Boltzmann.

4. Se $H(\eta) > H(\xi)$, consideramos a nova configuração (respectivamente com maior enérgia) com probabilidade $\mathbb{P} = e^{[H(\xi) - H(\eta)]/T}$ isso significa que, quando a temperatura é alta, não nos importamos com a direção "errada", mas à medida que a temperatura baixa, tomamos a configuração mais baixa que podemos encontrar em nossa vizinhança.

Se seguirmos essas regras, então amostraremos pontos no espaço de todas as configurações possíveis com probabilidade proporcional ao fator de Boltzmann, consistente com a teoria da mecânica estatística de equilíbrio. Podemos calcular as propriedades médias, somando-as ao longo do caminho que seguimos através das possíveis configurações. Na seção mais adiante em que falamos sobre o modelo de Ising ferromagnético apresentamos a aplicação do algoritmo de Metrópolis neste modelo.

2.0.3 Dinâmica de Glauber

Definição 2.8. *Definimos um spin (em inglês "giro") como sendo às possíveis orientações que as partículas podem apresentar quando inseridas em um campo magnético.*

Definição 2.9. *Segundo [1] o equilíbrio térmico é o estado final alcançado em que as variáveis de estado térmico que descrevem o sistema macroscópico (pressão, temperatura, volume, etc.) não mudam mais no tempo.*

A dinâmica de Glauber descreve a interação de um sistema de Ising, que será descrito nas próximas seções, com um reservatório térmico a uma determinada temperatura, consideremos uma rede de spins num espaço de dimensão d . A taxa de inversão de Glauber é dada por

$$\omega_i(\sigma) = \frac{\alpha}{2} \left\{ 1 - \sigma_i \tanh \left[k \sum_{\delta} \sigma_{i+\delta} \right] \right\}$$

onde α é um parâmetro que define a escala temporal e o somatório ocorre entre todos os vizinhos do sítio i . Pode-se mostrar que essa taxa de inversão satisfaz a condição de balanceamento detalhado que, neste caso, é dado por

$$\omega_i(\sigma^i) P(\sigma^i) = \omega_i(\sigma) P(\sigma)$$

para uma probabilidade estacionária

$$P(\sigma) = \frac{1}{Z} e^{k \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j}.$$

onde o somatório representa o número de ligações dos sítios vizinhos mais próximos, desse modo a dinâmica de Glauber descreve um estado de equilíbrio termodinâmico

2.0.4 Modelo para duas dimensões

Em [9] temos a seguinte descrição para um modelo em duas dimensões

Definição 2.10. *Seja $\Lambda \subset \mathbb{Z}^2$ uma grande caixa finita. Com cada local $x \in \Lambda$ associamos uma variável de ocupação $\eta(x) \in \{0, 1\}$, indicando a ausência ou presença de uma partícula para x . Onde um elemento da rede de configuração $\eta = \{\eta(x) : x \in \Lambda\}$ é um elemento do espaço de configuração $\Omega = \{0, 1\}^\Lambda$ com cada configuração $\eta \in \mathcal{X}$ associamos uma energia dada pelo Hamiltoniano*

$$H(\eta) = -U \sum_{(x,y) \in \partial\Lambda} \eta(x)\eta(y)$$

onde $\partial\Lambda$ representa a fronteira e $-U$ é a energia de ligação entre as partículas vizinhas. Como mostra a figura abaixo



Figura 2.1: Configuração do modelo em duas dimensões

Neste caso escolhemos uma dinâmica estocástica em x dada pelo algoritmo de Metrópolis

Cada configuração $\eta \rightarrow \eta'$ através de uma taxa dada por $e^{-\beta[H(\eta') - H(\eta)]_+}$, toda configuração η' é obtida da configuração η via:

- Uma troca de números de ocupação entre vizinhos locais em Λ , e
- Uma elevação ou redução de números de ocupação nos locais únicos em $\partial\Lambda$, que correspondem a saltos de partículas em Λ , respectivamente, para criação ou aniquilação de partículas em $\partial\Lambda$.

2.0.5 O modelo de Ising para baixas temperaturas

Definição 2.11. *(Medida de Gibbs): De acordo com [7] a medida de Gibbs é uma medida de probabilidade, que nos dá a probabilidade do processo de Markov ξ estar*

no estado x , isto é,

$$\mathbb{P}(\xi = x) = \mu_\beta = \frac{1}{Z(\beta)} e^{-\beta H(x)}$$

onde $\beta > 0$ é o inverso da temperatura e $H(x)$ é a energia associada a configuração x .

O Modelo de Ising Consideramos um modelo de Ising ferromagnético descrito em [14] e [13] onde a interação ocorre para vizinhos mais próximos em um toro finito $\Lambda_L = \mathbb{T}_L \times \mathbb{T}_L$, $L \geq 1$, onde $\mathbb{T}_L = \{1, \dots, L\}$ descreve um toro bidimensional com L pontos. O Hamiltoniano é escrito como

$$\mathbb{H} = -\frac{1}{2} \sum_{\langle x, y \rangle} \sigma(x)\sigma(y) - \frac{h}{2} \sum_{x \in \Lambda_L} \sigma(x),$$

onde $\sigma(x) \in \{-1, 1\}$, o primeiro somatório corresponde aos pares de pontos da fronteira de Λ_L , contendo cada par somente uma vez, e o segundo é assumido pelo Λ_L . Vamos considerar sempre $h > 0$.

Para o inverso da temperatura $\beta > 0$, a medida de Gibbs μ_β associado com o Hamiltoniano \mathbb{H} é dado por

$$\mu_\beta(\sigma) = \frac{1}{Z_\beta} e^{-\beta \mathbb{H}(\sigma)}$$

A dinâmica de Glauber no espaço de estado $\Omega = \Omega_L = \{-1, 1\}^{\Lambda_L}$, também sabemos que o modelo Ising, é um processo de Markov em tempo contínuo cujo gerador L_β atua nas funções $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ como

$$(L_\beta f)(\sigma) = \sum_{x \in \Lambda_L} c(x, \sigma) [f(\sigma^x) - f(\sigma)],$$

onde σ^x é a configuração obtida de σ da seguinte forma:

$$\sigma^x(y) = \begin{cases} \sigma(y) & \text{se } y \neq x \\ -\sigma(x) & \text{se } y = x \end{cases}$$

onde as taxas $c(x, \sigma)$ são dadas por

$$c(x, \sigma) = e^{-\beta[\mathbb{H}(\sigma^x) - \mathbb{H}(\sigma)]_+}$$

e onde $a_+, a \in \mathbb{R}$, fica a parte positiva de a : $a_+ = \max\{a, 0\}$. O processo de Markov $\{\sigma_t^\beta : t \geq 0\}$ com gerador L_β é reversível com respectiva medida de Gibbs μ_β , $\beta > 0$, e ergódico. Denote por $R_\beta(\sigma, \sigma')$ a taxa na qual o processo salta de σ para σ' , então $R_\beta(\sigma, \sigma')$ desaparece a menos que $\sigma' = \sigma^x$ para algum $x \in \Lambda_L$, caso em que

$$R_\beta(\sigma, \sigma^x) = c(x, \sigma).$$

Neste modelo o processo de salto do estado σ para o estado σ^x tem taxa 1 se $\mu_\beta(\sigma) \leq \mu_\beta(\sigma^x)$. Em particular, pela condição de equilíbrio detalhada, $\mu_\beta(\sigma)R_\beta(\sigma, \sigma^x) = \min\{\mu_\beta(\sigma), \mu_\beta(\sigma^x)\}$ então a medida de Gibbs é $G_\beta(\sigma, \sigma^x) = \min\{\mu_\beta(\sigma), \mu_\beta(\sigma^x)\}$.

A seguir mostramos algumas resultados obtidos com a simulação numérica do modelo de Ising a baixas temperaturas, onde neste caso estaremos considerando a variação de temperatura do modelo e além disso casos em que vamos levar em conta a existência ou não do campo magnético externo.

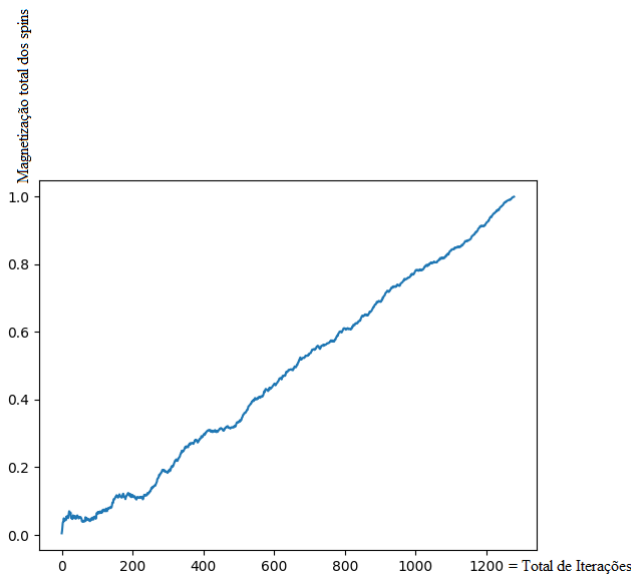


Figura 2.2: Simulação do modelo de Ising

Neste gráfico temos a simulação de uma rede retangular 100×100 de spins e probabilidade $\frac{1}{2}$, onde iniciamos a simulação do modelo com spins positivos e negativos dispostos aleatoriamente na rede com os seguintes valores iniciais $kT = 0,5$ que representa a temperatura da simulação, para a constante de acoplamento consideramos $J = 1$ e para o campo magnético externo consideramos $B = 0$, o passo de tempo t que vamos considerar é o número de linhas vezes o número de colunas. Nessas condições o gráfico [2.2](#) nos mostra que todos os spins foram magnetizados após um número de passos $t = 1200$.

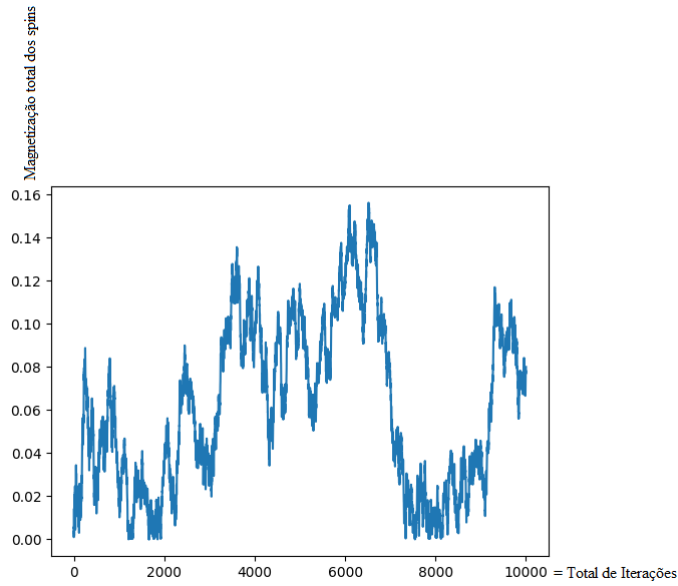


Figura 2.3: Simulação do modelo de Ising

No entanto, nesta outra simulação [2.5](#) mudamos o valor inicial de $kT = 0,5$, para $kT = 1$ e neste caso não ocorre magnetização dos spins após o número máximo de passos $t = 10000$, observamos que a taxa de magnetização é muito baixa e além disso ocorre oscilações da mesma, isso deve-se ao fato de termos aumentado a temperatura da simulação.

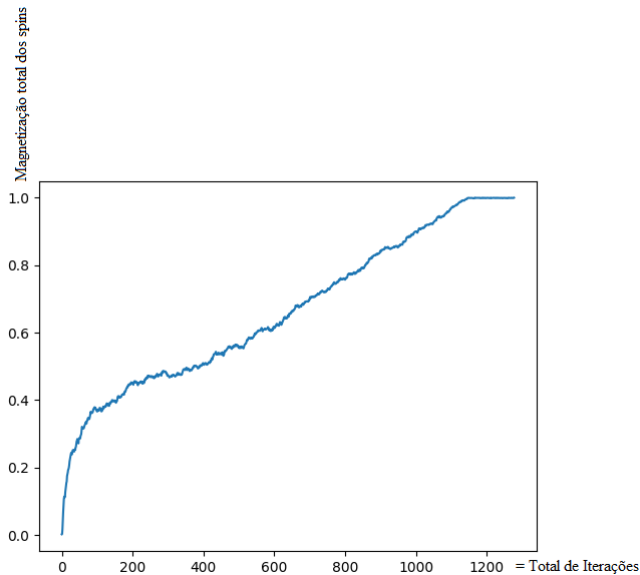


Figura 2.4: Simulação do modelo de Ising

Para esta simulação mudamos apenas o valor do campo magnético externo de

$B = 0$ para $B = 1$ e podemos observar através do gráfico que todos os spins foram magnetizados após 1100 iterações, podemos verificar também que após esse número de iterações o sistema entra em um estado de equilíbrio.

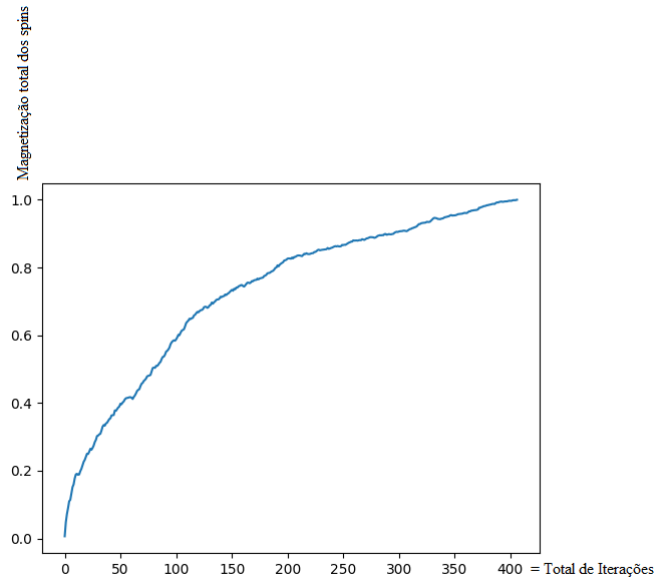


Figura 2.5: Simulação do modelo de Ising

Para esta simulação mudamos apenas os valores do campo magnético externo para $B = 100$ e aproximamos o valor da temperatura de zero consideramos $kT = 0,00001$ e como podemos observar a magnetização da rede de spins acontece em número de iterações menor do que as simulações anteriores.

No próximo capítulo apresentamos o nosso modelo de estudo, vamos iniciar do caso mais simples e em seguida vamos estender nossos resultados para os casos com mais partículas.

Capítulo 3

Metaestabilidade na Cruz

Neste capítulo apresentamos a descrição do modelo abordado nesta dissertação, bem como o sistema atinge os meta estados e também em quais intervalos de tempo isso ocorre e através disso calculamos as probabilidades do sistema atingir cada um dos macroestados do sistema.

Definição 3.1. (*Configuração geral da Cruz*) Em nosso modelo temos um conjunto de n partículas que estão dispostas em formato de uma cruz como mostra a figura 3.1, com cada partícula P correspondendo a um ponto de coordenada $P(x, y) \in \mathbb{Z}^2$. Neste caso a interação do sistema de partículas ocorrerá apenas para vizinhos mais próximos.

Proposição 1. Só consideraremos que duas partículas são vizinhas se a distância entre elas na vertical e horizontal for igual a um e a distância diagonal entre elas for igual a $\sqrt{2}$, a dinâmica utilizada neste modelo será a de Kawasaki abordadas em [6], [10]

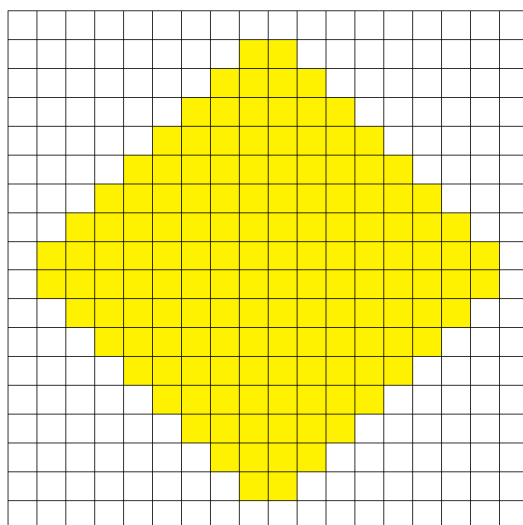


Figura 3.1: Configuração Geral da Cruz

Assim uma partícula no ponto $P(x, y)$ poderá saltar para qualquer um dos pontos $P_1(x-1, y)$, $P_2(x-1, y-1)$, $P_3(x-1, y+1)$, $P_4(x, y-1)$, $P_5(x+1, y)$, $P_6(x+1, y+1)$, $P_7(x, y+1)$ e $P_8(x+1, y-1)$

Denotemos por $\eta = \{\eta(x) : x \in \Omega\}$ como sendo uma determinada configuração do sistema e por Ω como sendo o conjunto de todas as configurações possíveis. Para cada configuração η associamos uma energia dada pela função Hamiltoniana:

$$H(\eta) = -U \sum_{(x,y) \in \partial\Lambda} \eta(x)\eta(y) \quad (3.1)$$

Inicialmente vamos considerar um modelo com 12 partículas na cruz. Assim tomando a configuração inicial η vamos obter a energia do sistema nesta configuração, cada uma das partículas P que fazem parte da fronteira tem duas ou três ligações com outras partículas, especificamente 8 partículas localizadas nos recantos da cruz tem duas ligações cada e as demais tem três ligações. Vale ressaltar que isso só vale pra essa configuração, pois ainda não ocorreu o salto de nenhuma partícula. Assim a energia total dessa configuração é:

$$H(\eta) = 16 + 3.(n - 8) = 16$$

onde n é o número de partículas da fronteira.

Nesse caso as taxas de salto serão sempre um dos seguintes valores

$$e^0, e^{-\beta}, e^{-2\beta}$$

Em [3.1](#) $\partial\Lambda$ representa o conjunto de vizinhos mais próximos de Λ' , onde Λ' é o conjunto de partículas que pertencem a fronteira do sistema de partículas e $-U$ é a energia de ligação entre as partículas vizinhas, cada configuração η vai para uma configuração $\eta^{x,y}$ da seguinte forma

$$\eta^{x,y}(z) = \begin{cases} \eta(z) & \text{se } z \neq x \neq y \\ \eta(y) & \text{se } z = x \\ \eta(x) & \text{se } z = y \end{cases} \quad (3.2)$$

onde x é vizinho de y com uma taxa de salto dada por

$$\lambda = e^{-\beta[H(\eta^{x,y}) - H(\eta)]_+} \quad (3.3)$$

Como em nosso modelo consideramos um sistema que é um processo de Markov em tempo contínuo, vamos tomar um gerador L_β que age sobre as funções $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$

como :

$$(L_\beta f)(\eta) = \sum_{x \in \Omega} c(x, \eta) [f(\eta^{x,y}) - f(\eta)]$$

onde as partículas saltam exponencialmente, e a primeira partícula a saltar é a que tiver respectivamente o menor valor entre todas as exponenciais.

3.1 Metaestabilidade de um sistema com 12 partículas.

Nessa seção faremos uma análise do comportamento de uma cruz com apenas 12 partículas. Observe que este é o caso mais simples de estudo o qual pode convergir para os seguintes possíveis retângulos um de lados 4 e 3, outro de lados 3 e 4, outro de lado 2 e 6 e outro de lado 6 e 2. A configuração inicial é a da figura [3.2](#).

		V ₁	V ₂		
	V ₁₂	P ₁	P ₂	V ₃	
V ₁₁	P ₈			P ₃	V ₄
V ₁₀	P ₇			P ₄	V ₅
	V ₉	P ₆	P ₅	V ₆	
		V ₈	V ₇		

Figura 3.2: Configuração do Modelo

Onde na fronteira temos as partículas P_1, P_2, \dots, P_8 cada partícula da fronteira tem apenas dois espaços vizinhos locais para onde eles podem pular. Por exemplo, a partícula P_1 pode saltar para V_2 ou V_{12} , com taxas exponenciais respectivamente, definidas pela formulas abaixo:

$$\lambda_1 = e^{-\beta} \text{ e } \lambda_2 = e^{-\beta}.$$

De fato para o primeiro salto todas as exponenciais tem a mesma taxa, iguais a de acima. Portanto, nós definimos 16 variáveis aleatórias exponenciais. Para simular tais variáveis nós usamos o fato:

Observação 3.1. *Seja X uma variável aleatória com função de distribuição acumulada $F(x)$ a qual admite inversa. Então, para simular X nós simulamos uma variável aleatória Y uniforme no intervalo $[0, 1]$ e aplicamos a fórmula $x = F^{-1}(y)$. Isto segue do fato que $Y = F(X)$ tem distribuição uniforme no intervalo $[0, 1]$.*

No caso de X ser uma variável exponencial de parâmetro λ , X será gerado ao calcularmos a formula $x = -\log(1 - Y)/\lambda$.

Consideremos η como sendo a configuração inicial do sistema onde nenhuma partícula saltou, e seja $\eta^{x,y}$ a próxima configuração do sistema, para sabermos qual partícula irá saltar temos que obter o valor de

$$\lambda = e^{-\beta[H(\eta^{x,y})-H(\eta)]_+}$$

onde $H(\eta^{x,y})$ e $H(\eta)$ são respectivamente as energias das configurações $\eta^{x,y}$ e η , o que muda de uma configuração pra outra é apenas o salto de um única partícula

Sendo η a configuração atual do sistema vamos obter a energia de cada uma das partículas da fronteira que é dada pelo número de ligações da partícula no estado atual

$$H(\eta)_{P_1} = 2, H(\eta)_{P_2} = 2, \dots, H(\eta)_{P_8} = 2$$

Daí a energia total do sistema é dado pela soma das energias de cada partícula da fronteira, assim temos:

$$H(\eta) = 16$$

Para a próxima configuração do sistema $\eta^{x,y}$ temos a seguinte energia para cada uma das partículas

Se P_1 saltar para V_{12} temos

$$H(\eta^{x,y})_{P_1} = 1, H(\eta^{x,y})_{P_2} = 1, H(\eta^{x,y})_{P_3} = 2, H(\eta^{x,y})_{P_4} = 2$$

$$H(\eta^{x,y})_{P_5} = 2, H(\eta^{x,y})_{P_6} = 2, H(\eta^{x,y})_{P_7} = 2, H(\eta^{x,y})_{P_8} = 3, H(\eta^{x,y})_{P_9} = 3$$

com enérgia tota

$$H(\eta^{x,y}) = 18$$

respectivamente a taxa de salto neste caso é

$$\lambda_1 = e^{-\beta[H(\eta^{x,y})-H(\eta)]} = e^{-\beta[18-16]} = e^{-2\beta}$$

como mostra a figura a seguir

V_{13}	V_{14}		V_2		
V_{12}	P_1	V_1	P_2	V_3	
V_{11}	P_8	P_9		P_3	V_4
V_{10}	P_7			P_4	V_5
	V_9	P_6	P_5	V_6	
		V_8	V_7		

Figura 3.3: Configuração $\eta^{x,y}$ com P_1 saltando para o vizinho V_{12}

Logo o tempo de salto da partícula P_1 para V_{12} será

$$X_1 = -\frac{\ln(1 - Y)}{\lambda_1} = -\frac{\ln(1 - Y)}{e^{-2\beta}}.$$

Tomando inicialmente $\beta = 1$ e sorteando um número $Y = 0,3$ aleatório entre $(0,1)$ temos

$$X_1 = -\frac{\ln(1 - 0,3)}{e^{-2}} = 2,74.$$

Se P_1 saltar para V_2 sua taxa de salto seria $\lambda_2 = e^{-2}$ como a configuração η tem sempre energia $H(\eta) = 16$ visto que é a configuração inicial sem nenhuma partícula ainda ter saltado e a configuração $\eta(x, y)$ tem sempre energia $H(\eta^{x,y}) = 18$ visto que nessa configuração apenas uma partícula saltou, assim vamos ter sempre a seguinte taxa de salto $\lambda = e^{-2}$.

Nessas condições o tempo de salto de P_1 para V_2 será $X_2 = -\frac{\ln(1-0.98)}{0.13} = 30.09$

No próximo capítulo, vamos apresentar alguns resultados obtidos com a simulação numérica do sistema de partículas no caso inicial com 12 e como consequência vamos estender tais resultados para casos com mais partículas.

Capítulo 4

Simulação Numérica

Neste capítulo apresentamos alguns resultados obtidos com a simulação numérica do sistema de partículas partindo do caso inicial com 12 partículas e posteriormente estendendo para mais partículas, a seguir temos uma descrição do algoritmo utilizado para a simulação numérica do nosso modelo.

Algoritmo

Entrada: Conjunto de pontos nos inteiros em formato de cruz

Início:

1º Passo: Identificar as partículas que fazem parte da fronteira;

2º Passo: Para cada partícula da fronteira encontrar os vizinhos com possibilidade de salto;

3º Passo: Calcular a taxa de salto de cada partícula para o seu respectivo vizinho, isto é, calcular $\lambda = e^{-\beta[H(\eta^{x,y})-H(\eta)]_+}$;

4º Passo: Para cada possível posição de salto obter o valor de Y através de uma distribuição uniforme entre 0 e 1;

5º Passo: Para cada possível local de salto e o seu respectivo valor de Y calcular o tempo de salto $X = -\frac{\ln(1-Y)}{\lambda}$;

6º Passo: Verificar o menor tempo de salto das partículas da fronteira para os seus vizinhos, a partícula que tiver o menor tempo de salto é a que saltará primeiro;

7º Passo: Realizar todos os passos anteriores até o sistema atingir a energia máxima;

Saída: Formação de um retângulo

Fim

4.1 Simulação para um sistema com 12 partículas

A simulação foi realizada na linguagem de programação Python, e com esta obtivemos alguns resultados interessantes que foram os seguintes:

1. Em todas as simulações realizadas constatamos que cada configuração do sistema de partículas apresenta uma energia maior ou igual a anterior como mostram as figuras abaixo:

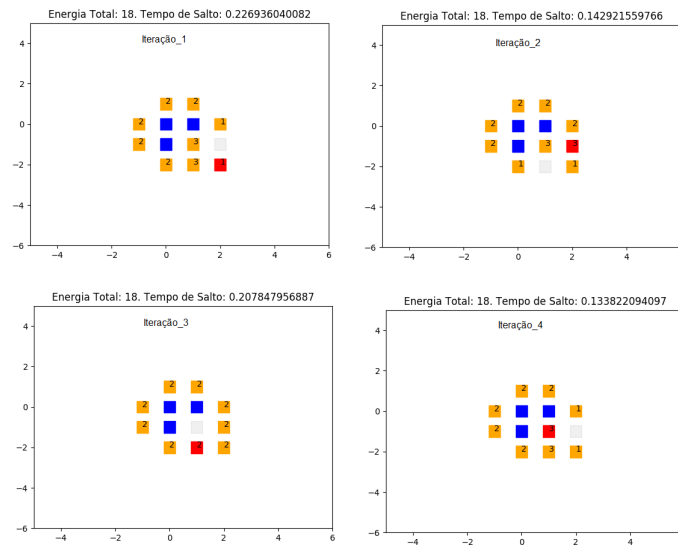


Figura 4.1: Resultados

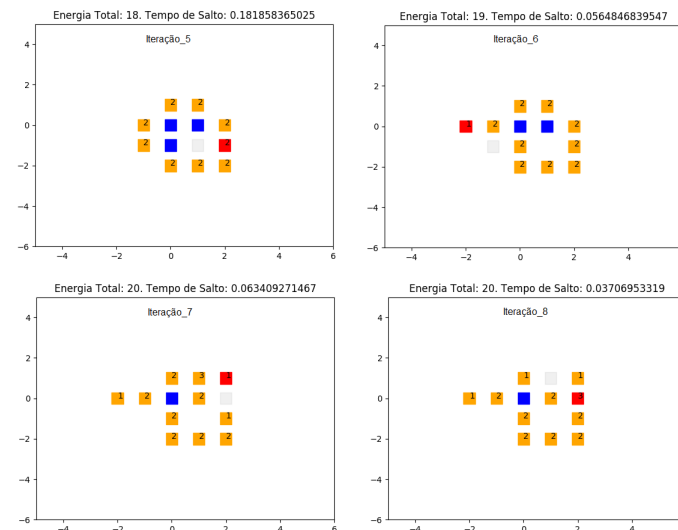


Figura 4.2: Resultados

2. A interação entre as partículas pode ocorrer de tal forma que se obtenham configurações cuja energia encontrada não seja máxima fazendo com que o sistema fique interagindo para sempre nessas configurações, o que podemos observar nas figuras abaixo.

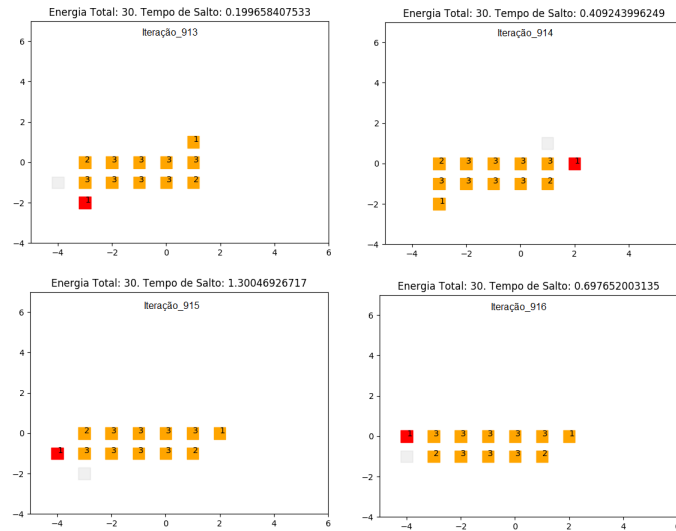


Figura 4.3: Resultados

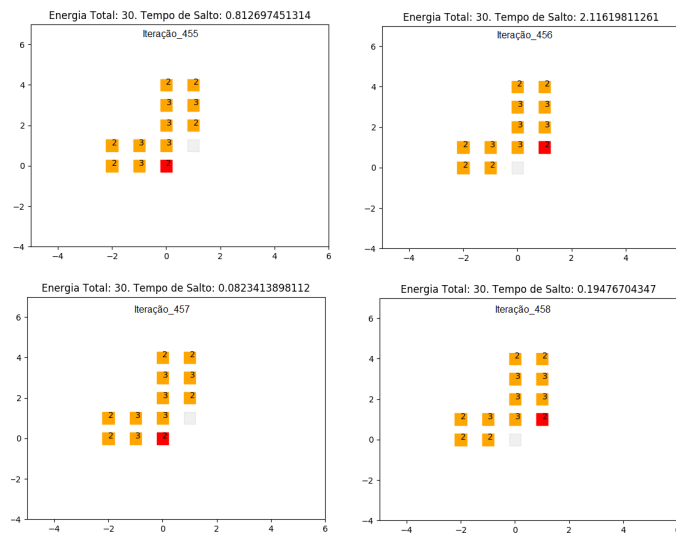


Figura 4.4: Resultados

3. Durante a interação do sistema de partículas se o mesmo não atingir uma das configurações descritas no item anterior, o mesmo passa por vários meta estados, fenômeno este que representa a metaestabilidade do sistema, antes de atingir um macro estado, este macro estado por sua vez é sempre uma configuração retangular de dimensões 2×6 ou 6×2 como podemos observar no capítulo 2 e na figura abaixo:

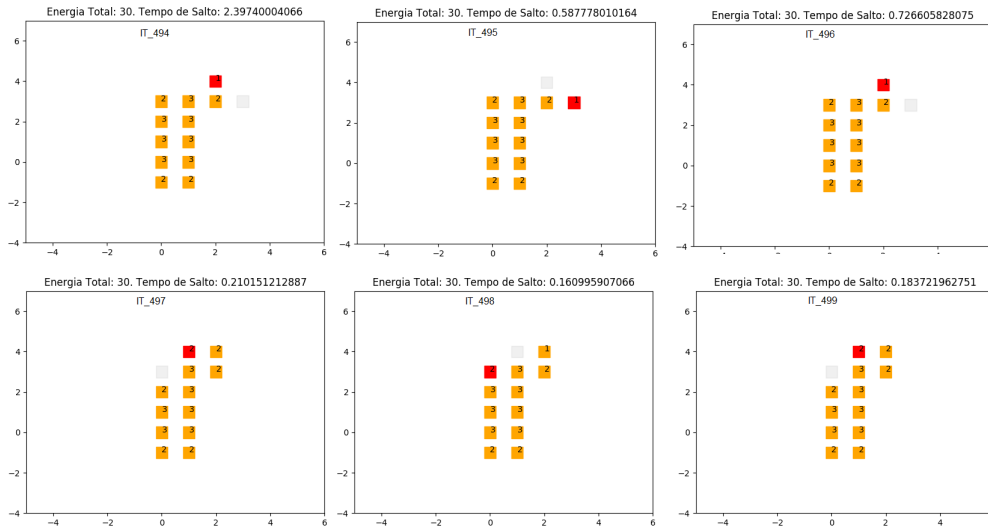


Figura 4.5: Resultados

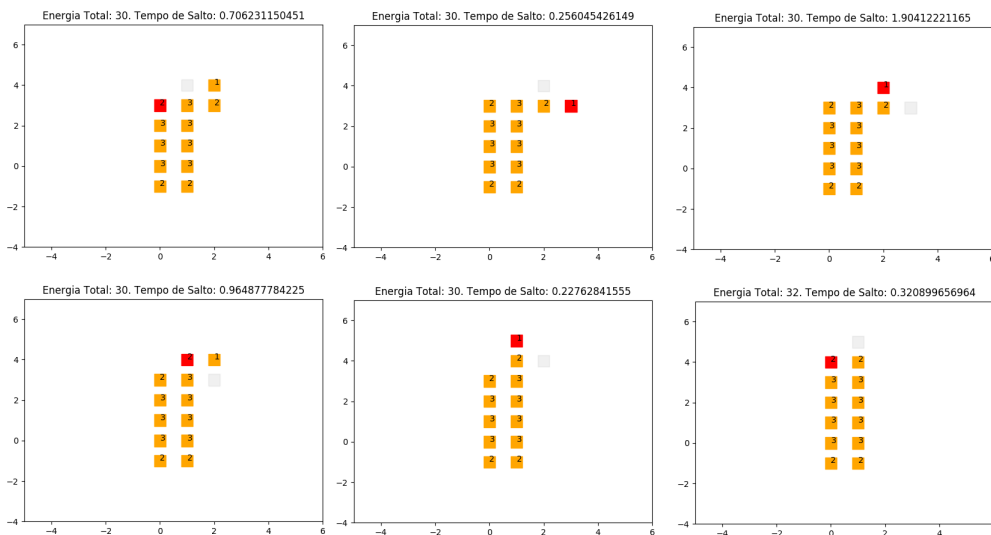


Figura 4.6: Resultados

4. Uma configuração do sistema com 12 partículas apresenta energia máxima quando todas as suas partículas estão na fronteira, isto não quer dizer que uma determinada configuração com todas as partículas na fronteira terá energia máxima como mostra a figura abaixo:

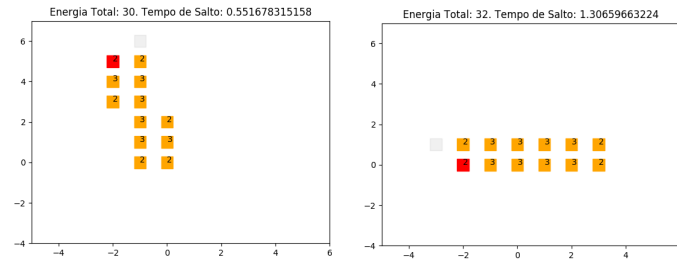


Figura 4.7: Resultados

Com base nestes resultados podemos afirmar que o sistema de partículas inicial não convergirá para a formação de retângulos de dimensões 3×4 e 4×3 , pois nestes dois casos a energia da configuração ainda é baixa fazendo com que o sistema busque novas configurações com energia maior ou igual a da configuração anterior, o que mostra que estas configurações não representam um macro estado do sistema como podemos observar nas figuras abaixo:

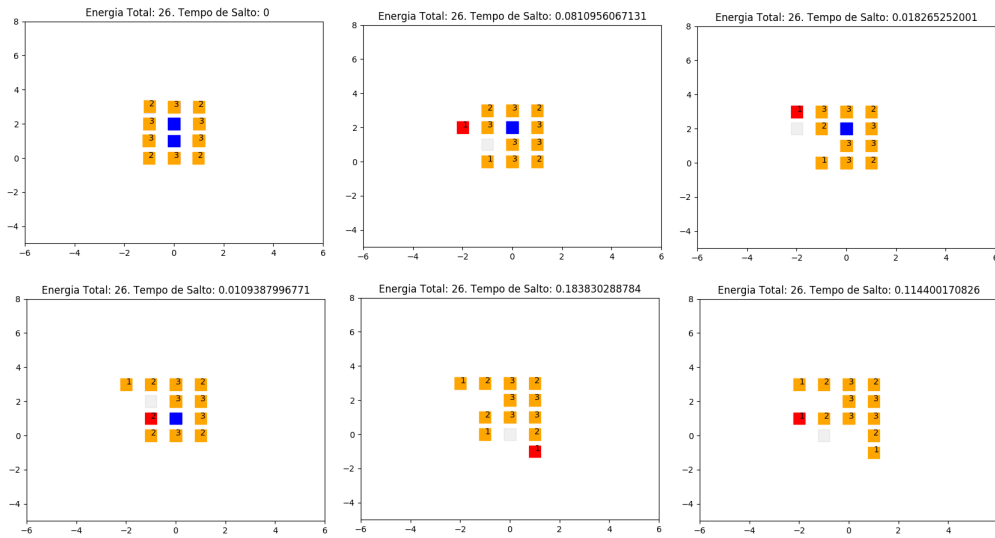


Figura 4.8: Resultados

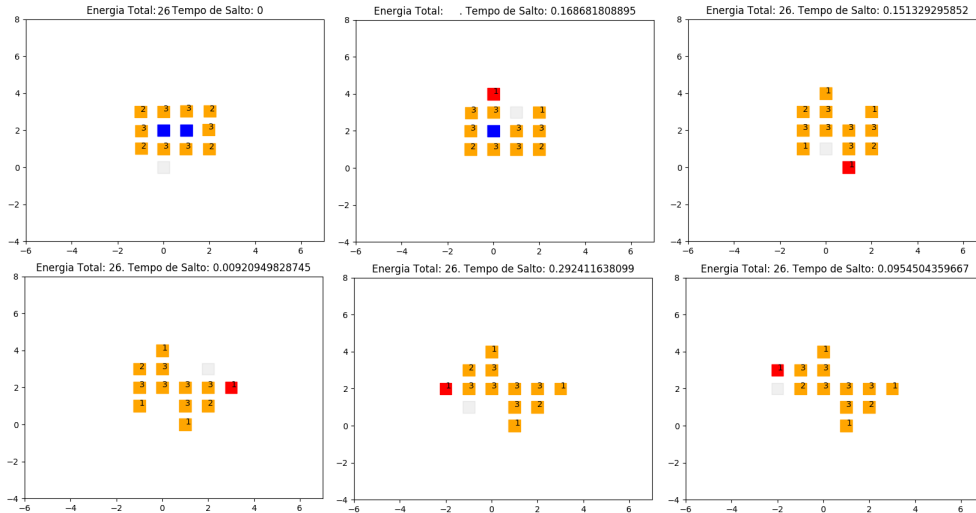


Figura 4.9: Resultados

O sistema atinge um estado de equilíbrio nas configurações de dimensões 2×6 e 6×2 , a partir daí não existe nenhuma outra configuração cuja energia seja maior ou igual e nessas condições as partículas param de interagir umas com as outras.

4.2 Estados de equilíbrio 2×6 e 6×2

Nesta seção vamos mostrar que as configurações de dimensões 2×6 e 6×2 representam estados de equilíbrio do sistema com 12 partículas, ambas com probabilidade aproximada $P = \frac{1}{2}$, vejamos

Dem.: 1. *Inicialmente vamos considerar as configurações $\eta = 6 \times 2$ e $\sigma = 2 \times 6$ respectivamente ambas com energia $H(\eta) = 32$ e $H(\sigma) = 32$, vamos verificar agora que as configurações η e σ possuem a energia máxima que o sistema com 12 partículas pode atingir. Para verificarmos isto temos que mostrar que não existe nenhuma outra configuração com energia maior ou igual a das configurações η e σ . A energia da configuração η é dada por*

$$H(\eta) = 3 \times 8 + 2 \times 4 = 32$$

onde o valores 8 e 4 representam respectivamente o número de partículas da fronteira com 3 e 2 ligações.

Consideremos as seguintes possibilidades de salto para todas as partículas da fronteira, seja η_1 uma nova configuração onde uma das quatro partículas da fronteira com duas ligações saltou, como mostra a figura abaixo

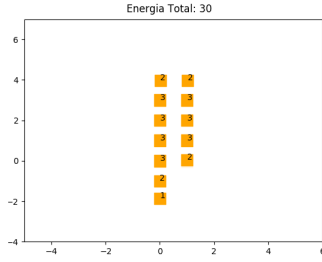


Figura 4.10: Resultados

Nesta configuração temos $H(\eta_1) = 30 < H(\eta)$ assim nenhuma das quatro partículas com duas ligações poderá saltar, consideremos uma outra configuração η_2 onde uma das partículas com três ligações saltou, como mostra a figura abaixo

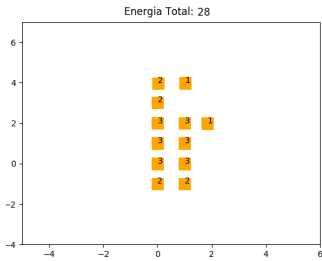


Figura 4.11: Resultados

Nesta configuração temos $H(\eta_2) = 28 < H(\eta)$ assim nenhuma das oito partículas com três ligações poderá saltar, portanto não existe nenhuma outra possibilidade de salto para as partículas da configuração η . o mesmo raciocínio vale para a configuração σ , portanto as configurações η e σ possuem energia máxima.

Seja ξ uma configuração qualquer do sistema diferente η e σ , então a energia de ξ é do tipo $H(\xi) = 3x + 2y + z$, onde x , y e z correspondem respectivamente ao número de partículas da fronteira com 3, 2 e 1 ligações. Assim temos

$$H(\xi) < H(\eta) \text{ e } H(\xi) < H(\sigma)$$

Consideremos agora α a próxima configuração do sistema após a configuração ξ , então temos que um dos seguintes casos pode ocorrer

1. Se $H(\alpha) = H(\xi)$, o sistema poderia encontrar uma nova configuração com energia superior ou igual;
2. Se $H(\eta) > H(\alpha) > H(\xi)$ o sistema vai para uma nova configuração ou atinge uma configuração com energia máxima que neste caso pode ser a configuração η ou σ

Com a simulação numérica feita e considerando apenas os resultados em que o sistema atinge uma das configurações 2×6 ou 6×2 temos o seguinte resultado, rodando o programa 400 vezes o sistema de partículas atingiu em 196 casos a formação de um retângulo de dimensões 2×6 neste caso com probabilidade aproximada de $P = \frac{196}{400} = 0,49$ e em 204 casos atinge um retângulo de dimensões 6×2 com probabilidade aproximada de $P = \frac{204}{316} = 0,51$

4.3 Simulação para um sistema com 14,16,18,20,22 partículas

Para estas quantidades de partículas obtivemos os seguintes resultados:

1. Para 14 partículas

Temos um sistema com a seguinte configuração inicial:

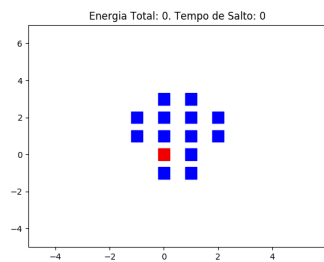


Figura 4.12: Resultados

Observação 4.1. *Para sistemas com respectivamente essas quantidades de partículas valem todos os resultados obtidos no caso inicial com 12 partículas.*

Com a simulação numérica feita e considerando apenas os resultados em que o sistema atinge uma das configurações 2×7 ou 7×2 temos o seguinte resultado, rodando o programa 200 vezes o sistema de partículas atingiu em 103 casos a formação de um retângulo de dimensões 2×7 neste caso com probabilidade aproximada de $P = \frac{103}{200} = 0,51$ e em 97 casos atinge um retângulo de dimensões 7×2 com probabilidade aproximada de $P = \frac{97}{200} = 0,49$ a configuração final desse sistema é do tipo mostrado nas figuras abaixo:

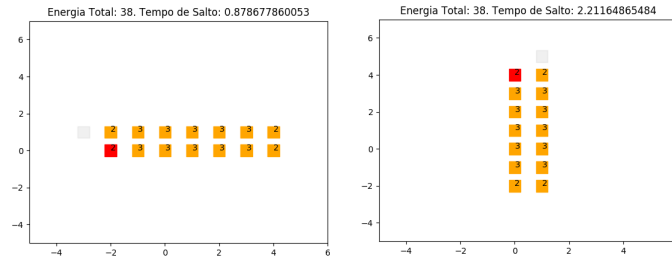


Figura 4.13: Resultados

2. Para 16 partículas

Temos um sistema com a seguinte configuração inicial:

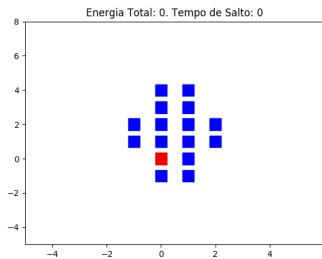


Figura 4.14: Resultados

Com a simulação numérica feita e considerando apenas os resultados em que o sistema atinge uma das configurações 2×8 ou 8×2 temos o seguinte resultado, rodando o programa 200 vezes o sistema de partículas atingiu em 101 casos a formação de um retângulo de dimensões 2×8 neste caso com probabilidade aproximada de $P = \frac{101}{200} = 0,50$ e em 99 casos atinge um retângulo de dimensões 8×2 com probabilidade aproximada de $P = \frac{99}{200} = 0,50$ a configuração final desse sistema é do tipo mostrado nas figuras abaixo:

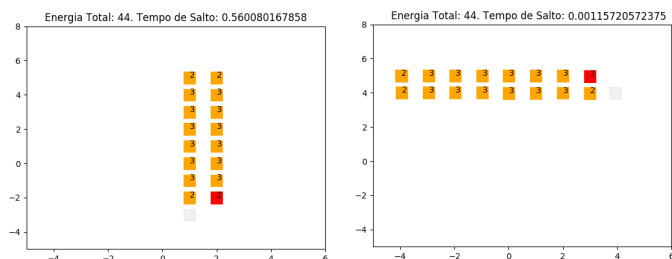


Figura 4.15: Resultados

3. Para 18 partículas

Temos um sistema com a seguinte configuração inicial:

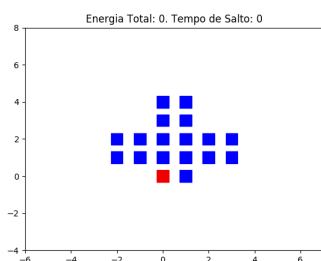


Figura 4.16: Resultados

Com a simulação numérica feita e considerando apenas os resultados em que o sistema atinge uma das configurações 2×9 ou 9×2 temos o seguinte resultado, rodando o programa 200 vezes o sistema de partículas atingiu em 105 casos a formação de um retângulo de dimensões 2×9 neste caso com probabilidade aproximada de $P = \frac{105}{200} = 0,52$ e em 95 casos atingiu um retângulo de dimensões 9×2 com probabilidade aproximada de $P = \frac{95}{200} = 0,48$ a configuração final desse sistema é do tipo mostrado nas figuras abaixo:

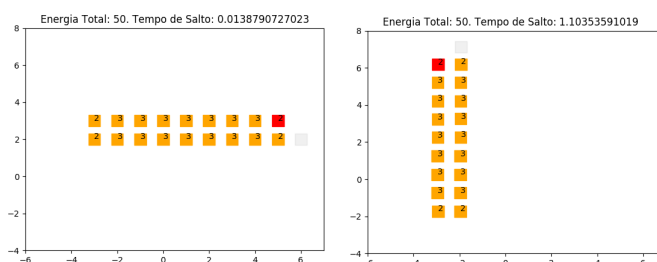


Figura 4.17: Resultados

4. Para 20 partículas

Temos um sistema com a seguinte configuração inicial:

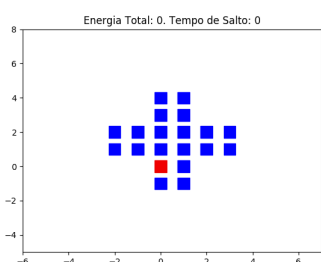


Figura 4.18: Resultados

Com a simulação numérica feita e considerando apenas os resultados em que o sistema atinge uma das configurações 2×10 ou 10×2 temos o seguinte resultado, rodando o programa 200 vezes o sistema de partículas atingiu em 98 casos a formação de um retângulo de dimensões 2×10 neste caso com probabilidade aproximada de $P = \frac{98}{200} = 0,49$ e em 102 casos atinge um retângulo de dimensões 10×2 com probabilidade aproximada de $P = \frac{102}{200} = 0,51$ a configuração final desse sistema é do tipo mostrado nas figuras abaixo:

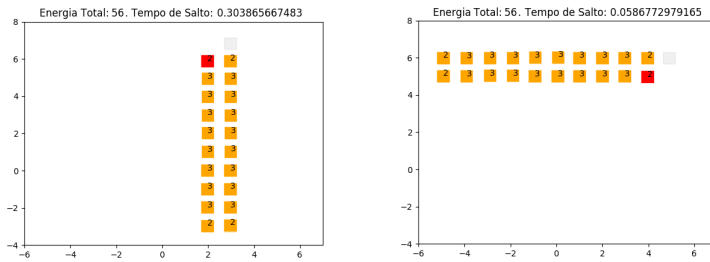


Figura 4.19: Resultados

5. Para 22 partículas

Temos um sistema com a seguinte configuração inicial:

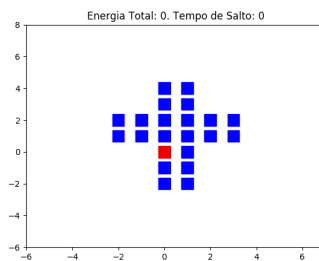


Figura 4.20: Resultados

Com a simulação numérica feita e considerando apenas os resultados em que o sistema atinge uma das configurações 2×11 ou 11×2 temos o seguinte resultado, rodando o programa 200 vezes o sistema de partículas atingiu em 98 casos a formação de um retângulo de dimensões 2×11 neste caso com probabilidade aproximada de $P = \frac{98}{200} = 0,49$ e em 102 casos atinge um retângulo de dimensões 11×2 com probabilidade aproximada de $P = \frac{102}{200} = 0,51$ a configuração final desse sistema é do tipo mostrado nas figuras abaixo:

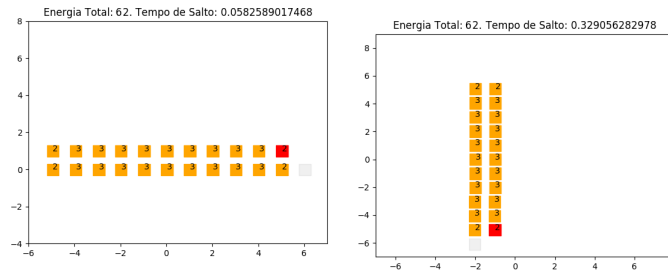


Figura 4.21: Resultados

4.4 Simulação para um sistema com 24 partículas

Nesta seção vamos considerar um sistema como 24 partículas dispostas inicialmente em formato de cruz, e através da simulação numérica vamos apresentar os resultados referentes ao comportamento do sistema no que diz respeito a metaestabilidade e a probabilidade do sistema atingir diferentes macroestados. O algoritmo utilizado é o mesmo para o sistema com 12 partículas, na figura abaixo temos a configuração inicial do sistema.

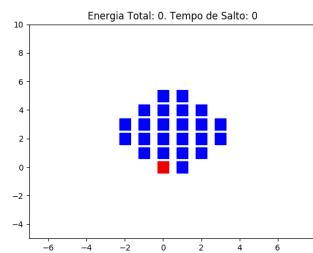


Figura 4.22: Resultados

A interação entre as partículas neste caso irá ocorrer da mesma forma que no caso com 12 partículas, partindo da cruz inicial temos que

Observação 4.2. *Em algumas tabelas não calculamos o tempo de salto de algumas partículas para um vizinho, devido ao fato da nova configuração com este salto ter uma energia menor do que a configuração atual, por exemplo na tabela [4.4](#) omitimos os cálculos referente ao salto da partícula do ponto $(1,0)$ para o vizinho $(2,0)$, pois caso ocorresse esse salto teríamos uma configuração com energia menor do que a energia da configuração atual, em outros casos algumas possibilidades de saltos também são omitidas na tabela devido ao fato das partículas se desconectarem do sistema, fato esse que não pode ocorrer, que é ocorreria caso a partícula $(2,1)$ saltasse para o vizinho $(3,0)$. Assim sendo continuamos com esse processo até o sistema de*

$U(0, 1)$	P.	V.	Tx. de S.	Tp. de S.
0.4227	e^{-2}	(0, 5)	(-1, 5)	4.0599
0.1564	e^{-2}	(0, 5)	(1, 6)	1.2575
0.1916	e^{-2}	(1, 5)	(2, 5)	1.5719
0.7463	e^{-2}	(1, 5)	(0, 6)	10.1360
0.0926	e^{-6}	(-1, 4)	(-2, 4)	39.2169
0.0115	e^{-6}	(-1, 4)	(-1, 5)	4.6737
0.6060	e^{-6}	(2, 4)	(3, 4)	375.8527
0.4345	e^{-6}	(2, 4)	(2, 5)	229.9896
0.5983	e^{-2}	(-2, 3)	(-2, 4)	6.7408
0.5629	e^{-2}	(-2, 3)	(-3, 2)	6.1163
0.8401	e^{-2}	(3, 3)	(3, 4)	13.5462
0.1725	e^{-2}	(3, 3)	(4, 2)	1.3996
0.1767	e^{-2}	(-2, 2)	(-2, 1)	1.4367
0.8237	e^{-2}	(-2, 2)	(-3, 3)	12.8257
0.0209	e^{-2}	(3, 2)	(3, 1)	0.1567
0.7246	e^{-2}	(3, 2)	(4, 3)	9.5295
0.3524	e^{-6}	(-1, 1)	(-2, 1)	175.3392
0.5679	e^{-6}	(-1, 1)	(-1, 0)	338.5211
0.2156	e^{-6}	(2, 1)	(3, 1)	97.9680
0.1409	e^{-6}	(2, 1)	(2, 0)	61.2876
0.2646	e^{-2}	(0, 0)	(-1, 0)	2.2719
0.5662	e^{-2}	(0, 0)	(1, -1)	6.1717
0.8299	e^{-2}	(1, 0)	(2, 0)	13.0908
0.4032	e^{-2}	(1, 0)	(0, -1)	3.8145

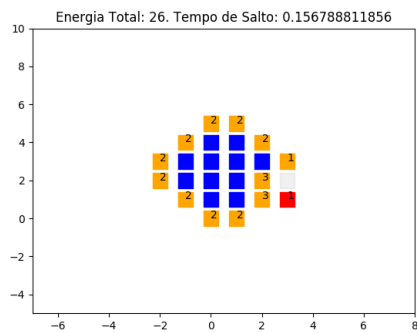


Tabela 4.1: 1ª partícula a saltar é a do ponto (3,2) para o vizinho (3,1)

$U(0, 1)$	P.	V.	Tx. de S.	Tp. de S.
0.2449	e^{-2}	(1, 5)	(0, 6)	2.0764
0.9969	e^{-6}	(-1, 4)	(-2, 4)	2341.3845
0.7129	e^{-6}	(-1, 4)	(-1, 5)	503.4915
0.0261	e^{-6}	(2, 4)	(3, 4)	10.6726
0.5660	e^{-6}	(2, 4)	(2, 5)	336.7827
0.1155	e^{-2}	(-2, 3)	(-2, 4)	0.9071
0.9196	e^{-2}	(-2, 3)	(-3, 2)	18.6277
0.8181	e^{-4}	(3, 3)	(3, 4)	93.0652
0.8758	e^{-2}	(3, 3)	(3, 2)	15.4129
0.3796	e^{-2}	(-2, 2)	(-2, 1)	3.5275
0.4919	e^{-2}	(-2, 2)	(-3, 3)	5.0031
0.6630	e^0	(2, 2)	(3, 2)	1.0877
0.4602	e^{-6}	(-1, 1)	(-2, 1)	248.7536
0.5369	e^{-6}	(-1, 1)	(-1, 0)	310.5876
0.0268	e^{-4}	(2, 1)	(3, 2)	1.4852
0.4874	e^{-2}	(0, 0)	(-1, 0)	4.9391
0.1702	e^{-2}	(0, 0)	(1, -1)	1.3790
0.4197	e^{-2}	(1, 0)	(0, -1)	4.0212
0.8164	e^{-2}	(3, 1)	(2, 0)	12.5244

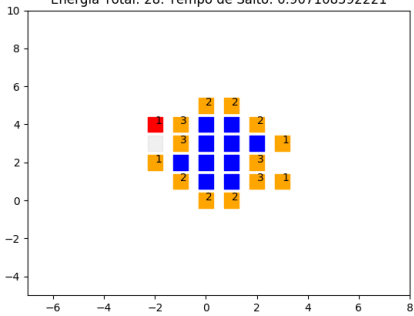
	<p>Energia Total: 28. Tempo de Salto: 0.907108592221</p> 
--	--

Tabela 4.2: 2ª partícula a saltar é a do ponto $(-2, 3)$ para o vizinho $(-2, 4)$

partículas atingir um estado macro, que neste caso é a formação de um retângulo do tipo 12×2 ou 2×12 como vamos mostrar mais adiante.

Com a simulação numérica obtivemos alguns resultados interessantes que foram os seguintes:

1. Em todas as simulações realizadas constatamos que cada configuração do sistema de partículas apresenta uma energia maior ou igual a anterior como mostram as figuras abaixo:

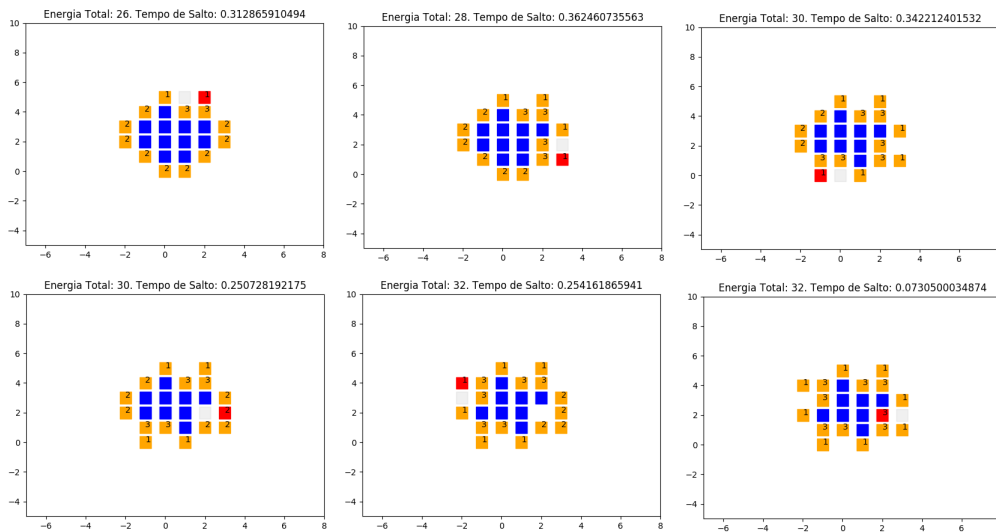


Figura 4.23: Resultados

2. A interação entre as partículas pode ocorrer de tal forma que se obtenham configurações cuja energia encontrada não seja máxima fazendo com que o sistema fique interagindo para sempre nessas configurações, o que podemos observar nas figuras abaixo.

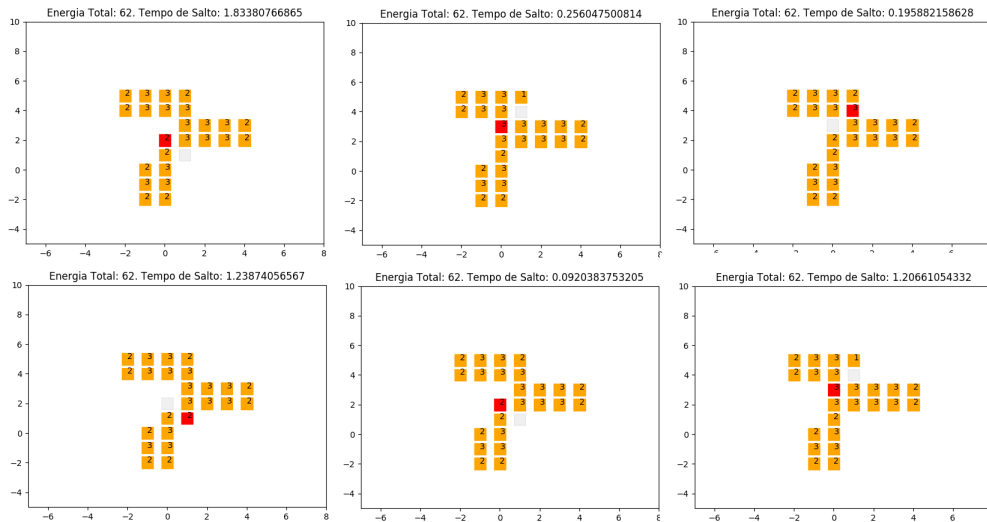


Figura 4.24: Resultados

3. Durante a interação do sistema de partículas se o mesmo não atingir uma das configurações descritas no item anterior, o mesmo passa por vários metaestáveis, fenômeno este que representa a metaestabilidade do sistema, antes de atingir um macro estado, este macro estado por sua vez é sempre uma configuração retangular de dimensões 12×2 ou 2×12

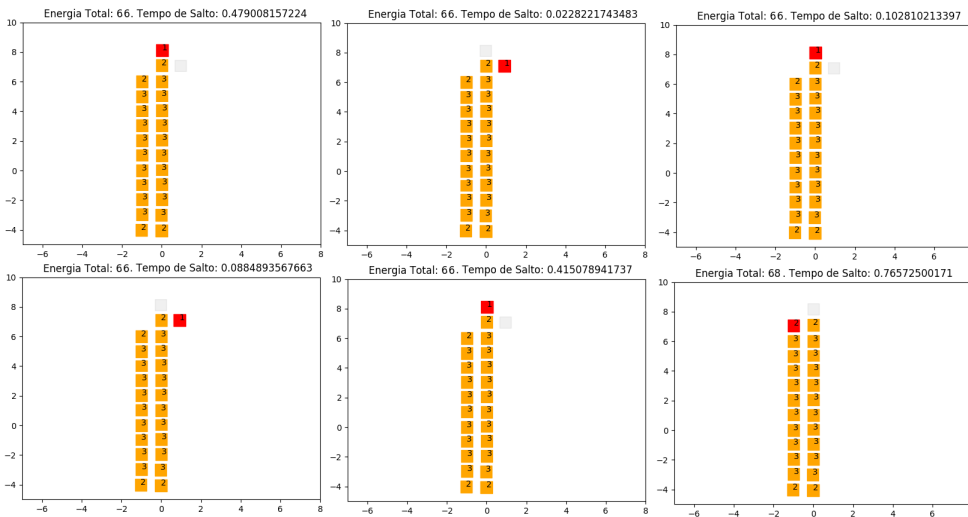


Figura 4.25: Resultados

4. Uma configuração do sistema com 24 partículas apresenta energia máxima quando todas as suas partículas estão na fronteira, isto não quer dizer que uma determinada configuração com todas as partículas na fronteira terá energia máxima como mostra a figura abaixo:

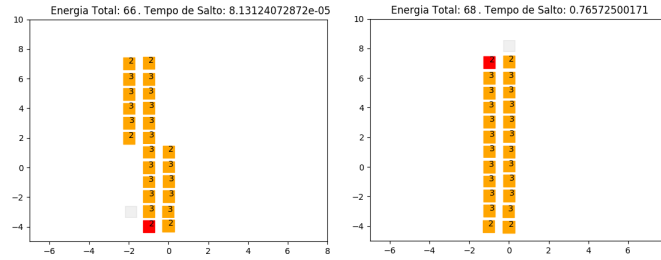


Figura 4.26: Resultados: Na configuração do lado esquerdo todas as partículas estão na fronteira com energia total igual a 66, enquanto que a configuração do lado direito apresenta todas as partículas na fronteira com energia máxima igual a 68.

Com base nestes resultados podemos afirmar que o sistema de partículas inicial não convergirá para a formação de retângulos de dimensões 3×8 , 8×3 , 6×4 e 4×6 pois nestes casos a energia da configuração ainda é baixa fazendo com que o sistema busque novas configurações com energia maior ou igual, o que mostra que estas configurações não representam um macroestados do sistema como podemos observar nas figuras abaixo:

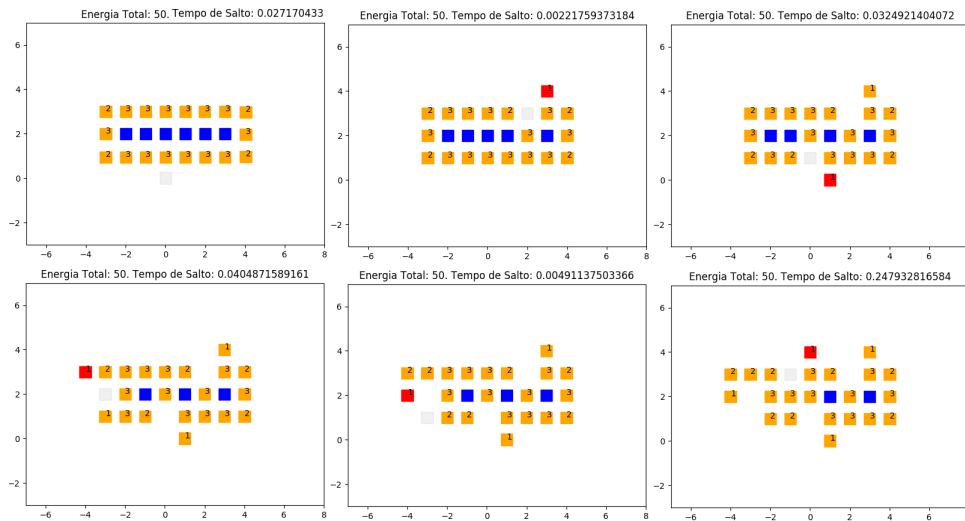


Figura 4.27: Resultados: Note que a configuração de dimensões 3×8 não representa um macroestado, pois se fosse o sistema de partículas não sairia dessa configuração como acontece no caso de dimensões 2×12 ou 12×2 como mostraremos mais adiante.

O sistema atinge um estado de equilíbrio nas configurações de dimensões 12×2 e 2×12 , a partir daí não existe nenhuma outra configuração cuja energia seja maior ou igual a energia da configuração anterior e nessas condições as partículas param de interagir umas com as outras.

4.5 Estados de equilíbrio 12×2 e 2×12

Nesta seção vamos mostrar que as configurações de dimensões 12×2 e 2×12 representam estados de equilíbrio do sistema com 24 partículas, ambas com probabilidade aproximada de $P = \frac{1}{2}$, vejamos

Dem.: 2. *Inicialmente vamos considerar as configurações $\eta = 12 \times 2$ e $\sigma = 2 \times 12$ respectivamente ambas com energia $H(\eta) = 68$ e $H(\sigma) = 68$, vamos verificar agora que as configurações η e σ possuem a energia máxima que o sistema com 24 partículas pode atingir. Para verificarmos isto temos que mostrar que não existe nenhuma outra configuração com energia maior ou igual a das configurações η e σ . A energia da configuração η é dada por*

$$H(\eta) = 3 \times 20 + 2 \times 4 = 68$$

onde o valores 20 e 4 representam respectivamente o número de partículas da fronteira com 3 e 2 ligações.

Consideremos as seguintes possibilidades de salto para todas as partículas da fronteira, seja η_1 uma nova configuração onde uma das quatro partículas da fronteira com duas ligações saltou, como mostra a figura abaixo

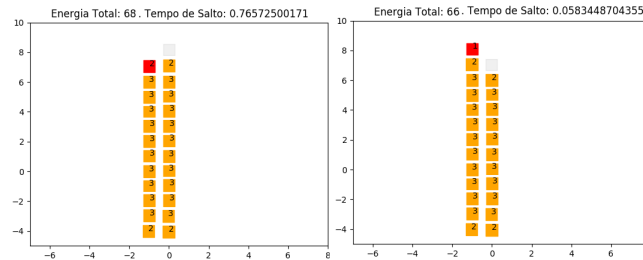


Figura 4.28: Resultados: Na figura da esquerda temos uma configuração η com energia máxima e a esquerda η_1 onde fizemos a suposição que uma das quatro partículas com com duas ligações saltasse note que sua energia diminui em relação a configuração anterior.

Nesta configuração temos $H(\eta_1) = 66 < H(\eta)$ assim nenhuma das quatro partículas com duas ligações poderá saltar, consideremos uma outra configuração η_2 onde uma das partículas com três ligações saltou, como mostra a figura abaixo

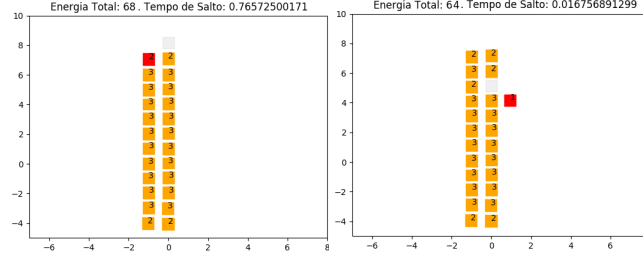


Figura 4.29: Resultados: Neste caso se uma das 20 partículas com 3 ligações pudesse saltar teríamos uma configuração com energia inferior

Nesta configuração temos $H(\eta_2) = 64 < H(\eta)$ assim nenhuma das oito partículas com três ligações poderá saltar, portanto não existe nenhuma outra possibilidade de salto para as partículas da configuração η . o mesmo raciocínio vale para a configuração σ , portanto as configurações η e σ possuem energia máxima.

Seja ξ uma configuração qualquer do sistema diferente η e σ , então a energia de ξ é do tipo $H(\xi) = 3x + 2y + z$, onde x , y e z correspondem respectivamente ao número de partículas da fronteira com 3, 2 e 1 ligações. Assim temos

$$H(\xi) < H(\eta) \text{ e } H(\xi) < H(\sigma)$$

Consideremos agora α a próxima configuração do sistema após a configuração ξ , então temos que um dos seguintes casos pode ocorrer

- 1. Se $H(\alpha) = H(\xi)$, o sistema poderia encontrar uma nova configuração com energia superior ou igual;*
- 2. Se $H(\eta) > H(\alpha) > H(\xi)$ o sistema vai para uma nova configuração ou atinge uma configuração com energia máxima que neste caso pode ser a configuração η ou σ*

Com a simulação numérica feita e considerando apenas os resultados em que o sistema atinge uma das configurações 2×12 ou 12×2 temos o seguinte resultado, rodando o programa 200 vezes o sistema de partículas atingiu em 97 casos a formação de um retângulo de dimensões 2×12 neste caso com probabilidade aproximada de $P = \frac{156}{316} = 0,485$ e em 103 casos atinge um retângulo de dimensões 12×2 com probabilidade aproximada de $P = \frac{160}{316} = 0,515$

4.6 Caso Geral com n-partículas.

Nesta seção vamos considerar um sistema com n-partículas e dessa forma analisaremos o comportamento das mesmas sob as mesmas condições vistas nos casos em

que o sistema apresentava 12 e 24 partículas.

Nessas condições o sistema convergirá para apenas dois macro estados que serão a formação de dois retângulos com dimensões $\eta = 2 \times \frac{n}{2}$ e $\xi \frac{n}{2} \times 2$ visto que estas são as duas configurações com energia máxima dada pela função Hamiltoniana

$$H(\eta) = 3n - 4 = H(\xi),$$

onde n é o número de partículas do sistema.

Observação 4.3. *Essas duas configurações são as únicas a atingirem a energia máxima do sistema de partículas devido ao fato de considerarmos apenas os casos onde a energia de cada configuração é sempre maior o igual a energia da configuração anterior.*

Vamos verificar que essas duas configurações tem energia máxima, suponhamos então que exista outra configuração σ com energia superior as configurações η e ξ daí temos que

$$H(\sigma) = 3 \cdot 2 + (n - 3) \cdot 3 = 3n - 3 > 3n - 4 = 4 \cdot 2 + (n - 4) \cdot 3 = H(\eta)$$

Isto quer dizer que a configuração σ tem 3 partículas com duas ligações e $n - 3$ partículas com 3 ligações o que é um absurdo pois o sistema deverá convergir para um macro estado de formato retangular.

Assim sendo considerando o modelo em que cada configuração tem sempre energia maior ou igual a energia da configuração anterior, o sistema de partículas em todos os casos convergirá para formação de configurações onde tenhamos sempre um número maior de partículas na fronteira, pois são nessas configurações que o sistema atinge energia máxima.

Referências Bibliográficas

- [1] ALLEN, L. W., 2011, *Thermal Physics Concepts and Practice*. 1 ed. Oregon State University Corvallis, Spring.
- [2] BELTRAN, J., LANDIM, C., 2011, “Metastability of reversible finite state Markov processes”, *Stochastic Processes and their Applications*, v. 121, pp. 1633–1677.
- [3] BOVIER, A., ECKHOFF, M., GAYRARD, V., et al., 2000, “Metaestability in stochastic dynamics of disordered mean-field models”, *Probab. Theor.*, v. 119, pp. 96–161.
- [4] CASSANDRO, M., GALVES, A., OLIVIERI, E., 1984, “Metaestable Behavior of Stochastic Dynamics: A Pathwise Approach”, *Journal of Statistical Physics*, v. 35, pp. 603–634.
- [5] GALVES, A. OLIVIERI, E., VARES, M. E., 1986, “Metastability for a class of dynamical systems subject to small random perturbations”, *The Annals of Probability*, v. 15, n. 4, pp. 1288–1305.
- [6] GAUDILLIÉRE, A., SCOPPOLA, E., 2008, “An introduction to metastability”, .
- [7] GEORGII, H. O., 1988, *Gibbs measures and phase transitions*. 9 ed. Berlin, Walter de Gruyter e Co.
- [8] HAARIO, H., SAKSMAN, E., INEN, J. T., 2001, “An adaptive Metropolis algorithm”, *Bernoulli*, v. 7.
- [9] HOLLANDER, F. D., 2004, “Metastability under stochastic dynamics”, *Stochastic Processes and their Applications*, v. 114, pp. 1–26.
- [10] HOLLANDER, F. D., NARDI, F. R., A., T., 2013, “Metastability for Kawasaki dynamics at low temperature with two types of particles”, .
- [11] ILKER, Y., 2012, “Bayesian Inference: Metropolis-Hastings Sampling”, *Department of Brain and Cognitive Sciences University of Rochester*.

- [12] JAMES, B. R., 1981, *Um curso em nível intermediário*. 1 ed. Rio de Janeiro, IMPA.
- [13] MCCOY, B. M., WU, T. T., 2014, *The Two-Dimensional Ising Model*. 2 ed. Nova York, Dover Publications, Inc.
- [14] NEVES, E. J., SCHONMANN, R. H., 1989, “Critical Droplets and Metastability for a Glauber Dynamics at Very Low Temperatures”, *Communications in Mathematical Physics*, pp. 209–230.
- [15] OZEL, G., INAL, C., 2009, “The probability function of a geometric Poisson distribution”, *Journal of Statistical Computation and Simulation*, v. 80, n. 5, pp. 479–487.
- [16] RIFFINO, P. R. C., 2009, *Uma Iniciação aos Sistemas Dinâmicos Estocásticos*. 1 ed. Rio de Janeiro, IMPA.
- [17] ROSS, S., 2010, *Probabilidade: um curso moderno com aplicações*. 8 ed. Porto Alegre, Bookman.
- [18] SIMONIS, A. E PEIXOTO, C., 2005, *Tópicos em Processos Estocásticos: Eventos Raros, Tempos Exponenciais e Metaestabilidade*. Coloquio Brasileiro de Matemática ISBN:85-244-0225-3, IMPA, Rio de Janeiro.

Apêndice A

Programas Utilizados

```
import utils

try:
    f = open("input.txt", "r")
    cross = eval('[ ' + str(f.read()) + ' ]')
except:
    cross = utils.buildSmallCross()

print cross
maxes = utils.getMaxes(cross)
maxX = maxes['maxX'] + 5
minX = maxes['minX'] - 5
maxY = maxes['maxY'] + 5
minY = maxes['minY'] - 5
rng = [minX,maxX,minY,maxY]
utils.plot(cross, rng, [], 'a', (0,0), (0,0), False, 0)

MAX_IT = 1000000
it = 0

while it < MAX_IT:
    border = utils.getPointsInBorder(cross)
    next = utils.getLowestFactor(border, cross, it, rng)
    if(next[0] not in cross):
        print "Converged"
        break;
    cross.remove(next[0])
    cross.append(next[1])
    it += 1
    utils.plot(cross, rng, utils.getPointsInBorder(cross), "IT_"+str(it), next[1], next[0], True, next[2])
```

Figura A.1: Programa para gerar a cruz inicial

```

import random
import matplotlib.pyplot as plt
import math
import networkx as nx

x = 0;
y = 1;
EULER = math.exp(1)
BETA = 1

def getSurrounding(point):
    x = point[0]
    y = point[1]
    return [(x-1, y), (x+1, y), (x, y+1), (x, y-1), (x+1, y+1), (x+1, y-1), (x-1, y+1), (x-1, y-1)]

def getEmptySurroundings(point, cross):
    sur = getSurrounding(point)
    ret = []
    for p in sur:
        if p not in cross:
            ret.append(p)
    return ret

def getCrossSurrounding(point):
    x = point[0]
    y = point[1]
    return [(x-1, y), (x+1, y), (x, y+1), (x, y-1)]

def getPointsInBorder(pointSet):
    sureEmptySpot, emptySpots = getEmptyPoints(pointSet)
    emptyGraph = points2Graph(emptySpots)
    ret = []
    for p in pointSet:
        surroundings = getCrossSurrounding(p)
        for sur in surroundings:
            if sur not in pointSet and p not in ret and repr(sur) in emptyGraph and not isFakeEmpty(sureEmptySpot, sur, e
        ret.append(p)
    return ret

```

Figura A.2: Dinâmica para as partículas saltarem.

```

def getEmptyPoints(pointSet):
    maxes = getMaxes(pointSet)
    maxX = maxes['maxX'] + 2
    minX = maxes['minX'] - 2
    maxY = maxes['maxY'] + 2
    minY = maxes['minY'] - 2
    yRange = range(minY, maxY+1)
    xRange = range(minX, maxX+1)
    emptyPoints = []
    for Y in yRange:
        for X in xRange:
            if (X,Y) not in pointSet:
                emptyPoints.append((X,Y))
    return ((maxX, maxY), emptyPoints)

def isFakeEmpty(sureEmptyPoint, emptySpot, emptyGraph):
    try:
        paths = nx.shortest_path(emptyGraph, source=repr(emptySpot), target=repr(sureEmptyPoint))
        return len(paths) == 0
    except:
        return True

def points2Graph(pointSet):
    G = nx.Graph()
    for p in pointSet:
        surround = getCrossSurrounding(p)
        for sur in surround:
            if sur in pointSet:
                G.add_edge(repr(p), repr(sur))
    G.add_edge(repr(p), repr(p))
    return G

def getPointEnergy(point, pointset):
    energy = 0;
    surroundig = getCrossSurrounding(point)
    for sur in surroundig:
        if sur in pointset:
            energy += 1
    return energy

```

Figura A.3: Continuação da dinâmica para as partículas saltarem.

```

def isConnected(pointSet):
    graph = points2Graph(pointSet)
    ret = nx.is_connected(graph)
    if not ret:
        pass
        #debug(pointSet)
    return ret

def isEmptySpaceEligible(emptySpace, currentPoint, cross):
    crossSurrounding = getCrossSurrounding(emptySpace)
    for neighbour in crossSurrounding:
        if neighbour in cross and neighbour != currentPoint:
            return True
    return False

#Funcao Auxiliar para testes
def buildSmallCross():
    points = []
    for x in [0, 1]:
        for y in [-2, -1, 0, 1]:
            points.append((x, y))
    points.append((2,-1))
    points.append((2,0))
    points.append((-1,-1))
    points.append((-1,0))
    return points

def calcFactor(jumpRate):
    return -1.0*(math.log(1-random.uniform(0, 1)))/jumpRate

def getEligibleSpaces(emptySpaces, currentPoint, cross):
    ret = []
    for emptySpace in emptySpaces:
        if(isEmptySpaceEligible(emptySpace, currentPoint, cross)):
            ret.append(emptySpace)
    return ret

```

Figura A.4: Continuação da dinâmica para as partículas saltarem.

```

def calculateEnergy(border, cross):
    energy = 0
    for point in border:
        surroundig = getCrossSurrounding(point)
        for sur in surroundig:
            if sur in cross:
                energy += 1
    return energy

def getLowestFactor(border, cross ,it, rng):
    lowestJumpTime = 9999999
    ret = (-999, -999)
    currentEnergy = calculateEnergy(border, cross);
    print 'it points: ' + str(cross).strip('[]')
    fileText = ""
    for point in border:
        pointEmptySpaces = getEmptySurroundings(point, cross)
        eligibleSpaces = getEligibleSpaces(pointEmptySpaces, point, cross)
        fileText += "\n"
        if len(eligibleSpaces) > 0:
            fileText += "Particula: " +str(point) + ", poderá saltar para: " + str(eligibleSpaces).strip('[]') + "\n"
        for space in eligibleSpaces:
            crossCopy = cross[:]
            crossCopy.remove(point)
            crossCopy.append(space)
            if not isConnected(crossCopy):
                fileText += "Particula: " + str(point) + " não saltará para: " + str(space) + " pois irá desconectar o sistema\n"
                continue
            newBorder = getPointsInBorder(crossCopy)
            newEnergy = calculateEnergy(newBorder, crossCopy)
            deltaEnergy = newEnergy - currentEnergy
            if deltaEnergy >= 0:
                jumpRate = math.pow(EULER, -1 * BETA * deltaEnergy)
                jumpTime = calcFactor(jumpRate)
                Uniforme=1-math.exp(-jumpRate*jumpTime)
                fileText += "Uni: " + str(Uniforme) + "Taxa de salto: "+ str(jumpRate) +"Particula: " + str(point) + " Saltando para: " + str(space) + "\n"
                if jumpTime < lowestJumpTime:
                    lowestJumpTime = jumpTime
                    ret = (point, space, jumpTime)
    return ret

```

Figura A.5: Continuação da dinâmica para as partículas saltarem.

```

        lowestJumpTime = jumpTime
        ret = (point, space, jumpTime)
    else:
        fileText += "Partícula: " + str(point) + " não saltará para: " + str(space) + " pois diminuiria a energia"
text_file = open(str(it)+".txt", "w")
text_file.write(fileText)
text_file.close()
return ret

def getMaxes(points):
    maxX = -999999999999
    maxY = -999999999999
    minX = 999999999999
    minY = 999999999999
    for p in points:
        if p[x] > maxX: maxX = p[x]
        if p[x] < minX: minX = p[x]
        if p[y] > maxY: maxY = p[y]
        if p[y] < minY: minY = p[y]
    return {
        'maxX': maxX,
        'minX': minX,
        'minY': minY,
        'maxY': maxY
    }

def plot(points, rng, border, text, newPoint, oldPoint, plotEnergy, jumpTime):
    plt.clf()
    X = []
    Y = []
    C = []
    alpha = []
    for p in points:
        X.append(p[x])
        Y.append(p[y])
        if p == newPoint:
            C.append('red')
            if p in border and plotEnergy:
                plt.annotate(str(getPointEnergy(p, points)), xy=(p[x], p[y]), xytext=(0, 0), textcoords='offset points')
        elif p in border:

```

Figura A.6: Continuação da dinâmica para as partículas saltarem.

```

            C.append('orange')
            if plotEnergy:
                plt.annotate(str(getPointEnergy(p, points)), xy=(p[x], p[y]), xytext=(0, 0), textcoords='offset points')
        else:
            C.append('blue')
    X.append(oldPoint[x])
    Y.append(oldPoint[y])
    C.append('#0F0F0F')
    plt.scatter(X, Y, s=200, marker='s', color=C)
    plt.axis(rng)
    energy = calculateEnergy(border, points)
    plt.title('Energia Total: ' + str(energy) + '. Tempo de Salto: ' + str(jumpTime))

plt.savefig(text+'.png')
```

Figura A.7: Continuação da dinâmica para as partículas saltarem.