

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA
Tese de Doutorado

**Estudo numérico de padrões espaciais e
condensação em modelos de partículas sob
contrafluxo**

Eduardo Velasco Stock

Porto Alegre
Janeiro, 2022

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA
Tese de Doutorado

*Numerical study of spacial patterns and
condensates in models of counterflowing
streams of particles**

Eduardo Velasco Stock

Tese realizada sob orientação do Prof. Dr.
Roberto da Silva e apresentada ao Insti-
tuto de Física da UFRGS em preenchi-
mento parcial dos requisitos para a ob-
tenção do título de Doutor em Física.

Porto Alegre
Janeiro, 2022

*Trabalho financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

Agradecimentos

Este trabalho de Doutorado apenas pôde ser realizado com o suporte e entusiasmo do meu orientador e amigo Roberto da Silva. Agradeço à minha mãe, irmã e namorada por terem me dado todo o apoio emocional ao longo de todo esse tempo de trabalho. Agradeço ao Instituto de Física da UFRGS por prover a estrutura física, ao pessoal que trabalha no cluster ADA e aos colegas e amigos da Universidade. Finalmente, agradeço ao CNPq por financiar este trabalho de pesquisa vinculado ao projeto de número 154822/2016-7.

Resumo

Neste trabalho, propusemos um modelo estocástico para descrever a dinâmica de duas espécies de partículas que se deslocam contrariamente em uma rede bidimensional com condições de contorno periódicas. Nossa proposta consiste em definir as probabilidades de transição dos agentes para suas primeiras células vizinhas como distribuições do tipo Fermi-Dirac adaptadas ao contexto de dinâmica de partículas. Assim, a partir de um parâmetro que controla o grau de estocasticidade do sistema (α), o modelo reproduz uma variedade de cenários partindo de um regime de dinâmica com alta aleatoriedade, onde partículas das duas espécies deslocam-se na rede de maneira descorrelacionada, até o regime de baixa estocasticidade, onde a dinâmica é fortemente correlacionada e o movimento na rede dependerá da relação entre o nível de ocupação das células vizinhas e o valor de ocupação máximo (σ_{\max}). A partir de simulações de Monte Carlo e integração numérica de equações diferenciais parciais acopladas, mostramos que existe uma transição abrupta em $\alpha = \alpha_c$, onde α_c depende da densidade média de partículas no sistema. Quando consideramos o caso em que há apenas interação entre entes de espécies diferentes, mostramos que o sistema passa a apresentar alta sensibilidade com as condições iniciais, de modo a poder relaxar para três estados estacionários: estado móvel com auto-organização, estado imóvel com formação de condensados e estado com coexistência de fases. Nesse cenário, o estado de coexistência mostra-se pouco provável de ocorrer, de maneira a observarmos o fenômeno de bimodalidade do estado estacionário (fase móvel ou fase imóvel). Entretanto, ao generalizarmos a dinâmica, a partir do estudo de magnitude dos fatores de interação, conseguimos mapear qualitativamente as condições de ocorrência dos fenômenos de bimodalidade e coexistência que o modelo apresenta.

Palavras chave: Dinâmica de partículas; Contrafluxo; Relaxação; distribuição de Fermi-Dirac; Estado estacionário; Entupimento; Condensados; Equações Diferenciais Parciais; Monte Carlo; Gini.

Abstract

This work proposed a stochastic model to describe the dynamics of two species of particles moving in opposite directions on a two-dimensional lattice with periodic boundary conditions. Our proposition consists of defining the agent's transition probabilities to the first neighboring cells as Fermi-Dirac-like distributions adapted to the context of particle dynamics. This way, by adjusting a single parameter (α), our model can describe a variety of scenarios ranging from a high level of randomness with uncorrelated particles moving along the lattice to a scenario with a low level of randomness with strongly correlated dynamics in which the movement in the lattice depends on the relation between the neighboring cells occupation level and the maximum level of occupation (σ_{\max}). Using Monte Carlo simulations and numerical integration of coupled differential equations, we show that an abrupt transition occurs when $\alpha = \alpha_c$, which value depends on the average density of particles. When we consider only the interaction between particles of different species, we show that the system presents sensitive dependence with initial conditions, and we observe three different steady states: mobile state with lane formation, a jammed state with condensates, and a phase coexistence state (mobile phase and jammed phase). In this case, the latter state rarely happens, in the sense that we observe a bi-modality phenomenon on the steady-state (mobile or jammed). However, when we generalize the dynamics by studying different magnitudes of the interaction factor, we qualitatively map the occurrence conditions of the bi-modality phenomenon and the coexistence state that rises from the model.

Key words: particle dynamic; counterflow; relaxation to a stationary state; non-equilibrium; Fermi-Dirac; clogging; jamming; lane formation; self-organized; condensates; Partial Differential Equations; Monte Carlo; Gini.

Sumário

1	Introdução	6
2	O Modelo	12
2.1	Dinâmica unidimensional	17
2.2	Dinâmica bidimensional	23
3	Resultados: rede unidimensional	25
3.1	Estudo das condições iniciais	29
3.2	Estado estacionário	37
3.3	Densidade média de ocupação	40
3.4	Nível máximo de ocupação (σ_{\max})	43
3.5	Coefficiente de Gini	46
4	Resultados: rede bidimensional	52
4.1	Coexistência e bimodalidade em sistema bidimensional	52
4.2	Interações assimétricas no modelo generalizado	63
5	Conclusões e perspectivas	70
	Referências Bibliográficas	73

Lista de Figuras

1.1	Famoso cruzamento de Shibuya em Tokio no Japão, onde podem atravessar até três mil pessoas por vez dependendo da época e horário. . . .	7
1.2	Representação do sistema de partículas em contrafluxo em uma topologia toroidal. As duas situações extremas são ilustradas: $\alpha \rightarrow 0$ mostra o caso de objetos independentes que interagem com o meio aleatório e $\alpha \rightarrow \infty$ mostra o caso de corpos rígidos e interagentes com momenta de grande magnitude sobrepondo a interação com o meio.	10
2.1	Plano λ_{XX} X λ_{XY} , onde podemos representar todas as possíveis interações do sistema de partículas quando consideramos que $\lambda_{AB} = \lambda_{BA}$ e $\lambda_{AA} = \lambda_{BB}$	16
3.1	Resultados da dinâmica explorada para diferentes valores de α , diferentes métodos e diferentes tempos.	26
3.2	Solução de REC mostrando a densidade de partículas A para $t = 10^5$ iterações (estado estacionário). O sistema é claramente móvel para $\alpha = 0.4$ e entupido para $\alpha = 0.8$ (formação de condensados). Podemos observar um “estranho” comportamento na vizinhança da transição ($0.5 \leq \alpha \leq 0.7$).	28
3.3	Evolução temporal do número de partículas por célula. Iniciando da condição I (PDD) para $\alpha = 0.4$, podemos observar um estado estacionário ($t = 10^5$) onde as partículas fluem sem nenhum efeito de entupimento, ou seja, $A(x, t) = B(x, t) = 1$	30
3.4	Evolução temporal do número de partículas por célula agora para um valor menor de estocasticidade, $\alpha = 3.0$ como condições iniciais do tipo PDD. Podemos observar a formação de condensados (picos de densidade) ao longo do meio.	30
3.5	Evolução temporal do número de partículas para $\alpha = 20.0$. A forte interação de primeiros vizinhos provoca um estado de completo entupimento $A(x, t = 10^5) = B(x, t = 10^5) \approx 128$ em um pico central.	31
3.6	Evolução temporal de partículas por célula iniciando da condição II (DU) para $\alpha = 0.45$. Podemos observar a evolução do sistema fracamente interagente, onde as partículas fluem sem nenhum efeito de entupimento, ou seja, $A(x, t) \approx B(x, t) \approx 1$. O sistema eventualmente atinge seu estado estacionário onde $A(x, t) = B(x, t) = 1$	32

3.7	Evolução temporal do número de partículas para $\alpha = 0.55$ com condição inicial de DU. Podemos observar que a interação presente em um sistema com suficiente aleatoriedade causa a formação de dois condensados de alta densidade de partículas.	32
3.8	Evolução temporal do número de partículas para $\alpha = 10$ com condição inicial de DU. A forte interação provoca um estado de completo entupimento já nos primeiros passos da simulação devido as muitas condições de $\sigma(x, t) > \sigma_{\max}$ presentes ao longo do anel.	33
3.9	Evolução temporal da mobilidade para um sistema de tamanho $L_x = 256$. Podemos observar a transição de um estado de mobilidade parcial quando $\alpha \leq 0.4$ para um estado de imobilidade total para $\alpha \geq 0.6$	34
3.10	Evolução temporal da mobilidade para (a) $L_x = 2$, (b) $L_x = 4$, (c) $L_x = 8$ e (d) $L_x = 16$	35
3.11	Evolução temporal da mobilidade para (a) $L_x = 32$, (b) $L_x = 64$, (c) $L_x = 128$ e (d) $L_x = 256$	36
3.12	Mobilidade estacionário em função de α : (a) mostra que o estado estacionário é sensível às mudanças em η e (b) nos mostra que há uma boa concordância na transição a partir de $\Delta t \geq 1000$	39
3.13	(a) Algoritmo síncrono apresenta comportamento estacionário anômalo para sistemas pequenos, mas para $L \geq 64$ a transição não sofre mais influência das condições de contorno. (b) Algoritmo assíncrono apresenta comportamento “esperado” para sistemas pequenos, mas também deixa de ser influenciado por questões de fronteira para $L \geq 64$	41
3.14	Mobilidade estacionária em função de α para diferentes densidades. Podemos observar uma transição abrupta dependente da densidade partindo de um estado móvel para um estado entupido quando $\alpha = \alpha_c$. O gráfico menor inserido (escala log-log) nos mostra a dependência de α_c como um função da densidade ρ	42
3.15	Mobilidade estacionária em função de α mostrando em (a) o algoritmo síncrono e em (b) o algoritmo assíncrono mantendo em ambos os casos ρ fixo para diferentes valores de σ_{\max}	44
3.16	Mobilidade estacionária em função de α mostrando em (a) o algoritmo síncrono e em (b) o algoritmo assíncrono mantendo em ambos os casos ρ fixo para diferentes valores de σ_{\max}	45
3.17	Coefficiente de Gini estacionário em função de α para <i>i</i>) integração numérica das EDP, <i>ii</i>) simulação MC com algoritmo assíncrono e <i>iii</i>) simulação MC com algoritmo síncrono. Os resultados para DU (UD), PDD (DDP) e OC (CO) como condições iniciais são mostrados nos gráficos (a), (b) e (c) respectivamente. Os efeitos de diferentes períodos de integração das EDP são mostrados no gráfico (d).	46
3.18	G_∞ em função de α obtido a partir da integração numérica das EDP para valores diferentes de σ_{\max} . Em todos os casos, o sistema tem tamanho $L_x = 128$ e $N_A = N_B = 128$ partículas distribuídas de maneira uniforme (UD) inicialmente.	48

- 3.19 G_∞ em função de α obtido a partir da integração numérica das EDP para valores diferentes de σ_{\max} . Em todos os casos, utilizamos um sistema de tamanho $L_x = 128$ e N foi variado de modo que a ocupação $o \equiv N/(L_x\sigma_{\max})$ se mantivesse constante. Condições iniciais de distribuição uniforme (DU) foram utilizadas. 50
- 3.20 Análise de escala considerando PDD como condições iniciais. A partir de $L_x \geq 128$ não são mais observadas variações em função do tamanho do sistema. 51
- 4.1 Evolução temporal da mobilidade do sistema para dez diferentes amostras (cada amostra corresponde a uma diferente semente e a uma diferente cor ou tom de cinza em escala de cinza) para um sistema de dimensões $L_x = 256$ e $L_y = 64$ e $\alpha = 20$. A dinâmica relaxa para um estado de fluxo ótimo quando $\rho = 0.5$ (a) e relaxa para um estado imóvel quando $\rho = 1.5$ (c). Para $\rho = 1.0$ (b), o sistema apresenta um fenômeno de instabilidade transiente em seu estado estacionário, onde tanto a fase móvel ou imóvel podem surgir de acordo dependendo da série temporal. 53
- 4.2 Evolução temporal do parâmetro de ordenamento Φ_x do mesmo conjunto de séries temporais referentes à mobilidade do sistema mostradas na Fig. 4.1. Aqui, chegamos exatamente às mesmas conclusões que chegamos no caso das séries temporais para a mobilidade. As diferentes cores, ou tons de cinza, correspondem a diferentes amostras. 54
- 4.3 Distribuição espacial típica obtida em caso de alta densidade média: $\rho_A = \rho_B = 8$. Podemos ver que o sistema apresenta (a) padrões de faixas de mesma espécie, (b) estado de entupimento e (c) uma situação atípica onde entupimento local e padrões de faixas auto-organizadas parecem coexistir em um chamado “estado desorganizado”. Os pontos azuis (cinza claro) correspondem às partículas movendo-se para o lado direito, enquanto os pontos verdes (cinza escuro) correspondem às partículas movendo-se para a esquerda. 56
- 4.4 Probabilidade de formação de faixas (círculos preenchidos), entupimento (círculos vazios) e relaxação para qualquer estado intermediário (linhas) para um sistema com largura $L_y = 2$ e comprimento $L_x = 2^5$ (preto), $L_x = 2^6$ (vermelho), $L_x = 2^7$ (verde) e $L_x = 2^8$ (cinza). Podemos ver que a densidade de “crossover” decresce assintoticamente a medida que o comprimento do sistema aumenta. O gráfico interno mostra as curvas do desvio padrão das probabilidades tendo seu valor máximo ρ_c diminuindo para sistemas com maior comprimento. As cores diferentes nesta figura correspondem a diferentes tons de cinza em escala de cinza. 58

- 4.5 Probabilidade de formação de faixas (círculos preenchidos), entupimento (círculos vazios) e relaxação para qualquer estado intermediário (linhas) para um sistema de comprimento $L_x = 128$. Mostramos os resultados das simulações para diferentes larguras: $L_y = 2$ (preto), $L_y = 2^2$ (vermelho), $L_y = 2^3$ (verde), and $L_y = 2^4$ (cinza). Podemos notar que a densidade de crossover cresce de $\rho_c \approx 0.5$ até um valor máximo de $\rho_c \approx 1.2$ para sistemas com $L_y > 2$. As cores diferentes nesta figura correspondem a diferentes tons de cinza em escala de cinza. 59
- 4.6 Probabilidades (p_{lane} , p_{clog} , and p_{else}) em função da concentração da espécie A (densidade relativa) para três diferentes valores de densidade média. Para $\rho < \rho_c$ (a), o sistema é móvel independentemente da concentração das espécies. Para $\rho = \rho_c$ (b), o sistema possui $p_{lane} = 1$ para $c_A \leq 0.2$ e cai para $p_{lane} = 0.5$ quando a concentração das espécies chega em uma razão 1:1, sendo este o ponto em que definimos como a densidade de “crossover”. Finalmente, quando $\rho > \rho_c$ (c), se torna mais provável que o sistema apresente um estado estacionário de coexistência de fases (móvel e imóvel) no intervalo em que $0.1 < c < 0.4$ 60
- 4.7 O comportamento de p em função de α ao considerarmos $c_A = c_B$ para o mesmo conjunto de parâmetros e dimensões da rede usados na Fig. 4.6. Para $\rho = \rho_c$, o sistema apresenta um intervalo de valores de α ($2 \lesssim \alpha \lesssim 5$) no qual apresenta maiores chances de entupimento da rede. 62
- 4.8 Mapa de cores nos mostram as probabilidades do sistema relaxar para um estado de auto-organização (p_{lane}), estado de travamento (p_{clog}) ou qualquer outro estado intermediário (p_{else}). Estudamos redes de comprimento $L_x = 128$, densidade média $\rho = 1$ e diferentes valores de largura $L_y = 1$ (gráficos (a.#)), $L_y = 2$ (gráficos (b.#)), $L_y = 4$ (gráficos (c.#)), $L_y = 8$ (gráficos (d.#)) e $L_y = 16$ (gráficos (e.#)). 64
- 4.9 Valores estacionários médios do parâmetro de ordenamento na direção x (a), da mobilidade (b) e do coeficiente de Gini (c) em escala de cores como função dos fatores de interação λ_{XY} e λ_{XX} para um sistema de comprimento $L_x = 128$ e largura $L_y = 1$ 66
- 4.10 Valores estacionários médios do parâmetro de ordenamento na direção x (a), da mobilidade (b) e do coeficiente de Gini (c) em escala de cores como função dos fatores de interação λ_{XY} e λ_{XX} para um sistema de comprimento $L_x = 128$ e largura $L_y = 8$ 68
- 4.11 Valores estacionários médios do parâmetro de ordenamento na direção x (a), da mobilidade (b) e do coeficiente de Gini (c) em escala de cores como função dos fatores de interação λ_{XY} e λ_{XX} para um sistema de comprimento $L_x = 128$ e largura $L_y = 16$ 68

Capítulo 1

Introdução

Fenômenos de transporte de partículas em meios com impurezas podem ser observados em muitos contextos na Física e em um grande número de aplicações. A aplicação do conhecimento desta área de estudo pode ser encontrado na indústria tal como o transporte com captura e liberação de elétrons em dispositivos de micro, nano e mesoescala [1–7] e no movimento errático direcionado de moléculas em colunas cromatográficas [8–10] e muitos outros exemplos. Apesar de existir um grande espectro de modelos teóricos [11–14] e aplicações interessantes no contexto de transporte de partículas interagentes, são os casos específicos em que há o movimento contrário com duas espécies de objetos/partículas que mais nos chamaram a atenção.

O estudo de sistemas de partículas em contrafluxo mostra que o surgimento de certos padrões sugere mais similaridades do que poderíamos prever entre sistemas de micro e macroescala, como a dinâmica de pedestres [15, 16] e o movimento de coloides carregados [17] por exemplo. O entendimento desses fenômenos e as condições nas quais eles acontecem podem nos ajudar a tentar prever o comportamento dos sistemas em questão.

No caso da dinâmica de sistemas macroscópicos como a dinâmica de pedestres aqui exemplificada pelo famoso cruzamento em Shibouya ¹ no Japão mostrado na Fig. 1.1, ou o trânsito de automóveis em estradas e rodovias [18–20], temos situações que nos permitem criar modelos com o objetivo de prever o comportamento dos agentes e os padrões emergentes provenientes de sua interação. O uso de tais modelos [21, 22], suas soluções analíticas e ou computacionais podem motivar a correta construção de prédios públicos ou privados, incluindo teatros e casas de espetáculos com o intuito de anteci-

¹https://en.wikipedia.org/wiki/Shibuya_Crossing



Figura 1.1: Famoso cruzamento de Shibuya em Tóquio no Japão, onde podem atravessar até três mil pessoas por vez dependendo da época e horário.

par possíveis tragédias como, por exemplo, o incêndio na *Boate Kiss* ², pisoteamento no festival de música *Love Parade* ³ e a tragédia nas arquibancadas do Hillsborough Stadium ⁴.

Neste sentido, Oliveira *et al.* [15] demonstraram em seu modelo que as partículas se organizavam em um padrão de fluxo pelo lado esquerdo do corredor induzido pela assimetria do perfil das paredes laterais. Em um estudo sobre “Mosh Pits” [16], que são confrontos coletivos que se originaram em shows de *Punk Rock* e *Heavy Metal* na década de 80 ⁵, onde os expectadores separam-se em dois grandes grupos que eventualmente

²https://pt.wikipedia.org/wiki/Incêndio_na_boate_Kiss

³https://en.wikipedia.org/wiki/Love_Parade_disaster

⁴https://en.wikipedia.org/wiki/Hillsborough_disaster

⁵<https://en.wikipedia.org/wiki/Moshing>

colidem como se estivessem em uma guerra medieval, Silverber *et al.* [16] mostraram a formação de faixas de fluxos opostos e até o surgimento de vórtices em seu modelo.

Em geral, a descrição de tais sistemas parte do princípio da existência de um campo externo responsável por gerar o movimento coletivo dos objetos interagentes. Alguns autores denotam como um campo “social” [23] sendo o responsável por gerar o movimento coletivo quando trata-se do contexto de caminhantes, enquanto em um contexto mais tradicional da Física geralmente estamos falando de um campo elétrico aplicado a dois conjuntos de moléculas/coloides de cargas opostas. Em ambos os casos, alguns autores [15, 16, 24–26] optam por tentar descrever tais sistemas por uma dinâmica molecular em que uma equação diferencial do tipo Langevin é responsável por reger a dinâmica de cada partícula e a estocasticidade do sistema é representada por uma força com componentes de origem estocástica a fim de descrever a interação das partículas com o meio ou o livre arbítrio do caminhante [15]. Outra possibilidade é descrever a dinâmica de transporte a partir de uma automata celular [18, 19, 27–29], na qual o deslocamento dos agentes ocorre probabilisticamente de acordo com o estado das células vizinhas na rede e a estocasticidade do sistema é inerente a este método da simulação. Em ambos os casos, muitas questões interessantes no contexto de mecânica estatística e da física de processos estocásticos modelados por simulações Monte Carlo (MC) e equações diferenciais parciais (EDP) são levantadas como consequência do surgimento de padrões, tais como a formação de faixas de fluxo único (“lanes”) e destilação originados por complexos processos emergentes de objetos e partículas autodirigidas e/ou propelidas por campos externos [27, 30].

De maneira similar, existem algumas situações fundamentais relacionadas ao colapso da dinâmica destes sistemas que nos levam a importantes questionamentos, sejam elas devido a efeitos de entupimento (“jamming”) [31] causados por fenômenos de concentração de massa, ou até mesmo a formação de condensados originados pelo contrafluxo de objetos. Como a aleatoriedade do meio se relaciona com o tamanho das partículas para a ocorrência de entupimento e mobilidade? Para tentarmos entender melhor esses problemas interessantes, propomos um modelo geral de objetos em contrafluxo que apresenta uma dinâmica capaz de cobrir situações entre dois cenários extremos:

- Cenário (i): objetos de tamanhos negligenciáveis se deslocam em um meio aleatório e seu volume excluído não é um parâmetro relevante. Neste caso, o sistema tem alto grau de indeterminação: duas espécies de partículas desempenham um movi-

mento de caminhantes aleatórios direcionados em sentidos opostos, no qual cada ente dá um passo para a próxima célula com probabilidade $1/2$ ou permanecem na célula original com a mesma probabilidade. Desta maneira, é como se a estocasticidade do movimento se devesse à resistência oferecida pelo meio e a interação dos objetos fosse negligenciável. Portanto, a dinâmica não é afetada pelo tamanho das partículas.

- Cenário (ii): os objetos são considerados corpos rígidos e o volume excluído apresenta um importante papel. Neste cenário, os objetos rígidos interagem apenas entre si e o sistema apresenta baixo grau de indeterminação, onde um objeto não pode se deslocar para uma célula sem espaço suficiente para aloca-la.

Nesta tese de doutoramento, exploramos a transição entre esses dois cenários completamente diferentes ao alterarmos apenas um parâmetro denotado por α . Podemos mapear de forma contínua a transição do cenário (i) ($\alpha \rightarrow 0$) para o cenário (ii) ($\alpha \rightarrow \infty$) através da proposta de um modelo simples em que duas espécies de objetos, denotadas por A e B , deslocam-se em sentidos opostos em um sistema toroidal divididos por células. Cada célula da rede possui o mesmo nível máximo de ocupação σ_{\max} , sendo que o grau no qual σ_{\max} pode ser violado é dependente do parâmetro de estocasticidade α . Para caracterizarmos α , utilizamos uma distribuição de Fermi-Dirac adaptada que governa a probabilidade de transição das partículas entre as células.

É importante enfatizarmos que nosso modelo pode representar uma vasta gama de diferentes sistemas físicos como já havíamos motivado, mas os detalhes desta representação são importantes. No movimento em contrafluxo de coloides com cargas opostas [17], um forte campo externo sendo aplicado ao sistema determina que partículas da espécie A se desloquem no sentido horário, por exemplo, enquanto as partículas da espécie B se deslocam no sentido anti-horário. De maneira alternativa, podemos pensar em objetos entrando e saindo das extremidades de uma rede bidimensional (ao longo do toro) a uma taxa constante (condições de contorno periódicas) conforme está representado graficamente na Figura 1.2. Em uma outra possibilidade, o modelo proposto poderia representar uma situação de pedestres andando em um corredor de uma estação de metrô sob algumas condições específicas.

Utilizando a distribuição de Fermi-Dirac adaptada, podemos descrever a dinâmica complexa de partículas em oposição em uma rede bidimensional a partir de duas aborda-

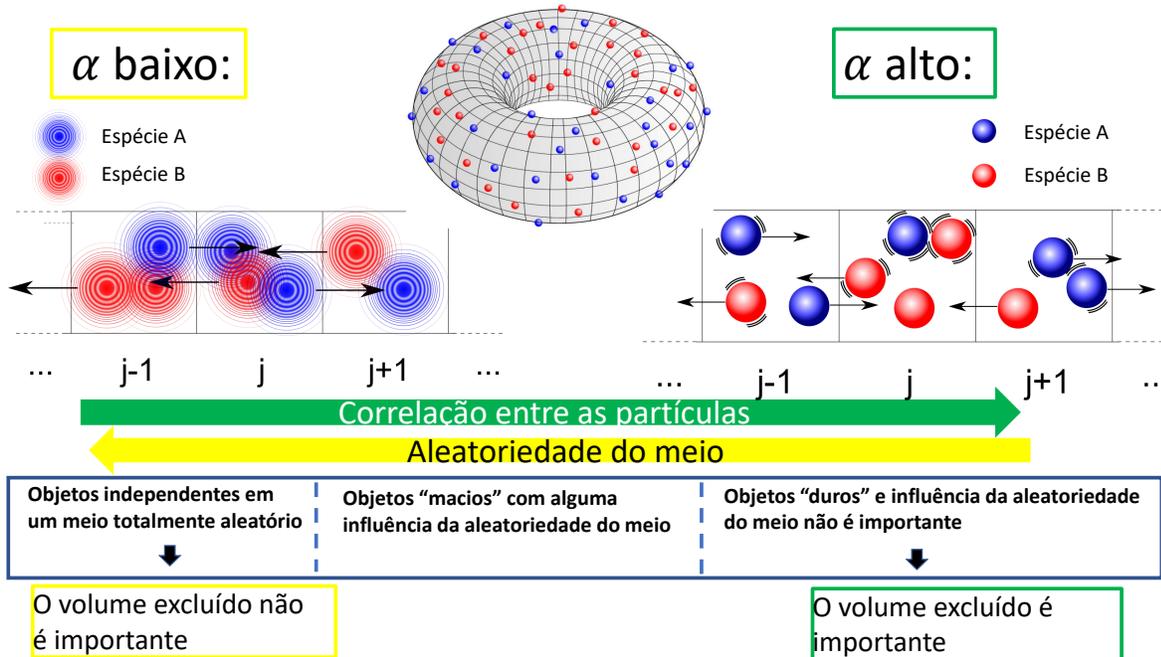


Figura 1.2: Representação do sistema de partículas em contrafluxo em uma topologia toroidal. As duas situações extremas são ilustradas: $\alpha \rightarrow 0$ mostra o caso de objetos independentes que interagem com o meio aleatório e $\alpha \rightarrow \infty$ mostra o caso de corpos rígidos e interagentes com momenta de grande magnitude sobrepondo a interação com o meio.

gens: simulações MC e solução das EDPs do problema. Nossos resultados demonstram a existência de transição abrupta na estocasticidade da dinâmica de um estado móvel de partículas descorrelacionadas para um estado de alta correlação. A dinâmica com alta correlação pode levar o sistema a uma fase imóvel dependendo se o fator de interação das partículas for grande o suficiente para fazer o sistema travar.

Na primeira etapa deste doutoramento, estudamos o modelo em seu caso mais simples: rede unidimensional. Neste estudo, mostramos que a transição na estocasticidade (α) é abrupta no caso de forte interação das partículas e que o valor de α desta transição depende inversamente da densidade média de partículas. Pudemos constatar que o sistema apresenta a formação de condensados quando há um grau de correlação intermediário entre as partículas. Ademais, para calcular a formação destes condensados, utilizamos também uma grandeza conhecida como coeficiente de Gini, que fora originalmente definida para descrever a distribuição de riquezas em um país [32], pois essa grandeza caracteriza bem a heterogeneidade nas concentrações das diferentes células.

Na segunda etapa deste doutoramento, estudamos um caso simples do modelo na rede bidimensional onde apenas partículas de espécies diferentes pudessem interagir. Neste caso específico, mostramos que o estado estacionário do sistema apresenta uma sensível dependência com as condições iniciais quando consideramos um baixíssimo grau de estocasticidade. O modelo apresenta um fenômeno de bimodalidade em que há possibilidade do sistema relaxar tanto para um estado de auto-organização e formação das conhecidas faixas de fluxo único, quanto para um estado imóvel. Mostramos que a probabilidade do sistema relaxar para um destes dois estados depende dos parâmetros extensivos do sistema (ρ , L_x e L_y). Discutiremos que a possibilidade do sistema relaxar para um estado intermediário, sem auto-organização nem imobilidade, é possível mas possui probabilidade baixíssima de ocorrer em nosso modelo e que as condições específicas para sua ocorrência devem ser estudadas futuramente.

Na última etapa deste doutoramento, exploramos simetrias e assimetrias na interação das partículas. Neste estudo, mapeamos o comportamento estacionário do sistema a partir dos fatores de interação entre partículas de mesma e diferentes espécies. Mostramos que o fenômeno de bimodalidade surge para diferentes valores dos fatores de interação desde que respeitando uma certa assimetria no qual a interação de entes de espécies opostas seja suficientemente mais forte que a interação de entes de mesma espécie.

No Cap. 2 desta tese, apresentaremos os detalhes de nosso modelo e definiremos os parâmetros apropriados para análise da dinâmica. Nele também faremos uma breve discussão das EDPs que resultam do caso em que consideramos uma rede unidimensional.

No Cap. 3, apresentaremos e discutiremos nossos principais resultados do caso unidimensional que resultaram em duas publicações no ano de 2019 nas revistas *Physical Review E* e *Journal of Statistical Mechanics*.

No Cap. 4, mostraremos e discutiremos nossos principais resultados do caso bidimensional. A parte do estudo deste capítulo que corresponde apenas a interação entre espécies opostas e o fenômeno de bimodalidade oriundo desta abordagem, foi publicada na revista *Physical Review E* no ano de 2020.

Apresentaremos nossas conclusões e perspectivas Cap. 5.

No capítulo 5, apresentamos os artigos já publicados e correspondentes a parte dos resultados apresentados nesta tese.

Capítulo 2

O Modelo

Definimos um sistema retangular de tamanho $L_x L_y$ com condições periódicas de contorno em ambos eixos, x e y , onde N partículas de duas espécies, A e B , podem deslocar-se. As partículas deslocam-se de maneira discreta pelas células em movimento permitido apenas para as primeiras células vizinhas. Em cada célula podemos ter mais de uma partícula, entretanto a possibilidade das partículas adentrarem uma célula é afetada pela ocupação desta em relação a um valor de ocupação máximo σ_{\max} .

Na direção principal do anel (direção x), as duas espécies deslocam-se em sentidos opostos devido à força de um campo externo de origem genérica, aplicado longitudinalmente à direção principal do anel. Nesse contexto, os dois conjuntos de objetos respondem ao campo de maneira contrária em razão de alguma característica intrínseca das partículas. Não consideramos a possibilidade de as partículas deslocarem-se no sentido oposto ao de sua espécie. Assim, sem perda de generalidade, definimos que as partículas A tendem a deslocar-se no sentido $+x$ do anel, enquanto as partículas B movem-se no sentido $-x$ do anel. As partículas podem, na pior das hipóteses, ficar paradas nas suas células correntes. Desta forma, o movimento das partículas para a célula vizinha no sentido de movimento de sua espécie depende apenas da ocupação de partículas na célula alvo.

Portanto, partículas da espécie A na célula de posição $(x, y) = \epsilon(i, j)$ deslocam-se para a célula $(x, y) = \epsilon(i + 1, j)$ no instante $t = \tau l$ a uma taxa ω , onde ϵ é a dimensão linear da célula quadrada e τ é o tempo necessário para realizar a transição. Consideraremos que a taxa de deslocamento de partículas seja uma função do estado de ocupação da célula alvo denotada por $\omega = \omega_{(i,j) \rightarrow (i+1,j)}^{(l)}$ em termos das variáveis

discretas. De maneira semelhante, ambas espécies estão aptas a deslocar-se sem sentido preferencial para as células de posição $(x, y) = \epsilon(i, j \pm 1)$, ou seja, na direção transversal ao anel (e ao campo). Denotamos as taxas de ocorrência deste movimento lateral por $\omega = \omega_{(i,j) \rightarrow (i,j \pm 1)}^{(l)}$.

A partir das taxas de deslocamento, ω , podemos expressar as seguintes probabilidades de movimento das partículas A :

$$p_{(i,j) \rightarrow (i+1,j)}^{(l)} = \frac{1}{Z_{(i,j)}^{(l)}} \omega_{(i,j) \rightarrow (i+1,j)}^{(l)}, \quad (2.1)$$

$$p_{(i,j) \rightarrow (i,j+1)}^{(l)} = \frac{1}{Z_{(i,j)}^{(l)}} \omega_{(i,j) \rightarrow (i,j+1)}^{(l)}, \quad (2.2)$$

$$p_{(i,j) \rightarrow (i,j-1)}^{(l)} = \frac{1}{Z_{(i,j)}^{(l)}} \omega_{(i,j) \rightarrow (i,j-1)}^{(l)}, \quad (2.3)$$

onde Z é o fator normalizador definido da seguinte forma:

$$Z_{(i,j)}^{(l)} = \begin{cases} \Omega_{(i,j)}^{(l)} & \text{if } \Omega_{(i,j)}^{(l)} \geq 1 \\ 1 & \text{do contrário,} \end{cases} \quad (2.4)$$

onde $\Omega_{(i,j)}^{(l)} = \sum_{\langle i', j' \rangle} \omega_{(i,j) \rightarrow (i', j')}^{(l)}$ é o total de partículas que saem da célula e o termo $\langle i', j' \rangle$ denota que a soma contempla as primeiras células vizinhas para as quais o movimento é permitido.

O fator normalizador (Z), definido pela Eq. 2.4, permite-nos escrever a probabilidade de uma partícula A permanecer na célula de origem, tal que

$$p_{(i,j) \rightarrow (i,j)}^{(l)} = \left(1 - \Omega_{(i,j)}^{(l)}\right) \Theta \left(1 - \Omega_{(i,j)}^{(l)}\right), \quad (2.5)$$

onde $\Theta(\xi)$ é a função degrau:

$$\Theta(\xi) = \begin{cases} 1 & \text{se } \xi > 0 \\ 0 & \text{do contrário.} \end{cases} \quad (2.6)$$

De maneira análoga, as partículas da espécie B deslocam-se no sentido $-x$ com probabilidades:

$$p_{(i,j) \rightarrow (i-1,j)}^{(l)} = \frac{1}{Z_{(i,j)}^{(l)}} \omega_{(i,j) \rightarrow (i-1,j)}^{(l)}, \quad (2.7)$$

$$p_{(i,j) \rightarrow (i,j+1)}^{(l)} = \frac{1}{Z_{(i,j)}^{(l)}} \omega_{(i,j) \rightarrow (i,j+1)}^{(l)} \quad (2.8)$$

e

$$p_{(i,j) \rightarrow (i,j-1)}^{(l)} = \frac{1}{Z_{(i,j)}^{(l)}} \omega_{(i,j) \rightarrow (i,j-1)}^{(l)}, \quad (2.9)$$

assim como a probabilidade de permanência dada pela Eq. 2.5.

Desta maneira, podemos escrever a seguinte relação de recorrência (REC):

$$\begin{aligned} A_{i,j}^{(l+1)} &= p_{(i-1,j) \rightarrow (i,j)}^{(l)} A_{i-1,j}^{(l)} + p_{(i,j-1) \rightarrow (i,j)}^{(l)} A_{i,j-1}^{(l)} \\ &+ p_{(i,j+1) \rightarrow (i,j)}^{(l)} A_{i,j+1}^{(l)} + p_{(i,j) \rightarrow (i,j)}^{(l)} A_{i,j}^{(l)}, \end{aligned} \quad (2.10)$$

onde $A_{i,j}^{(l)}$ é o número de objetos da espécie A na célula (i, j) (posição $(x, y) = \epsilon(i, j)$) no instante $t = \tau l$ e $p_{(i-1,j) \rightarrow (i,j)}^{(l)}$ é a probabilidade de uma partícula A realizar a transição da célula $(i-1, j)$ para a célula (i, j) .

Seguindo a mesma linha de raciocínio, obtemos a seguinte REC para a espécie B :

$$\begin{aligned} B_{i,j}^{(l+1)} &= p_{(i+1,j) \rightarrow (i,j)}^{(l)} B_{i+1,j}^{(l)} + p_{(i,j-1) \rightarrow (i,j)}^{(l)} B_{i,j-1}^{(l)} \\ &+ p_{(i,j+1) \rightarrow (i,j)}^{(l)} B_{i,j+1}^{(l)} + p_{(i,j) \rightarrow (i,j)}^{(l)} B_{i,j}^{(l)}. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Ao levarmos em conta que as chances de adentrar uma célula depende do nível de ocupação máxima, σ_{max} , iremos fazer uma analogia com a distribuição de Fermi-Dirac em um contexto de transporte em condutores e semi-condutores, onde um parâmetro similar à temperatura denotado por α^{-1} apresenta um papel que não é necessariamente a temperatura no nosso contexto. Assim, quando a ocupação de uma célula estiver acima de σ_{max} partículas, a taxa de transição de uma partícula da espécie A para esta célula comporta-se de acordo com a função de Fermi-Dirac [33] na forma:

$$\omega_{(i,j) \rightarrow (i+1,j)}^{(l)} = \frac{1}{1 + e^{\alpha(\sigma(A)_{i+1,j}^{(l)} - \sigma_{max})}}, \quad (2.12)$$

onde $\sigma(X)_{i+1,j}^{(l)} \equiv \lambda_{XA} A_{i+1,j}^{(l)} + \lambda_{XB} B_{i+1,j}^{(l)}$ é a ocupação “efetiva” da célula alvo com a qual as partículas da espécie $X = A, B$ na célula de origem interagem. As variáveis $A_{i+1,j}^{(l)}$ e $B_{i+1,j}^{(l)}$ correspondem ao número de agentes da espécie A e B , respectivamente, α é um fator positivo que controla a estocasticidade da dinâmica, λ_{XX} é o fator de interação entre partículas de mesmo tipo e λ_{XY} corresponde à interação de uma partículas

da espécie X com a espécie Y . Podemos expressar a interação das partículas matematicamente através de uma matriz de interação dada por

$$\Lambda \equiv \begin{pmatrix} \lambda_{AA} & \lambda_{AB} \\ \lambda_{BA} & \lambda_{BB} \end{pmatrix}, \quad (2.13)$$

onde os elementos da matrix Λ devem respeitar alguns critérios para poder representar sistemas físicos reais. Por exemplo, para podermos refletir a terceira Lei de Newton e expressar a simetria da interação das espécies, precisamos definir que $\lambda_{AB} = \lambda_{BA}$. Por simplicidade, também iremos supor que $\lambda_{AA} = \lambda_{BB}$ e $0 < |\lambda_{XX}|, |\lambda_{XY}| < 1$, onde $XX = AA, BB$ e $XY = AB, BA$.

A partir destas últimas considerações, podemos simplificar a representação dos possíveis tipos e magnitudes de interações ao estudarmos os pares coordenados $(\lambda_{XX}, \lambda_{XY})$ no plano $\lambda_{XX} \times \lambda_{XY}$. Na Fig. 2.1, mostramos qualitativamente todas as interações possíveis dentro do intervalo $\lambda_{XX} \in [-1, 1]$ e $\lambda_{XY} \in [-1, 1]$ representado na área hachurada, enquanto os círculos correspondem aos nove diferentes tipos de interações principais.

Por todas as características de um modelo de ocupação celular, torna-se natural definirmos a taxa de movimento das partículas (Eq. 2.12) na forma da distribuição de Fermi-Dirac, sendo a ocupação máxima por célula, σ_{\max} , um parâmetro equivalente ao nível de Fermi, isto é, o potencial químico à temperatura zero. É importante notarmos que este modelo permite matematicamente que as células possuam ocupação maior que σ_{\max} , de maneira que este parâmetro seja apenas um valor referência para um limiar de ocupação.

Dessa maneira, quando o número efetivo de partículas na célula alvo é maior que o limite de ocupação das células, ou seja, $\sigma(X) > \sigma_{\max}$ a transição é dificultada. Do contrário, a transição é facilitada. O quanto a transição é facilitada ou dificultada depende do parâmetro α , que não é exatamente o inverso da temperatura como havíamos esclarecido, entretanto a escolha de uma distribuição do tipo Fermi-Dirac torna-se surpreendentemente compreensível quando estudamos os efeitos de α em um contexto de dinâmica de partículas como é mostrado posteriormente nesta tese.

Continuando a definir as taxas de movimento de partículas no toro, temos que na direção transversal ao campo (direção y), ambas espécies movem-se nos dois sentidos. Neste trabalho, esse movimento “lateral” resulta de dois fatores: o espalhamento causado diretamente por colisões inerentes ao contrafluxo e difusão. O fator de espa-

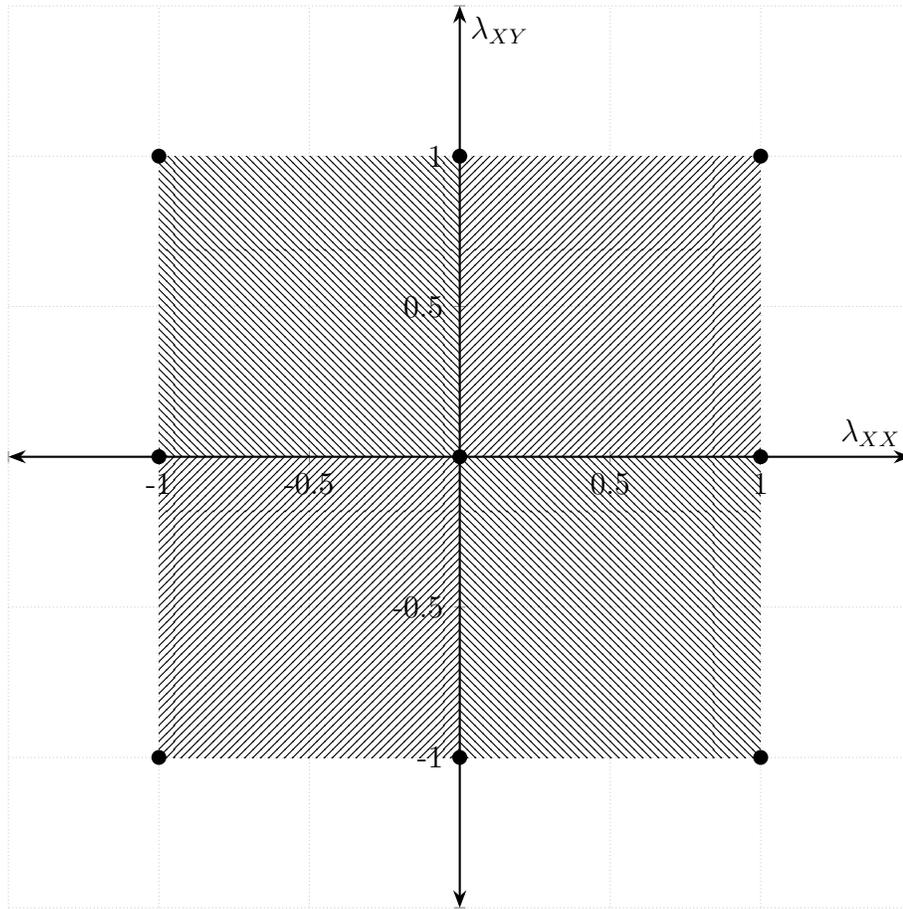


Figura 2.1: Plano λ_{XX} X λ_{XY} , onde podemos representar todas as possíveis interações do sistema de partículas quando consideramos que $\lambda_{AB} = \lambda_{BA}$ e $\lambda_{AA} = \lambda_{BB}$.

lhamento correlaciona de maneira direta o movimento no eixo y com o movimento em x . Definimos este fator como uma taxa de “insucessos” do deslocamento ao longo do eixo x do sistema anelar. A direta correlação impede que o sistema bidimensional se reduza a um conjunto de sistemas unidimensionais acoplados como pôde ser mostrado em ([34]). O fator difusivo do movimento em y depende da ocupação da célula lateral alvo na mesma forma da Eq. 2.12. Ambos os fatores contribuem para a taxa de partículas que deslocam-se lateralmente no anel. Assim, podemos escrever as seguintes taxas de de transição para as partículas da espécie A que deslocam-se da célula $(x, y) = \epsilon(i, j)$

para a células laterais $(x, y) = \epsilon(i, j \pm 1)$ da seguinte forma:

$$\begin{aligned}\omega_{(i,j) \rightarrow (i,j \pm 1)}^{(l)} &= \left[1 - \frac{1}{1 + e^{\alpha(\sigma(A)_{i+1,j}^{(l)} - \sigma_{\max})}} \right] \frac{1}{1 + e^{\alpha(\sigma(A)_{i,j \pm 1}^{(l)} - \sigma_{\max})}} \\ &= \frac{e^{\alpha(\sigma(A)_{i+1,j}^{(l)} - \sigma_{\max})} (1 + e^{\alpha(\sigma(A)_{i,j \pm 1}^{(l)} - \sigma_{\max})})^{-1}}{1 + e^{\alpha(\sigma(A)_{i+1,j}^{(l)} - \sigma_{\max})}},\end{aligned}\quad (2.14)$$

onde o termo em colchetes corresponde ao termo de espalhamento e o termo fora dos colchetes corresponde ao termo difusivo.

Mantendo a analogia e lembrando que os agentes do tipo B deslocam-se no direção $-x$, também podemos escrever as seguintes taxas de movimento celular:

$$\omega_{(i,j) \rightarrow (i-1,j)}^{(l)} = \frac{1}{1 + e^{\alpha(\sigma(B)_{i-1,j}^{(l)} - \sigma_{\max})}}, \quad (2.15)$$

$$\omega_{(i,j) \rightarrow (i,j \pm 1)}^{(l)} = \frac{e^{\alpha(\sigma(B)_{i-1,j}^{(l)} - \sigma_{\max})} (1 + e^{\alpha(\sigma(B)_{i,j \pm 1}^{(l)} - \sigma_{\max})})^{-1}}{1 + e^{\alpha(\sigma(B)_{i-1,j}^{(l)} - \sigma_{\max})}}. \quad (2.16)$$

Ao estudarmos a natureza da distribuição do tipo Fermi-Dirac, podemos inferir algumas características do nosso modelo. Em uma primeira análise, iremos focar nos efeitos que α causa no sistema. Para isso, iremos explorar primeiramente um sistema unidimensional onde duas espécies de partículas deslocam-se em sentidos opostos ao longo de L_x células com condições periódicas de contorno.

2.1 Dinâmica unidimensional

No contexto unidimensional, uma partícula qualquer pode deslocar-se para a célula a sua frente (no sentido de sua espécie) ou permanecer parada a cada intervalo de tempo τ . Assim, a dinâmica de ambas espécies é regida pelo conjunto de regras definidas pelas probabilidades de movimento correspondentes às Eqs. 2.1 para a espécie A e 2.7 para a espécie B e pela chance de permanência em sua célula dada pela Eq. 2.5. Desta forma, o vínculo de normalização nos permite escrever

$$p_{(i) \rightarrow (i)}^{(l)} = 1 - p_{(i) \rightarrow (i+(-)1)}^{(l)}, \quad (2.17)$$

para uma partícula $A(B)$, onde o número inteiro, correspondente à coordenada y , foi e será suprimida nesta tese sempre que tratarmos do caso unidimensional.

É importante ressaltarmos que, durante este doutoramento, nosso modelo foi evoluindo em sua notação até chegar em seu estado atual apresentado neste texto. Desta forma, a notação apresentada aqui difere em alguns aspectos da notação utilizada nos artigos publicados relativos a este estudo e que apresentaremos no final desta tese.

A dinâmica estocástica baseada em uma distribuição do tipo Fermi-Dirac (ver Eq. 2.12 e 2.15) tem seu caso mais trivial quando $\alpha \rightarrow 0$, pois implica que $p_{(i) \rightarrow (i+(-)1)}^{(l)} = 1/2$ e reflete uma situação que seria análoga a de um sistema em alta temperatura (referente ao cenário (i) explicado na Introdução). Este é um cenário ($\alpha \rightarrow 0$) pode representar um sistema de partículas onde os momenta das espécies A e B estivessem em uma escala de grandeza dos momenta das impurezas do meio aleatório devido à baixa intensidade do campo externo. Assim, os objetos comportam-se como caminhantes aleatórios direcionados, onde um número arbitrário de partículas pudesse ocupar as células do sistema (apesar de improvável) uma vez que as chances de movimento não dependeriam de σ_{\max} .

O caso oposto ($\alpha \rightarrow \infty$) apresenta outras peculiaridades. Neste contexto, a probabilidade de transição é altamente sensível à ocupação efetiva da célula alvo e apresenta a seguinte forma:

$$p_{(i) \rightarrow (i\pm 1)}^{(l)} = \begin{cases} 1, & \text{se } \sigma(X)_{i\pm 1}^{(l)} < \sigma_{\max}, \\ \frac{1}{2}, & \text{se } \sigma(X)_{i\pm 1}^{(l)} = \sigma_{\max}, \\ 0, & \text{se } \sigma(X)_{i\pm 1}^{(l)} > \sigma_{\max}. \end{cases} \quad (2.18)$$

Podemos ver pela equação 2.18 que a dinâmica se torna fortemente determinística devido ao seu caráter do tipo Fermi-Dirac. A partícula se move quando encontra uma célula vazia a sua frente ou permanece parada quando esta célula estiver com uma ocupação efetiva acima de σ_{\max} . Neste regime (correspondente ao cenário (ii) visto anteriormente), a estocasticidade aparece apenas no caso em que a ocupação efetiva na célula alvo for igual à capacidade celular, ou seja $\sigma(X)_{i\pm 1, j}^{(l)} = \sigma_{\max}$. Sendo assim, as partículas se comportam como corpos rígidos que colidem ao deslocar-se em sentidos opostos sem que o meio possua alguma influência em seu movimento.

É importante salientarmos que o modelo pode representar muitos contextos físicos. Podemos pensar que um campo elétrico aplicado ao longo do anel provoca o movimento oposto de partículas contrariamente carregadas como no modelo de gás de rede proposto por Schmitten et. al. [35] ou no modelo de colóides com cargas opostas proposto e estudado teórico e experimentalmente por Vissers et. al. [17].

A dinâmica em apenas um grau de liberdade espacial nos permite reescrever as relações de recorrência 2.10 e 2.11 para os objetos A no formato $A_m^{(n)} - A_m^{(n-1)} = a_{m-1}^{(n-1)} - a_m^{(n)}$ e de maneira similar para os objetos B no formato $B_m^{(n)} - B_m^{(n-1)} = b_{m+1}^{(n-1)} - b_m^{(n-1)}$, onde

$$a_m^{(n)} \equiv A_m^{(n)} / \left[1 + e^{\alpha(\sigma(A)_{m+1}^{(n)} - \sigma_{\max})} \right] \quad (2.19)$$

e

$$b_m^{(n)} \equiv B_m^{(n)} / \left[1 + e^{\alpha(\sigma(B)_{m-1}^{(n)} - \sigma_{\max})} \right]. \quad (2.20)$$

Neste caso unidimensional, resolvemos as equações de recorrências que determinam a evolução das espécies em uma dinâmica discreta, mas também devemos estudar o conjunto de EDPs resultantes da aproximação para o contínuo.

Quando analisamos a situação em que $\sigma(X)_m^{(n)} \approx \sigma(X)_{m-1}^{(n)} \approx \sigma(X)_{m+1}^{(n)}$, obtemos as seguintes EDPs acopladas:

$$\frac{\partial A(x, t)}{\partial t} = c_1 \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{A(x, t)}{1 + e^{\alpha(\sigma(x, t; A) - \sigma_{\max})}} \right], \quad (2.21)$$

e

$$\frac{\partial B(x, t)}{\partial t} = c_2 \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{B(x, t)}{1 + e^{\alpha(\sigma(x, t; B) - \sigma_{\max})}} \right], \quad (2.22)$$

onde $c_1 = \lim_{\tau, \epsilon \rightarrow 0} -\frac{\epsilon}{\tau}$, $c_2 = -c_1$, $\sigma(x, t; A(B))$ é a densidade efetiva de partículas entre as posições x e $x + dx$ com qual $A(x, t)(B(x, t))$ interage.

Podemos também obter a equação 2.21 através de um truque simples de adicionar e subtrair o termo $A_m^{(n-1)} / [1 + e^{\alpha(\sigma_m^{(n-1)} - \sigma_{\max})}]$ na relação 2.10, onde devemos lembrar que no caso unidimensional temos que $p_{(m-1) \rightarrow (m)}^{(n-1)} = p_{(m+1) \rightarrow (m)}^{(n-1)} = 1 / [1 + e^{\alpha(\sigma(X)_m^{(n-1)} - \sigma_{\max})}]$, como definimos nas equações 2.12 e 2.15. Com isso, obtemos uma equação de diferenças finitas

$$\begin{aligned} A_m^{(n)} - A_m^{(n-1)} &= -\frac{1}{1 + e^{\alpha(\sigma(A)_m^{(n-1)} - \sigma_{\max})}} \left[A_m^{(n-1)} - A_{m-1}^{(n-1)} \right] \\ &- A_m^{(n-1)} \left[\frac{1}{1 + e^{\alpha(\sigma(A)_{m+1}^{(n-1)} - \sigma_{\max})}} - \frac{1}{1 + e^{\alpha(\sigma(A)_m^{(n-1)} - \sigma_{\max})}} \right], \end{aligned} \quad (2.23)$$

que nos limites em que $\tau, \epsilon \rightarrow 0$, toma a forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial A(x, t)}{\partial t} &= c_1 \left\{ \frac{1}{1 + e^{\alpha(\sigma(x, t; A) - \sigma_{\max})}} \frac{\partial A(x, t)}{\partial x} \right. \\ &+ \left. A(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{1 + e^{\alpha(\sigma(x, t; A) - \sigma_{\max})}} \right] \right\} \end{aligned} \quad (2.24)$$

e se torna a equação 2.21 ao notarmos que se trata de uma derivada do produto.

De maneira análoga, podemos obter a equação 2.22, que rege a dinâmica da espécie B , ao somarmos e subtrairmos o fator $B_m^{(n-1)}/[1 + e^{\alpha(\sigma(B)_m^{(n-1)} - \sigma_{\max})}]$ do lado direito da relação de recorrência 2.11. Assim, nos limites em que $\tau, \epsilon \rightarrow 0$, ficamos com

$$\begin{aligned} \frac{\partial B(x, t)}{\partial t} &= c_2 \left\{ \frac{1}{1 + e^{\alpha(\sigma(x, t; B) - \sigma_{\max})}} \frac{\partial B(x, t)}{\partial x} \right. \\ &\quad \left. + B(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{1 + e^{\alpha(\sigma(x, t; B) - \sigma_{\max})}} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (2.25)$$

que nos leva à Eq. 2.22.

É importante notarmos que no regime $\alpha \rightarrow 0$, o sistema se torna não interagente e as EDPs que regem a dinâmica das espécies se desacoplam. Nesse cenário, esperamos que as soluções devam satisfazer um par equações de deriva [36]: $\frac{\partial A(x, t)}{\partial t} = \frac{c_1}{2} \frac{\partial A(x, t)}{\partial x}$ e $\frac{\partial B(x, t)}{\partial t} = \frac{c_2}{2} \frac{\partial B(x, t)}{\partial x}$, que representam soluções que propagam com velocidade de deriva $c_1/2$ nas direções $+x$ e $-x$ respectivamente. Para $c_1/2 = 1$, é fácil vermos que, com condições periódicas de contorno, as únicas soluções viáveis são $A(x, t) = 1$ e $B(x, t) = 1$ ao tomarmos $A(x, t = 0) = 1$ e $B(x, t = 0) = 1$ como condições iniciais.

No âmbito discreto, este cenário significa que $p_{(i) \rightarrow (j)}^{(n)} = 1/2$ e corresponde a um comportamento balístico dos objetos, pois se considerarmos uma condição inicial $A(x, t = 0) = L\delta_{x,0}$ e $B(x, t = 0) = L\delta_{x,L}$, devemos esperar em uma primeira volta no anel que as soluções sejam dadas por

$$A_{m,n} \approx L \binom{n-1}{m-1} 2^{-n} \quad (2.26)$$

e

$$B_{m,n} \approx L \binom{n-1}{L-m-1} 2^{-n}. \quad (2.27)$$

As soluções refletem que para se obter m sucessos (ou seja, estar na posição $x = m\tau$), é preciso que as partículas executem $n > m$ experimentos, correspondendo a uma distribuição binomial negativa [37]. Vale lembrar que em toda esta tese utilizamos o número de células igual ao tamanho do tubo anelar (ou simplesmente $\epsilon = \tau = 1$).

Após um tempo suficientemente grande do início da evolução do sistema, devemos esperar que as soluções assumam a forma $A_m^{(n)}, B_m^{(n)} \rightarrow 1$? O que acontece quando α aumenta e as interações das partículas começam a representar um fator importante na dinâmica? É razoável esperarmos que $A_m^{(n)}, B_m^{(n)} \rightarrow 1$? Isso significa que as partículas irão fluir sem ocorrências de entupimento no sistema?

Quando analisamos o caso discreto na condição de $\alpha \rightarrow \infty$, vemos que o movimento das partículas se torna determinístico (ver equação 2.18) e as EDPs 2.21 e 2.22 que regem a dinâmica das partículas apresentam, respectivamente, as três possíveis formas seguintes:

$$\frac{\partial A(x, t)}{\partial t} = \begin{cases} c_1 \frac{\partial A(x, t)}{\partial x}, & \text{se } \sigma(x, t; A) < \sigma_{\max}, \\ \frac{c_1}{2} \frac{\partial A(x, t)}{\partial x}, & \text{se } \sigma(x, t; A) = \sigma_{\max}, \\ 0, & \text{se } \sigma(x, t; A) > \sigma_{\max}, \end{cases}$$

e

$$\frac{\partial B(x, t)}{\partial t} = \begin{cases} c_2 \frac{\partial B(x, t)}{\partial x}, & \text{se } \sigma(x, t; B) < \sigma_{\max}, \\ \frac{c_2}{2} \frac{\partial B(x, t)}{\partial x}, & \text{se } \sigma(x, t; B) = \sigma_{\max}, \\ 0, & \text{se } \sigma(x, t; B) > \sigma_{\max}. \end{cases}$$

Neste regime, σ_{\max} é o principal parâmetro a controlar a fluidez na rede junto à densidade média de partículas dada por $\rho \equiv \frac{N}{V}$. Esta relação entre σ_{\max} e ρ pode ser melhor estudada através do parâmetro ocupação definido por

$$o \equiv \frac{N}{\sigma_{\max} V}, \quad (2.28)$$

pois leva em conta o número total de sítios disponíveis da rede.

Assim como α , a ocupação máxima por célula (σ_{\max}) não tem ligação direta com os níveis de energia no modelo de Fermi-Dirac. Aqui, σ_{\max} tem uma interpretação direta com a ocupação do espaço pelas partículas e, portanto, relaciona o tamanho dos objetos em movimento ao tamanho do sistema (V).

Ainda no regime de $\alpha \rightarrow \infty$, caso ρ seja suficientemente pequeno, temos em média que $\sigma \ll \sigma_{\max}$, de modo que as equações acopladas 2.21 e 2.22 tornam-se respectivamente

$$\frac{\partial A}{\partial t} \approx c_1 \frac{\partial A}{\partial x} \quad (2.29)$$

e

$$\frac{\partial B}{\partial t} \approx c_2 \frac{\partial B}{\partial x}, \quad (2.30)$$

onde temos novamente uma equação de deriva, entretanto devido ao fato de $p_{(i) \rightarrow (j)}^{(n)} \approx 1$, as partículas irão sempre se deslocar a cada passo e, portanto, a solução deveria manter a forma de sua condição inicial caso não houvesse duas espécies de partículas em contrafluxo.

Quando ρ é suficientemente grande tal que em média $\sigma \gg \sigma_{\max}$, as probabilidades de movimentos (equação 2.18) se anulam e as EDPs caem no caso trivial $\frac{\partial A}{\partial t} \approx 0$ e $\frac{\partial B}{\partial t} \approx 0$ no qual não é esperada fluidez de partículas mesmo no início da dinâmica.

Nesse caso, o sistema apresenta uma solução constante, tais que $A(x, t) = A(x, 0)$ e $B(x, t) = B(x, 0)$.

Para estudarmos todos esses aspectos da dinâmica unidimensional, iremos explorar o modelo também através de simulações MC. As simulações MC podem ser implementadas em dois métodos: dinâmica síncrona e assíncrona.

No caso síncrono, em cada passo de MC, todas as N partículas do sistema tem sua posição verificada e suas probabilidades de movimento calculadas de acordo com a configuração de distribuição das partículas nas suas células vizinhas naquele passo de MC, assim como fora implementado por Ansgar *et al.* em um modelo de automata celular para dinâmica de pedestres [28]. Em nossas implementações computacionais, utilizamos o conhecido gerador *Ran2* de números pseudo-aleatórios uniformemente definidos no intervalo $[0,1]$ [38]. A nova posição de todas as partículas é atualizada de maneira síncrona para o próximo passo MC.

No caso assíncrono, realizamos N sorteios entre as N partículas do sistema. Cada uma das N partículas sorteadas, na ordem que foi escolhida, tem sua posição e movimento verificados e, então, sua posição atualizada antes de verificar a próxima partícula da lista. Após todas as N partículas sorteadas terem seus movimentos calculados e suas novas posições atualizadas de maneira sequencial, um novo passo de MC é implementado. Cada passo de MC corresponde a um passo de tempo da dinâmica tanto para o algoritmo síncrono quanto para o algoritmo assíncrono. Esse tipo de esquema de atualização é comumente utilizado para simulação de sistemas estocásticos em mecânica estatística como, por exemplo, em modelos de gás de rede [12,39], modelos de spins [40,41] e muitos outros como por exemplo [11,42].

As simulações MC nos permitem analisar situações em que o sistema de partículas pode “entupir” devido ao contrafluxo formando um estado de condensados inertes. Para estudarmos esse estado de entupimento, precisamos definir uma quantidade que chamamos de mobilidade e que denotamos por

$$M(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \xi_i(t), \quad (2.31)$$

onde $\xi_i(t)$ é uma variável binária que assume valor 0 quando a i -ésima partícula permanece parada na mesma célula no instante t e assume valor 1 quando se desloca para a célula vizinha. Basicamente, a mobilidade mede a fração das N partículas da dinâmica que deslocaram-se no passo de tempo e funcionará como um dos principais

parâmetros de ordem em nossas análises. O seu complemento, $1 - M(t)$, mede a fração das partículas que permaneceram imóveis.

Uma outra interessante quantidade que utilizamos neste trabalho é o coeficiente de Gini [43], que foi originalmente criado para calcular a heterogeneidade da distribuição de riqueza na população de países [32, 44]. A eficiência deste parâmetro em medir flutuações em distribuições permite o seu uso em outros contextos como na quantificação de recompensa (“payoff”) em modelos de teoria de jogos [45, 46] por exemplo.

Em nosso contexto de partículas que se deslocam na rede anelar, o coeficiente de Gini, $G(t)$, apresenta um importante papel, pois é capaz de medir a concentração e distribuição dos objetos nas células do sistema, além de ser um parâmetro alternativo para mensurar a transição da fase móvel para a fase de condensados. Para tanto, sendo $A_{j,n}(B_{j,n})$ o número de partículas da espécie $A(B)$ nas células $j = 1, 2, \dots, L$ no instante n , definimos o coeficiente de Gini no instante n como

$$G(n; A(B)) = \frac{1}{(L-1)} \left[L + 1 - 2 \left(\frac{\sum_{j=1}^L (L+1-j) A_j^{(n)}(B_j^{(n)})}{\sum_{j=1}^L A_j^{(n)}(B_j^{(n)})} \right) \right], \quad (2.32)$$

que pode ser medido tanto nas simulações MC como nas soluções das EDPs, diferentemente de $M(t)$ que só pode ser definido para as simulações MC.

Padrões espaciais na concentração das partículas que podem ser mensurados com a ajuda do coeficiente de Gini, por exemplo, se caracterizam por representarem, em sua maioria, estados estáticos do sistema. Entretanto, em sistemas com mais de um grau de liberdade espacial é possível surgir alguns padrões em fase dinâmica que necessitam o auxílio de outros parâmetros para podermos identificá-los.

Na seção seguinte, iremos dar continuidade ao estudo do modelo e apresentaremos algumas outras quantidades capazes de refletir alguns possíveis estados de organização das partículas em duas dimensões.

2.2 Dinâmica bidimensional

Ao voltarmos nossa atenção para o sistema bidimensional, nos deparamos com a possibilidade da dinâmica de duas espécies em contrafluxo resultarem em padrões espaciais peculiares. Podemos agora definir outros parâmetros de ordem que nos ajudarão a mensurar os estados da dinâmica durante a série temporal. O primeiro parâmetro que

iremos definir é o chamado parâmetro de ordem na direção x , que é dado por

$$\Phi_x^{(n)} \equiv \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{L_y} \left| \sum_{j=1}^{L_x} A_{j,k}^{(n)} - B_{j,k}^{(n)} \right| \quad (2.33)$$

e calcula o nível de separação entre as espécies ao longo de bandas na direção x . O parâmetro (equação 2.33) mede possíveis cenários de ordenamento do sistema como é observado em modelos de dinâmica de pedestres [26, 29, 30], ou no caso de coloides de cargas opostas sob a influência de um campo elétrico [17]. Φ_x assume o valor 1 quando ambas espécies estão completamente segregadas em faixas de fluxo contrário e assume o valor 0 quando estão misturadas ao longo de x .

Outro possível cenário de ordenamento importante é o de segregação das espécies na direção y . Portanto, iremos definir o parâmetro de ordem em y , dado por

$$\Phi_y^{(n)} \equiv \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{L_x} \left| \sum_{k=1}^{L_y} A_{j,k}^{(n)} - B_{j,k}^{(n)} \right|, \quad (2.34)$$

que, em sua definição, difere do parâmetro de ordem em x apenas pela ordem dos somatórios.

O parâmetro de ordenamento em y (equação 2.34) é um bom medidor do quanto o sistema está segregado em bandas transversais à direção principal do anel, como foi observado por Vissers et. al. em um trabalho sobre coloides carregados sob a influência de um campo elétrico periódico [24]. Entretanto, o cenário mais comum no qual ocorre este tipo de “organização” se dá em situações de trancamento (“jamming”) da vazão, onde partículas de ambas espécies entopem o sistema e a fluidez na direção x se interrompe. Assim, a mobilidade tende a zero quando ocorre o acúmulo transversal (y) dos objetos e o parâmetro de ordenamento em y tende a um de acordo com o grau de separação das espécies.

No capítulo seguinte, apresentaremos os principais resultados do modelo que é objeto de estudo desta tese. Em cada seção, iremos realizar uma breve explanação das condições utilizadas na obtenção dos resultados e, ao final deste trabalho, apresentaremos a primeira página dos três artigos correlatos que foram publicados nas revistas *Physical Review E* [47, 48] e *Journal of Statistical Mechanics* [49].

Capítulo 3

Resultados: rede unidimensional

Iniciaremos nossa apresentação dos resultados considerando uma rede simples unidimensional com nível de ocupação celular $\sigma_{\max} = 1$. Para tanto iremos analisar a concentração das partículas A e B no caso de simulações MC, integração numérica das RECs 2.10 e 2.11 e as soluções das EDPs 2.21 e 2.22. Na Figura 3.1 podemos ver um resumo de nossos resultados utilizando uma condição inicial de partículas distribuídas aleatoriamente nas $L_x = 128$ células do sistema. No gráfico (a) da Figura 3.1 podemos ver que para $\alpha = 0.3$ o sistema apresenta um estado de fluidez das partículas, pois ao realizarmos uma média sobre uma número grande de amostras ($N_{run} = 100$) temos $A(x) \approx B(x) \approx 1$ em $t = 10^3$ passos de MC. No caso de uma única amostra ($N_{run} = 1$) as flutuações se sobrepõem aos resultados esperados.

Como vimos no capítulo anterior, as EDPs (PDEs nos gráficos) são obtidas a partir das RECs após tomarmos o limite $\tau, \epsilon \rightarrow 0$, portanto, não devem apresentar exatamente os mesmos resultados, apesar de esperarmos qualitativamente o mesmo comportamento. A comparação entre as soluções das RECs ou EDPs (PDEs) se dá por óbvio, mantendo o mesmo α . Em ambos os casos, é preciso que a condição inicial uniforme possua algum tipo de assimetria, pois estes métodos não possuem flutuações que possam gerar um desequilíbrio na ocupação celular necessário para que o sistema possa evoluir. Por isso, utilizamos condições iniciais tais que as células fossem ocupadas por uma partícula A e uma partícula B exceto na posição $m = L/2$, ou seja, $A_{m,0} = 1, B_{m,0} = 1$ para todo $m \neq L/2$ no anel e $A_{L/2,0} = B_{L/2,0} = 0$. Assim, no gráfico (b) da Figura 3.1 podemos ver o comportamento aproximado de $A(x) \approx B(x) \approx 1$ para um tempo intermediário de $t = 10^3$. Ainda no gráfico (b), podemos também perceber que para um tempo

mais longo ($t = 10^5$), ambas as soluções das EDPs e RECs apresentam uma exata concordância mostrada pela curva cinza.

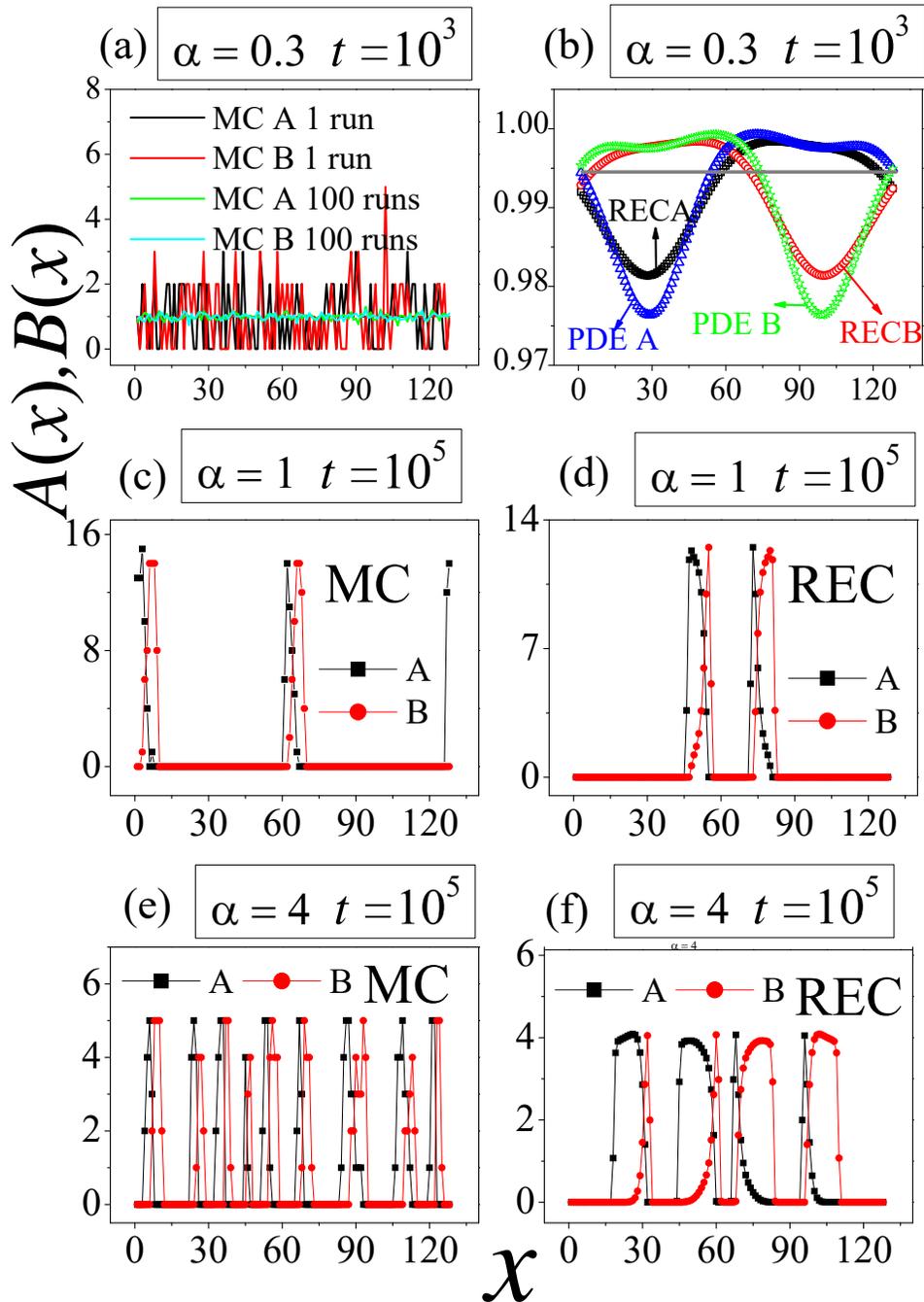


Figura 3.1: Resultados da dinâmica explorada para diferentes valores de α , diferentes métodos e diferentes tempos.

A partir deste ponto, iremos explorar apenas as RECs, pois ambos os métodos apresentam pequenas diferenças (vide a escala dos gráficos da Fig. 3.1 para uma adequada comparação) e acreditamos que as RECs serão bons representantes das soluções das EDPs do modelo. Uma análise mais completa das EDPs deste modelo de contrafluxo será realizada futuramente.

No gráfico (c) da Figura 3.1, podemos ver pelos resultados das simulações MC para $\alpha = 1$ que o sistema apresenta a formação de condensados de partículas na faixa de $14 \leq A(x) \approx B(x) \leq 16$ para um tempo consideravelmente grande $t = 10^5$. Nessa situação, grandes condensados das espécies em contrafluxo se formam devido ao fato de $\alpha = 1$ já impor uma significativa correlação entre as partículas, mas a ainda presente aleatoriedade faz com que a vazão de partículas apenas cesse quando $A(x) + B(x) \gg \sigma_{\max}$. No gráfico (d), podemos ver a mesma situação ocorrer ao caso das RECs, que mostram a formação de condensados praticamente do mesmo tamanho que a solução MC para o mesmo tempo decorrido. É interessante ver que, quando $\alpha = 4$ (ver gráficos (e) e (f) da Fig. 3.1), ambos os sistemas apresentam um número maior de condensados, mas de tamanhos menores. Nesse cenário, a alta correlação das partículas força o entupimento local e global (“jamming”) do sistema em qualquer situação que se tenha $A(x) + B(x) > \sigma_{\max}$. Devido a estes fatos, iremos explorar a existência de um valor de $0 < \alpha_c < \infty$ tal que o sistema passe de um estado móvel para um estado de entupimento.

Por isso, iremos estudar transições dependentes da estocasticidade (α) do sistema. Outros autores exploram transições dependentes de outros parâmetros como a velocidade média do sistema [50] ou a probabilidade de entupimento (“clogging”) em função da densidade de pedestres [26, 29].

Consideraremos agora a vizinhança da transição, onde estudaremos a densidade da espécie A para cinco valores diferentes α em um tempo longo de $t = 10^5$ com a mesma condição inicial do caso anterior, onde $A_{m,0} = 1$ e $B_{m,0} = 1$ para todos os sítios exceto por $m = L/2$. Primeiramente, vemos pela Figura 3.2 o já conhecido estado móvel do sistema quando $\alpha = 0.4$. Para valores de $\alpha = 0.5, 0.6$ e 0.7 , a densidade de partículas é praticamente a mesma $A(x) \approx 1$, mas o sistema aparenta estar em um estado meta-estável apresentando pequenas diferenças numéricas que deformam a solução em estranhas formas até que o sistema atinge o estado de completa imobilidade para $\alpha = 0.8$. Neste regime, há a formação dos condensados de partículas (apenas a espécie A é mostrada) resultante do entupimento do canal.

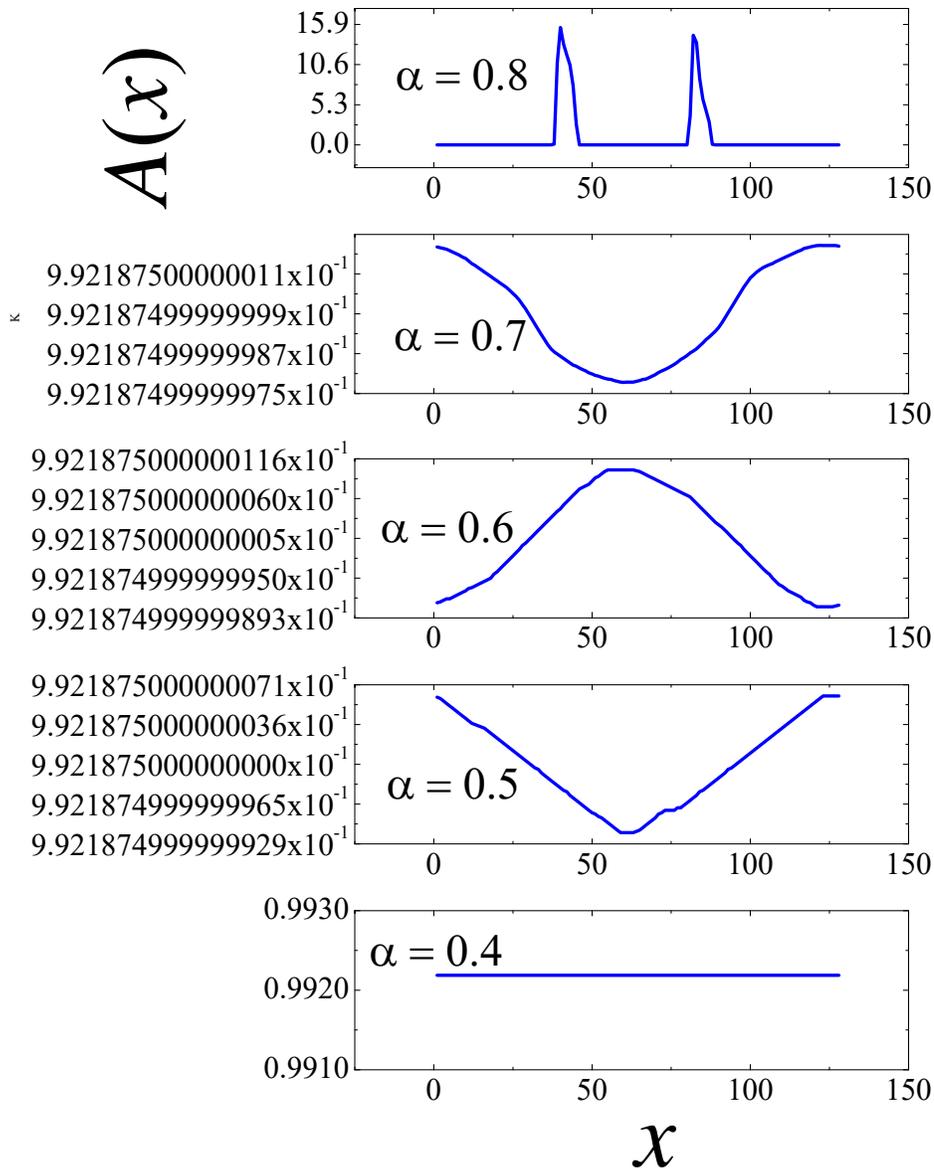


Figura 3.2: Solução de REC mostrando a densidade de partículas A para $t = 10^5$ iterações (estado estacionário). O sistema é claramente móvel para $\alpha = 0.4$ e entupido para $\alpha = 0.8$ (formação de condensados). Podemos observar um “estranho” comportamento na vizinhança da transição ($0.5 \leq \alpha \leq 0.7$).

Para entendermos melhor esta transição, na seção seguinte iremos explorar o comportamento da distribuição de partículas para alguns valores de α em diferentes instan-

tes de tempo da evolução do sistema. Iremos partir de três diferentes condições iniciais: pulso de deltas de Dirac (PDD), distribuição uniforme (DU) e ocupação constante (OC).

3.1 Estudo das condições iniciais

Nosso modelo de contrafluxo de partículas, cuja dinâmica se baseia na distribuição do tipo Fermi-Dirac, apresenta uma transição na estocasticidade (α). Iremos estudar como esta transição pode afetar a distribuição de partículas na rede unidimensional considerando as seguintes condições iniciais:

1. **Pulsos de Deltas de Dirac (PDD):** Todas as partículas A partem inicialmente da célula i , enquanto todas partículas B partem da célula $i + L - 1$.
2. **Distribuição Uniforme (DU):** Todas as partículas A e B são uniformemente distribuídas ao longo das L células do sistema com o auxílio do *Ran2*.
3. **Ocupação Constante (OC):** Cada célula tem duas partículas: uma partícula A e uma partícula B .

Iremos começar o estudo a partir da condição inicial que considera o confronto de duas frentes de partículas de alta concentração com o intuito de simular duas funções Delta de Dirac (PDD). Para a EDP, integramos o sistema anelar de tamanho $L_x = 128$ com as seguintes condições iniciais:

$$A(x, t = 0) = \begin{cases} L, & \text{se } x = 0, \\ 0, & \text{se } x \neq 0. \end{cases} \quad (3.1)$$

$$B(x, t = 0) = \begin{cases} L, & \text{se } x = L, \\ 0, & \text{se } x \neq L. \end{cases} \quad (3.2)$$

Analisamos a distribuição de partículas para quatro instantes diferentes $t = 0$, $t = 10^3$, $t = 10^4$ e $t = 10^5$. Nas Figuras 3.3, 3.4 e 3.5 apresentamos as distribuições das espécies para $\alpha = 0.4$, 3.0 e 20.0. Podemos observar pela Figura 3.3 que o sistema flui livremente de tal forma que a alta estocasticidade faz com que a distribuição perca sua forma inicial de PDD e passe para uma forma de partículas homogeneamente distribuídas ao longo do anel.

Na Figura 3.4, no entanto, a interação das partículas começa ter um papel importante. Podemos observar a formação de condensados de espécies se confrontando. Os

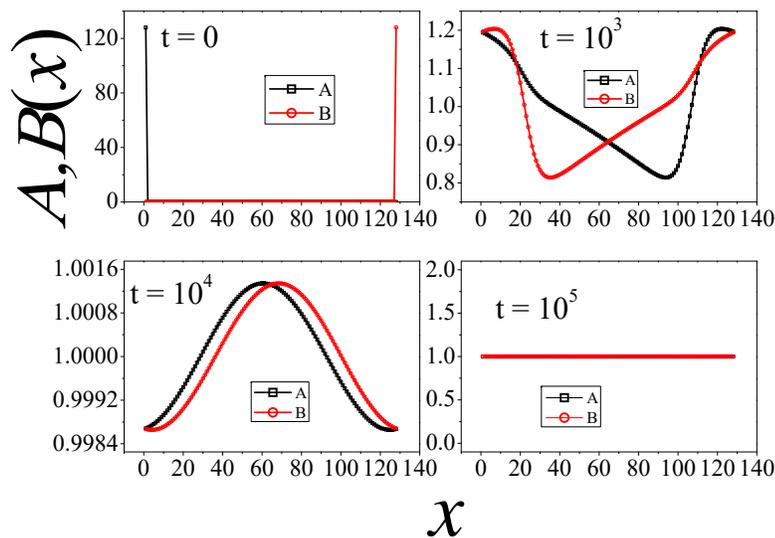


Figura 3.3: Evolução temporal do número de partículas por célula. Iniciando da condição I (PDD) para $\alpha = 0.4$, podemos observar um estado estacionário ($t = 10^5$) onde as partículas fluem sem nenhum efeito de entupimento, ou seja, $A(x, t) = B(x, t) = 1$.

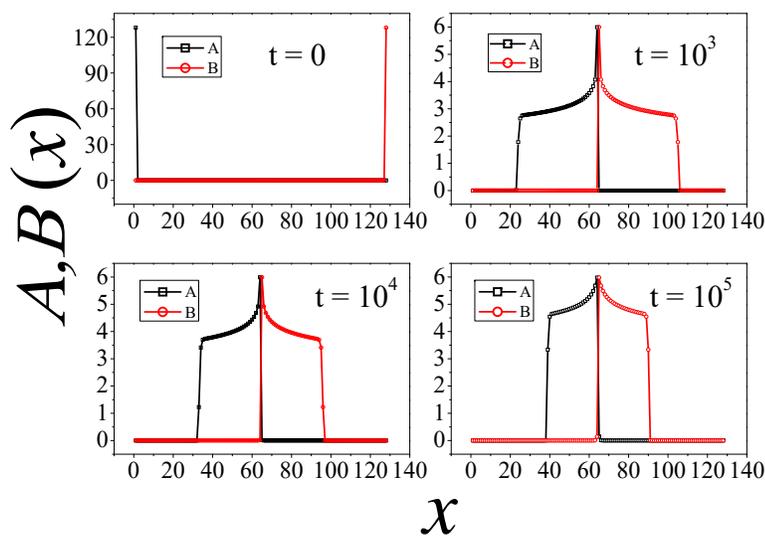


Figura 3.4: Evolução temporal do número de partículas por célula agora para um valor menor de estocasticidade, $\alpha = 3.0$ como condições iniciais do tipo PDD. Podemos observar a formação de condensados (picos de densidade) ao longo do meio.

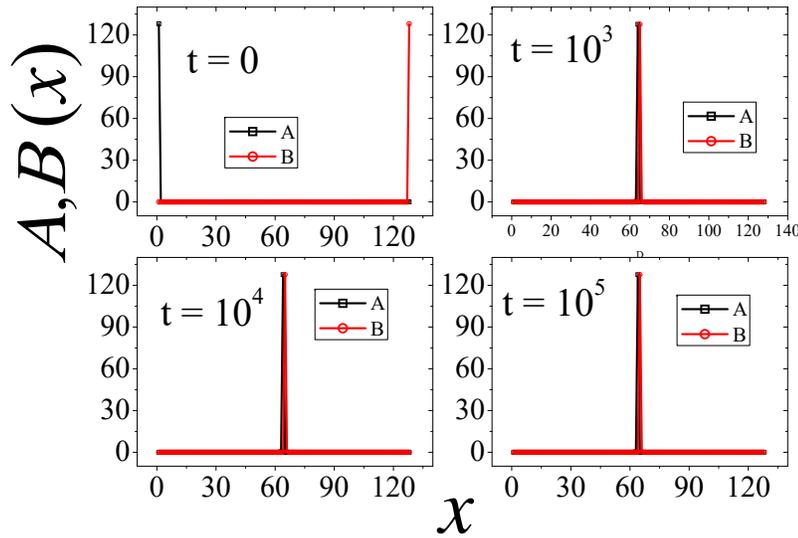


Figura 3.5: Evolução temporal do número de partículas para $\alpha = 20.0$. A forte interação de primeiros vizinhos provoca um estado de completo entupimento $A(x, t = 10^5) = B(x, t = 10^5) \approx 128$ em um pico central.

condensados formados apresentam um pico central que delimita uma principal barreira ao fluxo de partículas e apresentam uma cauda que perde largura e ganha altura a medida que as partículas se concentram. De maneira semelhante, podemos ver pela Figura 3.5 que o alto determinismo do movimento das partículas quando $\alpha = 20.0$, indica um regime no qual a forma inicial de PDD se mantém ao longo de metade do trajeto ($x \approx L/2$) quando as espécies em confronto se encontram e o sistema tranca com dois grandes picos de densidade como estado estacionário.

Quando estudamos a condição inicial de duas espécies uniformemente distribuídas (DU) ao longo do anel, vemos que o estado estacionário do sistema pode apresentar um comportamento peculiar. Analisamos a evolução temporal do número de partículas para os valores de $\alpha = 0.45$, $\alpha = 0.55$ e $\alpha = 10$. Podemos observar pela Figura 3.6 que para $\alpha = 0.45$, o sistema apresenta uma evolução para um estado de completa mobilidade sem a formação de condensados, assim como no caso anterior de PDD como condição inicial e $\alpha = 0.4$.

No entanto, quando $\alpha = 0.55$, já há a caracterização da fase de condensados como consequência da alta concentração de partículas como mostram os picos na Figura 3.7. O sistema apresenta uma fase imóvel com formação de muitos condensados de pequena

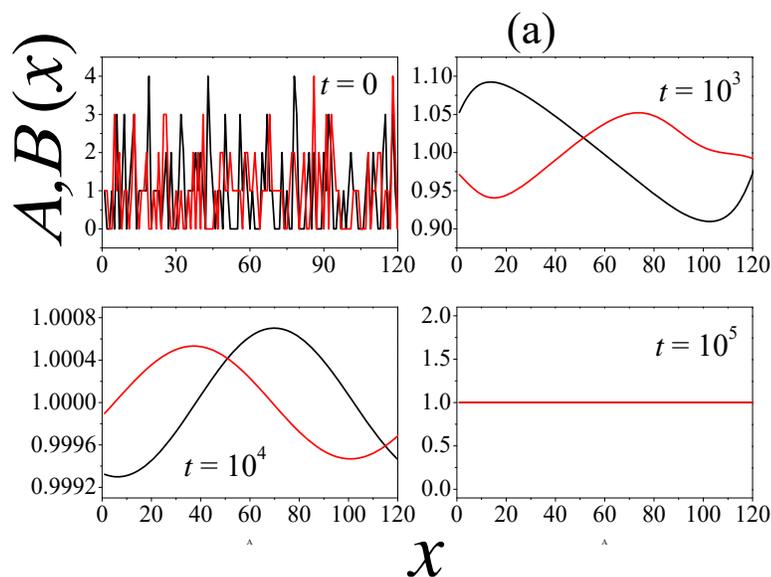


Figura 3.6: Evolução temporal de partículas por célula iniciando da condição II (DU) para $\alpha = 0.45$. Podemos observar a evolução do sistema fracamente interagente, onde as partículas fluem sem nenhum efeito de entupimento, ou seja, $A(x, t) \approx B(x, t) \approx 1$. O sistema eventualmente atinge seu estado estacionário onde $A(x, t) = B(x, t) = 1$.

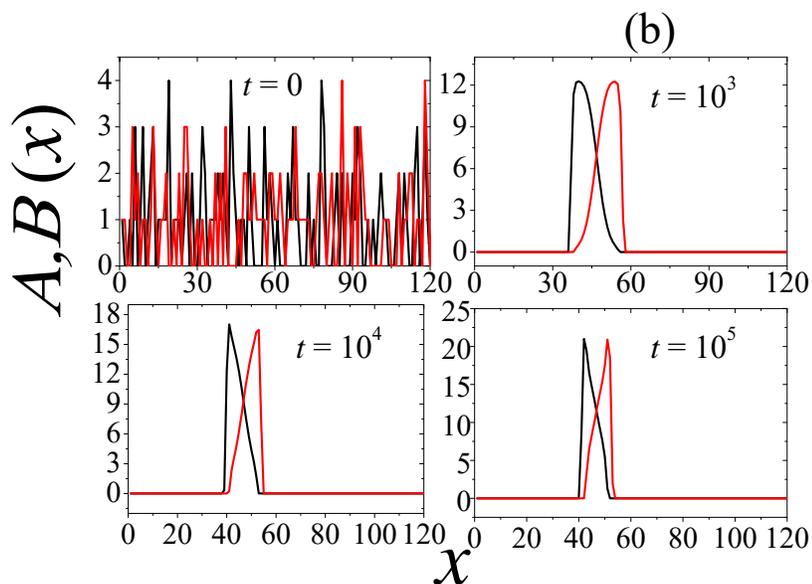


Figura 3.7: Evolução temporal do número de partículas para $\alpha = 0.55$ com condição inicial de DU. Podemos observar que a interação presente em um sistema com suficiente aleatoriedade causa a formação de dois condensados de alta densidade de partículas.

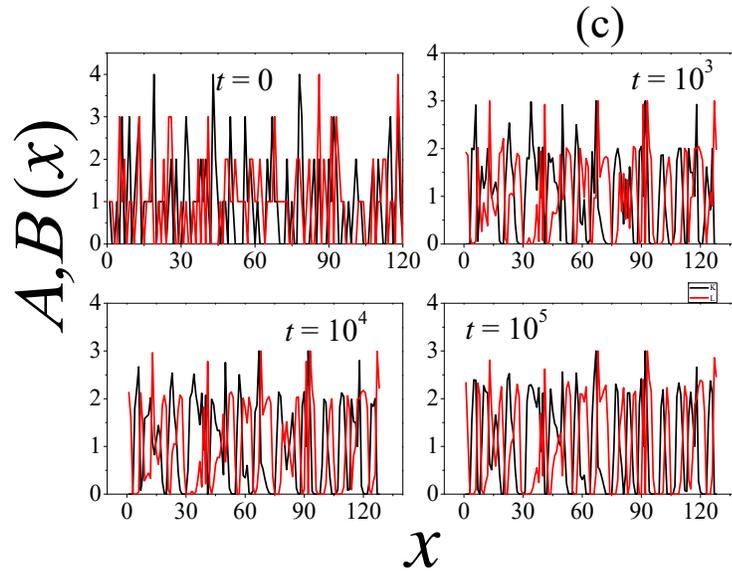


Figura 3.8: Evolução temporal do número de partículas para $\alpha = 10$ com condição inicial de DU. A forte interação provoca um estado de completo entupimento já nos primeiros passos da simulação devido as muitas condições de $\sigma(x, t) > \sigma_{\max}$ presentes ao longo do anel.

magnitude no estado estacionário quando $\alpha = 10$. Esse fenômeno corrobora com a interpretação de que as pequenas diferenças de densidade presentes no início da evolução em um regime altamente determinístico já são suficientes para o rápido entupimento do sistema, diferentemente de quando $\alpha = 0.55$ no qual o sistema apresenta uma demorada formação de um único pico de alta concentração dos objetos.

Com o intuito de facilitar o melhor entendimento de nosso modelo e métodos, apresentaremos nosso estudo da condição inicial de OC na última seção deste capítulo denominada “Coeficiente de Gini”. Na referente seção, apresentaremos os resultados da utilização de OC como condição inicial e suas comparação com as outras condições iniciais PDD e DU.

Iremos agora estudar toda a evolução temporal da mobilidade (dada pela equação 2.31) através da dinâmica síncrona das simulações MC para um sistema de tamanho $L_x = 256$ e $\rho = 1.0$ ($N = 256$) no caso mais simples dado por $\sigma_{\max} = 1$. Usamos condições iniciais do tipo DU e um número de amostras $N_{run} = 10^6/N = 3907$ foram realizadas. Neste trabalho, usamos $N \cdot N_{run} = 10^6$ a menos de quando explicitamente definimos diferente. Na Figura 3.9, vemos o comportamento das séries temporais para

diferentes valores de α . O comportamento esperado para os casos de alta estocasticidade ($\alpha \leq 0.4$) se manifesta na mobilidade ($M_\infty \approx 1/2$), de maneira a refletir o fato de, em média, a metade das partículas se deslocar e metade permanecer imóvel. Entretanto, em algum ponto do intervalo de $0.4 < \alpha < 0.6$ ocorre a transição e o sistema apresenta sua evolução partindo de um estado móvel transiente para o estado estacionário de entupimento. Percebemos também que a evolução para o estado imóvel ocorre para tempos cada vez menores a medida que α aumenta como era de se esperar.

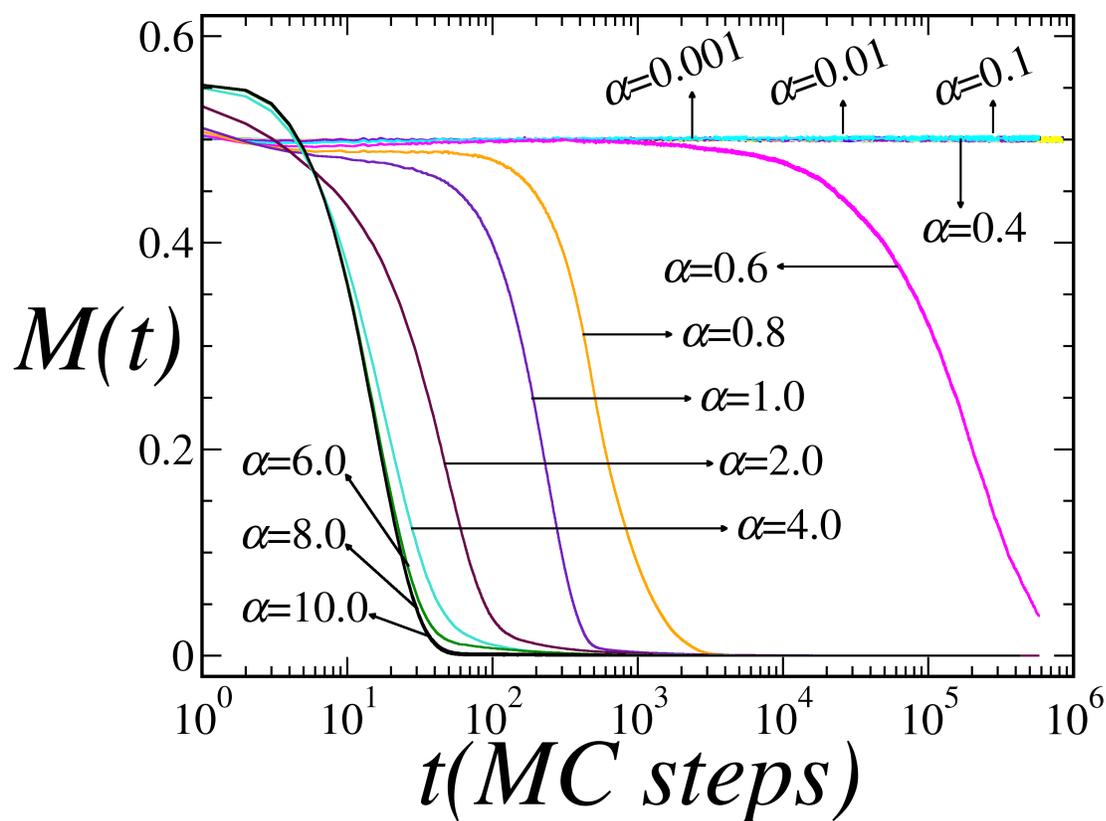


Figura 3.9: Evolução temporal da mobilidade para um sistema de tamanho $L_x = 256$. Podemos observar a transição de um estado de mobilidade parcial quando $\alpha \leq 0.4$ para um estado de imobilidade total para $\alpha \geq 0.6$.

Completando a apresentação sobre as séries temporais, vemos nas Figuras 3.10 e 3.11 que sistemas de tamanhos diferentes são consideravelmente diferentes no estado transiente da evolução da mobilidade. Obtivemos todos estes resultados utilizando $\rho = 1$. Assim, se tivermos $L_x = 64$, por exemplo, o sistema tem $N = 64$ partículas

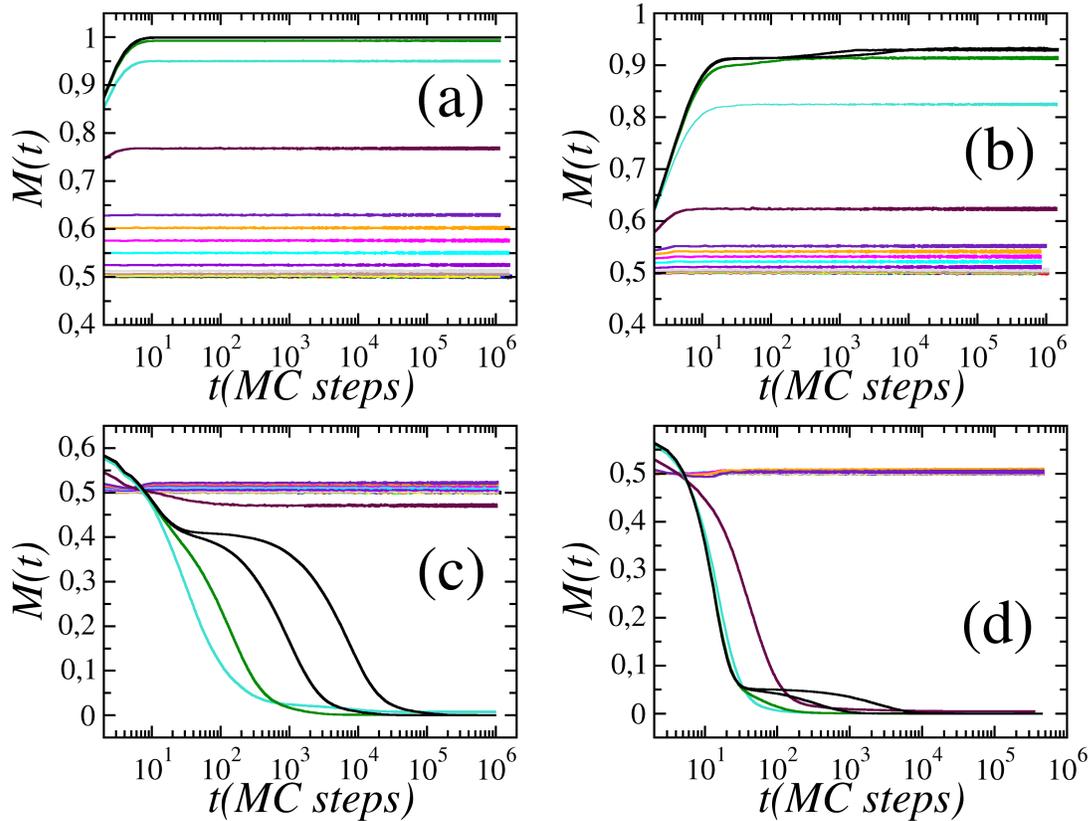


Figura 3.10: Evolução temporal da mobilidade para (a) $L_x = 2$, (b) $L_x = 4$, (c) $L_x = 8$ e (d) $L_x = 16$.

no total. Na Figura 3.10, vemos os efeitos de escala para tamanhos relativamente pequenos. Os gráficos (a) e (b) da Figura 3.10 nos mostram que os sistemas pequenos de tamanho $L_x = 2$ e $L_x = 4$, respectivamente, apresentam um comportamento de certa forma anômalo, pois a mobilidade tende ao seu valor máximo de 1 quando o sistema está em um regime de forte interação ($\alpha \geq 4.0$) das partículas em contrafluxo. Esse fenômeno no qual todos os objetos se deslocam conjuntamente é originado por um “problema” configuracional causado pela forma da probabilidade de movimento no regime de $\alpha \rightarrow \infty$ (equação 2.18) ao utilizarmos o algoritmo síncrono.

Para explicar de maneira mais clara esse fenômeno, imaginemos um sistema de tamanho $L_x = 2$ com uma partícula A e uma partícula B , sendo a capacidade da célula $\sigma_{\max} = 1$ e α grande. Com a condição inicial aleatória, as duas partículas ou partirão da mesma célula ou estarão em células vizinhas. Se estiverem na mesma célula,

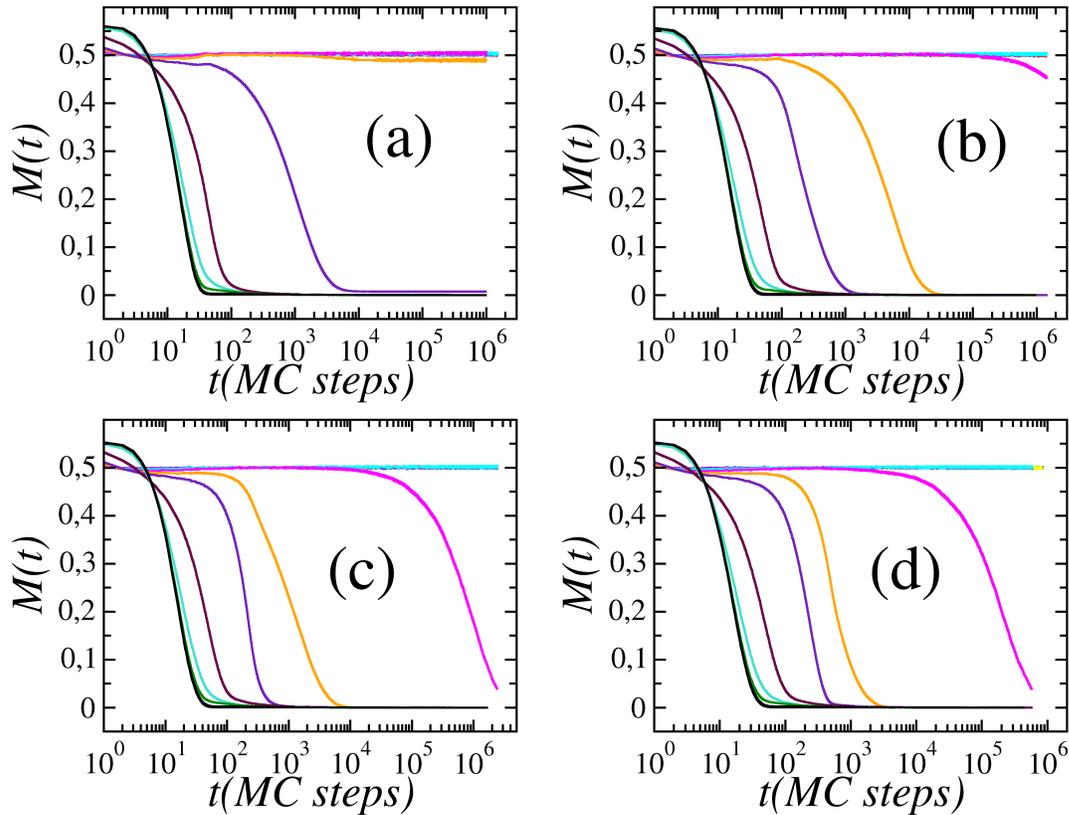


Figura 3.11: Evolução temporal da mobilidade para (a) $L_x = 32$, (b) $L_x = 64$, (c) $L_x = 128$ e (d) $L_x = 256$.

ambas irão “ver” a outra célula do sistema vazia (ressaltando as condições periódicas de contorno) e, portanto, ambas irão deslocar-se para a mesma célula, mas vinda de lados opostos pois trata-se de contrafluxo. Este estado já é estacionário. No outro caso, as partículas iniciam de células vizinhas e a probabilidade de movimento é $1/2$, pois $\sigma = \sigma_{\max}$ e, assim, irão deslocar-se ou não até que a configuração de estarem no mesmo sítio eventualmente ocorra e não mais se modifique. Assim, o sistema atinge o mesmo estado estacionário do caso anterior, onde a mobilidade do sistema tem valor máximo. Este mesmo raciocínio vale para $L_x = 4$, entretanto devido a um número maior de possibilidades de ocupação, a mobilidade não chega a atingir seu valor máximo. Este efeito é atenuado ao utilizarmos o algoritmo assíncrono para sistemas de tamanhos pequenos e desaparece completamente para sistemas grandes mais rapidamente que o algoritmo síncrono como veremos posteriormente neste trabalho.

A medida que o sistema aumenta, os efeitos de fronteira para α alto aparentam diminuir, como podemos ver pelos gráficos (c) e (d) da Figura 3.10, que mostram que para $L_x = 8$ e $L_x = 16$, a mobilidade tende a cair a zero apesar de para tempos diferentes. Na Figura 3.11, vemos pelos gráficos (a), (b), (c) e (d) que quanto maior for o sistema, menor é o α que faz com que o sistema torna-se imóvel em seu estado estacionário. Podemos ver, por exemplo, que para um sistema de tamanho $L_x = 32$ (Figura 3.11 (a)), o sistema ainda flui no regime de partículas não interagentes quando $\alpha = 0.6$ (curva “rosa”). No entanto, a partir de $L_x = 64$ (gráfico (b) da Figura 3.11) podemos ver que o sistema já evolui para o estado imóvel quando $\alpha = 0.6$.

A partir da seguinte seção, iremos focar nosso estudo apenas no estado estacionário do sistema para descobrirmos detalhadamente a transição e sua dependência com α .

3.2 Estado estacionário

Nos resultados da evolução temporal apresentados até esta etapa do trabalho, vimos que a mobilidade do sistema atinge diferentes valores estacionários bem definidos e que dependem de α (Figuras 3.10 e 3.11). Dependendo também do tamanho do sistema, a mobilidade pode tanto apresentar um crescimento quanto um decréscimo para então atingir seu valor médio estacionário. Neste transiente da evolução do sistema para o estado estacionário, o tempo de simulação de cada amostra pode apresentar grandes variações que dependem dos parâmetros do sistema. Se propuséssemos que o tempo de simulação fosse igual (independente dos parâmetros α, L_x, \dots) e grande o suficiente, de maneira a garantir que a mais demorada das simulações atingisse seu estado estacionário, estaríamos desperdiçando um valioso tempo computacional para as simulações que chegam a tal estado mais rapidamente.

Desta maneira, desenvolvemos um algoritmo de truncamento das séries temporais das simulações MC que calcula em cada simulação se o estado final do sistema já tenha sido atingido (com uma margem de erro) e evitando, assim, possíveis perdas de tempo de simulação. Nosso algoritmo estabelece um critério de avaliação do estado estacionário a partir da inclinação da curva de regressão linear da mobilidade, $M(t)$, dentro de um intervalo de tempo de tamanho fixo Δt . Definimos assim:

- A partir do início da evolução temporal, guardamos os valores de mobilidade $M(t)$ dentro de um intervalo fixo de tempo Δt ;

- A cada intervalo Δt_i , onde $i = 0, 1, 2, \dots$ é o índice do intervalo ($i = 0$ corresponde aos primeiros Δt passos de MC), realizamos uma regressão linear com os valores de mobilidade $M(t)$ pertencentes ao seu intervalo, tal que resulte uma equação linear na forma geral $y = a_i x + b_i$, onde y corresponde aos valores de mobilidade sobre a curva de regressão linear no intervalo i e x corresponde ao tempo;
- No final de cada intervalo Δt_i , verificamos se a inclinação da reta resultante da regressão linear é, em módulo, menor que um valor de erro η pré-definido, ou seja, se $|a_i| \leq \eta$. Se $|a_i| \leq \eta$, a série temporal é truncada e o valor médio da mobilidade (\bar{M}) no intervalo Δt_i é guardado. Do contrário, a série continua com o mesmo critério sendo aplicado até que a condição seja satisfeita.

Com este algoritmo pudemos confirmar a ergodicidade do sistema ao verificarmos que a média dos valores estacionários da mobilidade (equação 2.31) equivale ao valor estacionário da média amostral de mobilidade. No primeiro caso, aplicamos o algoritmo individualmente em amostras sequenciais que atingiram o estado estacionário para então realizarmos a média, enquanto no segundo caso aplicamos o algoritmo à média de amostras concorrentes. O objetivo para criar tal algoritmo está na tentativa de otimizar o tempo de simulação e automatizar o processo.

Com o intuito de obtermos resultados qualitativos e fidedignos ao modelo, estudamos as influências dos parâmetros de truncamento da série: o erro η e a janela temporal Δt . Na Figura 3.12 mostramos a mobilidade estacionária em função de α para um sistema $L_x = 256$, $\rho = 1$ e $\sigma_{\max} = 1$. Podemos verificar pelo gráfico (a) da Figura 3.12 que mantendo $\Delta t = 1000$ passos de MC fixos, o sistema apresenta uma mudança gradual na transição para a fase imóvel, partindo de uma transição suave quando $\eta = 10^{-3}$ para uma transição abrupta quando $\eta \leq 10^{-6}$. Essa mudança no tipo da transição não significa que o sistema alterou seu comportamento, mas apenas que o algoritmo passou a identificar com melhor precisão o comportamento do sistema que indica ser de uma transição de primeira ordem na mobilidade estacionária. O resultado do gráfico (a) da Figura 3.12 indica que para $\eta \leq 10^{-6}$ as curvas de mobilidade apresentam o mesmo comportamento e se assemelham quantitativamente no valor de α da transição.

No gráfico (b) da Figura 3.12, podemos ver que as curvas de mobilidade estacionária colapsam umas nas outras à medida que Δt aumenta ao mantermos a inclinação da curva de regressão linear vinculada a $\eta = 10^{-7}$ fixo. É fácil percebermos que o aumento

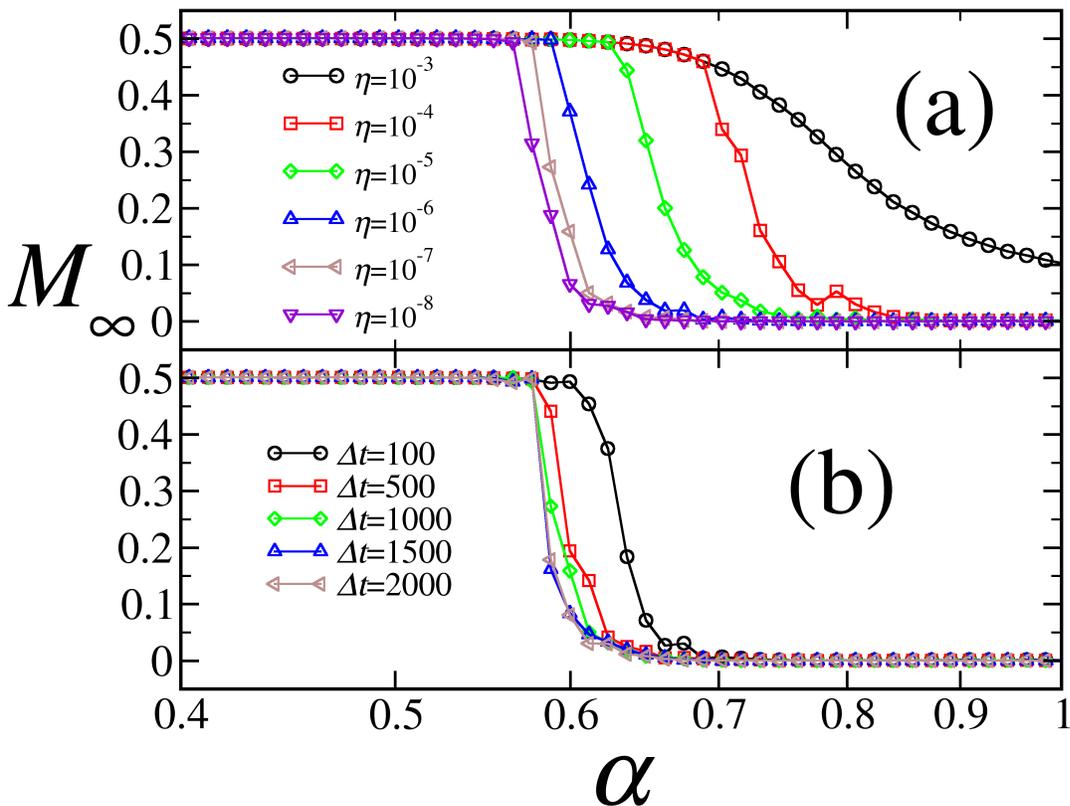


Figura 3.12: Mobilidade estacionário em função de α : (a) mostra que o estado estacionário é sensível às mudanças em η e (b) nos mostra que há uma boa concordância na transição a partir de $\Delta t \geq 1000$.

de dados de $M(t)$ corresponde a uma maior e, conseqüentemente, melhor amostragem para o cálculo da curva de regressão linear e posterior verificação do critério de truncamento da evolução.

Todos os resultados estacionários apresentados a partir desta etapa do trabalho foram obtidos com a utilização de $\eta = 10^{-7}$ e $\Delta t = 1000$ passos de MC como parâmetros do critério de truncamento das séries temporais, a menos que digamos diferentemente.

Voltemos à análise de tamanho do sistema vista no início deste capítulo. Nos resultados apresentados nas Figuras 3.10 e 3.11, vimos que há uma transição da mobilidade do sistema em um intervalo de $0.4 < \alpha < 0.6$, passando de um sistema de partículas móveis do tipo caminhantes aleatórios direcionados para um sistema de partículas interagentes em contrafluxo que em um tempo grande o suficiente acabam se tornando

imóveis. Desta forma, estudamos a influência da estocasticidade na mobilidade das partículas e como os efeitos de fronteira se manifestam quando a dinâmica de interação é síncrona.

Na continuação deste estudo, ao mantermos $\rho = 1$ e $\sigma_{\max} = 1$ fixos, podemos ver no gráfico (a) da Figura 3.13 que a dinâmica síncrona apresenta as (já discutidas na seção anterior) anomalias devido aos efeitos de fronteira para sistema pequenos de tamanhos $L_x = 2, 4$ e 8 . Como explicado anteriormente no início deste capítulo, na dinâmica síncrona quando α é grande o suficiente tal que a probabilidade de movimento dada pela equação 2.18 esteja em vigor, alguns efeitos oriundos do baixo número de configurações de ocupação de partículas manifestam-se em maior proporção quando tratamos de sistemas pequenos. Interessante percebemos que para $L_x = 8$, o aumento da correlação entre as partículas é suficiente para que o contrafluxo ocasione a imobilidade estacionária ($M_\infty = 0$) do sistema no intervalo $2 < \alpha < 10$. A partir de $\alpha \approx 10$, no entanto, a alta correlação das partículas demonstra que os efeitos de fronteira ainda são sensíveis à dinâmica. Para a dinâmica assíncrona, no entanto, os efeitos de fronteira não são fortes em comparação ao caso síncrono mostrados no gráfico (b) da Figura 3.13. Para $L_x = 2$, a dinâmica assíncrona ainda apresenta a anomalia causada pelo baixo número de configurações possíveis do sistema que ocorre no caso síncrono. Entretanto, essa anomalia é atenuada devido ao método assíncrono que sorteia as partículas dentro do passo da simulação. Quando isso ocorre, a situação estacionário não é imutável como na dinâmica síncrona.

As diferenças entre o caso síncrono e assíncrono no que diz respeito aos efeitos de borda desaparecem qualitativamente a partir de $L_x = 16$, mostrando em ambos os casos a transição do tipo mobilidade-entupimento. Também podemos perceber que as curvas colapsam umas às outras com o aumento do sistema de tal maneira que a partir de $L_x = 64$ não haja mais efeitos de fronteira residuais para ambos os métodos.

Na próxima seção, iremos estudar os efeitos da densidade de ocupação média ρ . Iremos mostrar que o nível de estocasticidade crítico, α_c , no qual acontece a transição depende de ρ de acordo com uma lei de potência.

3.3 Densidade média de ocupação

A dinâmica de partículas baseada na distribuição de Fermi-Dirac apresenta uma

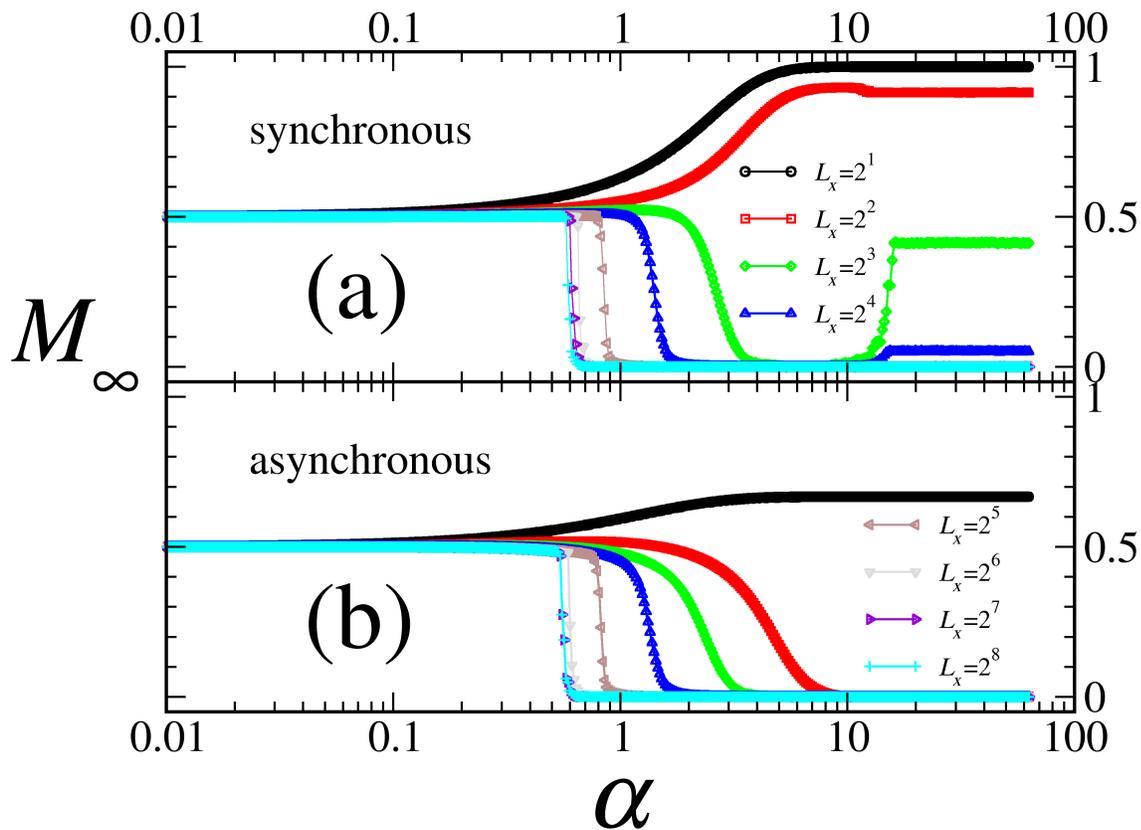


Figura 3.13: (a) Algoritmo síncrono apresenta comportamento estacionário anômalo para sistemas pequenos, mas para $L \geq 64$ a transição não sofre mais influência das condições de contorno. (b) Algoritmo assíncrono apresenta comportamento “esperado” para sistemas pequenos, mas também deixa de ser influenciado por questões de fronteira para $L \geq 64$.

transição na mobilidade do sistema quando a estocasticidade do sistema é alterada. Na seção anterior, vimos que essa transição é abrupta e ocorre para um $\alpha \approx \alpha_c$ para sistemas maiores que $L_x = 64$, que é quando os efeitos de borda desaparecem para o método de dinâmica síncrona e assíncrona. Agora iremos analisar apenas a dinâmica síncrona.

Iremos estudar agora a influência que a densidade média de partículas, ρ , tem sobre essa mobilidade e se a transição continua a ocorrer. Como nosso enfoque será na variação de ρ , iremos manter o tamanho do sistema fixo em $L_x = 256$ células e o nível máximo de ocupação em $\sigma_{\max} = 1$. O número de partículas varia de acordo com $N = \rho V$, onde

$N_A = N_B = N/2$ se mantém.

Na Figura 3.14, podemos ver as curvas para diferentes valores de densidade média. Iniciando de $\rho = 0.062$ e variando de curva para curva de $\Delta\rho = 0.062$, percebemos que os casos de mais baixa densidade, ou seja, $\rho \leq 0.186$ apresentam mobilidade final do sistema crescente à medida que a correlação das partículas aumenta. É possível interpretarmos que a diminuição da estocasticidade (aumento de α) torna o ambiente de ocupação rarefeito propício para a alta mobilidade onde a transição para uma célula vazia é fortemente provável (ver equação 2.18). A partir de $\rho = 0.248$ (curva de cor grená ou quarta curva de cima pra baixo) a transição de um sistema de partículas móveis para imóveis começa a ocorrer de modo que podemos ver a dependência de α_c

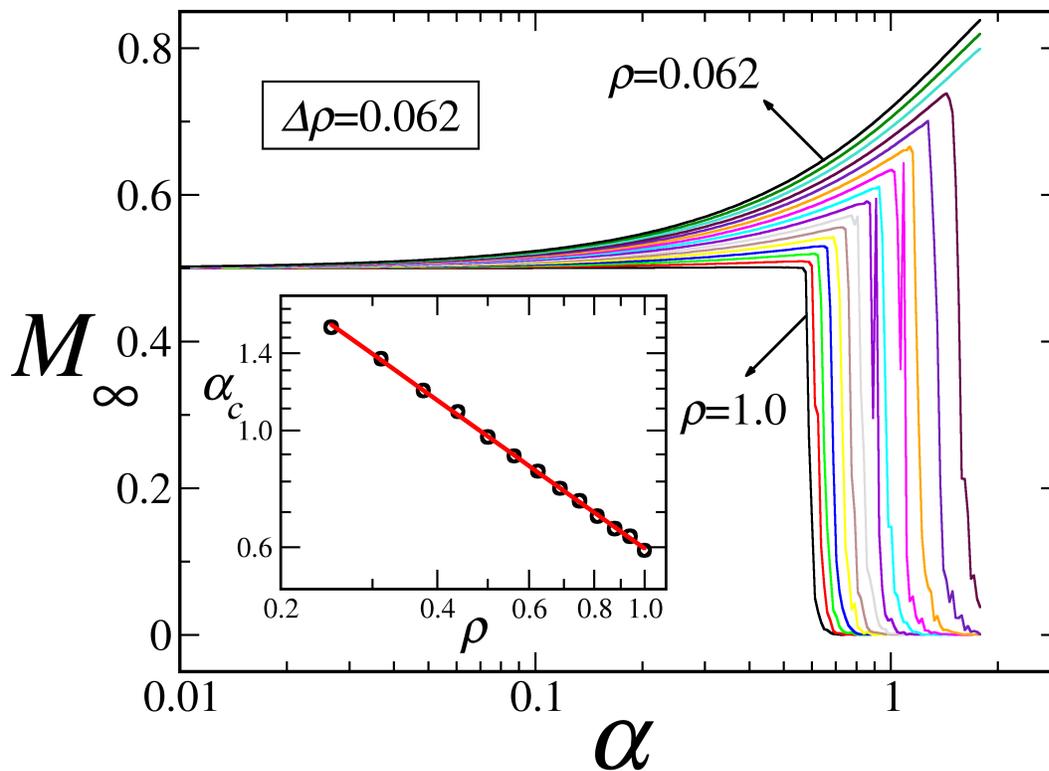


Figura 3.14: Mobilidade estacionária em função de α para diferentes densidades. Podemos observar uma transição abrupta dependente da densidade partindo de um estado móvel para um estado entupido quando $\alpha = \alpha_c$. O gráfico menor inserido (escala log-log) nos mostra a dependência de α_c como um função da densidade ρ .

com a densidade. O minigráfico da Figura 3.14 nos mostra que o nível estocasticidade crítica, α_c , onde ocorre a transição de estado móvel-imóvel é função da densidade na forma de uma lei de potência.

Na próxima seção iremos estudar os efeitos que diferentes níveis de ocupação máximo σ_{\max} têm no sistema em dois casos: mantendo a densidade média (ρ) fixa e mantendo a ocupação média (o , dada pela equação 2.28) fixa.

3.4 Nível máximo de ocupação (σ_{\max})

Um dos mais importantes parâmetros de nosso modelo é o nível máximo de ocupação, σ_{\max} . Este parâmetro de natureza extensiva, é relacionado ao tamanho das células que formam o sistema. Nesta etapa, iremos estudar as diferenças dos métodos de dinâmica síncrona e assíncrona para um sistema de tamanho $L_x = 256$ e $\rho = 1$ fixo.

Podemos ver na Figura 3.15 os resultados do efeito de diferentes valores de σ_{\max} na mobilidade estacionária do sistema. No gráfico (a) da Figura 3.15 vemos os resultados do método síncrono, onde percebemos que o aumento de σ_{\max} proporciona uma permissividade maior de movimento das partículas indicada pelas curvas de mobilidade crescente para $\alpha < \alpha_c$. Quando $\alpha = \alpha_c$, o sistema sofre a transição para o estado imóvel para os casos $\sigma_{\max} \leq 2$, no entanto, o sistema volta a ser móvel apresentando uma segunda transição quando $\sigma_{\max} = 3$, agora do tipo móvel-imóvel. A partir de $\sigma_{\max} \geq 3$, quando o sistema tem um valor de α suficientemente grande, o alto determinismo na dinâmica síncrona faz com que as vacâncias sejam totalmente exploradas pelas partículas e a mobilidade do sistema seja possível. Para $\sigma_{\max} = 4$, existe uma visível região de $1 < \alpha < 2$, na qual o sistema apresenta transições de primeira ordem instáveis do tipo móvel-imóvel e imóvel-móvel. Quando $\sigma_{\max} \geq 5$ o sistema não mais apresenta transição de fase e a mobilidade estacionária é crescente com α até chegar à mobilidade plena ($M_\infty = 1$) quando $\alpha \approx 1$. Nos dois tipos de dinâmica, as chances de uma célula apresentar ocupação maior que σ_{\max} são praticamente nulas, pois a ocupação média é $o = \frac{\rho}{\sigma_{\max}} = 1/6$.

Ainda na Figura 3.15, podemos ver no gráfico (b) que o método assíncrono possui um comportamento parcialmente diferente do comportamento visto no caso síncrono. Em ambos os casos, temos uma mobilidade estacionária crescente com α para diferentes valores de σ_{\max} até que ocorre a transição para estado imóvel em $\alpha_c = \alpha_c(\sigma_{\max})$.

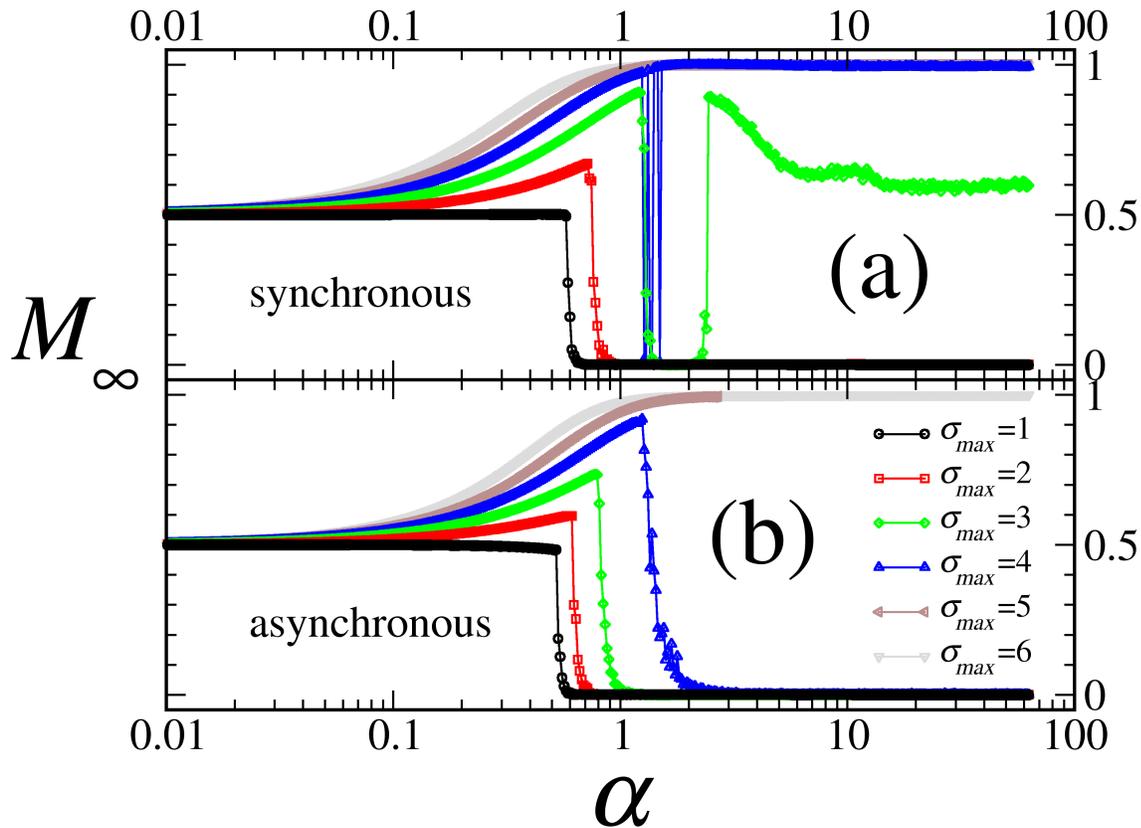


Figura 3.15: Mobilidade estacionária em função de α mostrando em (a) o algoritmo síncrono e em (b) o algoritmo assíncrono mantendo em ambos os casos ρ fixo para diferentes valores de σ_{\max} .

A diferença entre os métodos, no entanto, se dá a partir de α_c , sendo que no caso assíncrono o sistema não tem um “retorno” do estado móvel das partículas como ocorre no outro método. A partir de $\sigma_{\max} \geq 5$, porém, o sistema é sempre móvel em seu estado estacionário, passando do regime de caminhante aleatório direcionado para o regime de superfluidez com o aumento da correlação das partículas.

Iremos fixar nossas atenções nos efeitos que diferentes valores de σ_{\max} causam no sistema quando o parâmetro a ser mantido fixo agora é a ocupação o . Neste caso iremos estudar sistemas de tamanho $L_x = 256$ e número de partículas (N) diferentes de maneira que a ocupação se mantenha fixa em $o = 1$. Assim, se tivermos $\sigma_{\max} = 4$, por exemplo, o sistema terá $N = L_x \sigma_{\max} = 1024$ partículas e, portanto, uma densidade média $\rho = 4$. Na Figura 3.16 vemos que ambos os tipos de dinâmica (síncrona e

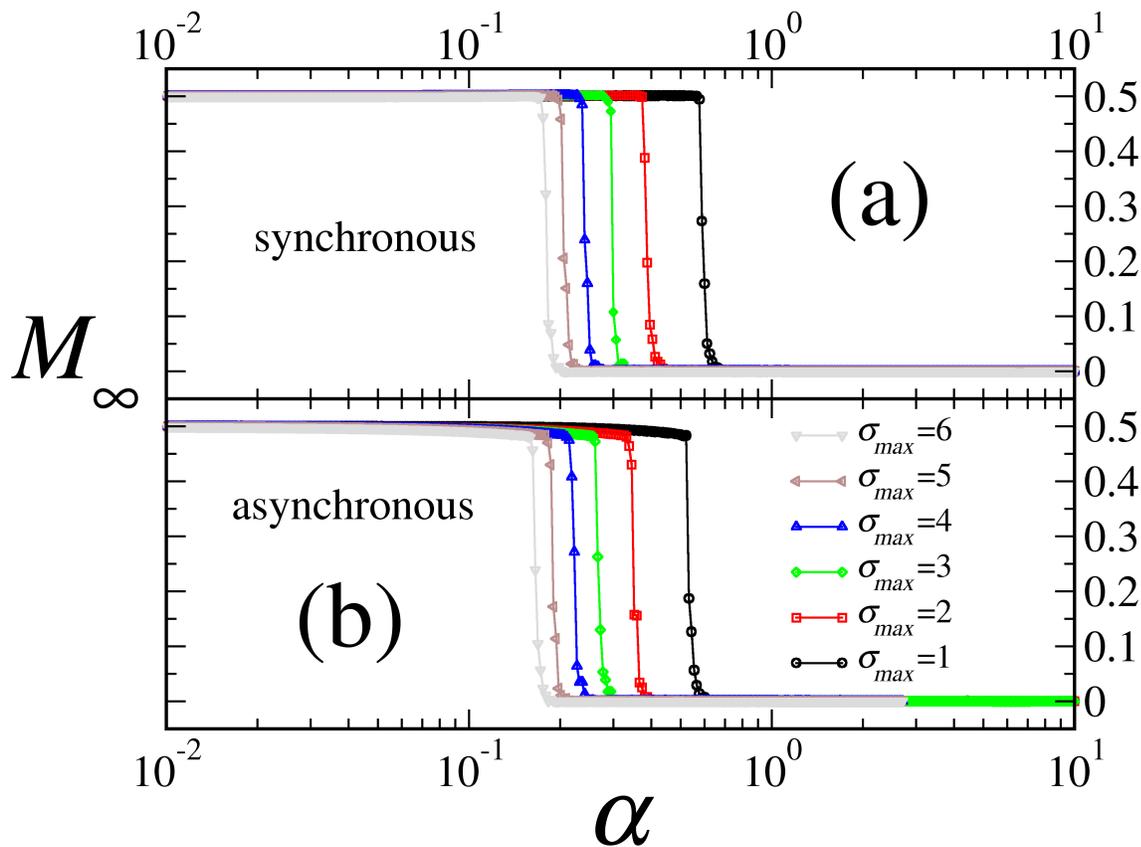


Figura 3.16: Mobilidade estacionária em função de α mostrando em (a) o algoritmo síncrono e em (b) o algoritmo assíncrono mantendo em ambos os casos o fixo para diferentes valores de σ_{\max} .

assíncrona) comportam-se qualitativamente de maneira idêntica. Nos dois casos, o sistema apresenta uma transição de primeira ordem que ocorre para valores de α_c cada vez menores a medida que aumentamos a ocupação máxima celular. Esse fenômeno indica que o sistema apresenta uma maior sensibilidade ao aumento da densidade do que devido ao próprio aumento de σ_{\max} quando as partículas passam a interagir devido ao α .

Uma outra medida estatística interessante para aplicarmos no contexto de dinâmica de partículas é o coeficiente de Gini [32, 44], sendo parâmetro originalmente criado para o cálculo da homogeneidade da distribuição de renda de um país [43].

3.5 Coeficiente de Gini

No contexto de uma dinâmica de partículas, o coeficiente de Gini (equação 2.32) é capaz de nos fornecer uma melhor resolução dos fenômenos coletivos encontrados em nosso modelo. Como esse coeficiente basicamente funciona para medir a heterogeneidade de uma distribuição, pudemos quantificar com mais clareza a condensação no sistema. Por exemplo, quando temos um único pico de alta densidade o coeficiente de Gini corresponde ao seu valor máximo ($G \rightarrow 1$). Enquanto que se temos uma distribuição de vários condensados nos retorna um valor intermediário ($G \approx 1/2$). E finalmente, para uma distribuição homogênea que corresponde a um cenário de ausência de poucos condensados de alta densidade, o coeficiente de Gini resulta em pequenos

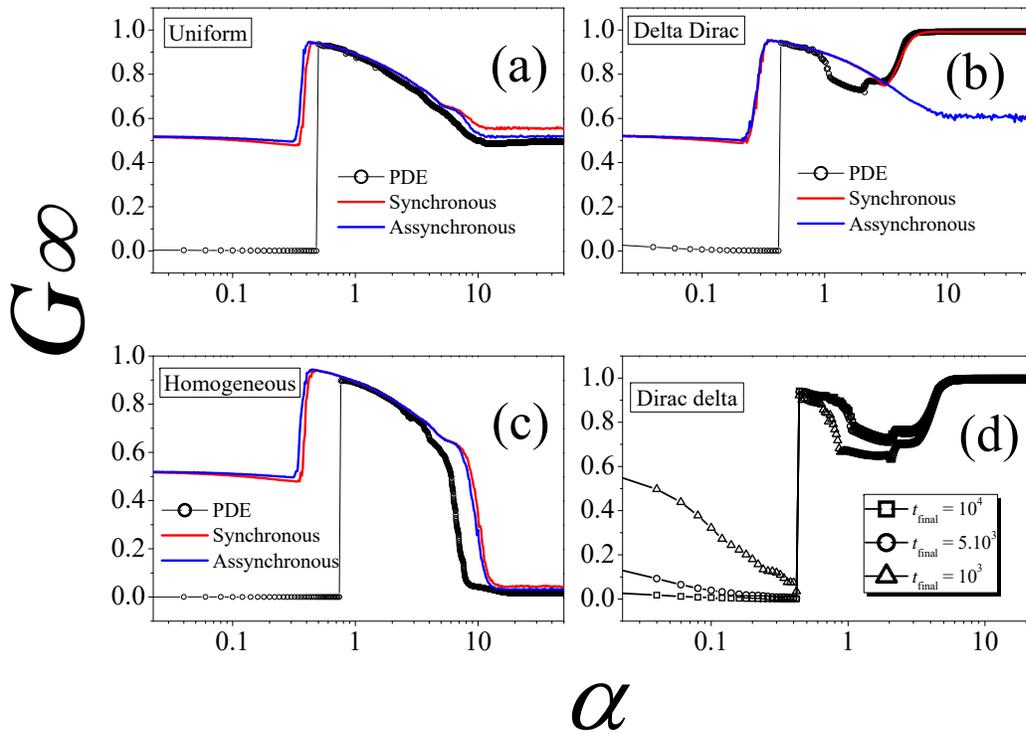


Figura 3.17: Coeficiente de Gini estacionário em função de α para *i*) integração numérica das EDP, *ii*) simulação MC com algoritmo assíncrono e *iii*) simulação MC com algoritmo síncrono. Os resultados para DU (UD), PDD (DDP) e OC (CO) como condições iniciais são mostrados nos gráficos (a), (b) e (c) respectivamente. Os efeitos de diferentes períodos de integração das EDP são mostrados no gráfico (d).

valores ($G \rightarrow 0$).

Realizamos a integração numérica das EDPs (equações 2.21 e 2.22) para $t_\infty = 10^4$ iterações que se mostraram suficientes para alcançarmos o valor de estado estacionário G_∞ . No entanto, não foi possível atingir a convergência para um único valor de G_∞ nas simulações MC. Para esse estudo, utilizamos $\eta = 10^{-7}$ no critério de truncamento das séries temporais.

Para descobrirmos se G_∞ é um bom estimador para a transição móvel-imóvel, verificamos a sua dependência como função de α para *i*) simulações MC com esquema de atualização assíncrona, *ii*) simulações MC com esquema de atualização síncrona e *iii*) integração numérica das EDPs.

O coeficiente de Gini varia abruptamente em função de α como podemos observar nas Figuras 3.17 (a), (b) e (c). Embora a transição não ocorra para o mesmo valor exato de α , é possível notarmos que há uma concordância qualitativa entre as simulações MC e a integração numérica das EDP. Além disso, a transição sempre ocorre para valores de $\alpha < 1$.

O coeficiente de Gini tende a 0 no caso da integração numérica das EDPs e tende para $1/2$ no caso das simulações MC na fase móvel (baixo α). O primeiro caso corresponde a uma situação onde existem dois tipos de ocupação das células, enquanto no segundo caso corresponde a uma ocupação homogênea. Portanto, é possível afirmarmos que as simulações MC produzem um *regime de estado estacionário estatisticamente homogêneo*, enquanto que a integração numérica das EDPs produzem um *regime de estado estacionário completamente homogêneo*.

As distribuições iniciais uniformes não se alteram com tempo se α for suficientemente grande. Assim, $G_\infty \approx 1/2$ tanto para simulações MC quanto para a integração numérica como é mostrado na Figura 3.17 (a). A Figura 3.17 (b) torna explícito o comportamento de onda do modelo. Vemos que o sistema parte de um estado de dois grupos concentrados e produz uma transição simultânea entre as simulações MC e a integração numérica. A explicação para esta coincidência é que as EDPs também se caracterizam pela sincronidade. Após a colisão dos dois grupos, há a formação de condensados permanentes que não dissipam. No entanto, as simulações MC com esquema assíncrono apresentam um caráter difusivo. Assim, as partículas se dispersam e a condensação é menos forte do que nos outros casos. Deste modo, o coeficiente de Gini se mostra com valor menor. Ainda assim, tanto o caso síncrono quanto o caso assíncrono

das simulações MC apresentam uma perfeita concordância no limite de baixa interação para $\alpha < 3$.

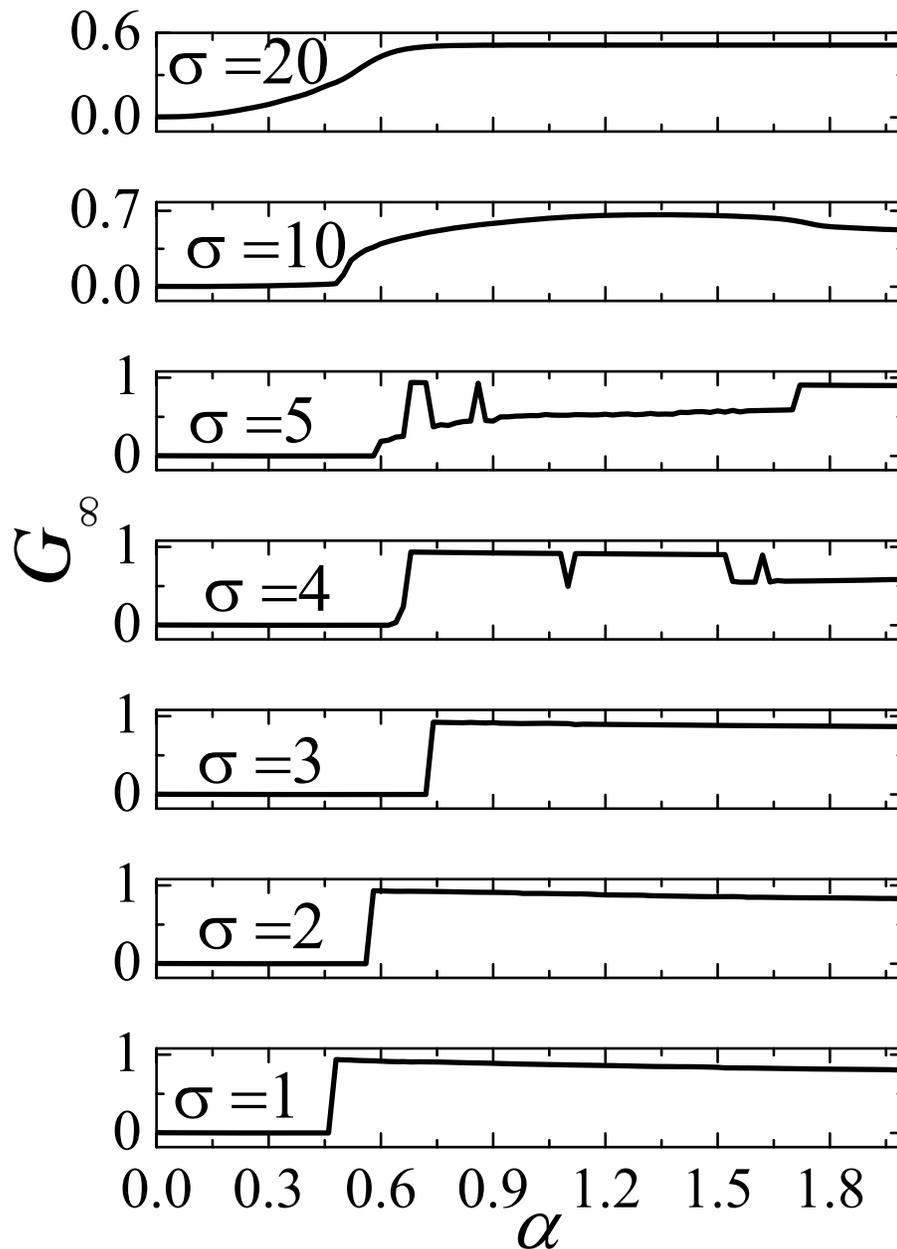


Figura 3.18: G_∞ em função de α obtido a partir da integração numérica das EDP para valores diferentes de σ_{\max} . Em todos os casos, o sistema tem tamanho $L_x = 128$ e $N_A = N_B = 128$ partículas distribuídas de maneira uniforme (UD) inicialmente.

O coeficiente de Gini é mostrado na Figura 3.17 (c) para uma distribuição inicial homogênea. Diferentemente do comportamento descrito na utilização das condições uniformes e concentradas, $G_\infty \rightarrow 0$ para valores altos de α quando o sistema parte de uma ocupação homogênea. Isso ocorre porque o sistema não altera seu estado inicial para α grande o suficiente. Para contornar esse problema, implementamos uma estratégia numérica para a integração nesta situação. Definimos que o sítio central do sistema estivesse inicialmente vazio, enquanto que todos os sítios restantes permanecessem inicialmente ocupados por uma partícula de cada espécie: $A(x, t = 0) = B(x, t = 0) = 1 - \delta_{x, L/2}$.

O período de integração t_∞ é particularmente importante para a integração numérica das EDPS. A Figura 3.17 (d) mostra o coeficiente de Gini calculado para os períodos $t_\infty = 1.0 \times 10^3$, 5.0×10^3 e 1.0×10^4 . Como não existem diferenças consideráveis entre os coeficientes de Gini calculados para os períodos $t_\infty = 5.0 \times 10^3$ e 1.0×10^4 , podemos assumir que o menor dos dois períodos é um valor suficientemente bom para as simulações.

Iremos agora estudar os efeitos de ocupação e diluição (variações de ρ) a partir do coeficiente de Gini. Para tanto, integramos as EDPs para um conjunto de $N_A = N_B = 128$ partículas uniformemente distribuídas ao longo das $L_x = 128$ células do sistema. Observamos G_∞ em função de α para valores de σ_{\max} variando de 1 a 20. Como a Figura 3.18 mostra, a transição crítica inicialmente desloca-se para maiores valores de α à medida que σ_{\max} aumenta. Quando $\sigma_{\max} = 4$, essa tendência termina e a transição se torna mais suave apresentando um começo que se reduz com o aumento de α e algumas irregularidades. Esse fenômeno é uma consequência do sistema possuir mais graus de liberdade devido ao aumento da capacidade das células. Portanto, o sistema se torna mais móvel. Essa tendência continua até $\sigma_{\max} = 20$, quando a transição se torna contínua, sua ordem muda e G_∞ diminui.

Aqui utilizamos uma densidade constante de partículas de cada espécie: $\rho = N/L_x$. Mas uma outra forma de estudarmos o modelo é mantendo a ocupação (o) constante. Assim, L_x se mantém constante, mas variamos N e σ_{\max} .

A Figura 3.19 mostra o comportamento de G_∞ em função de α . O gráfico menor inserido na Figura 3.19 indica que o valor crítico de α possui uma dependência do tipo lei de potência com σ_{\max} :

$$\alpha_c \approx \sigma_{\max}^\Delta, \quad (3.3)$$

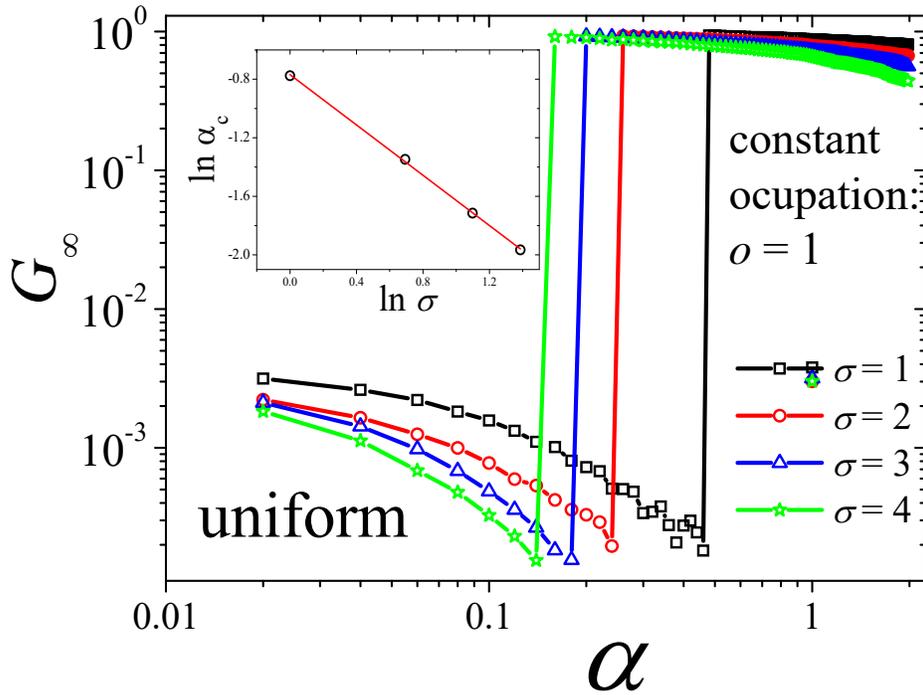


Figura 3.19: G_∞ em função de α obtido a partir da integração numérica das EDP para valores diferentes de σ_{\max} . Em todos os casos, utilizamos um sistema de tamanho $L_x = 128$ e N foi variado de modo que a ocupação $o \equiv N/(L_x\sigma_{\max})$ se mantivesse constante. Condições iniciais de distribuição uniforme (DU) foram utilizadas.

onde $\Delta \approx 0.86$.

Em seguida, estudamos os efeitos de diferentes valores de L para G_∞ em função de α utilizando condições iniciais PDD. Os resultados mostrados na Figura 3.20 indicam que não há significantes variações observadas para $L \geq 128$. Desta maneira, $L_x = 128$ se mostra um valor apropriado para nossas simulações.

No próximo capítulo, apresentaremos os resultados do modelo quando consideramos uma rede bidimensional de células. Iremos mostrar os efeitos que a adição de um grau de liberdade espacial causa na dinâmica de contrafluxo e o interessante fenômeno de auto-organização das espécies quando consideramos apenas a interação entre agentes de diferentes tipos.

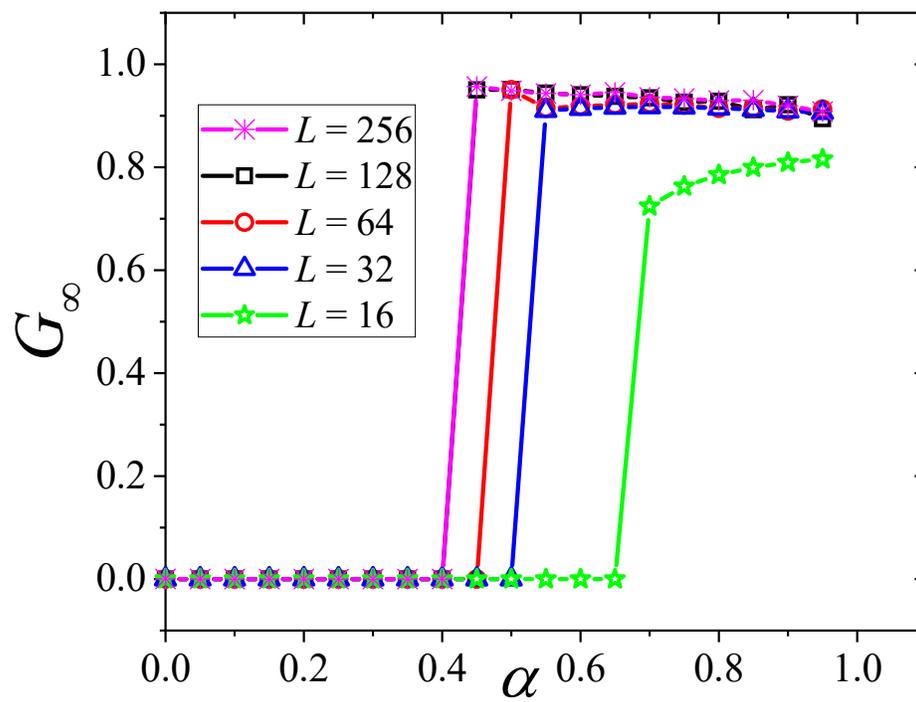


Figura 3.20: Análise de escala considerando PDD como condições iniciais. A partir de $L_x \geq 128$ não são mais observadas variações em função do tamanho do sistema.

Capítulo 4

Resultados: rede bidimensional

Nesta etapa, mostraremos todos os resultados obtidos quando consideramos nosso modelo de partículas em uma rede bidimensional. Neste cenário, a dinâmica de cada partícula é regida pelo conjunto de probabilidades dada pelas Eqs. 2.1, 2.2, 2.3 e 2.5 para a espécie A e Eqs. 2.7, 2.8, 2.9 e 2.5 para a espécie B . Todos os resultados deste capítulo foram obtidos apenas via simulações MC e um estudo das RECs que regem a dinâmica em uma aproximação de campo médio deverá ser feito futuramente.

Primeiramente, apresentaremos os resultados de um caso específico no qual apenas partículas de espécies opostas interagem. Exploraremos o fenômeno de bimodalidade onde o sistema apresenta a possibilidade de relaxar para um de três estados estacionários possíveis (estado móvel, estado imóvel ou estado de coexistência de fases) dependendo sensivelmente das condições iniciais utilizadas. Estes resultados foram publicados em [48].

Posteriormente, iremos apresentar os resultados do modelo generalizado, onde exploraremos todos os tipos de interações possíveis através das componentes da matriz de interação Λ .

4.1 Coexistência e bimodalidade em sistema bidimensional

No estudo da rede bidimensional, primeiramente investigamos as consequências de considerarmos um caso simples no qual apenas partículas de espécies diferentes pudessem interagir. Neste situação, a interação das partículas do sistema é representada

matricialmente por (ver Eq. 2.13)

$$\Lambda = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.1)$$

Nossa primeira abordagem consistiu em estudar a evolução da mobilidade do sistema e do parâmetro de ordenamento na direção x (Φ_x) para um nível de estocasticidade relativamente baixo, $\alpha = 20$, e diferentes valores de densidade média (ρ). Assim, para um sistema de dimensões $L_x = 256$ e $L_y = 64$ e valor de ocupação máxima $\sigma_{\max} = 1$, implementamos nossas simulações para três seguintes casos de densidade

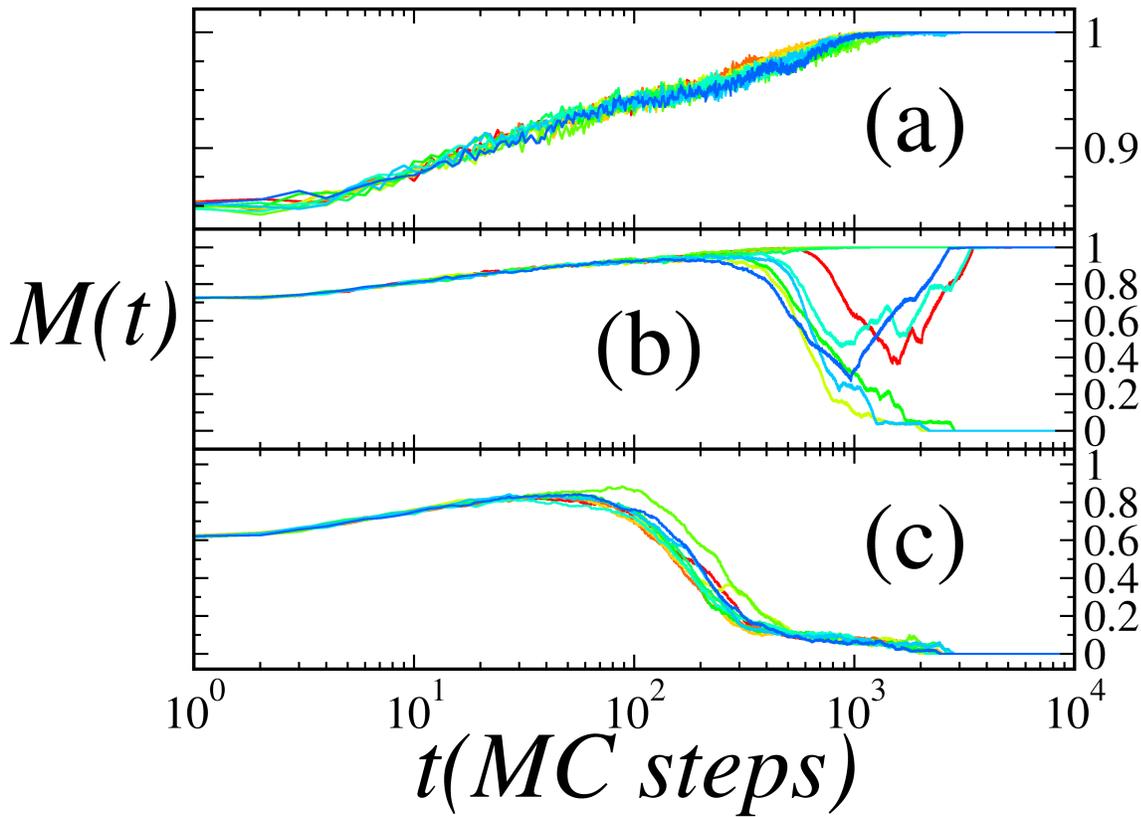


Figura 4.1: Evolução temporal da mobilidade do sistema para dez diferentes amostras (cada amostra corresponde a uma diferente semente e a uma diferente cor ou tom de cinza em escala de cinza) para um sistema de dimensões $L_x = 256$ e $L_y = 64$ e $\alpha = 20$. A dinâmica relaxa para um estado de fluxo ótimo quando $\rho = 0.5$ (a) e relaxa para um estado imóvel quando $\rho = 1.5$ (c). Para $\rho = 1.0$ (b), o sistema apresenta um fenômeno de instabilidade transiente em seu estado estacionário, onde tanto a fase móvel ou imóvel podem surgir de acordo dependendo da série temporal.

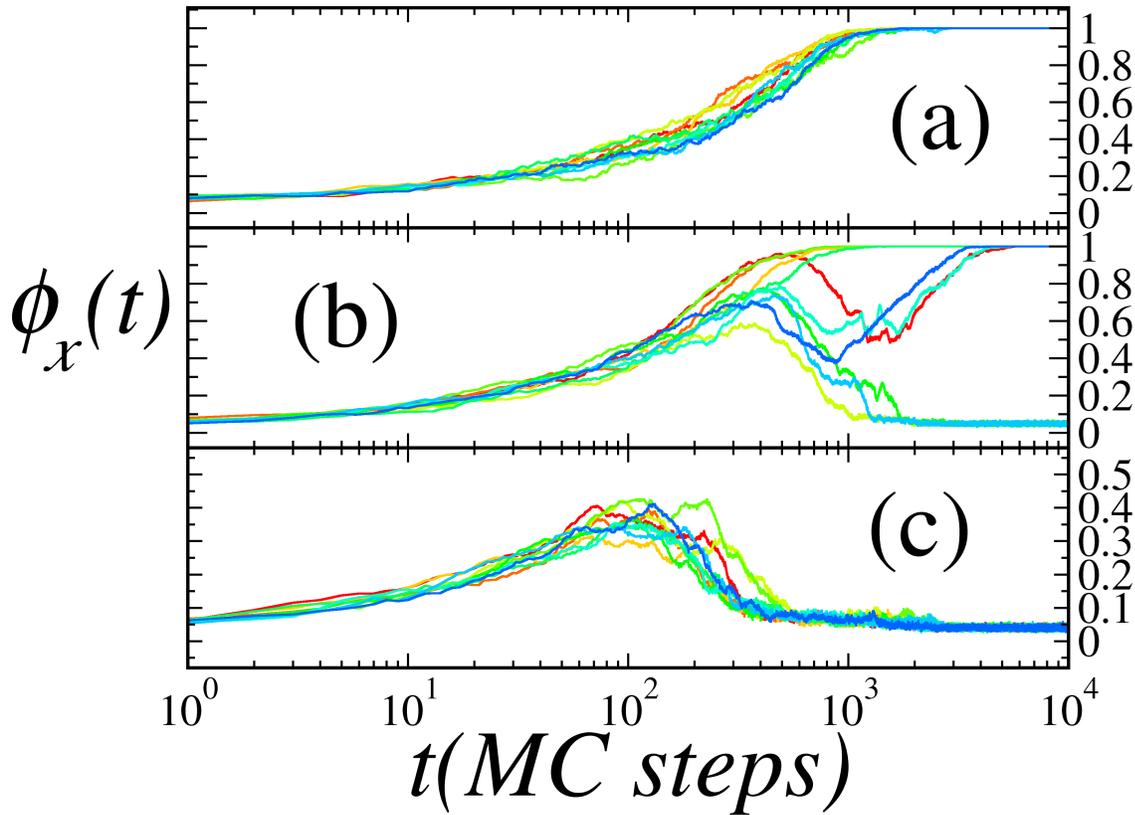


Figura 4.2: Evolução temporal do parâmetro de ordenamento Φ_x do mesmo conjunto de séries temporais referentes à mobilidade do sistema mostradas na Fig. 4.1. Aqui, chegamos exatamente às mesmas conclusões que chegamos no caso das séries temporais para a mobilidade. As diferentes cores, ou tons de cinza, correspondem a diferentes amostras.

média: $\rho = 0.5$, $\rho = 1.0$ e $\rho = 1.5$. Nessas condições, esperamos, a priori, que o sistema tenha alta mobilidade para o caso de baixa densidade ($\rho = 0.5$), assim como esperamos que o sistema trave para o caso de alta densidade ($\rho = 1.5$).

Nas Figs. 4.1 e 4.2, observamos a evolução da mobilidade do sistema e Φ_x , respectivamente, para dez amostras (“runs”) de sementes distintas (cada série temporal corresponde a uma cor e a uma semente diferentes) para os três casos de densidade média: $\rho = 0.5$ (gráficos (a)), $\rho = 1.0$ (gráfico (b)) e $\rho = 1.5$ (gráficos (c)). Podemos perceber que o sistema rapidamente evolui para o estado de ordenamento em faixas de fluxo de espécie única ($\Phi_x \rightarrow 1$) quando há baixa densidade de partículas na rede ($\rho = 0.5$). De forma esperada também, a mobilidade do sistema rapidamente cai a

zero quando o sistema possui alta densidade média de partículas ($\rho = 1.5$). Entretanto, é para $\rho = 1.0$ (gráficos (b) nas Figs. 4.1 e 4.2) que observamos que o sistema apresenta uma certa instabilidade transiente antes de relaxar para um estado móvel ou para um estado imóvel. Este caso revela que para uma certa densidade intermediária, o estado estacionário de cada simulação depende sensivelmente das condições iniciais como podemos observar pela bifurcação nas curvas temporais da mobilidade e de Φ_x . Percebemos que não há um estado estacionário intermediário diferente do estado móvel de fluxo auto-organizado ($\Phi_x \rightarrow 1$) ou um estado de imobilidade na rede ($M_\infty \rightarrow 0$).

Para melhor entender esse fenômeno de bimodalidade, estudamos a dependência do sistema com a densidade média ρ . Para tanto, implementamos o critério de parada da série temporal de cada simulação de acordo com o algoritmo que leva em conta a inclinação da curva de regressão linear calculada a cada Δt passos de MC. Podemos implementar tal critério, pois sabemos que a dinâmica evolui para um estado estacionário bimodal de comportamentos antagônicos, onde a mobilidade e Φ_x variam menos que um certo valor de erro η em cada simulação a partir de certo instante na série temporal.

No estudo de ρ , os parâmetros do critério de parada que utilizamos foram $\Delta t = 10^3$ MC steps e erro $\eta = 10^{-7}$, os quais mostraram-se satisfatórios (ver Fig. 3.12) para o estudo quantitativo do modelo. Devido ao caráter bimodal do estado estacionário observado, não faz sentido que calculássemos os valores médios da mobilidade e de Φ_x , no entanto, medimos a probabilidade do sistema atingir cada estado possível. Desta maneira, denotamos a probabilidade do sistema relaxar para o estado de alta mobilidade por p_{lane} (número de simulações que o sistema atinge a fase de auto-organização dividido por N_{run}). De maneira similar, calculamos a probabilidade do sistema evoluir para um estado imóvel denotada por p_{clog} , assim como calculamos a probabilidade do sistema atingir qualquer outro estado intermediário diferente dos dois casos anteriores. Denotamos tal estado por $p_{else} = 1 - p_{lane} - p_{clog}$.

Antes de mais nada, precisamos entender o que seriam tais estados assintóticos “diferentes” (“else”) que ocorrem em no nosso problema. Para isso, observemos a Fig. 4.3 onde mostramos quadros (“snapshots”) da distribuição das partículas na rede para os três diferentes estados estacionários possíveis nos quais a dinâmica já tenha atingido seu estacionário. Na figura, partículas da espécie A estão coloridas em azul e a espécie B em verde, onde quanto mais intensa é a cor, maior é a densidade local de partículas. Aqui, utilizamos altíssima densidade média, $\rho_A = \rho_B = 8.0$ (lembrando

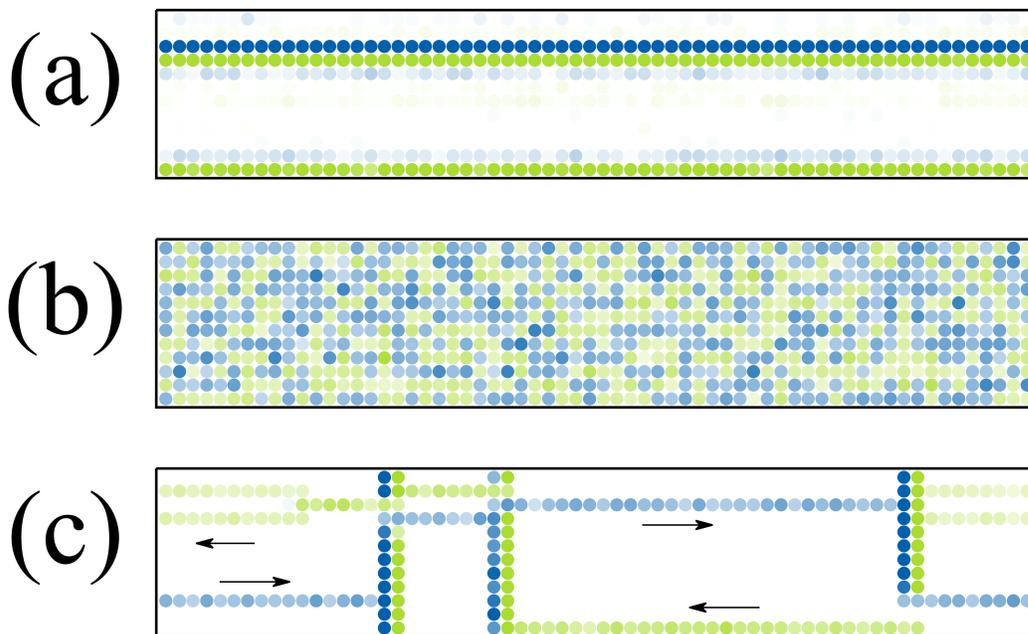


Figura 4.3: Distribuição espacial típica obtida em caso de alta densidade média: $\rho_A = \rho_B = 8$. Podemos ver que o sistema apresenta (a) padrões de faixas de mesma espécie, (b) estado de entupimento e (c) uma situação atípica onde entupimento local e padrões de faixas auto-organizadas parecem coexistir em um chamado “estado desorganizado”. Os pontos azuis (cinza claro) correspondem às partículas movendo-se para o lado direito, enquanto os pontos verdes (cinza escuro) correspondem às partículas movendo-se para a esquerda.

que $\rho = \rho_A + \rho_B$), para gerar as três amostras da Fig. 4.3. O gráfico (a) mostra um quadro em que a amostra evoluiu para o estado de auto-organização (de certa forma raros para a referida densidade média) com a produção de padrões de faixas de fluxo de mesma espécie. O gráfico (b) da Fig. 4.3 remete ao caso que a dinâmica evolui para o estado de entupimento da rede (que é altamente provável para as circunstâncias). Finalmente, observamos no gráfico (c) uma possível configuração do estado estacionário “intermediário” da dinâmica, onde podemos observar a coexistência das fases móvel (faixas horizontais de partículas paralelas às setas) e imóvel (faixas perpendiculares às

setas). Neste estado, podemos observar um diferente padrão de fluidez chamado de padrão de mobilidade “desorganizada”, que contém simultaneamente características dos estados (a) e (b), isto é, a coexistência das duas fases.

O estado de coexistência de fases é raro, mas pode ocorrer em nosso modelo. Ainda não sabemos quais são as circunstâncias necessárias para tal fenômeno ocorrer, mas constatamos que a probabilidade do sistema relaxar para o estado de mobilidade “desorganizada” é praticamente zero para os parâmetros extensivos utilizados na obtenção das Figs. 4.1 e 4.2. No entanto, foi possível notarmos que o número de ocorrências desse caso raro aumenta consideravelmente quando utilizamos os parâmetros ($L_x = 64$, $L_y = 12$ e $\rho = 16$) das simulações para a produção da Fig. 4.3, do que em comparação a todos os outros casos estudados que foram e serão mostrados nesta tese. Portanto, ficamos com a seguinte questão em aberto: Que tipo de perturbação o sistema deve sofrer ou quais valores dos parâmetros extensivos o sistema deve ter para que seja possível a evolução da dinâmica para um estado em que duas fases antagônicas possam coexistir? Devemos explorar futuramente os detalhes que fazem com que tal fenômeno possa ocorrer.

Ao voltarmos nossa atenção para a Fig. 4.4, vemos as probabilidades do sistema atingir cada um dos três estados possíveis como função de ρ para redes de largura fixa $L_y = 2$ (propositalmente exígua) e diferentes valores de comprimento: $L_x = 2^5$ (preto), $L_x = 2^6$ (vermelho), $L_x = 2^7$ (verde) e $L_x = 2^8$ (cinza). Podemos observar que o sistema apresenta uma maior probabilidade de auto-organização em faixas de fluxo único para baixas densidades independentemente do tamanho da rede como era de se esperar. Quando a rede possui uma densidade média de partículas suficientemente grande ($\rho \geq 0.5$ para $L_x = 2^5$ por exemplo), o entupimento da rede torna-se um estado estacionário provável e surge o cenário de bimodalidade. A medida que a densidade média do sistema aumenta, p_{clog} continua a aumentar enquanto p_{lane} mantém uma tendência de queda até que ambas curvas se cruzam e ocorre a troca do cenário estacionário mais provável. Na atual figura, também podemos notar que a probabilidade de surgimento de qualquer outro estado intermediário, p_{else} , é praticamente nula para o intervalo de densidade e os comprimentos de rede estudados assim como havíamos afirmado no parágrafo anterior.

O gráfico menor da Fig. 4.4 nos mostra também que o desvio padrão das probabilidades, σ_p , possui um valor máximo quando $p_{clog} = p_{lane}$ (lembrando que $p_{else} \approx 0$),

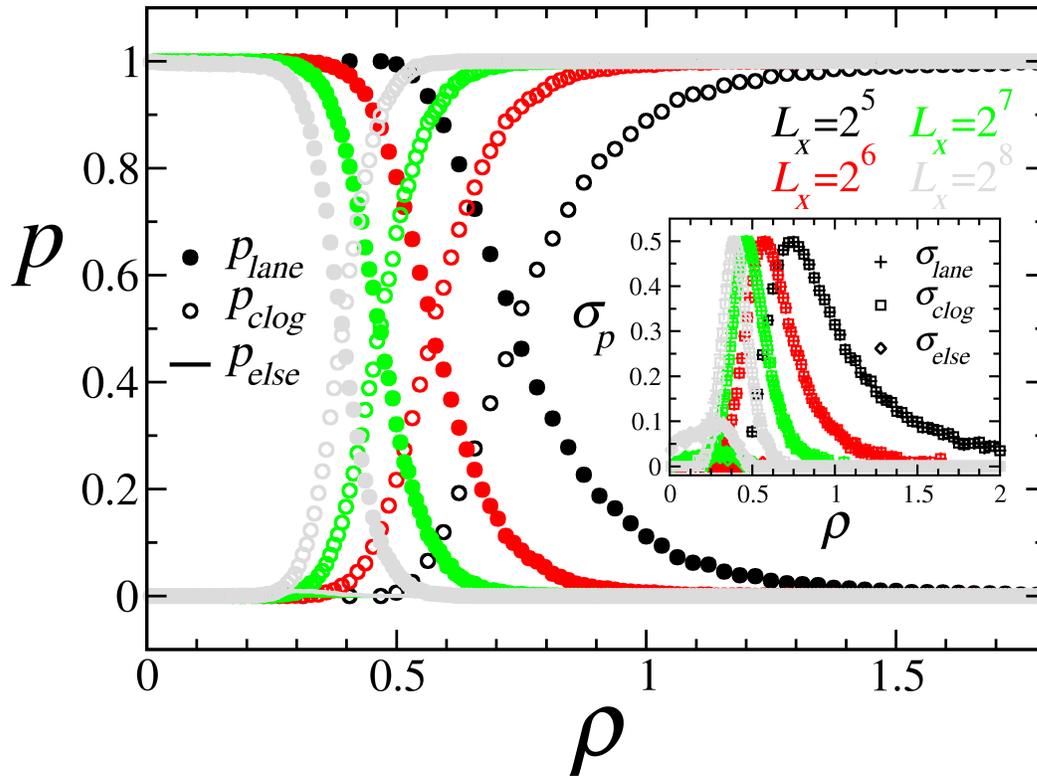


Figura 4.4: Probabilidade de formação de faixas (círculos preenchidos), entupimento (círculos vazios) e relaxação para qualquer estado intermediário (linhas) para um sistema com largura $L_y = 2$ e comprimento $L_x = 2^5$ (preto), $L_x = 2^6$ (vermelho), $L_x = 2^7$ (verde) e $L_x = 2^8$ (cinza). Podemos ver que a densidade de “crossover” decresce assintoticamente a medida que o comprimento do sistema aumenta. O gráfico interno mostra as curvas do desvio padrão das probabilidades tendo seu valor máximo ρ_c diminuindo para sistemas com maior comprimento. As cores diferentes nesta figura correspondem a diferentes tons de cinza em escala de cinza.

tal que a densidade na qual o sistema alterna de estado estacionário mais provável (ou densidade de “crossover”) pode ser descrita por $\rho_C = \rho(p_{clog} = p_{lane} = 1/2)$. Por fim, a Fig. 4.4 nos sugere que redes mais alongadas tornam ρ_C assintoticamente menor, assim como o intervalo de densidade na qual o fenômeno de bimodalidade ocorre.

Agora focaremos nossas atenções ao estudo da influência da largura da rede. Mostramos na Fig. 4.5 as probabilidades da dinâmica relaxar para os três estados possíveis para uma rede com $L_x = 128$ e diferentes larguras de sistema: $L_y = 2$ (preto), $L_y = 2^2$

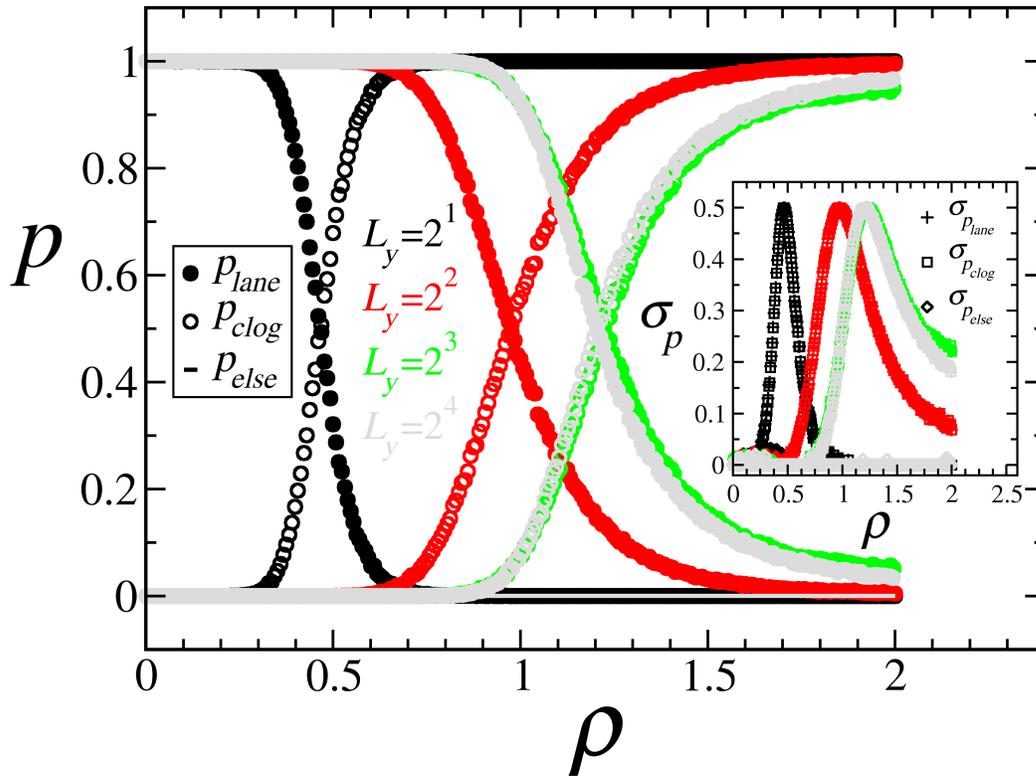


Figura 4.5: Probabilidade de formação de faixas (círculos preenchidos), entupimento (círculos vazios) e relaxação para qualquer estado intermediário (linhas) para um sistema de comprimento $L_x = 128$. Mostramos os resultados das simulações para diferentes larguras: $L_y = 2$ (preto), $L_y = 2^2$ (vermelho), $L_y = 2^3$ (verde), and $L_y = 2^4$ (cinza). Podemos notar que a densidade de crossover cresce de $\rho_c \approx 0.5$ até um valor máximo de $\rho_c \approx 1.2$ para sistemas com $L_y > 2$. As cores diferentes nesta figura correspondem a diferentes tons de cinza em escala de cinza.

(vermelho), $L_y = 2^3$ (verde) e $L_y = 2^4$ (cinza). É possível observarmos que quando o toróide é relativamente estreito, o sistema exhibe uma grande diferença em termos de ρ_c a medida que observamos larguras aumentarem $L_y = 2, 2^2$ e 2^3 . No entanto, quando o sistema possui uma largura $L_y \geq 2^3$, o valor de ρ_c não se altera e poderíamos esperar o aumento das chances de emergência de auto-organização, entretanto isso não ocorre devido ao aumento proporcional do número de total de partículas (N).

O fato do sistema apresentar a possibilidade bimodal de relaxar para dois estados estacionários distintos pode também ser observado nas Figs. 4.4 e 4.5 por $p_{else} \approx$

0. Nessa situação, estados não organizados de mobilidade não nula são raros. De maneira similar, os padrões de auto-organização que permitem a mobilidade plena em contrafluxo também são raros em situação de alta densidade.

Também abordamos o problema considerando a influência de diferentes concentrações de partículas, isto é, variando o nível de mistura das espécies para N fixo. Denotamos as concentrações médias de partículas por $c_A = N_A/N$ e $c_B = N_B/N$, onde usamos $c_A = c_B$ até esta etapa do trabalho. A Fig. 4.6 nos mostra o estado

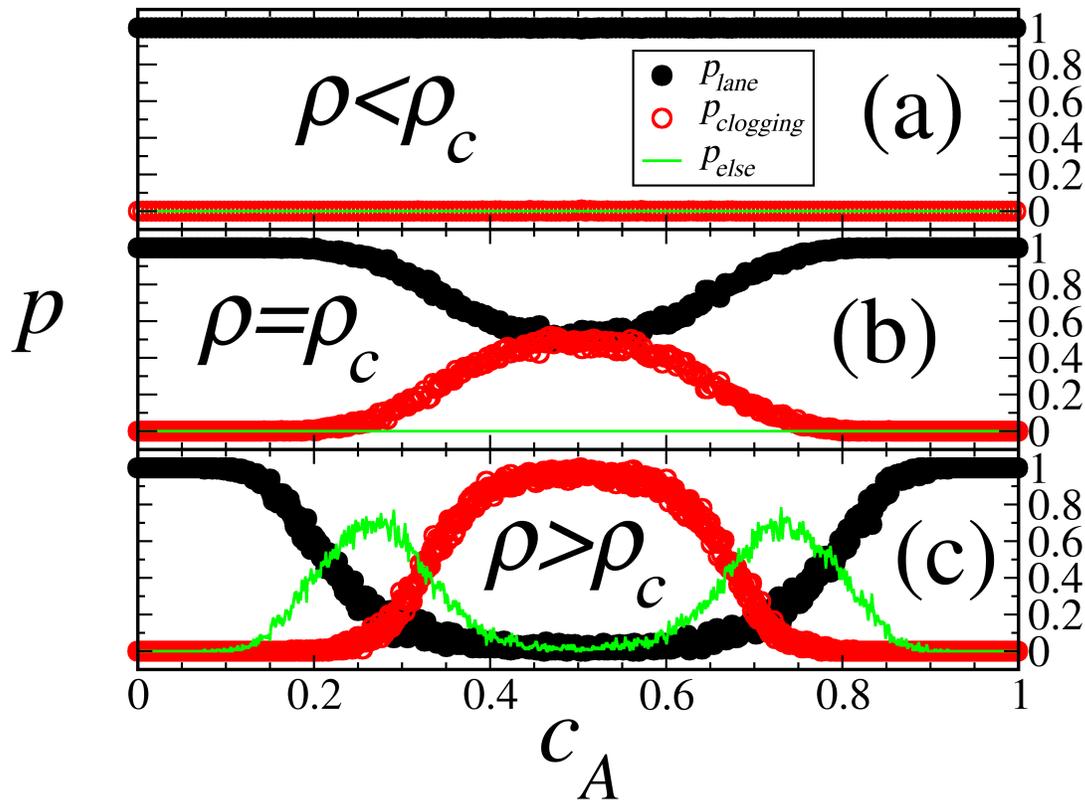


Figura 4.6: Probabilidades (p_{lane} , p_{clog} , and p_{else}) em função da concentração da espécie A (densidade relativa) para três diferentes valores de densidade média. Para $\rho < \rho_c$ (a), o sistema é móvel independentemente da concentração das espécies. Para $\rho = \rho_c$ (b), o sistema possui $p_{lane} = 1$ para $c_A \leq 0.2$ e cai para $p_{lane} = 0.5$ quando a concentração das espécies chega em uma razão 1:1, sendo este o ponto em que definimos como a densidade de “crossover”. Finalmente, quando $\rho > \rho_c$ (c), se torna mais provável que o sistema apresente um estado estacionário de coexistência de fases (móvel e imóvel) no intervalo em que $0.1 < c < 0.4$.

estacionário da dinâmica para uma proporção das espécies variando de um cenário de praticamente apenas uma espécie movendo-se ao longo do toróide ($c_A = 0$, lembrando que $c_A + c_B = \frac{N_A + N_B}{N} = 1$) para a situação estudada até então, onde ambas espécies estão na mesma proporção ($c_A = c_B = 1/2$). No presente gráfico (Fig. 4.6), mostramos os três regimes que surgem nas condições $\rho < \rho_C$, $\rho = \rho_C$ e $\rho > \rho_C$. Em um sistema de dimensões $L_x = 128$ e $L_y = 16$, sabemos que $\rho_C \approx 1.2$ (curva de cor cinza claro na Fig. 4.5) e, portanto, realizamos simulação para $\rho = 0.5$, $\rho = 1.2$ e $\rho = 3.0$, que podemos observar, respectivamente, nos gráficos (a), (b) e (c) da Fig. 4.6.

Em todas as curvas da presente figura, começamos simulando o cenário de apenas uma espécie movendo-se na rede ($c_A = 0$). Dessa maneira, temos que $p_{lane} = 1$ significa obviamente um falso estado de auto-organização pois estamos considerando apenas uma espécie.

O gráfico (a) da Fig. 4.6 mostra um comportamento esperado da dinâmica, pois a densidade média de partículas garante a formação de faixas auto-organizadas de mesma espécie, independentemente do aumento da concentração da espécie A . Entretanto, o caso em que $\rho = \rho_C$ [gráfico (b) da Fig. 4.6] nos mostra que p_{lane} diminui gradualmente a medida que c_A aumenta. Finalmente, no gráfico (c) da Fig. 4.6 que corresponde a $\rho > \rho_C$, podemos observar que o sistema é capaz de relaxar para o estado de coexistência das fases de mobilidade auto-organizada e de entupimento local. Neste caso, a densidade média, ρ , é maior que o valor de *crossover*, portanto, o crescimento de c_A próximo de $c_A \approx 0.2$ fazem as partículas A comportarem-se como impurezas ao movimento de B , mas não a ponto de interromper o fluxo da rede. Quando a concentração das espécies tende ao mesmo valor ($c_A \approx c_B$), o sistema basicamente relaxa apenas para o estado estacionário imóvel de entupimento do toróide.

Para concluirmos esta etapa da tese, é importante que façamos alguns esclarecimentos a respeito do parâmetro α . Em todo este estudo, utilizamos um α suficientemente grande, mas não argumentamos de maneira completa do porquê dessa escolha. Nesse sentido, realizamos simulações com o objetivo de obter um gráfico $p \times \alpha$ para um sistema de dimensões fixas ($L_x = 128$ e $L_y = 16$), mantendo $c_A = c_B$ (usado na maior parte deste trabalho) e três densidade: $\rho = 0.5$ ($\rho < \rho_C$), $\rho = 1.2$ ($\rho \approx \rho_C$) e $\rho = 3.0$ ($\rho > \rho_C$) mostrados, respectivamente, nos gráficos (a), (b) e (c) da Fig. 4.7.

Os resultados nos mostram que a dinâmica possui uma transição abrupta no grau de estocasticidade, onde esta transição depende da densidade média (ρ) assim como fora

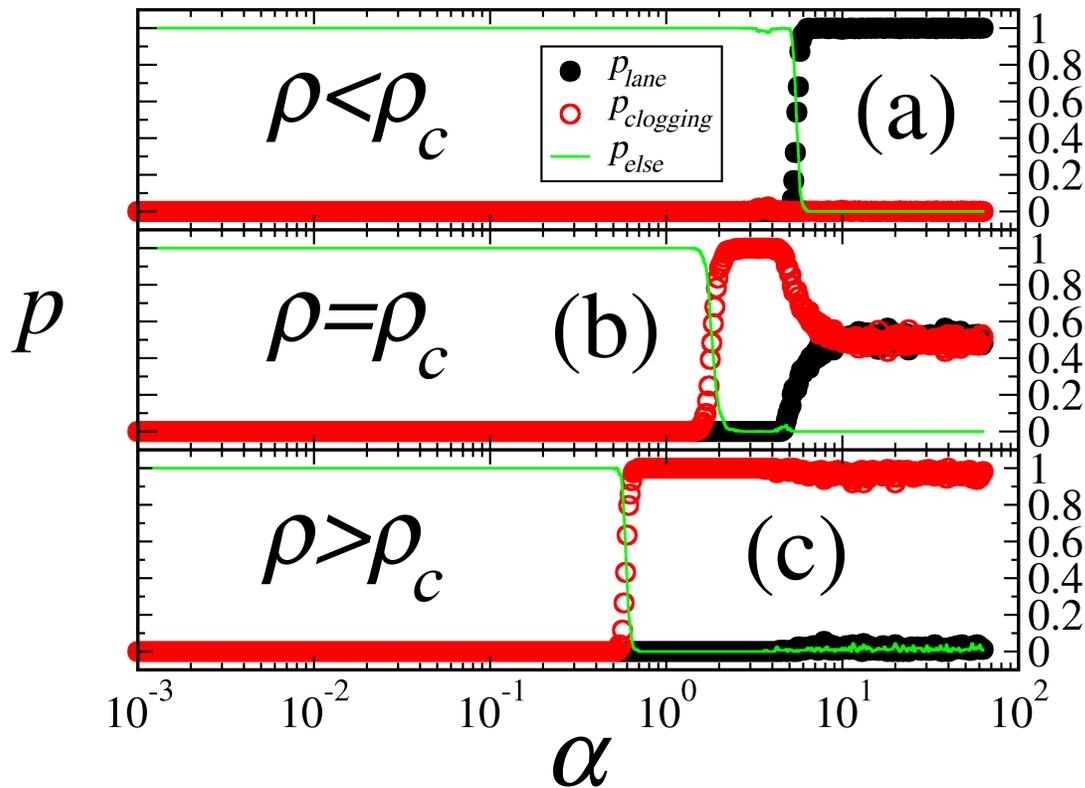


Figura 4.7: O comportamento de p em função de α ao considerarmos $c_A = c_B$ para o mesmo conjunto de parâmetros e dimensões da rede usados na Fig. 4.6. Para $\rho = \rho_c$, o sistema apresenta um intervalo de valores de α ($2 \lesssim \alpha \lesssim 5$) no qual apresenta maiores chances de entupimento da rede.

mostrado no modelo unidimensional original [47,49]. Este resultado também sugere que quando temos $\rho = \rho_c$, o sistema tem maiores chances de travar no intervalo $2 \leq \alpha \leq 5$, onde a interação é forte o suficiente para interromper o fluxo de partículas, mas não é forte o suficiente para induzir a auto-organização das partículas. Para todos os valores pequenos de α , o sistema é moderadamente móvel como seria de se esperar, uma vez que a interação das espécies é fraca de tal forma que as partículas basicamente deslocam-se numa dinâmica de caminhante aleatório direcionado ao longo do eixo x , mas com caráter difusivo (caminhante aleatório) ao longo do eixo y . Para valores altos de α , o sistema apresenta o já visto estado estacionário bimodal, onde a fase móvel e a fase imóvel são igualmente prováveis.

4.2 Interações assimétricas no modelo generalizado

Nos resultados que apresentamos até então, a interação das partículas apresentava um caráter repulsivo quando utilizamos fatores de interação positivos, de maneira que a presença de agentes nas células vizinhas não favorecia o movimento para estas mesmas células. Esse foi o caso da rede unidimensional, onde usamos $\lambda_{XX}, \lambda_{XY} = 1$. Posteriormente, estudamos uma rede bidimensional, onde consideramos um sistema de partículas apenas com interação (repulsiva novamente) entre as espécies diferentes ($\lambda_{XX} = 0$). Nesse último, foi possível observar o surgimento do fenômeno de bimodalidade no qual o sistema apresentava a possibilidade de relaxar para dois estados estacionários completamente distintos: mobilidade com auto-organização e entupimento da rede.

No que se refere ao estudo de sistema com diferentes tipos de interação, não havíamos explorado de maneira mais completa a possibilidade de generalização do problema. Uma possibilidade que ainda não havíamos testado, por exemplo, consiste em considerar que os fatores de interação possuíssem valor negativo. Poderíamos pensar, a priori, que a escolha de $\lambda_{XX}, \lambda_{XY} < 0$ pudesse refletir um sistema com interação atrativa das partículas. Entretanto, ao observarmos a relação da densidade efetiva ($\sigma(X)$) e o limiar de ocupação celular (σ_{max}) dentro da distribuição do tipo Fermi-Dirac (ver Eq. 2.12 e 2.15), vemos que esse não é o caso. Pois, quando a estocasticidade da dinâmica é muito baixa ($\alpha \rightarrow \infty$), o argumento da exponencial irá saturar para qualquer valor que satisfaça $\sigma(X) - \sigma_{max} < 0$, independentemente do quão negativo seja o termo $\sigma(X)$, como observamos na Eq. 2.18.

Com isso em mente, estudamos qualitativamente todos os tipos de interações possíveis de nosso modelo considerando um nível de estocasticidade baixíssimo ($\alpha = 100$) e valor máximo de ocupação celular de uma partícula ($\sigma_{max} = 1$). Mapeamos qualitativamente todos os possíveis tipos de interação dos agentes do sistema em contrafluxo ao considerarmos os fatores de interação dentro do intervalo: $-1 \geq \lambda_{XX}, \lambda_{XY} \geq 1$, onde $XX = AA, BB$ e $XY = AB, BA$.

Para este estudo, representamos os parâmetros estacionários do sistema em um mapa de cores no plano carteriano, onde cada valor das componentes de Λ pudesse ser representado pelo par coordenado $(\lambda_{XX}, \lambda_{XY})$. Implementamos nossas simulações da evolução de cada sistema até que este atingisse seu estado estacionário definido por

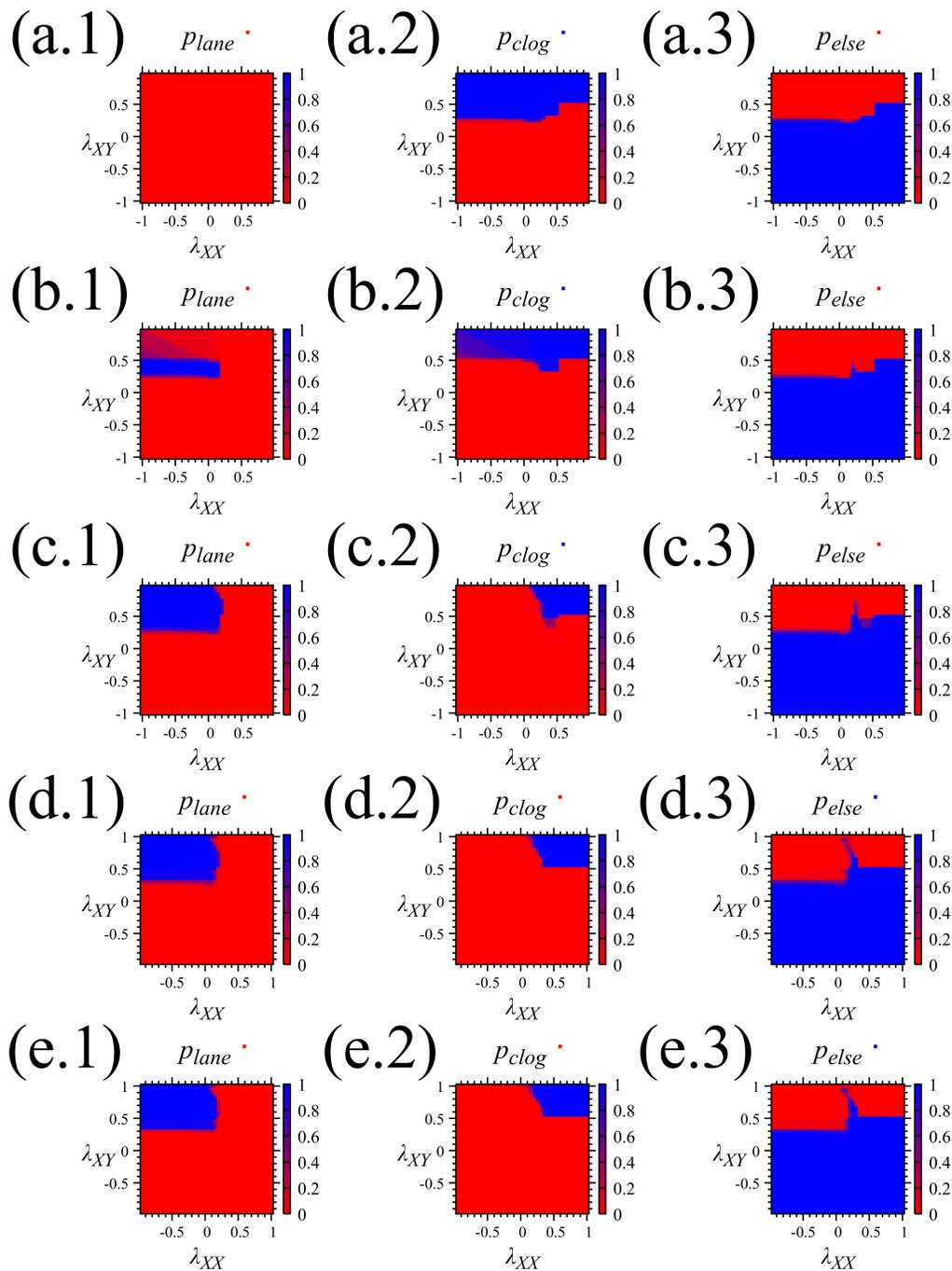


Figura 4.8: Mapa de cores nos mostram as probabilidades do sistema relaxar para um estado de auto-organização (p_{plane}), estado de travamento (p_{clog}) ou qualquer outro estado intermediário (p_{else}). Estudamos redes de comprimento $L_x = 128$, densidade média $\rho = 1$ e diferentes valores de largura $L_y = 1$ (gráficos (a.#)), $L_y = 2$ (gráficos (b.#)), $L_y = 4$ (gráficos (c.#)), $L_y = 8$ (gráficos (d.#)) e $L_y = 16$ (gráficos (e.#)).

nosso critério de parada com os parâmetros nos valores: $\epsilon = 10^{-6}$ e $\Delta t = 10^3$ MC steps. Realizamos um total de $N_{run} = 10^3$ amostras para cada par $(\lambda_{XX}, \lambda_{XY})$ dentro do intervalo $\lambda_{XX}, \lambda_{XY} \in [-1, 1]$. Estudamos redes de comprimento $L_x = 128$ e densidade média $\rho = 1$ para variadas larguras: $L_y = 1, L_y = 2, L_y = 4, L_y = 8$ e $L_y = 16$.

Na Fig. 4.8, mostramos em gradiente de cores no plano λ_{XX} versus λ_{XY} , as probabilidades do sistema atingir os estados estacionários de mobilidade com auto-organização (p_{lane}), imobilidade (p_{clog}) e quaisquer outros estados intermediários (p_{else}) em função dos fatores de interação λ_{XX} e λ_{XY} . Os gráficos (a.#), (b.#), (c.#), (d.#) e (e.#) referem-se aos sistemas de largura de $L_y = 1, L_y = 2, L_y = 4, L_y = 8$ e $L_y = 16$ respectivamente. Nos gráficos (a) da Fig. 4.8, podemos ver o comportamento estacionário do sistema unidimensional, onde $p_{lane} = 0$ (vermelho para qualquer $(\lambda_{XX}, \lambda_{XY})$) é um resultado trivial que mostramos por questão de completude, pois não faz sentido falarmos em estado de auto-organização das partículas na direção x , uma vez que todos os agentes estão vinculados a deslocar-se sobre a mesma faixa de células. No entanto, podemos ver no gráfico (a.2) da Fig. 4.8 que o sistema relaxa para o estado de imobilidade ($p_{clog=0}$ corresponde à região em azul) para todos os valores acima de $\lambda_{XY} \approx 0.3$ aproximadamente. Tal comportamento é esperado, pois a interação repulsiva ($\lambda_{XY} > 0$) com a espécie oposta atua como principal gatilho para que a rede venha a entupir. Entretanto, quando a interação de mesma espécie é $\lambda_{XX} > 0.5$, o sistema surpreendentemente apresenta uma maior permissividade de movimento e passa a se tornar imóvel apenas para $\lambda_{XY} \geq 0.5$, indicando que a interação de mesma espécie ajuda a aumentar a mobilidade do sistema até que o fator de interação com a espécie oposta seja $\lambda_{XY} < 0.5$. O gráfico (a.3) mostra que o sistema apresenta mobilidade, mas p_{else} é um parâmetro inconclusivo neste contexto em que o estado estacionário do sistema apresenta mobilidade, mas não apresenta o fenômeno de bimodalidade.

Para melhor compreender o comportamento do modelo generalizado em rede unidimensional mostramos na Fig. 4.9 os valores médios dos parâmetros (média sobre os valores estacionários das $N_{run} = 1000$ amostras) $\Phi_{x\infty}$, M_∞ e G_∞ nos gráficos (a), (b) e (c) respectivamente. Pelo gráfico (a) da Fig. 4.9, podemos observar o resultado trivial de $\Phi_{x\infty} = 0$ para a rede unidimensional. No entanto, o gráfico (b) da Fig. 4.9 nos mostra com mais clareza a região de relativa alta mobilidade do sistema, $M_\infty \approx 0.6$ (região triangular em cor violeta no quadrante superior direito) logo abaixo de $\lambda_{XY} = 0.5$ para $\lambda_{XX} \approx 0.5$. Podemos observar ainda que a mobilidade é praticamente plena ($M_\infty \approx 1$)

abaixo da referida região triangular para $\lambda_{XX} \geq 0.5$ aproximadamente. Por fim, mostramos no gráfico (c) da Fig. 4.9 o parâmetro de Gini estacionário médio, G_∞ , que nos permite identificar a forma da distribuição de partículas na rede para os estados estacionários não móveis. Podemos notar na região onde $\lambda_{XY} > 0.5$, que a distribuição de partículas no estado de entupimento da rede passa de um estado de maior uniformidade da distribuição das partículas ($G_\infty \approx 0.5$) para $0.5 < \lambda_{XX} < 1.0$, transitando gradativamente para um estado com formação de condensados ($G_\infty \approx 1$) a medida que λ_{XX} diminui. Podemos interpretar que a diminuição da interação intra-espécie permite que o sistema mantenha-se móvel durante a dinâmica até que ocorram a formação de condensados de grande densidade de partículas opostas para interromper a dinâmica.

Quando observamos redes de largura $L_y > 1$, o sistema começa a apresentar a possibilidade de formação de estados móveis auto-organizados ($p_{lane} = 1$) como podemos observar pelas regiões azuladas nos gráficos (b.1), (c.1), (d.1) e (e.1) da Fig. 4.8. Ao estudarmos rede com largura $L_y = 2$ (gráficos de letra (b)), podemos identificar o fenômeno de bimodalidade do estado estacionário como mostra a região do quadrante superior esquerdo dos gráficos (b.1), (b.2) e (b.3). Nesta região, temos probabilidades não nulas do sistema relaxar para os estados móveis auto-organizados e de entupimento ($p_{lane} \neq 0$ e $p_{clog} \neq 0$), ao mesmo tempo que qualquer estado intermediário não seja possível ($p_{else} = 0$). É importante notarmos que nosso estudo anterior no qual consideramos apenas interação de partículas de tipos diferentes ($\lambda_{XY} = 1$ e $\lambda_{XX} = 0$) é um caso particular do modelo generalizado e fica dentro da região, mas próximo da fronteira no qual a bimodalidade deixa de ocorrer. Ao longo de toda a região do quadrante superior

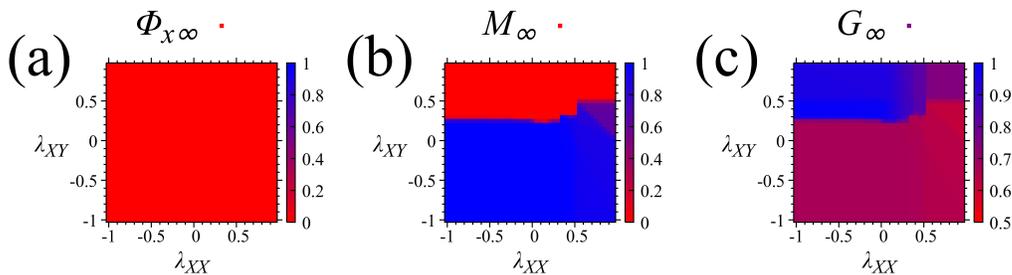


Figura 4.9: Valores estacionários médios do parâmetro de ordenamento na direção x (a), da mobilidade (b) e do coeficiente de Gini (c) em escala de cores como função dos fatores de interação λ_{XY} e λ_{XX} para um sistema de comprimento $L_x = 128$ e largura $L_y = 1$.

esquerdo dos gráficos (b) da Fig. 4.8, podemos perceber que o fenômeno de bimodalidade também ocorre quando temos variadas magnitudes das interações, de maneira que o podemos supor que tal fenômeno ocorra em sistemas que tenham como característica principal uma forte interação ($\lambda_{XY} > 0$) entre as espécies opostas e fraca interação dos entes de mesmo tipo ($\lambda_{XX} \approx 0$ ou até $\lambda_{XX} < 0$).

Para identificarmos com maior facilidade o caso que estudamos na seção anterior, podemos comparar os gráficos (b) e (c) da Fig. 4.8 correspondentes às larguras $L_y = 2$ e $L_y = 4$, respectivamente, com a Fig. 4.5. Na Fig. 4.5, havíamos mostrado que a densidade de crossover para uma rede de comprimento $L_x = 128$ e $L_y = 2$ era $\rho_c \approx 0.5$, enquanto para uma rede de largura $L_y = 4$ a densidade de crossover tinha valor $\rho_c \approx 1.0$. Isso significa a densidade em estudo na Fig. 4.8 é acima da densidade de crossover para um sistema de largura $L_y = 2$, portanto, a probabilidade de formação de auto-organização é basicamente nula, enquanto a probabilidade de entupimento é $p_{clog} \approx 1$, como podemos observar no ponto (0, 1) dos gráficos (b.1) e (c.1) da Fig. 4.8.

No caso de um sistema de largura $L_y = 4$, mostramos na Fig. 4.8 que ρ_c é aproximadamente igual à densidade aplicada no presente estudo ($\rho = 1.0$), entretanto a região de bimodalidade não é perceptível para sistemas dessa dimensão como podemos observar nos gráficos (c.1), (c.2) e (c.3) da Fig. 4.8. De fato, para sistemas com tais dimensões, a região onde ocorre o estado estacionário bimodal corresponde à curva que delinea a fronteira que divide as regiões onde $p_{lane} = 1.0$ (mostrado em azul no gráfico (c.1)) e a região onde $p_{clog} = 1.0$ (mostrado em azul no gráfico (c.2)) desde que $p_{else} = 0$ (condições que definem o fenômeno de bimodalidade). Inclusive, o sistema que estudamos anteriormente, que é representado pelo ponto (0, 1) no plano λ_{XY} versus λ_{XX} , é um ponto sobre a fronteira entre tais regiões, de tal maneira que podemos afirmar que $p_{lane} = 1/2$ e $p_{clog} = 1/2$ em todos os pontos sobre a fronteira de tais regiões desde que $p_{else} \approx 0$.

Por fim, iremos focar nossa atenção nos sistemas de largura $L_y = 8$ e $L_y = 16$, representados na Fig. 4.8 pelos gráficos (d.#) e (e.#) respectivamente. A primeira coisa que podemos observar é que a região de bimodalidade não existe mais, pois $p_{else} = 1$ (em azul nos gráficos (d.3) e (e.3)) em toda a região de fronteira entre as regiões de $p_{lane} = 1$ (em azul nos gráficos (d.1) e (e.1)) e $p_{clog} = 1$ (em azul nos gráficos (d.2) e (e.2)). Isso ocorre, pois $\rho = 1$ é muito menor que ρ_c para $L_y \geq 8$ como mostramos anteriormente na Fig. 4.5. É possível percebermos, no entanto, que na fronteira das

regiões de predominância do estado auto-organizado e do estado de entupimento, vai se criando uma espécie de menisco em que a probabilidade do estado de coexistência de fases passa a ser o estado mais provável.

Com o intuito de estudar em maior detalhes essas redes de maior largura, mostramos nas Figs. 4.10 e 4.11 os parâmetros estacionários médios $\Phi_{x\infty}$, M_∞ e G_∞ para as redes de largura $L_y = 8$ e $L_y = 16$ respectivamente. O primeiro aspecto que podemos notar

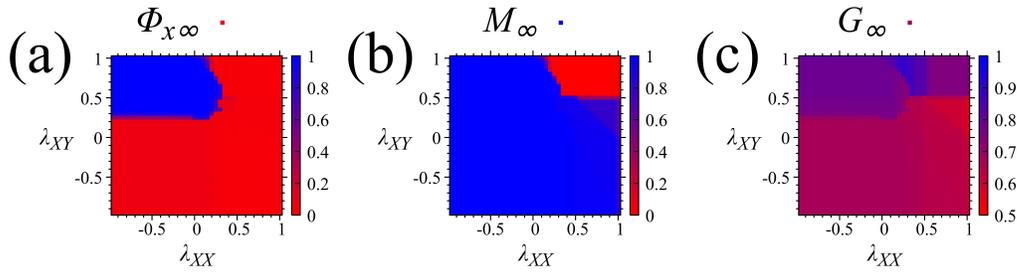


Figura 4.10: Valores estacionários médios do parâmetro de ordenamento na direção x (a), da mobilidade (b) e do coeficiente de Gini (c) em escala de cores como função dos fatores de interação λ_{XY} e λ_{XX} para um sistema de comprimento $L_x = 128$ e largura $L_y = 8$.

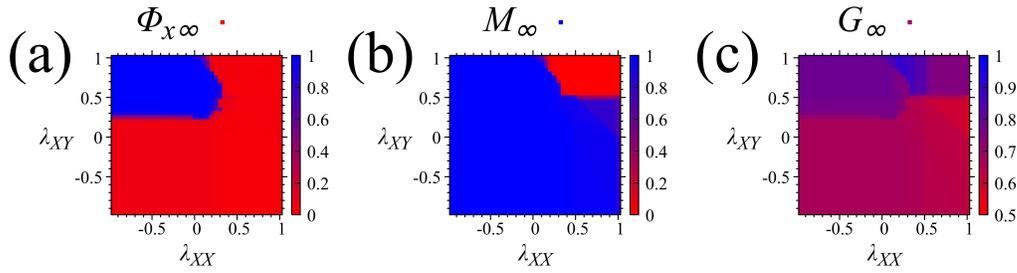


Figura 4.11: Valores estacionários médios do parâmetro de ordenamento na direção x (a), da mobilidade (b) e do coeficiente de Gini (c) em escala de cores como função dos fatores de interação λ_{XY} e λ_{XX} para um sistema de comprimento $L_x = 128$ e largura $L_y = 16$.

nas Figs. 4.10 e 4.11 é que os parâmetros médios $\Phi_{x\infty}$, M_∞ e G_∞ não apresentam diferenças significativas para ambos tamanhos de largura em relação aos fatores de interação λ . Este resultado corrobora com o estudo de largura da rede (ver Fig. 4.5) no qual mostramos que sistemas com largura a partir de $L_y = 8$ não mostram diferenças

em suas probabilidades de atingir os três estados estacionários possíveis em função da densidade.

De maneira geral, conseguimos delinear um amplo espectro de possibilidades que nosso modelo permitia para o fator de interação inclusive considerando assimetrias. Particularmente, alguns casos assimétricos podem ser futuramente explorados como o aparecimento do fenômeno de bimodalidade para valores $\lambda_{XY} > 0$ e $\lambda_{XX} < 0$ (região do quadrante superior esquerdo dos gráficos (b,#), por exemplo), apesar de esta região carecer de motivação física devido ao fator negativo de interação. De qualquer forma, conseguimos mostrar que as 4.8, 4.9, 4.10 e 4.11 descrevem qualitativamente todas as possibilidades de interação que nosso modelo permite.

Capítulo 5

Conclusões e perspectivas

Nesta tese de doutoramento, propusemos um modelo estocástico de partículas em contrafluxo numa rede toroidal baseado na distribuição de Fermi-Dirac. Nossa motivação foi descrever, a partir de nosso modelo, uma variedade de sistemas físicos de transporte caracterizados pelo contrafluxo como a dinâmica de pedestres ou até mesmo um sistema de colóides carregados influenciados por um campo elétrico externo. Com esse intuito, conseguimos reproduzir alguns conhecidos fenômenos de tais sistemas como a auto-organização em “lanes” das espécies e a formação de condensados.

Nossa proposta consistiu em definir a dinâmica das partículas na rede a partir de um conjunto de probabilidades de transição baseadas em funções com a forma da distribuição de Fermi-Dirac dependentes da ocupação das primeiras células vizinhas. Essa escolha se deu pela capacidade de funções com esse formato serem capazes de descrever qualitativamente a relação que a densidade local de partículas possui com a limitação física de ocupação de espaço (σ_{\max}). Neste sentido, a principal característica do modelo é a capacidade de controlar o grau de estocasticidade da dinâmica e a correlação das partículas através de um único parâmetro (α). Pois é neste importante parâmetro que reside a resposta para nossa pergunta de como a aleatoriedade do meio se relaciona com o tamanho das partículas para gerar os conhecidos fenômenos de auto-organização e entupimento. Mostramos que ao diminuirmos o grau de aleatoriedade da dinâmica, o movimento das partículas dependerá fortemente da relação da densidade local de ocupação e σ_{\max} , sendo que σ_{\max} tem relação inversa com o tamanho das partículas.

Ao estudarmos o caso mais simples de uma rede unidimensional, mostramos que a dinâmica do modelo pode ser representada por um par de equações acopladas (ver Eqs. 2.21 e 2.22) em uma aproximação de campo médio cujas soluções analíticas ainda

merecem um estudo futuro mais detalhado. Exploramos a influência dos efeitos do tamanho do sistema (L_x) na evolução da dinâmica, onde já pudemos obter algumas pistas de que havia uma transição de fase ocorrendo na estocasticidade (α). A partir dos resultados da evolução da dinâmica, conseguimos estabelecer um critério de parada para a série temporal da mobilidade do sistema, que se mantém em um valor médio estabilizado após um tempo suficientemente grande.

A partir da definição do critério de parada das séries temporais, realizamos um completo estudo da dependência da mobilidade estacionária do sistema em função de α , onde estabelecemos uma boa comparação entre a atualização síncrona e assíncrona do estado das partículas dentro do passo de MC. Mostramos a influência dos parâmetros extensivos do sistema (L_x , ρ e o) na mobilidade estacionária, onde argumentamos que a atualização síncrona seria mais apropriada para descrevermos o modelo, pois as discrepâncias entre os resultados de ambas as modalidades de implementação da dinâmica eram causadas por idiosincrasias próprias da atualização síncrona.

Ainda no caso unidimensional, estudamos a transição de fase abrupta na estocasticidade (α_c) que faz o sistema passar de um regime estacionário móvel onde as partículas não interagem para um regime de entupimento e formação de condensados. Para melhor caracterizar o fenômeno de formação de condensados, fizemos uso de uma interessante quantidade conhecida, o famoso coeficiente de Gini [32], cujo contexto de criação difere completamente do contexto desse trabalho. A formação de condensados é um fenômeno característico de modelos de transporte como, por exemplo, pode ser observado pelos autores Majumdar, Evans e Zia em um belo trabalho [14] de transporte de massa. Em outro estudo igualmente interessante, Helbing, Farkas e Vicsek [51] apresentam um modelo de partículas em contrafluxo no qual ocorre uma transição de fase fluida para uma fase cristalizada decorrente do aumento das flutuações do sistema, causa aparentemente similar a nossa para a formação de condensados.

Quando estudamos nosso modelo na rede bidimensional, partimos de um caso mais simples onde apenas partículas de espécies diferentes interagissem. Esse caso específico de interação mostrou-se peculiar, pois dele não apenas conseguimos mostrar o surgimento do fenômeno de auto-organização em faixas de fluxo de mesmo sentido, como também vimos surgir o fenômeno de bimodalidade, onde o sistema apresenta tanto a possibilidade de relaxar para um estado imóvel quanto para um estado móvel auto-organizado. Explicamos que o modelo apresenta a possibilidade de ocorrer um estado

estacionário intermediário, onde ambas fases móveis e imóveis coexistem. No entanto, mostramos que a ocorrência deste estado híbrido tinha probabilidade quase nula em todos os resultados que obtivemos e que devemos realizar um futuro estudo específico a respeito das condições necessárias para o surgimento desse estado. Sendo assim, exploramos o fenômeno de bimodalidade a partir das probabilidades de ocorrência de cada um dos três estados estacionários possíveis, uma vez que estudar o comportamento médio amostral dos observáveis estacionários como mobilidade, parâmetro de ordenamento e coeficiente de Gini não faziam sentido nesse contexto. A partir das probabilidades de ocorrência dos possíveis estados estacionários, realizamos um estudo da densidade de partículas para diferentes dimensões do sistema. Neste estudo, mostramos que a bimodalidade apresentava um “crossover” em termos da densidade do sistema, onde o estado que se apresenta ser mais provável é o estado de fase móvel com auto-organização quando a rede está com baixa densidade de partículas, mas que acaba dando lugar ao estado de fase imóvel em que a rede fica trancada devida a uma densidade suficientemente alta. Neste ponto de “troca”, ou seja, na densidade onde ambos estados antagônicos são equiprováveis, definimos a densidade de “crossover” (ρ_c).

Finalmente, exploramos qualitativamente o modelo generalizado, onde observamos os efeitos de utilizar diferentes valores dos fatores de interações das partículas. Desta forma, conseguimos mapear todos os resultados anteriores e mostrar que o fenômeno de bimodalidade aparece para outros valores de interação e não apenas para o caso de interação exclusiva de espécies opostas. Estamos atualmente escrevendo um artigo a respeito do modelo de interação generalizada no qual exploramos o fenômeno de bimodalidade resultante dos casos de interação assimétrica. Acreditamos ter conseguido explorar de maneira completa as principais características do modelo proposto nesta tese cujos resultados até então foram publicados em três artigos nas revistas *Physical Review E* [47, 48] e *Journal of Statistical Mechanics* [49]. Ainda estamos em fase de redação do artigo referente ao estudo do mapeamento das interações que fecharia o modelo.

Referências Bibliográficas

- [1] Roberto da Silva, Lucas Brusamarello, and Gilson I. Wirth. Statistical fluctuations for the noise current from random telegraph signals in semiconductor devices: Monte carlo computer simulations and best fits. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 389(14):2687 – 2699, 2010.
- [2] Stefan Machlup. Noise in semiconductors: Spectrum of a two-parameter random signal. *Journal of Applied Physics*, 25(3):341–343, 1954.
- [3] M.J. Kirton and M.J. Uren. Noise in solid-state microstructures: A new perspective on individual defects, interface states and low-frequency (1/f) noise. *Advances in Physics*, 38(4):367–468, 1989.
- [4] Roberto Da Silva, Luis C. Lamb, and Gilson Inacio Wirth. Collective poisson process with periodic rates: applications in physics from micro-to nanodevices. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 369(1935):307–321, 2010.
- [5] Roberto da Silva and Gilson I Wirth. Logarithmic behavior of the degradation dynamics of metal–oxide–semiconductor devices. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2010(04):P04025, 2010.
- [6] Roberto da Silva, Gilson I Wirth, and Lucas Brusamarello. A novel and precise time domain description of mosfet low frequency noise due to random telegraph signals. *International Journal of Modern Physics B*, 24(30):5885–5894, 2010.
- [7] Roberto da Silva, Gilson Inacio Wirth, and Lucas Brusamarello. An appropriate model for the noise power spectrum produced by traps at the si–sio₂ interface: a study of the influence of a time-dependent fermi level. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2008(10):P10015, 2008.

- [8] Roberto da Silva, Luis C. Lamb, Eder C. Lima, and Jairton Dupont. A simple combinatorial method to describe particle retention time in random media with applications in chromatography. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 391(1–2):1 – 7, 2012.
- [9] J. Calvin Giddings and Henry Byring. A molecular dynamic theory of chromatography. *The Journal of Physical Chemistry*, 59(5):416–421, 1955.
- [10] J. Calvin Giddings. Chromatography: Introduction. *Chemical Reviews*, 89(2):277–277, 1989.
- [11] Ronald Dickman, Tânia Tomé, and Máio J. de Oliveira. Sandpiles with height restrictions. *Physical Review E*, 66:016111, 2002.
- [12] Ronald Dickman. Mean-field theory of the driven diffusive lattice gas. *Physical Review A*, 38:2588, 1988.
- [13] Derek Frydel and Yan Levin. Thermodynamic collapse in a lattice-gas model for a two-component system of penetrable particles. *Phys. Rev. E*, 102:032101, Sep 2020.
- [14] Satya N. Majumdar, M. R. Evans, and R. K. P. Zia. Nature of the condensate in mass transport models. *Physical Review Letters*, 94:180601, 2005.
- [15] C. L. N. Oliveira, A. P. Vieira, D. Helbing, J. S. Andrade, and H. J. Herrmann. Keep-left behavior induced by asymmetrically profiled walls. *Phys. Rev. X*, 6:011003, Jan 2016.
- [16] Jesse L. Silverberg, Matthew Bierbaum, James P. Sethna, and Itai Cohen. Collective motion of humans in mosh and circle pits at heavy metal concerts. *Phys. Rev. Lett.*, 110:228701, May 2013.
- [17] Teun Vissers, Adam Wysocki, Martin Rex, Hartmut Lowen, C. Patrick Royall, Arnout Imhof, and Alfons van Blaaderen. Lane formation in driven mixtures of oppositely charged colloids. *Soft Matter*, 7:2352–2356, 2011.
- [18] Kai Nagel and Michael Schreckenberg. A cellular automaton model for freeway traffic. *J. Phys. I France*, 2(12):2221–2229, 1992.

-
- [19] Ming Li, Zhong-Jun Ding, Rui Jiang, Mao-Bin Hu, and Bing-Hong Wang. Traffic flow in a manhattan-like urban system. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2011(12):P12001, dec 2011.
- [20] Andrea Portz and Armin Seyfried. Modeling stop-and-go waves in pedestrian dynamics. In Roman Wyrzykowski, Jack Dongarra, Konrad Karczewski, and Jerzy Wasniewski, editors, *Parallel Processing and Applied Mathematics*, pages 561–568, Berlin, Heidelberg, 2010. Springer Berlin Heidelberg.
- [21] Dirk Helbing, Illés Farkas, and Tamás Vicsek. Simulating dynamical features of escape panic. *Nature*, 407:487–490, 2000.
- [22] Dirk Helbing, Anders Johansson, and Habib Zein Al-Abideen. Dynamics of crowd disasters: An empirical study. *Phys. Rev. E*, 75:046109, Apr 2007.
- [23] Dirk Helbing and Péter Molnár. Social force model for pedestrian dynamics. *Phys. Rev. E*, 51:4282–4286, May 1995.
- [24] Teun Vissers, Alfons van Blaaderen, and Arnout Imhof. Band formation in mixtures of oppositely charged colloids driven by an ac electric field. *Phys. Rev. Lett.*, 106:228303, Jun 2011.
- [25] Tamás Vicsek, András Czirók, Eshel Ben-Jacob, Inon Cohen, and Ofer Shochet. Novel type of phase transition in a system of self-driven particles. *Phys. Rev. Lett.*, 75:1226–1229, Aug 1995.
- [26] Fernando Alonso-Marroquín, Jonathan Busch, Coraline Chiew, Celia Lozano, and Álvaro Ramírez-Gómez. Simulation of counterflow pedestrian dynamics using spheropolygons. *Physical Review E*, 90:063305, 2014.
- [27] Roberto da Silva, Agenor Hentz, and Alexandre Alves. Stochastic model of self-driven two-species objects inspired by particular aspects of a pedestrian dynamics. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 437:139 – 148, 2015.
- [28] Ansgar Kirchner, Katsuhiko Nishinari, and Andreas Schadschneider. Friction effects and clogging in a cellular automaton model for pedestrian dynamics. *Physical Review E*, 67:056122, 2003.

- [29] Juan Wei, Hong Zhang, Yangyong Guo, and Musong Gu. Experiment of bi-direction pedestrian flow with three-dimensional cellular automata. *Physics Letters A*, 379:1081, 2015.
- [30] Eduardo Velasco Stock, Roberto da Silva, and H. A. Fernandes. Statistics, distillation, and ordering emergence in a two-dimensional stochastic model of particles in counterflowing streams. *Physical Review E*, 96:012155, 2017.
- [31] Dion J. Koeze and Brian P. Tighe. Sticky matters: Jamming and rigid cluster statistics with attractive particle interactions. *Physical Review Letters*, 121:188002, 2018.
- [32] Corrado Gini. Concentration and dependency ratios (in italian). *English Translation in Rivista di Politica Economica (1997)*, 87:769–789, 1909.
- [33] S.R.A. Salinas. *Introdução a Física Estatística Vol. 09*. EDUSP, 1997.
- [34] A I Curatolo, M R Evans, Y Kafri, and J Tailleur. Multilane driven diffusive systems. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 49(9):095601, jan 2016.
- [35] B. Schmittmann, K. Hwang, and R. K. P. Zia. Onset of spatial structures in biased diffusion of two species. *Europhysics Letters*, 19:19–25, 1992.
- [36] C. Scherer. *Métodos Computacionais da Física*. Editora Livraria da Física, 2005.
- [37] W. Feller. *An introduction to probability theory and its applications*. Wiley series in probability and mathematical statistics: Probability and mathematical statistics. Wiley, 1971.
- [38] William H. Press, Saul a. Teukolsky, William T. Vetterling, and Brian P. Flannery. *Numerical Recipes in Fortran 77: the Art of Scientific Computing. Second Edition*, volume 1. Cambridge University Press, 1996.
- [39] Sheldon Katz, Joel L. Lebowitz, and H. Spohn. Phase transitions in stationary nonequilibrium states of model lattice systems. *Physical Review B*, 28:1655, 1983.
- [40] David Landau and Kurt Binder. *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. Cambridge University Press, New York, NY, USA, 2005.

- [41] M. E. J. Newman and G. T. Barkema. *Monte Carlo methods in statistical physics*. Clarendon Press, Oxford, 1999.
- [42] Marcelo Martins de Oliveira, Renato Vieira Dos Santos, and Ronald Dickman. Symbiotic two-species contact process. *Physical Review E*, 86:011121, 2012.
- [43] Corrado Gini. Measurement of inequality of incomes. *The Economic Journal*, 31:124, 1921.
- [44] Corrado Gini. *Variabilità e mutabilità* reprinted in *Memorie di metodologica statistica*. Rome: Libreria Eredi Virgilio Veschi (1955), 1912.
- [45] Roberto da Silva, Gustavo A. Kellermann, and Luis C. Lamb. Statistical fluctuations in population bargaining in the ultimatum game: Static and evolutionary aspects. *Journal of Theoretical Biology*, 258:208–218, 2009.
- [46] Roberto da Silva, Pablo Valverde, and Luis C. Lamb. A reactive-darwinian model for the ultimatum game: On the dominance of moderation in high diffusion. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 80:104956, 2020.
- [47] Roberto da Silva and Eduardo V. Stock. Mobile-to-clogging transition in a fermi-like model of counterflowing particles. *Phys. Rev. E*, 99:042148, Apr 2019.
- [48] Eduardo Velasco Stock and Roberto da Silva. Coexistence and crossover phenomena in a fermi-like model of particles in counterflowing streams. *Phys. Rev. E*, 102:022139, Aug 2020.
- [49] Eduardo V Stock, Roberto da Silva, and Carlo R da Cunha. Numerical study of condensation in a fermi-like model of counterflowing particles via gini coefficient. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2019(8):083208, aug 2019.
- [50] Ronald Dickman. First- and second-order phase transitions in a driven lattice gas with nearest-neighbor exclusion. *Physical Review E*, 64:016124, 2001.
- [51] Dirk Helbing, Illés J. Farkas, and Tamás Vicsek. Freezing by heating in a driven mesoscopic system. *Physical Review Letters*, 84:1240, 2000.

Artigos

A seguir apresentamos as capas dos três artigos desenvolvidos sobre os resultados deste doutoramento até o presente momento, exceto pelo capítulo “Interações assimétricas”. Os três artigos foram publicados na mesma ordem que os resultados foram apresentados nesta tese. O primeiro artigo foi publicado na *Physical Review E* [47], o segundo fora publicado no *Journal of Statistical Mechanics* [49] e o último também foi publicado na *Physical Review E* [48].

Mobile-to-clogging transition in a Fermi-like model of counterflowing particles

Roberto da Silva and Eduardo V. Stock

Institute of Physics, Federal University of Rio Grande do Sul, Porto Alegre-RS, 91501-970, Brazil

(Received 1 September 2018; published 29 April 2019)

In this paper we propose a generalized model for the motion of a two-species self-driven objects ranging from a scenario of a completely random environment of particles of negligible excluded volume to a more deterministic regime of rigid objects in an environment. Each cell of the system has a maximum occupation level called σ_{\max} . Both species move in opposite directions. The probability of any given particle to move to a neighboring cell depends on the occupation of this cell according to a Fermi-Dirac-like distribution, considering a parameter α that controls the system randomness. We show that for a certain $\alpha = \alpha_c$ the system abruptly transits from a mobile scenario to a clogged state, which is characterized by condensates. We numerically describe the details of this transition by coupled partial differential equations (PDE) and Monte Carlo (MC) simulations that are in good agreement.

DOI: [10.1103/PhysRevE.99.042148](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.99.042148)**I. INTRODUCTION**

The theoretical motion of particles in inhomogeneous media with local impurities can be observed in many contexts in Physics and in a large number of applications such as capture and decapture of electrons in micro, nano, and meso devices [1–3], the erratic, but also directed, motion of molecules in chromatographic columns [4], and many others. However, other situations that consider particles interaction can be explored, and we will particularly focus on the one that takes into account two different species of particles moving against each other.

The patterns arising from counterflowing stream of particles can be studied considering a wide range of apparently very different systems such as pedestrian dynamics [5], and charged colloids motion [6,7], which suggest more similarities between the micro and macro systems that we can anticipate in this kind of modeling. For this reason the straight formation of lanes, distillation, originated from the complex emergent process of self-propelled and/or field-directed objects and particles have raised a lot of interesting questions in the context of statistical mechanics and the physics of stochastic process modelled by Monte Carlo (MC) simulations or partial differential equations (PDE) [8,9].

Similarly, more fundamental situations related to systems that collapse due to clogging effects, related to the typical phenomena of concentration of objects, or their condensation patterns, under counterflowing streams, lead to a fundamental question: How the environmental randomness compares to the size of objects for the occurrence of clogging and jamming phenomena? To understand this interesting problem that relates the micro with the macro scales, in this work we consider a general modeling of streams of counterflowing objects interpolating two very distinct situations:

(1) Situation (i): Objects of negligible sizes move in random environment and their excluded volume is not a relevant parameter. In this case the system is entirely random: the particle performs a biased random walk in which it makes a step to the next cell with probability $1/2$ or remains at

the original cell with the same probability. It works as if the randomness of the motion is due to the resistance offered by the environment and not from the interaction among objects. This randomness is then not affected by the particle size.

(2) Situation (ii): The second extreme situation considers hard objects where the excluded volume plays a role. It works as if rigid bodies interact only with each other. In this situation the system is essentially deterministic and one object does not move to a cell that does not have enough space to allocate it.

In this work we explore the transition between these two distinct scenarios, by changing an external parameter denoted by α . We are able to map continuously from situation (i) ($\alpha = 0$) to situation (ii) ($\alpha \rightarrow \infty$) and the interesting point is how it is performed.

For that, we propose a simple model of two species of objects, denoted by A and B , moving in opposite directions in a ring divided by cells, which have the same maximum occupation denoted by σ_{\max} that depends on the stochasticity parameter α . To describe α , which controls in which degree the maximal occupation σ_{\max} can be violated, we use an adapted Fermi-Dirac distribution that governs the particle transition between the cells.

It is worth to emphasize that our model can represent a lot of different systems, among them, for example, oppositely charged colloids in counterflowing streams. In this context, the application of a strong electric field along the longitudinal direction of the ring, would make species A drift, let us say, in a counterclockwise fashion while species B would drift in the opposite direction or we can picture objects entering and leaving both extremities of a thin tape (tube) at a constant rate (periodic boundary conditions), or as a last mention, the model proposed can also mimic typical situations of pedestrians walking in subway corridors under some peculiar conditions.

With our adapted Fermi-Dirac distribution we are able to describe the complex dynamics of particles clogging in counterflowing that here is studied in both: PDE and MC simulations. Our results indicate the existence of a transition from a mobile phase (fluid) to clogged (condensate) phase,

PAPER: Classical statistical mechanics, equilibrium and non-equilibrium

Numerical study of condensation in a Fermi-like model of counterflowing particles via Gini coefficient

Eduardo V Stock, Roberto da Silva and Carlo R da Cunha

Institute of Physics, Federal University of Rio Grande do Sul, Av. Bento Gonçalves, 9500, Porto Alegre, 91501-970, RS, Brazil
E-mail: rdasilva@if.ufrgs.br

Received 3 May 2019

Accepted for publication 13 June 2019

Published 20 August 2019

Online at stacks.iop.org/JSTAT/2019/083208

<https://doi.org/10.1088/1742-5468/ab333d>



CrossMark

Abstract. The collective motion of self-driven particles shows interesting novel phenomena such as swarming and the emergence of patterns. We have recently proposed a model for counterflowing particles that captures this idea and exhibits clogging transitions. This model is based on a generalization of the Fermi–Dirac statistics wherein the maximal occupation of a cell is used. Here we present a detailed study comparing synchronous and asynchronous stochastic dynamics within this model. We show that an asynchronous updating scheme supports the mobile-clogging transition and eliminates some mobility anomalies that are present in synchronous Monte Carlo simulations. Moreover, we show that this transition is dependent upon its initial conditions. Although the Gini coefficient was originally used to model wealth inequalities, we show that it is also efficient for studying the mobile-clogging transition. Finally, we compare our stochastic simulation with direct numerical integration of partial differential equations used to describe this model.

Keywords: stochastic particle dynamics, diffusion in random media, transport properties, colloids, bio-colloids, nano-colloids

Coexistence and crossover phenomena in a Fermi-like model of particles in counterflowing streamsEduardo Velasco Stock  and Roberto da Silva *Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, UFRGS, Porto Alegre-RS, 91501-970, Brazil* (Received 28 February 2020; revised 19 June 2020; accepted 4 August 2020; published 26 August 2020)

In this work, we propose a two-dimensional extension of a previously defined one-dimensional version of a model of particles in counterflowing streams, which considers an adapted Fermi-Dirac distribution to describe the transition probabilities. In this modified and extended version of the model, we consider that only particles of different species can interact, and they hop through the cells of a two-dimensional rectangular lattice with probabilities taking into account diffusive and scattering aspects. We show that for a sufficiently low level of randomness ($\alpha \geq 10$), the system can relax to a mobile self-organized steady state of counterflow (lane formation) or to an immobile state (clogging) if the system has an average density near a certain crossover value (ρ_c). We also show that in the case of imbalance between the species, we can simultaneously have three different situations for the same density value set: (i) an immobile phase, (ii) a mobile pattern organized by lanes, and (iii) a profile with mobility but without lane formation, which essentially is the coexistence of situations (i) and (ii). All of our results were obtained by performing Monte Carlo simulations.

DOI: [10.1103/PhysRevE.102.022139](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.102.022139)**I. INTRODUCTION**

The statistical mechanics of self-driven diffusive systems has great importance in the context of nonequilibrium phenomena [1]. In particular, counterflowing streams of particles [2–6] can lead to interesting patterns, such as those presented by studies with charged colloids [7–11], for example. Exactly as pedestrians organize their motion to make that system flow [12,13], particles without a “natural intelligence,” self-propelled or simply oriented by a field, sometimes can organize their motion by lanes (see, for example, Refs. [14,15,16]). However, exclusion effects seem to bring clogging/jamming [17] phenomena [18,19], although the formation of condensates is not mandatorily observed only in counterflowing systems [20].

Recently, we have developed a model with exclusion based on Fermi-Dirac distribution [18] from an extension of a simple model without exclusion previously defined in [3], which was loosely based on the concept of clannish random walks developed by Montroll and West [21]. The easiness and coverage of this extended model is related to the manipulation of a single parameter that can model systems going from hard-body systems with exclusion up to systems that are completely random and without exclusion effects. We have previously shown that such systems have an interesting transition from a clogging phase to a mobile phase, which we have described with many order parameters such as mobility, the Gini coefficient, etc., over different situations [19].

The extension of this Fermi model for the counterflowing streams of particles in two dimensions has not yet been studied, and it deserves our attention. It is known that models in counterflowing system of particles in two dimensions present interesting lane patterns. For example, a lattice model for oppositely driven binary particles with purely repulsive

interactions was investigated on a square lattice presenting such an effect [22]. On the other hand, two-dimensional directed random walks in counterflow can also present such phenomena [5].

In this paper, we propose a two-dimensional version of the Fermi model to describe the counterflowing streams of particles on a lattice. We show that the system can present metastable events between a clogging and a lane phase, which, to the best of our knowledge, was never studied in systems with counterflowing streams of particles. Thus in this paper, we qualitatively and quantitatively explore this phenomenon in detail.

Our paper is organized as follows: In the next section, we present one of the possible formulations (the more appropriate one in our opinion) of the modeling in two dimensions. We show that renormalization is required for $d = 2$, but that naturally recovers $d = 1$ previously studied by us in our first contributions about this topic [18,19]. After that, we present our results in Sec. III. Finally, a few conclusions and summaries are presented in Sec. IV.

II. THE MODEL IN TWO DIMENSIONS

We start this section by defining our scenario: a rectangular system of $V = L_x L_y$ cells with periodic boundary conditions (toroidal lattice) where N particles of two species, namely A and B , can move. Each cell has a maximum occupation level denoted by σ_{\max} . Our particles are able to hop only to their neighboring cells where particles of species A tend to move to the $+x$ direction (along the toroid) while particles of species B tend to move to the $-x$ direction, exactly like the effect of an electric field longitudinally applied, considering that particles of species A are oppositely charged to particles of species B . In our model, particles only interact with particles