

Projeto de Iniciação Científica:

Estudo de Transições de Fase em Sistemas Físicos e Biológicos

Aluno: Felipe da Cruz Rodrigues
Orientador: Prof. Fabiano Lemes Ribeiro

July 2, 2012

Abstract

Nesse projeto de Iniciação Científica, propomos o estudo de transições de fase em diferentes sistemas, tais como sistemas físicos, biológicos, entre outros. Esse estudo deve ser realizado a partir de modelos teóricos e de simulações computacionais com autômatos celulares. Gostaríamos, por meio desse estudo, de identificar características universais presentes nessas transições.

1 Introdução

Uma transição de fase consiste na mudança brusca de uma característica macroscópica de um dado sistema como consequência da variação de um certo parâmetro de controle. Por exemplo, a densidade (característica macroscópica) da água aumenta bruscamente quando sua temperatura (parâmetro de controle) ultrapassa 100°C (no nível do mar). Nesse caso, a água sofre uma transição de uma fase líquida (maior densidade) para uma fase gasosa (menor densidade).

A grande motivação nesse estudo consiste no fato que essas transições de fase da água acontecem de forma análoga ao que acontece em transições de fase em sistemas completamente diferentes. Por exemplo, transições de fases em sistemas magnéticos, de uma fase ferromagnética para uma fase paramagnética frente a mudança de temperatura [8]. Ou mesmo transições de fase em modelos computacionais de propagação de doença, onde pode-se observar transições de uma fase com eliminação de indivíduos infectados para outra fase de disseminação da doença, de acordo com a taxa de infecção (parâmetro de controle) [3]. Dessa forma, embora sistemas magnéticos, sistemas epidemiológicos, densidade da água, entre outros, possuam natureza completamente distintas, o mecanismo matemático que rege as transições de fase desses sistemas se apresenta de forma análoga. Esse fato nos leva à investigação de aspectos universais presentes nas transições.

2 Cenários de Estudo

Durante o primeiro ano da Iniciação científica do estudante Felipe, foi realizado o estudo de transições de fase restrito ao contexto da dinâmica epidemiológica. Pretende-se dar continuidade a esse trabalho, estendendo o estudo a transições em outros sistemas físicos e biológicos. Como, por exemplo, os cenários que serão discutidos nessa seção.

Modelo de Van der Waals de um Gás Real

Van der Waals foi o primeiro pesquisador a obter uma descrição matemática do comportamento macroscópico de um gás real. A partir do modelo proposto por ele, foi possível descrever a transição

de fase de fluidos, fato que não era possível no chamado modelo de *gás ideal* [1].

No modelo do gás ideal, considera-se (por simplificação) um gás diluído, de modo que as partículas constituintes nunca se chocam umas com as outras. Embora esse modelo simplificado seja útil para a descrição de certas propriedades dos gases, ele não é capaz de prever transições de fase (líquido-gás ou sólido-líquido) de fluidos.

Em 1873 Van der Waals propôs seu modelo, que leva em conta as colisões entre as partículas. A sua proposta foi uma primeira investida em direção a uma descrição menos simplificada de um gás. Com esse modelo ele chega na sua famosa equação e consegue descrever as transições de fase de fluidos. O estudo do modelo de Van der Waals será importante para o estudante adquirir uma familiarização com as ferramentas matemáticas e noções de modelagem matemática.

Modelo de Ising

É bem conhecido que um material constituído de ferro apresenta uma magnetização permanente mesmo sem a presença de qualquer campo magnético externo. Verifica-se também que essa magnetização “espontânea”, i.e. emergente das próprias interações internas dos átomos constituintes, desaparece quando o material é aquecido à temperaturas maiores que um certo valor característico (temperatura crítica). Usando o vocabulário da mecânica estatística [7], diz-se que o material se encontra numa fase termodinâmica *ordenada* quando em baixas temperaturas, ou numa fase *desordenada*, quando em altas temperaturas. Ordenada pois, neste caso, os átomos se encontram (na grande maioria) em um mesmo estado magnético; e desordenada pois os átomos estão homogeneamente distribuídos em todos os estados acessíveis.

Um modelo matemático simples (mas não trivial) que consegue prescrever tal fenômeno é o chamado *Modelo de Ising* [7, 9]. Essencialmente, este modelo considera que as interações entre os átomos são de curto alcance, i.e. cada átomo interage apenas com seus vizinhos mais próximos.

Nesse trabalho de Iniciação Científica, gostaríamos de implementar computacionalmente o modelo de Ising, usando, para isso, o *método de Monte Carlo* e o *algoritmo de Metrópolis* [10]. Através dessa implementação poderemos verificar o comportamento do sistema frente a variações da temperatura, e estudar aspectos universais da transição de fase.

Modelos de Percolação

Outro contexto em que observa-se transições de fases são os modelos de percolação. Modelos de percolação foram introduzidos na década de 50 por Broadbent e Hammersley [12]. Este tipo de modelo é usado para descrever a dinâmica de um fluido em um meio poroso. Usando um exemplo dado pelos próprios autores, considere uma molécula de gás (fluido) que pode ou não ser absorvida na superfície de um sólido poroso (meio). Caso a molécula esteja sobre um poro suficientemente grande, a molécula é absorvida pelo meio. Se p é a probabilidade de que o poro seja suficientemente grande para a absorção da molécula, pode-se mostrar que existe um certo valor crítico p_c abaixo do qual não há absorção do fluido pelo meio, e acima do qual há absorção. Nesse último caso, diz-se que o fluido *percolou* o meio poroso.

De modo similar, podemos pensar na percolação de uma doença em uma população. Considere agora que p seja a probabilidade de que uma doença infecciosa seja transmitida de um indivíduo para outro dentro de uma população. Caso p seja menor que o valor crítico p_c , apenas uma pequena quantidade de indivíduos será contaminada e a doença desaparece espontaneamente da população. Por outro lado, se $p > p_c$, a doença espalha-se pela população. Nesse último caso, diz-se que a doença *percolou* a população.

Sistemas como esses descritos nos parágrafos anteriores apresentam transições de fase no ponto crítico p_c . Podemos dizer que há duas fases acessíveis a esses sistemas. A primeira, quando $p < p_c$, que caracteriza a situação em que o fluido não é absorvido pelo meio ou que a doença infecciosa é dissipada espontaneamente. A segunda, caracteriza uma fase de percolação.

Nesse trabalho de iniciação científica, também será implementado modelos de percolação via autômatos celulares. Essa implementação nos permitirá analisar, assim como no modelo de Ising, aspectos universais das transições de fases.

3 Metodologia

A abordagem metodológica que será usada nesse trabalho de iniciação científica consiste na modelagem computacional via autômatos celulares. Os autômatos celulares fazem parte de uma classe de modelos computacionais conhecidos por *Modelos Baseados em agentes* [2, 6]. Esses modelos simulam sistemas populacionais, representando cada membro da população por agentes/indivíduos que possuem características próprias. O objetivo desse tipo de modelagem é tornar mais realista as simulações de populações naturais.

Com essa implementação computacional, o estudante terá contato com várias técnicas que permitirão atacar problemas nas mais diversas áreas da simulação computacional. Entre essas técnicas podemos citar o método de Monte Carlo e o algoritmo de Metrópolis[10], entre outras técnicas da física computacional[11] e da Mecânica Estatística [7, 9].

4 Plano de Trabalho de 1 ano

- Estudo da literatura (livros textos e periódicos): Modelos matemáticos e computacionais de autômatos celulares; mecânica estatística das transições de fase - 3 meses;
- Estudo do Gás de Van der Waals- 1 mês;
- Estudo e Implementação do Método de Monte Carlo e Algoritmo de Metrópolis - 1 mês;
- Estudo e implementação computacional do modelo de Ising via método de Monte Carlo e algoritmo de Metrópolis - 2 meses;
- Estudo de Modelos de transição de fase em sistemas Epidemiológicos - 2 meses;
- Implementação e estudo do Modelo de Percolação via algoritmo de Monte Carlo - 2 meses;
- Redação do relatório de atividades - 1 mês;

References

- [1] M. Nussenzveig. *Curso de Física Básica 2*. Editora Edgard Blucher Ltda .
- [2] N. Boccara. *Modeling Complex Systems*. Springer-Verlag New York (2004).
- [3] Tânia Tomé and Mário J. de Oliveira. *Stationary distribution of finite-size systems with absorbing states*. PHYSICAL REVIEW E 72, 026130 (2005).
- [4] Murray, J.D.. *Mathematical Biology: An Introduction*. 3rd edition, Springer Verlag, New York (2002).
- [5] G. Bendoricchio and S.E. Jorgensen. *Fundamentals of Ecological Modelling*. Elsevier Science; 3 edition (August 28, 2001).
- [6] T. Tomé, M. de Oliveira. *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade*. Edusp, Editora da Universidade de São Paulo (2001).
- [7] S. Salinas. *Introdução à Física Estatística*. Edusp (1997).
- [8] J.M. Yeomans. *Statistical Mechanics of Phase Transitions*. Oxford University Press (1992).
- [9] Kadanoff. *Statistical Physics - Statistics, Dynamics and Renormalization*. World Scientific (2000).
- [10] D. Landau and K. Binder. *A Guide to Monte Carlo Simulation in Statistical Physics*. Cambridge University Press (2009).

- [11] K. Hoffmann and M. Schreiber. *Computational Statistical Physics*. Springer.
- [12] Broadbent S. R. and Hammersley J. M. *Percolation Processes: I. Crystal and Mazes*. Proceedings of the Cambridge Philosophical Society 53 629–641 (1957).