

Transições de fase em sistemas fora do equilíbrio

Prof. Carlos E. Fiore

November 4, 2021

Uma motivação: “Peixes de Ising”

- Exemplos anteriores \rightarrow sistemas que apresentam $T, p, H, U, F, S \rightarrow$ transição de fase \rightarrow uma Hamiltoniana do tipo $\mathcal{H} = -J \sum_i \sigma_i \sigma_j$ (modelo de Ising) ou $\mathcal{H} = -\epsilon \sum_i \eta_i \eta_j$ (modelo gás de rede) sendo $\sigma_i = \pm 1$ e $\eta_i = 0, 1$;
- Transições de fase ocorrem em diversos sistemas que não estão em equilíbrio termodinâmico \rightarrow quantidades acima nem sempre são conhecidas á priori;
- Um primeiro exemplo \rightarrow movimento de certos cardumes de peixes;



- Por simplicidade consideramos \rightarrow peixes movimentando-se apenas para o norte e sul, respectivamente;
- Fração de peixes $\rightarrow \frac{dm}{dt} = (a - a_c)m - bm^3 + \dots \rightarrow$ no estado estacionário $\frac{dm}{dt} = 0$;
- Para $a < a_c \rightarrow m = \pm \sqrt{\frac{a - a_c}{b}}$
- Transição de fases ordem-desordem ocorre em $a = a_c$ e $b > 0$;
- Para $a > a_c \rightarrow m = 0$;

Fundamentação Teórica

- Processos Markovianos descritos por uma equação mestra;
- $\dot{\rho}_m(t) = \sum_n \{W_{mn}(t)\rho_n(t) - W_{nm}(t)\rho_m(t)\} \rightarrow \sum_n W_{mn}(t)\rho_n(t)$, sendo $W_{mn}(t)$ a taxa de transição do estado n para o estado m ;
- Algumas propriedades: $\sum_m W_{mn}(t) = 0$ e $W_{mm}(t) = -\sum_{n \neq m} W_{nm}(t)$;
- Estado estacionário $\rightarrow \frac{d}{dt}P_n(t) = 0$;
- $W_{m \rightarrow n}P(m, t) = W_{n \rightarrow m}P(n, t) \rightarrow$ balanço detalhado $\rightarrow P_n = e^{-\beta H_n} / Z$;
- $\sum_n \{W_{mn}(t)\rho_n(t) - W_{nm}(t)\rho_m(t)\} = 0 \rightarrow$ distribuição de probabilidades de não equilíbrio \rightarrow não são conhecidas na maioria dos casos \rightarrow estudo a partir da dinâmica;

Fundamentação Teórica

- Processos Markovianos descritos por uma equação mestra;
- $\dot{p}_m(t) = \sum_n \{W_{mn}(t)p_n(t) - W_{nm}(t)p_m(t)\} \rightarrow \sum_n W_{mn}(t)p_n(t)$, sendo $W_{mn}(t)$ a taxa de transição do estado n para o estado m ;
- Algumas propriedades: $\sum_m W_{mn}(t) = 0$ e $W_{mm}(t) = -\sum_{n \neq m} W_{nm}(t)$,
- Estado estacionário $\rightarrow \frac{d}{dt}P_n(t) = 0$;
- $W_{m \rightarrow n}P(m, t) = W_{n \rightarrow m}P(n, t) \rightarrow$ balanço detalhado $\rightarrow P_n = e^{-\beta H_n} / Z$;
- $\sum_n \{W_{mn}(t)p_n(t) - W_{nm}(t)p_m(t)\} = 0 \rightarrow$ distribuição de probabilidades de não equilíbrio \rightarrow não são conhecidas na maioria dos casos \rightarrow estudo a partir da dinâmica;

Fundamentação Teórica

- Processos Markovianos descritos por uma equação mestra;
- $\dot{\rho}_m(t) = \sum_n \{W_{mn}(t)\rho_n(t) - W_{nm}(t)\rho_m(t)\} \rightarrow \sum_n W_{mn}(t)\rho_n(t)$, sendo $W_{mn}(t)$ a taxa de transição do estado n para o estado m ;
- Algumas propriedades: $\sum_m W_{mn}(t) = 0$ e $W_{mm}(t) = -\sum_{n \neq m} W_{nm}(t)$,
- Estado estacionário $\rightarrow \frac{d}{dt} P_n(t) = 0$;
- $W_{m \rightarrow n} P(m, t) = W_{n \rightarrow m} P(n, t) \rightarrow$ balanço detalhado $\rightarrow P_n = e^{-\beta H_n} / Z$;
- $\sum_n \{W_{mn}(t)\rho_n(t) - W_{nm}(t)\rho_m(t)\} = 0 \rightarrow$ distribuição de probabilidades de não equilíbrio \rightarrow não são conhecidas na maioria dos casos \rightarrow estudo a partir da dinâmica;

Fundamentação Teórica

- Processos Markovianos descritos por uma equação mestra;
- $\dot{\rho}_m(t) = \sum_n \{W_{mn}(t)\rho_n(t) - W_{nm}(t)\rho_m(t)\} \rightarrow \sum_n W_{mn}(t)\rho_n(t)$, sendo $W_{mn}(t)$ a taxa de transição do estado n para o estado m ;
- Algumas propriedades: $\sum_m W_{mn}(t) = 0$ e $W_{mm}(t) = -\sum_{n \neq m} W_{nm}(t)$,
- Estado estacionário $\rightarrow \frac{d}{dt} P_n(t) = 0$;
- $W_{m \rightarrow n} P(m, t) = W_{n \rightarrow m} P(n, t) \rightarrow$ balanço detalhado $\rightarrow P_n = e^{-\beta H_n} / Z$;
- $\sum_n \{W_{mn}(t)\rho_n(t) - W_{nm}(t)\rho_m(t)\} = 0 \rightarrow$ distribuição de probabilidades de não equilíbrio \rightarrow não são conhecidas na maioria dos casos \rightarrow estudo a partir da dinâmica;

Fundamentação Teórica

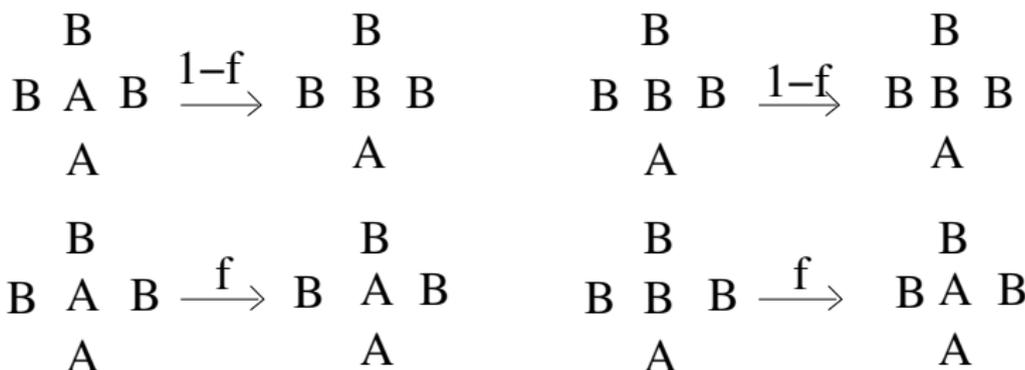
- Processos Markovianos descritos por uma equação mestra;
- $\dot{\rho}_m(t) = \sum_n \{W_{mn}(t)\rho_n(t) - W_{nm}(t)\rho_m(t)\} \rightarrow \sum_n W_{mn}(t)\rho_n(t)$, sendo $W_{mn}(t)$ a taxa de transição do estado n para o estado m ;
- Algumas propriedades: $\sum_m W_{mn}(t) = 0$ e $W_{mm}(t) = -\sum_{n \neq m} W_{nm}(t)$,
- Estado estacionário $\rightarrow \frac{d}{dt} P_n(t) = 0$;
- $W_{m \rightarrow n} P(m, t) = W_{n \rightarrow m} P(n, t) \rightarrow$ balanço detalhado $\rightarrow P_n = e^{-\beta H_n} / Z$;
- $\sum_n \{W_{mn}(t)\rho_n(t) - W_{nm}(t)\rho_m(t)\} = 0 \rightarrow$ distribuição de probabilidades de não equilíbrio \rightarrow não são conhecidas na maioria dos casos \rightarrow estudo a partir da dinâmica;

Fundamentação Teórica

- Processos Markovianos descritos por uma equação mestra;
- $\dot{p}_m(t) = \sum_n \{W_{mn}(t)p_n(t) - W_{nm}(t)p_m(t)\} \rightarrow \sum_n W_{mn}(t)p_n(t)$, sendo $W_{mn}(t)$ a taxa de transição do estado n para o estado m ;
- Algumas propriedades: $\sum_m W_{mn}(t) = 0$ e $W_{mm}(t) = -\sum_{n \neq m} W_{nm}(t)$,
- Estado estacionário $\rightarrow \frac{d}{dt} P_n(t) = 0$;
- $W_{m \rightarrow n} P(m, t) = W_{n \rightarrow m} P(n, t) \rightarrow$ balanço detalhado $\rightarrow P_n = e^{-\beta H_n} / Z$;
- $\sum_n \{W_{mn}(t)p_n(t) - W_{nm}(t)p_m(t)\} = 0 \rightarrow$ distribuição de probabilidades de não equilíbrio \rightarrow não são conhecidas na maioria dos casos \rightarrow estudo a partir da dinâmica;

Outras aplicações-modelo do votante majoritário

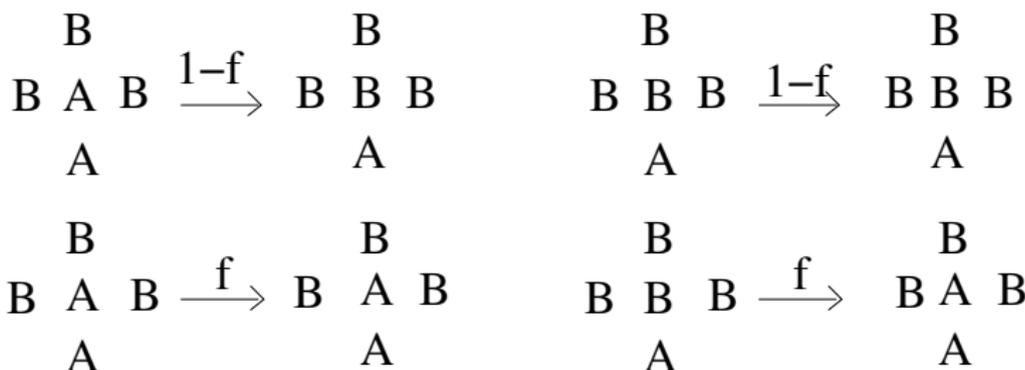
- Indivíduos de uma comunidade formam sua opinião de acordo com o que pensam seus vizinhos \rightarrow indivíduos receptivos e hesitantes \rightarrow agem a favor ou contra a opinião da maioria, respectivamente;
- Modelo simples para formação de uma opinião $\sigma_i = \pm 1 \rightarrow$ a favor ou contra uma certa opinião, respectivamente;



- Sistema acima \rightarrow transição de fases com características semelhantes aos exemplos anteriores;
- Fração de indivíduos favoráveis a uma opinião $\rightarrow m = \frac{1}{N}(N_+ - N_-)$;

Outras aplicações-modelo do votante majoritário

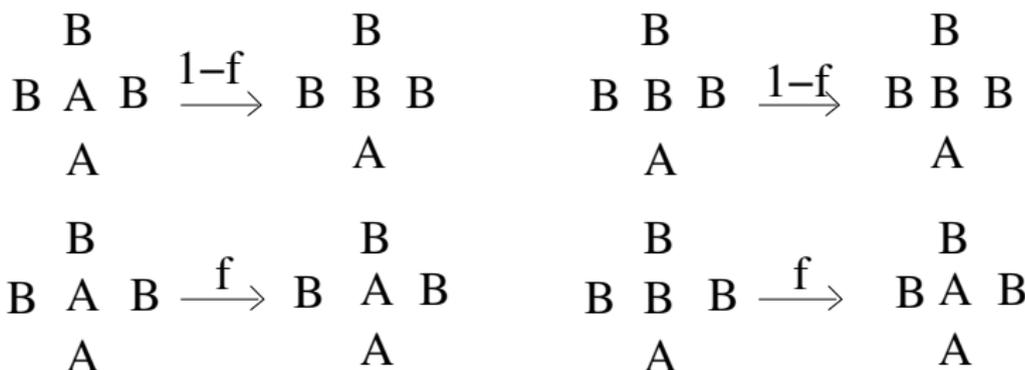
- Indivíduos de uma comunidade formam sua opinião de acordo com o que pensam seus vizinhos \rightarrow indivíduos receptivos e hesitantes \rightarrow agem a favor ou contra a opinião da maioria, respectivamente;
- Modelo simples para formação de uma opinião $\sigma_i = \pm 1 \rightarrow$ a favor ou contra uma certa opinião, respectivamente;



- Sistema acima \rightarrow transição de fases com características semelhantes aos exemplos anteriores;
- Fração de indivíduos favoráveis a uma opinião $\rightarrow m = \frac{1}{N}(N_+ - N_-)$;

Outras aplicações-modelo do votante majoritário

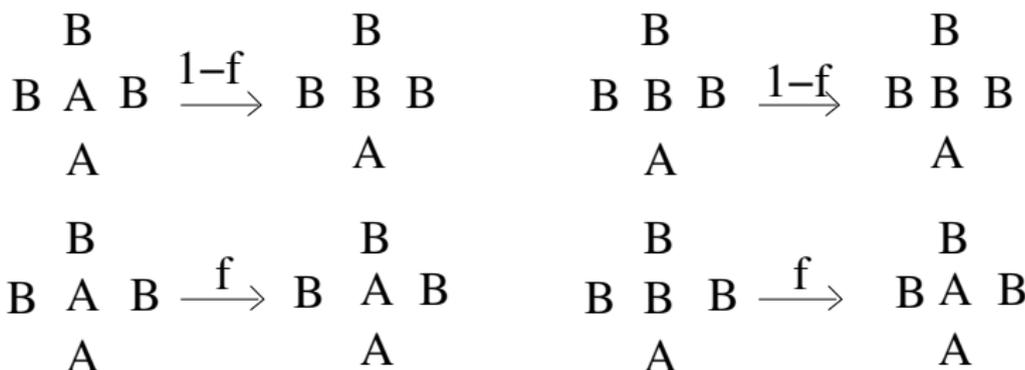
- Indivíduos de uma comunidade formam sua opinião de acordo com o que pensam seus vizinhos \rightarrow indivíduos receptivos e hesitantes \rightarrow agem a favor ou contra a opinião da maioria, respectivamente;
- Modelo simples para formação de uma opinião $\sigma_i = \pm 1 \rightarrow$ a favor ou contra uma certa opinião, respectivamente;



- Sistema acima \rightarrow transição de fases com características semelhantes aos exemplos anteriores;
- Fração de indivíduos favoráveis a uma opinião $\rightarrow m = \frac{1}{N}(N_+ - N_-)$;

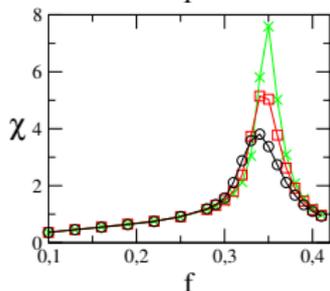
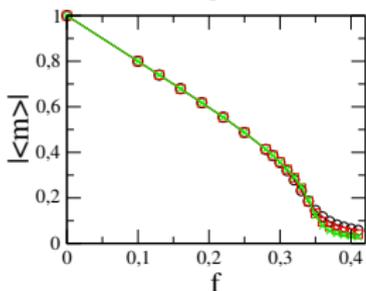
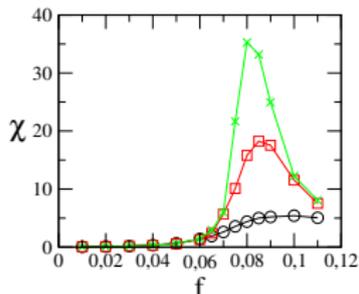
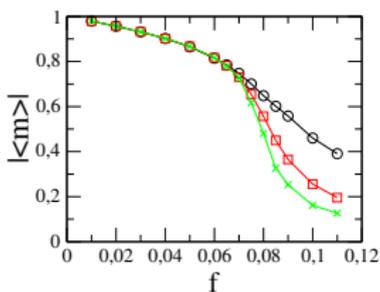
Outras aplicações-modelo do votante majoritário

- Indivíduos de uma comunidade formam sua opinião de acordo com o que pensam seus vizinhos \rightarrow indivíduos receptivos e hesitantes \rightarrow agem a favor ou contra a opinião da maioria, respectivamente;
- Modelo simples para formação de uma opinião $\sigma_i = \pm 1 \rightarrow$ a favor ou contra uma certa opinião, respectivamente;



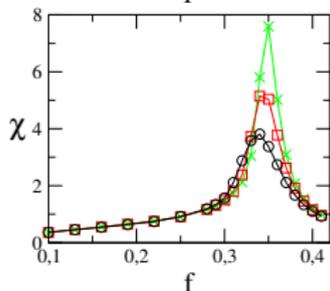
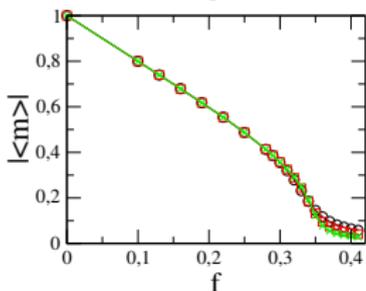
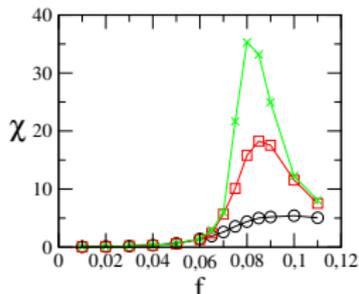
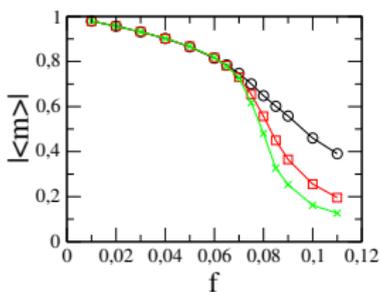
- Sistema acima \rightarrow transição de fases com características semelhantes aos exemplos anteriores;
- Fração de indivíduos favoráveis a uma opinião $\rightarrow m = \frac{1}{N}(N_+ - N_-)$;

- Se a probabilidade de “hesitação” f for pequena \rightarrow a maioria dos indivíduos formarão sua opinião de acordo com o que pensa a maioria \rightarrow haverá predominância de uma opinião ($m \neq 0$);
- À medida que f aumenta \rightarrow hesitação aumenta \rightarrow não haverá predominância de uma opinião ($m = 0$) \rightarrow transição de fases é esperada num valor “limite” f_c ;
- Resultados para a rede quadrada e para uma rede complexa de Erdős-Renyi ¹ \rightarrow mesmos expoentes críticos do modelo de Ising;



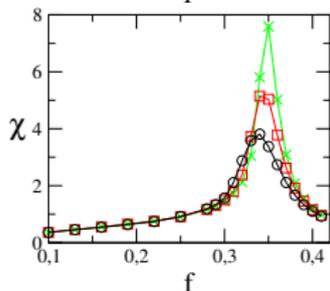
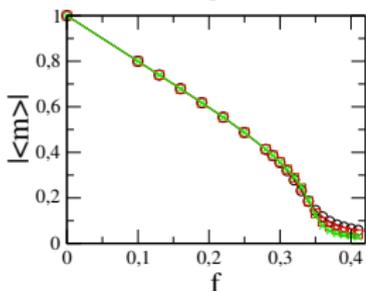
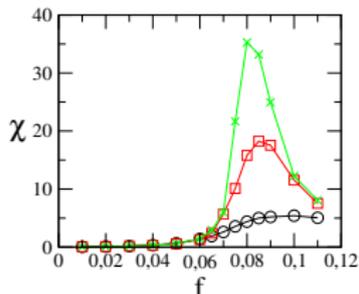
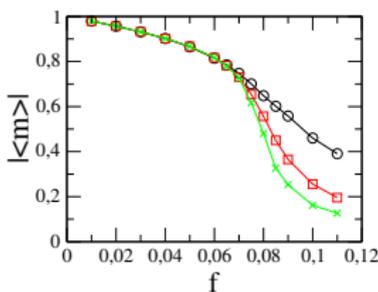
¹M. J. de Oliveira, J. Stat. Phys. **66**, 273 (1992); L. F. C. Pereira et al. Phys. Rev. E **71**, 016123 (2005).

- Se a probabilidade de “hesitação” f for pequena \rightarrow a maioria dos indivíduos formarão sua opinião de acordo com o que pensa a maioria \rightarrow haverá predominância de uma opinião ($m \neq 0$);
- À medida que f aumenta \rightarrow hesitação aumenta \rightarrow não haverá predominância de uma opinião ($m = 0$) \rightarrow transição de fases é esperada num valor “limite” f_c ;
- Resultados para a rede quadrada e para uma rede complexa de Erdős-Renyi ¹ \rightarrow mesmos expoentes críticos do modelo de Ising;



¹M. J. de Oliveira, J. Stat. Phys. **66**, 273 (1992); L. F. C. Pereira et al. Phys. Rev. E **71**, 016123 (2005).

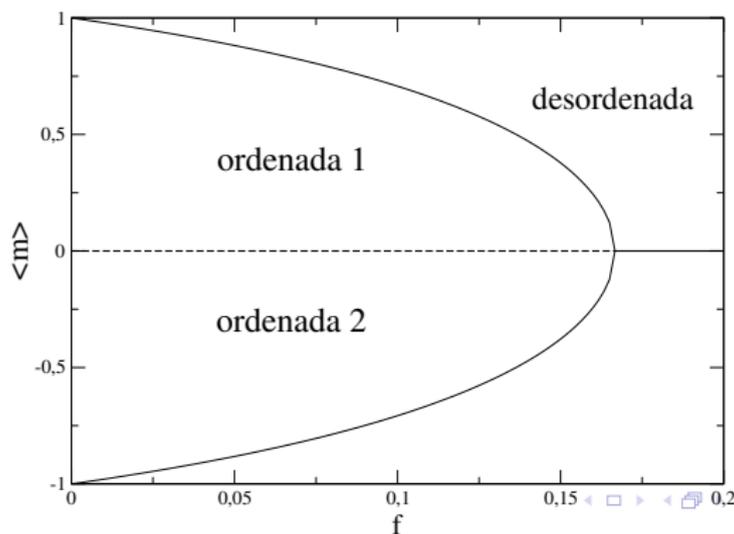
- Se a probabilidade de “hesitação” f for pequena \rightarrow a maioria dos indivíduos formarão sua opinião de acordo com o que pensa a maioria \rightarrow haverá predominância de uma opinião ($m \neq 0$);
- À medida que f aumenta \rightarrow hesitação aumenta \rightarrow não haverá predominância de uma opinião ($m = 0$) \rightarrow transição de fases é esperada num valor “limite” f_c ;
- Resultados para a rede quadrada e para uma rede complexa de Erdős-Renyi ¹ \rightarrow mesmos expoentes críticos do modelo de Ising;



¹M. J. de Oliveira, J. Stat. Phys. **66**, 273 (1992); L. F. C. Pereira et al. Phys. Rev. E **71**, 016123 (2005).

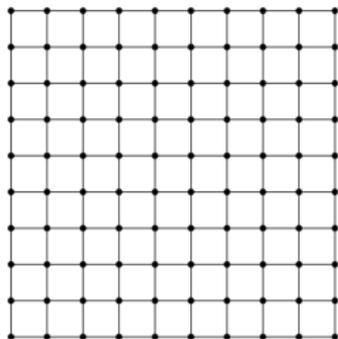
Tratamento matemático aproximado

- A partir da equação mestra e desprezando correlações, a evolução temporal de $\langle m \rangle$ é aproximadamente dada por $\frac{d\langle m \rangle}{dt} = (1 - 6f)\langle m \rangle - (1 - 2f)\langle m \rangle^3$;
- No estado estacionário $\rightarrow \frac{d\langle m \rangle}{dt} = 0$;
- Uma solução $\langle m \rangle = 0 \rightarrow$ fase desordenada (sem predomínio de uma opinião);
- $\langle m \rangle = \pm \sqrt{\frac{1-6f}{1-2f}}$ \rightarrow fase ordenada (predomínio de uma opinião) \rightarrow transição de fase ocorre em $f_c = 1/6$;



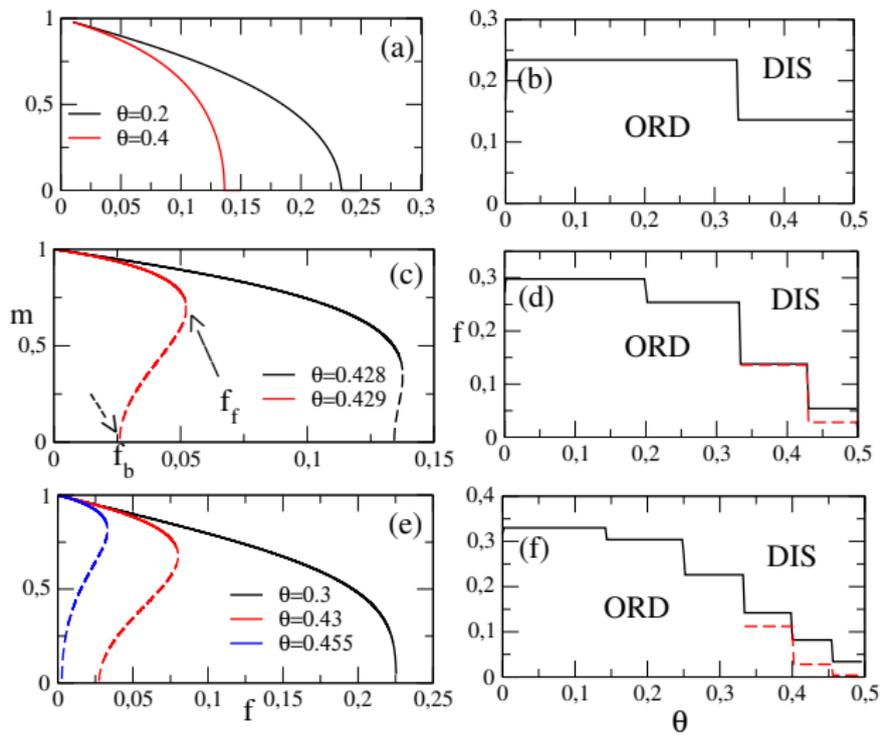
Transições descontínuas-Possíveis ingredientes mínimos

- $\frac{d}{dt}m = am - bm^3 + cm^5$ ($c > 0$) \rightarrow salto de $\pm\sqrt{b/2c}$ em m ocorre em $a = \frac{b^2}{4c}$;
- Acrescenta-se um termo dependente do spin local \rightarrow inércia \rightarrow transição descontínua ²;
- Redes regulares e complexas levam à mesmas conclusões?

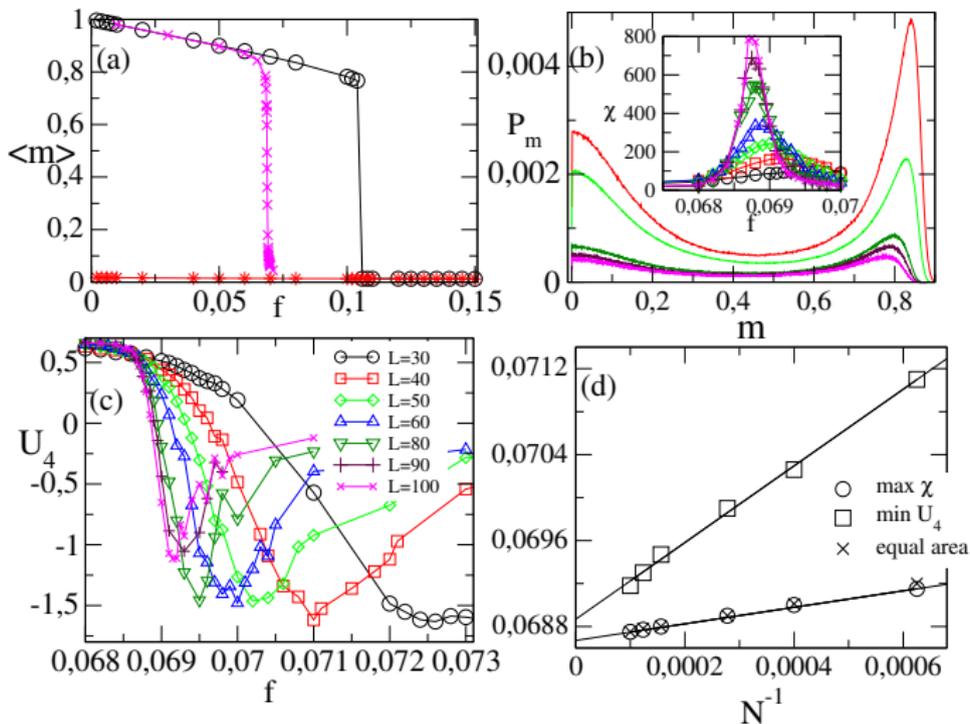


²H. Chen et al., Phys. Rev. E **95**, 042304 (2017); P. Harunari, M. M. de Oliveira e C. E. Fiore, Phys. Rev. E **96**, 042305 (2017), J. M. Encinas, et al. Sci. Rep. **8**, 9338 (2018).

Resultados de campo médio



Redes regulares \times Redes complejas ³



³J. M. Encinas, et al. Sci. Rep. **8**, 9338 (2018).

Teoria fenomenológica para transições descontínuas

- Próximo à coexistência de fases \rightarrow soma de duas gaussianas independentes

$$P_N(m) = P_N^{(o)}(m) + P_N^{(d)}(m) \text{ com cada } P_N^{(\sigma)}(m) = \frac{\sqrt{N}}{\sqrt{2\pi}} \frac{\exp[N\{(\Delta f)m - (m - m_\sigma)^2 / (2\chi_\sigma)\}]}{[F_o(\Delta f; N) + F_d(\Delta f; N)]},$$

- Para o máximo da variância ou posição de áreas iguais $\rightarrow f_N \approx f_0 + \frac{\ln[\chi_d/\chi_o]}{2(m_o - m_d)} \frac{1}{N}$;
- Para o $U_2 = \frac{\langle m^2 \rangle}{\langle m \rangle^2} \rightarrow f_N \approx f_0 + \frac{1}{2N} \frac{\ln[\chi_D/\chi_o] + 2 \ln[m_d/m_o]}{(m_o - m_d)}$.⁴;

⁴M. M. de Oliveira, M. G. E. da Luz e C. E. Fiore, Phys. Rev. E **92**, 062126 (2015),
Phys. Rev. E **97**, 060101 (R) (2018).

Teoria fenomenológica para transições descontínuas

- Próximo à coexistência de fases \rightarrow soma de duas gaussianas independentes

$$P_N(m) = P_N^{(o)}(m) + P_N^{(d)}(m) \text{ com cada } P_N^{(\sigma)}(m) = \frac{\sqrt{N}}{\sqrt{2\pi}} \frac{\exp[N\{(\Delta f)m - (m - m_\sigma)^2 / (2\chi_\sigma)\}]}{[F_o(\Delta f; N) + F_d(\Delta f; N)]},$$

- Para o máximo da variância ou posição de áreas iguais $\rightarrow f_N \approx f_0 + \frac{\ln[\chi_d/\chi_o]}{2(m_o - m_d)} \frac{1}{N}$;

- Para o $U_2 = \frac{\langle m^2 \rangle}{\langle m \rangle^2} \rightarrow f_N \approx f_0 + \frac{1}{2N} \frac{\ln[\chi_D/\chi_o] + 2 \ln[m_d/m_o]}{(m_o - m_d)}$.⁴;

⁴M. M. de Oliveira, M. G. E. da Luz e C. E. Fiore, Phys. Rev. E **92**, 062126 (2015),
Phys. Rev. E **97**, 060101 (R) (2018).

Teoria fenomenológica para transições descontínuas

- Próximo à coexistência de fases \rightarrow soma de duas gaussianas independentes

$$P_N(m) = P_N^{(o)}(m) + P_N^{(d)}(m) \text{ com cada } P_N^{(\sigma)}(m) = \frac{\sqrt{N}}{\sqrt{2\pi}} \frac{\exp[N\{(\Delta f)m - (m - m_\sigma)^2 / (2\chi_\sigma)\}]}{[F_o(\Delta f; N) + F_d(\Delta f; N)]},$$

- Para o máximo da variância ou posição de áreas iguais $\rightarrow f_N \approx f_0 + \frac{\ln[\chi_d/\chi_o]}{2(m_o - m_d)} \frac{1}{N}$;
- Para o $U_2 = \frac{\langle m^2 \rangle}{\langle m \rangle^2} \rightarrow f_N \approx f_0 + \frac{1}{2N} \frac{\ln[\chi_D/\chi_o] + 2 \ln[m_d/m_o]}{(m_o - m_d)}$.⁴;

⁴M. M. de Oliveira, M. G. E. da Luz e C. E. Fiore, Phys. Rev. E **92**, 062126 (2015), Phys. Rev. E **97**, 060101 (R) (2018).

Produção de entropia

- Ponto de partida: Definições de entropia e produção de entropia ⁵;
- Definições de entropia e produção de entropia $S(t) = -k_B \sum_m p_m(t) \ln p_m(t)$ e $\sigma(t) = k_B \sum_{(m,n)} \{W_{mn}(t)p_n(t) - W_{nm}(t)p_m(t)\} \ln \frac{W_{mn}(t)p_n(t)}{W_{nm}(t)p_m(t)}$,
- Produção de entropia e fluxo de entropia

$$\frac{dS(t)}{dt} = \sigma(t) - \Phi(t), \quad (1)$$

onde

$$\Phi(t) = \frac{k_B}{2} \sum_{(m,n)} \{W_{mn}(t)p_n(t) - W_{nm}(t)p_m(t)\} \ln \frac{W_{mn}(t)}{W_{nm}(t)}, \quad (2)$$

- Notemos que $\sigma(t) \geq 0$ (sempre) e que $\Phi(t)$ pode ser 0, positiva ou negativa;
- Estado estacionário de equilíbrio $\rightarrow \sigma = \Phi = 0$;
- Estado estacionário de não equilíbrio $\rightarrow \sigma = \Phi > 0$ (entropia está sendo sempre produzida e sendo toda cedida ao reservatório);

⁵J. Schnakenberg, Rev. Mod. Phys. **48**, 571 (1976), C. Van den Broeck e M. Esposito, Phys. A **418**, 6 (2015).; T. Tomé e M. J. de Oliveira, Phys. Rev. E **91**, 042140 (2015).

Trabalho e calor

- Sendo $U(t) = \sum_m \epsilon_m(t) p_m(t) \rightarrow \dot{U}(t) = \dot{W}_d(t) + \dot{W}_{chem}(t) + \dot{Q}(t)$;
- Trabalho: $\dot{W}_d(t) = \sum_m \dot{\epsilon}_m(t) p_m(t)$,
- Trabalho Químico: $\dot{W}_{chem}(t) = \sum_m \mu(t) n_m \dot{p}_m(t)$,
- Calor: $\dot{Q}(t) = \sum_m [\epsilon_m - \mu(t) n_m] \dot{p}_m(t)$,
- Em suma: trabalho \rightarrow variações temporais na energia do sistema;
- Calor e trabalho químico \rightarrow variações temporais na probabilidade de ocupação;

Produção de Entropia para dinâmica de um sítio

- Partindo das definições de entropia $S(t) = - \sum_{\sigma} P(\sigma, t) \ln P(\sigma, t)$ e da equação mestra

$\frac{d}{dt} P(\sigma, t) = \sum_i \{w_i(\sigma^i) P(\sigma^i, t) - w_i(\sigma) P(\sigma, t)\}$ obtemos a expressão \rightarrow

$$\frac{dS(t)}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sum_i \ln \frac{P(\sigma^i, t)}{P(\sigma, t)} \{w_i(\sigma^i) P(\sigma^i, t) - w_i(\sigma) P(\sigma, t)\}$$

- A expressão acima $\frac{dS}{dt} = \sigma - \Phi \rightarrow$ produção de entropia e fluxo de entropia (do sistema para o reservatório), respectivamente dados por ;

$$\sigma(t) = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sum_i \ln \frac{w_i(\sigma^i) P(\sigma^i, t)}{w_i(\sigma) P(\sigma, t)} \{w_i(\sigma^i) P(\sigma^i, t) - w_i(\sigma) P(\sigma, t)\} \quad (3)$$

$$\sigma(t) = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sum_i w_i(\sigma) P(\sigma, t) \ln \frac{w_i(\sigma)}{w_i(\sigma^i)} \quad (4)$$

- Vamos exemplificar, ao longo das próximas aulas, o cálculo da produção de entropia para o modelo do votante majoritário e em seguida, considerarmos uma descrição fenomenológica (porém geral) para seu comportamento considerando uma dinâmica arbitrária com simetria de inversão.