



INSTITUTO DE FÍSICA
Universidade Federal Fluminense

Topologia e Dinâmica de Sistemas
Complexos: Transições de Fase e
Fenômenos Críticos

Nuno Miguel Melo Crokidakis Peregrino

Niterói-RJ

2011

Nuno Miguel Melo Crokidakis Peregrino

TOPOLOGIA E DINÂMICA DE SISTEMAS COMPLEXOS: TRANSIÇÕES DE FASE E FENÔMENOS CRÍTICOS

Tese apresentada ao programa de Pós-graduação em Física da UFF como requisito parcial para obtenção do grau de doutor em Física.

Orientador: Marcio Argollo de Menezes

Niterói-RJ, Julho de 2011

Agradecimentos

A Deus;

Ao meu bisavô Giorgio Crokidakis, que saiu da Grécia no início do século passado e se estabeleceu no Rio de Janeiro; sem isso eu não estaria aqui.

Ao professor Marcio Argollo de Menezes, pela confiança e pela motivação que me deu durante os últimos 4 anos, e pela orientação sempre responsável;

Aos meus pais Eduardo e Vânia e às minhas irmãs Yara e Melina, por serem uma família sempre presente, apesar da distância;

À minha mulher Rachel, pela paciência que teve (quase) sempre em aturar os meus horários de trabalho nada convencionais, e por apoiar meu doutorado sanduíche;

Aos meus tios Carlos e Nara, aos meus primos Rachel e Júnior e à minha vó dona Penha, por terem sido uma grande família pra mim ao longo dos últimos 6 anos.

Aos amigos Sílvio, Diogo e Octavio, pela colaboração científica que resultou em alguns artigos, e principalmente ao gajo Sílvio por ter lido todos os meus textos;

Aos professores Thadeu Penna e Paulo Murilo, por oferecerem ótimas condições de trabalho no grupo de Sistemas Complexos do IF-UFF;

Ao alemão Veit, pela amizade, apoio de sempre e pelas cervejas, especialmente no início do meu doutorado;

Ao professor Fernando Dantas Nobre, pela colaboração que resultou em alguns trabalhos após o meu mestrado, e por ter mantido as portas do CBPF sempre abertas;

Aos componentes do Grupo de Sistemas Complexos do IF-UFF: Jorge Sá, Suzana Moss,

Angelo, Alexandre, Edgardo, Eduardo, Florencia, Gralha, Marlon, Newton, Orahcio, Paulo, Pierre, Vitor Lara e Wellington.

Aos amigos Adolfo, Alfeu, Carlinhos, Ciro, George, Manel, Morcego, Pedroka, Roldão, Rudy, Vitor, Zaca, Zé Filho e Zuza, pelos momentos de lazer nas viagens a Fortaleza;

Aos amigos que fiz durante o doutorado. *No Brasil*: Álvaro baiano, Cadu, Carlos Ritter, Fabiano, FLAvio, Márcio Jorge, Minos, Tiago José, Thiago Lôbo, Thiaguinho Mattos, e em especial às amizades que começaram no CBPF e continuam até hoje, com Andrézinho e Luciana. *Em Portugal*: Badru, Fabrício, Maklyn, Mário, Massimo, Mohammed, Patrícia, Paulino, Reda, Rui, Sônia, Uayl, Uqueio, Walid Tunísia, Walid Argélia e Wonhoon.

Aos amigos que ficaram no CBPF e que mantém contato até hoje, especialmente Aranha, Gabriel, Jesus, Perez e Vampirinho;

Aos professores Jurgen Stilck, Luis Oxman e Mario Reis, com os quais eu cursei disciplinas na UFF;

Aos integrantes do grupo de Redes Complexas da Universidade de Aveiro, em especial aos professores José Fernando Mendes e Sergey Dorogovtsev, pelas ótimas discussões científicas que tivemos durante os 6 meses que permaneci em Portugal;

Aos funcionários administrativos do IF-UFF, especialmente Valéria e Rafael, por serem tão prestativos e ágeis;

Ao Clube de Regatas do Flamengo, pelos 6 títulos conquistados nos últimos 6 anos, e por ter me proporcionado um dos dias mais felizes da minha vida: 06/12/09, data da conquista do hexa brasileiro;

Ao CNPq, pelo apoio financeiro no Brasil, e à CAPES, pela bolsa de doutorado sanduíche em Portugal;

A todos os outros que colaboraram para a minha formação e para a realização desse trabalho, e que porventura eu tenha esquecido de mencionar aqui.

Dedico esta tese à minha família: Eduardo, Vânia, Yara, Melina e Rachel.

“A verdadeira lógica deste mundo está no cálculo de probabilidades.”

James Clerk Maxwell

Resumo

Nesta tese estudamos alguns sistemas complexos por meio de simulações computacionais e técnicas oriundas da física estatística, como hipótese de escala e análise de tamanho finito. Os modelos estudados são variados e envolvem sistemas considerados físicos (percolação e magnetismo desordenado) e não-físicos (redes de transporte, dinâmica de opiniões e propagação de epidemias). Apesar de apresentarem características particulares, todos os sistemas analisados exibem transições de fase entre estados distintos. Utilizando as técnicas mencionadas acima, localizamos os pontos críticos e estimamos os expoentes característicos desses modelos. Além disso, os sistemas estudados foram definidos em diferentes topologias, de regulares a redes livres de escala. No final, discutimos possíveis continuidades no estudo dos modelos apresentados nesta tese.

Abstract

In this thesis we study some complex systems by means of computer simulations and techniques from statistical physics like scaling hypothesis and finite-size scaling analysis. The studied models are diverse and involve “classical” physical systems (percolation, disordered magnetism) and nonphysical ones (transportation networks, opinion models and epidemic dynamics). Although these models present particular features, all of them undergo phase transitions between distinct states. By means of the above-mentioned techniques we localized the critical points and estimated the characteristic exponents of those models. In addition, the systems were defined on complex and regular topologies. We also discuss some possible extensions of the models studied in this work.

Publicações

Associadas à Tese

1. **Nuno Crokidakis**, Marcio Argollo de Menezes. *Emergence of clusters in growing networks with ageing*, Journal of Statistical Mechanics P04018 (2009).
2. **Nuno Crokidakis**. *Nonequilibrium phase transitions and tricriticality in a three-dimensional lattice system with random-field competing kinetics*, Physical Review E 81, 041138 (2010).
3. **Nuno Crokidakis**. *First-order phase transition in a 2D random-field Ising model with conflicting dynamics*, Journal of Statistical Mechanics P02058 (2009).
4. **Nuno Crokidakis**, Fabricio L. Forgerini. *Consequence of reputation in the Sznajd consensus model*, Physics Letters A 374, 3380 (2010).
5. **Nuno Crokidakis**, Alexei Vazquez, Marcio Argollo de Menezes. *Optimization in transportation networks: occupation transition and fluctuation patterns* (em preparação).
6. **Nuno Crokidakis**, Marcio Argollo de Menezes. *Critical behavior of the SIS epidemic model with time-dependent infection rate* (em preparação).

Não Associadas à Tese

7. **Nuno Crokidakis**, *Phase Transitions in Disordered Systems under Random Magnetic Fields* (LAP Lambert Academic Publishing, Alemanha, 2010).
8. Octavio R. Salmon, **Nuno Crokidakis**, Fernando D. Nobre. *Multicritical behavior in a random-field Ising model under a continuous-field probability distribution*, *Journal of Physics: Condensed Matter* 21, 056005 (2009).
9. **N. Crokidakis**, D. O. Soares-Pinto, M. S. Reis, A. M. Souza, R. S. Sarthour, I. S. Oliveira. *Finite-size analysis of a two-dimensional Ising model within a nonextensive approach*, *Physical Review E* 80, 051101 (2009).
10. Silvio M. Duarte Queiros, **Nuno Crokidakis**, Diogo O. Soares-Pinto. *Effect of platykurtic and leptokurtic distributions in the random-field Ising model: Mean-field approach*, *Physical Review E* 80, 011143 (2009).
11. **Nuno Crokidakis**, Silvio M. Duarte Queiros, *Fat-tailed and compact random-field Ising models on cubic lattices*, arXiv: 1011.3337 (2010).
12. A. P. Lima, **N. Crokidakis**, M. S. Reis, *Zig-zag ferromagnetic Cu chain of a new compound* (em preparação).
13. **Nuno Crokidakis**, Fabricio L. Forgerini, *Competition of reputations in the 2D Sznajd model: spontaneous emergence of democratic states* (aceito para publicação no *Brazilian Journal of Physics*)
14. F. L. Forgerini, **N. Crokidakis**, S. N. Dorogovtsev, J. F. F. Mendes, *Branching process for network growth with geometric restrictions* (em preparação)

Sumário

Lista de Figuras

1	Introdução	p. 1
2	Noções sobre Transições de Fase, Universalidade e Hipótese de Escala para Sistemas Finitos	p. 4
2.1	Expoentes Críticos e Classificação das Transições de Fase	p. 4
2.2	Análise de Tamanho Finito	p. 7
3	Transição de Fase Geométrica em Redes em Crescimento com Envelhecimento dos Sítios	p. 11
3.1	Introdução	p. 11
3.2	Modelo	p. 15
3.3	Transição de Fase	p. 16
3.4	Conclusões	p. 24
4	Otimização de Fluxos em Redes de Transporte: Transição de Ocupação e Padrões de Flutuação	p. 26
4.1	Introdução	p. 26
4.2	Modelo e Solução Geral	p. 29
4.3	Resultados Numéricos	p. 33

4.4	Conclusões	p. 43
5	Transições de Fase de Não-Equilíbrio em Sistemas Magnéticos com Dinâmica	
	Conflitiva	p. 45
5.1	Introdução	p. 45
5.2	Modelo	p. 48
5.3	Simulações na Rede Quadrada	p. 50
5.4	Simulações na Rede Cúbica	p. 56
5.5	Conclusões	p. 63
6	Efeitos de Reputação na Dinâmica de Opiniões do Modelo de Sznajd	p. 67
6.1	Introdução	p. 67
6.2	Modelo	p. 69
6.3	Resultados	p. 71
6.4	Conclusões	p. 77
7	Transição de Fase em um Modelo de Propagação de Epidemias	p. 79
7.1	Introdução	p. 79
7.2	Modelo e Abordagem de Campo Médio	p. 81
7.3	Simulações na Rede Quadrada	p. 87
7.4	Conclusões	p. 91
8	Discussão Final, Conclusões e Perspectivas	p. 93
	Apêndice A – Geradores de Números Aleatórios	p. 98

Lista de Figuras

- 2.1 Forma esquemática da susceptibilidade em um sistema finito. Figura retirada da referência [18]. p. 9
- 3.1 Distribuição de conectividades do modelo de Barábasi-Albert [27]. O gráfico está na escala logarítmica nos dois eixos, o que indica que a forma geral desta distribuição é $P(k) \sim k^{-\gamma}$, sendo $\gamma = 3$ para este modelo. p. 13
- 3.2 Efeitos da variação da probabilidade de reconexão p no modelo de Watts e Strogatz [34]. p. 14
- 3.3 Tamanho relativo médio do maior aglomerado como função do parâmetro α . Podemos observar um transição de fase em um certo valor $\alpha_c(N)$ onde o aglomerado gigante emerge. Cada ponto é resultado de um média sobre 10^3 realizações de redes. p. 16
- 3.4 Número médio de aglomerados como função do parâmetro α . Assim como na figura 3.3 podemos observar um transição em um certo valor $\alpha_c(N)$ onde o aglomerado gigante emerge. Cada ponto é resultado de um média sobre 10^3 realizações de redes. p. 17
- 3.5 Flutuação do parâmetro de ordem para redes de diferentes tamanhos N como função de α . As curvas tem um comportamento típico de susceptibilidades, e os máximos se deslocam no eixo x quando aumentamos o tamanho da rede. Cada ponto é resultado de um média sobre 10^3 realizações de redes. p. 18

- 3.6 Posições dos máximos $\alpha_c(N)$ contra o inverso do tamanho da rede N^{-1} . A reta corresponde ao melhor ajuste numérico, o que nos dá $\ln y = 1.7171 - 516.17 x$ p. 18
- 3.7 Colapso do parâmetro de ordem $\langle S \rangle / N$, onde utilizamos a função de escala $\frac{\alpha}{\alpha_c(N)}$, onde $\alpha_c(N) = \alpha_c e^{-bN^{-1}}$. Os valores dos parâmetros são $\alpha_c = 5.5682$ e $b = 516.17$ p. 19
- 3.8 Distribuição relativa de tamanhos dos aglomerados $n(s)$ para $N = 15000$ sítios e alguns valores do parâmetro α , na escala log-linear. O decaimento exponencial de $n(s)$ para todos os valores de α sugerem que $\tau = 0$, como no caso do problema de percolação em 1 dimensão. Em destaque, na figura inserida, temos $n(s)$ no ponto crítico α_c p. 20
- 3.9 Representação esquemática da transição geométrica ocorrida nas redes em crescimento estudadas neste capítulo. Consideramos redes com $N = 500$ sítios e alguns valores de α : 0.5 (superior esquerda), 1.0 (superior direita), 2.0 (inferior esquerda) e 3.0 (inferior direita). Observe que no último caso a rede tem um estrutura unidimensional, como discutido no texto. p. 21
- 3.10 Máximos da susceptibilidade $\chi(\alpha_c(N))$ contra o tamanho da rede N na escala log-log. O melhor ajuste dos dados numéricos indica uma divergência do tipo lei de potência $\chi(\alpha_c) \sim N^\gamma$, com $\gamma = 1.02 \pm 0.02$ p. 22
- 3.11 Comportamento de escala do menor caminho médio entre todos os pares de sítios que pertencem ao maior aglomerado de redes de tamanho N , para valores de α abaixo (esquerda) e acima do ponto crítico α_c (direita). A emergência do aglomerado gigante é acompanhada por uma mudança na topologia da rede de estilo árvore para quase unidimensional, como indica a mudança do comportamento de escala do menor caminho médio $\langle l \rangle$ de $\log N$ para linear com N p. 23

- 4.1 Diagrama fundamental do tráfego no plano fluxo F (veículos por hora) contra densidade D (veículos/milha) obtido a partir de dados de uma estrada do estado americano de Minnesota [70]. Observe que temos uma dependência linear $F \propto D$ para densidades baixas (observe a reta preta), mas para densidades altas esta dependência passa a ser não-linear. p. 28
- 4.2 Representação esquemática de um sistema com n canais. Dois sítios são conectados por n canais direcionados com fluxos f_1, f_2, \dots, f_n e custos intrínsecos $e_1 < e_2 < \dots < e_n$. Uma corrente de entrada I é injetada no sítio da esquerda e removida no sítio da direita, garantindo a conservação do fluxo total. p. 30
- 4.3 Figura superior: representação esquemática de um sistema com 2 canais, onde os dois sítios são conectados por 2 canais direcionados com fluxos f_1 e f_2 , custos intrínsecos $e_1 < e_2$ e uma corrente I é injetada no sítio à esquerda. Figura inferior: distribuição de fluxos que minimiza a função de custo E , equação (4.4) para $i = 2$, sujeita ao vínculo de conservação $f_1 + f_2 = I$. Para $I < I_c = e_2/e_1 - 1$, obtemos $f_1 = I$ e $f_2 = 0$, e somente o canal mais eficiente é utilizado (o com menor custo, canal 1). Para $I > I_c$, os canais 1 e 2 são utilizados, com fluxos ótimos $f_1 = I - f_2$ e $f_2 = (I - I_c)/(2 + I_c)$, respectivamente. Exibimos em destaque, na figura inserida, a fração de canais não-utilizados, que cai a zero em $I = I_c$ p. 31
- 4.4 Rede quadrada direcionada usada nas simulações. p. 32
- 4.5 Evolução da fração de canais não-utilizados P com o tempo de simulação, para custos distribuídos uniformemente no intervalo $0 < e_i < 1000$. Para cada valor de I , mostramos resultados para $N = 10^2, 10^3, 10^4$ e 10^5 . Podemos notar que os estados estacionários são obtidos rapidamente, e que este tempo de relaxação não varia muito com os parâmetros do sistema. As curvas são resultados de médias sobre 10^3 realizações dos custos $\{e_i\}$ p. 33

- 4.6 Fração média P de canais não-utilizados em função da corrente de entrada por sítio na rede I , para custos distribuídos uniformemente no intervalo $0 < e_i < 1000$. As simulações sugerem que o parâmetro de ordem não depende do tamanho da rede N . Resultados são médias temporais em 10^5 passos, e consideramos 10^3 realizações dos custos $\{e_i\}$ p. 34
- 4.7 Representação esquemática da transição ocorrida na rede de transporte com topologia quadrada direcionada, quando aumentamos o valor da corrente de entrada por sítio I : (a) fase de ocupação esparsa, para $I = 10^{-4}$, (b) ocupação um pouco maior, com $I = 10^{-2}$, (c) ocupação perto da total, com $I = 0.3$ e (d) fase de ocupação densa ($P \rightarrow 0$), para $I = 10^6$ p. 35
- 4.8 Fração média P de canais não-utilizados em função do parâmetro $T = e_2/e_1 - 1$ para diferentes valores de I , para o caso onde temos apenas 2 custos distribuídos aleatoriamente. Os resultados são para $N = 10^4$ sítios, médias temporais em 10^5 passos e consideramos 10^2 realizações dos custos $\{e_i\}$ p. 36
- 4.9 Flutuação do parâmetro de ordem $\chi = \langle P^2 \rangle - \langle P \rangle^2$ em função de T para diferentes valores de I , para o caso onde temos apenas 2 custos distribuídos aleatoriamente. As curvas têm comportamento típico de curvas de susceptibilidade magnética. Os resultados são para $N = 10^4$ sítios, médias temporais em 10^5 passos e consideramos 10^2 realizações dos custos $\{e_i\}$ p. 37
- 4.10 Valores de T correspondentes às posições dos máximos das flutuações do parâmetro de ordem P , isto é, $\chi = \langle P^2 \rangle - \langle P \rangle^2$, contra a corrente de entrada por sítio I (esquerda) e os correspondentes valores do parâmetro de ordem $P(T_{\max}, I)$ (direita), ambos na escala log-log. As retas são os melhores ajustes obtidos dos resultados numéricos, e nos dão relações do tipo lei de potência entre as quantidades do problema, $T_{\max} \sim I^\alpha$ e $P(T_{\max}, I) \sim I^{-\beta}$, com os expoentes $\alpha = 0.3127$ e $\beta = 0.0155$, conforme discutido no texto. p. 38

- 4.11 Colapso das curvas do parâmetro de ordem P em função do parâmetro $T = e_2/e_1 - 1$ para o caso onde temos apenas 2 custos distribuídos aleatoriamente. O melhor colapso foi obtido baseado nas equações (4.11), (4.12) e (4.13), com os expoentes $\alpha = 0.0155$ e $\beta = 0.3127$. Os resultados são para $N = 10^4$ sítios. p. 39
- 4.12 Fração média P dos canais não-utilizados em função da corrente de entrada por sítio I para diferentes valores do parâmetro $T = e_2/e_1 - 1$, para o caso onde temos apenas 2 custos distribuídos aleatoriamente. Podemos observar uma transição ocupação-desocupação com o aumento de I , apenas para valores de T no intervalo $10 < T < 300$. Os resultados são para $N = 10^4$ sítios, médias temporais em 10^5 passos e consideramos 10^2 realizações dos custos $\{e_i\}$ p. 40
- 4.13 Colapso das curvas do parâmetro de ordem P em função da corrente de entrada por sítio I para diferentes valores de T , para o caso onde temos apenas 2 custos distribuídos aleatoriamente. O melhor colapso foi obtido baseado nas equações (4.14), com os expoentes $\delta = 0.19$ e $\gamma = 3.84$, conforme descrito no texto. p. 41
- 4.14 Previsão do modelo para as flutuações do tráfego σ_i em torno do fluxo médio $\langle f_i \rangle$ em cada canal i da rede (lado esquerdo). Cada aglomerado de pontos corresponde a um valor diferente de corrente injetada por sítio, no intervalo $2 \times 10^{-2} \leq I \leq 10^3$, e foram tomadas médias sobre 500 realizações. Podemos observar o comportamento de escala $\sigma_i \sim \langle f_i \rangle^\nu$, com $\nu = 1/2$ para a fase esparsa ($P \rightarrow 1$) e $\nu = 1$ para a fase densa ($P \rightarrow 0$). Exibimos também flutuações de tráfego real obtidas a partir de dados do estado americano de Nova Iorque [77]. A curva $y = x^{1/2} + 0.5x$ ajusta bem os dados reais, indicando o mesmo comportamento previsto pelo nosso modelo (lado direito). p. 42

- 5.1 Evolução da magnetização por spin com o tempo de Monte Carlo para o caso da rede quadrada com $\sigma = 0.2$ e $L = 128$. Exemplos de intensidades do campo magnético h_o fraca (esquerda) e forte (direita) são mostrados. p. 49
- 5.2 Magnetização por spin como função da temperatura para o caso da rede quadrada, com $L = 128$, $\sigma = 0.0$ e alguns valores típicos da intensidade do campo magnético h_o . Para intensidades $h_o \geq 2.0$ o sistema se encontra na fase paramagnética, mas para todos os outros valores menores de h_o podemos observar uma transição contínua entre as fases ordenada e desordenada. Os símbolos (círculo, quadrado, etc) são resultados das simulações, enquanto que as linhas são apenas guias para os olhos. p. 50
- 5.3 Magnetização por spin como função da temperatura para o caso da rede quadrada, com $L = 128$, $\sigma = 0.2$ e alguns valores típicos da intensidade do campo magnético h_o . Podemos observar que m diminui continuamente com o aumento de T para valores pequenos de h_o , mas ocorrem saltos na magnetização para valores próximos de $h_o = 2.0$ p. 52
- 5.4 Magnetização por spin como função da temperatura para o caso da rede quadrada, com $\sigma = 0.2$, $h_o = 2.0$ e diferentes tamanhos de rede. Podemos observar saltos nas curvas para todos os tamanhos. p. 53
- 5.5 Susceptibilidade χ como função da temperatura para o caso da rede quadrada, com $\sigma = 0.2$, $h_o = 2.0$ e $L = 128$ (a) e posições do máximos da susceptibilidade χ_{max} contra L na escala log-log para alguns tamanhos de rede (b). A reta é o melhor ajuste dos dados, e tem inclinação 2.08. Descartamos o menor tamanho $L = 32$ para o ajuste, para minimizar os efeitos de tamanho finito. . . p. 54
- 5.6 Cumulante de Binder U_L , Eq. (5.8), como função da temperatura para o caso da rede quadrada, com $\sigma = 0.2$, $h_o = 0.5$ e alguns tamanhos de rede (a) e o melhor colapso dos dados (b), baseado na equação (5.9). Os valores críticos são $T_c = 2.125$ e $\nu = 1.027$, como discutido no texto. p. 55

- 5.7 Magnetização por spin como função da temperatura para o caso da rede quadrada, com $\sigma = 0.2$, $h_o = 0.5$ e alguns tamanhos de rede (a) e o melhor colapso de dados (b). Este colapso foi obtido com $T_c = 2.125$, $\beta = 0.068$ e $\nu = 1.027$, como discutido no texto. p. 56
- 5.8 Esboço do diagrama de fases do modelo para o caso da rede quadrada, separando as fases Paramagnética (**P**) e Ferromagnética (**F**), para $\sigma = 0.0, 0.2$ e 0.5 . Os símbolos (círculo, quadrado e triângulo) são resultados das simulações, enquanto as linhas são apenas guias para os olhos. Linhas cheias (pontilhadas) representam transições de fase contínuas (de primeira ordem). p. 57
- 5.9 Evolução da magnetização por spin com o tempo de Monte Carlo para o caso da rede cúbica com $L = 16$. Exemplos de intensidades do campo magnético h_o fraca (esquerda) e forte (direita) são mostrados. p. 58
- 5.10 Magnetização como função da temperatura para o caso da rede cúbica, com $L = 60$ e valores típicos da intensidade de desordem h_o . Podemos observar transições de fase contínuas entre os estados estacionários ferromagnéticos e paramagnéticos para os menores valores de h_o , mas para valores próximos de $h_o = 4.0$ o sistema apresenta transições descontínuas. Para desordens mais elevadas, o sistema se encontra no estado paramagnético para qualquer temperatura. p. 59
- 5.11 Magnetização por spin como função da temperatura para o caso da rede cúbica, com $h_o = 4.0$ e alguns tamanhos de rede L , mostrando saltos nas temperaturas pseudo-críticas $T_c(L)$ (a). Em destaque, na figura inserida, exibimos resultados de simulações para $L = 60$ considerando um intervalo pequeno entre temperaturas. Também mostramos uma ilustração do procedimento de extrapolação para determinar a temperatura crítica T_c para $h_o = 4.0$ (b). Ajustando os dados com uma reta, obtemos $T_c(L) = 0.186 + 0.424L^{-1}$, que resulta em $T_c(L) = 0.186$ no limite termodinâmico ($L^{-1} \rightarrow 0$). p. 60

- 5.12 Susceptibilidade $\chi(T)$ como função da temperatura para o caso da rede cúbica, com $L = 40$ e $h_o = 4.0$, onde mostramos o salto próximo da temperatura crítica (c). Em destaque, na figura inserida, também exibimos as posições dos picos da susceptibilidade χ_{\max} contra tamanho da rede L na escala log-log. A inclinação da reta é 3.05 ± 0.05 , o que sugere uma transição de primeira ordem para $h_o = 4.0$. O caráter de primeira ordem da transição é confirmado pelo comportamento do cumulante de Binder, que apresenta um mínimo característico bem definido perto da transição (d). Em destaque, na figura inserida, ainda mostramos um histograma da magnetização próxima do ponto crítico, onde vemos claramente dois picos, assinatura de uma transição de primeira ordem. p. 61
- 5.13 Susceptibilidade $\chi(T)$ como função da temperatura para o caso da rede cúbica, com $h_o = 3.5$ e $L = 40$ (a) e as posições dos máximos da susceptibilidade χ_{\max} contra tamanho da rede L na escala log-log (b). A inclinação da reta é 2.63 ± 0.10 , o que sugere uma transição de fase contínua para $h_o = 3.5$ p. 62
- 5.14 Resultados numéricos próximos ao ponto tri-crítico para o caso da rede cúbica, com $L = 30$ e um intervalo muito pequeno entre temperaturas ($\Delta T = 0.005$). Na figura (a) mostramos o cumulante de Binder para intensidades do campo $h_o = 3.5, 3.6$ e 3.7 , onde pode-se ver o caráter contínuo da transição, enquanto que em (b) podemos ver comportamentos típicos de transições de primeira ordem, para $h_o = 3.8$ e 3.9 p. 63
- 5.15 Magnetização por spin como função da temperatura para o caso da rede cúbica (a) e colapso dos dados de acordo com as equações (5.17) para $h_o = 2.0$ e vários tamanhos de rede L diferentes (b). O colapso foi obtido com $T_c = 2.97$, $\beta = 0.051$ e $\nu = 1.67$, como discutido no texto. p. 64

- 5.16 Cumulante de Binder como função da temperatura para o caso da rede cúbica, com $h_o = 2.0$ e alguns tamanhos de rede (a) e o melhor colapso dos dados (b), baseado na equação (5.9). O colapso foi obtido com $T_c = 2.97$, $\beta = 0.051$ e $\nu = 1.67$, como discutido no texto. p. 65
- 5.17 Esboço do diagrama de fases do modelo para o caso da rede cúbica, separando os estados ferromagnético (**F**) e paramagnético (**P**). Os quadrados são estimativas numéricas das temperaturas de transição, enquanto que a linha é apenas um guia para os olhos. A linha pontilhada na região de baixas temperaturas representa a região para a qual as simulações sugerem transições de fase de primeira ordem. Em destaque, na figura inserida, mostramos em mais detalhes a região próxima ao ponto tri-crítico (retiramos os pontos calculados, pra ficar mais claro), e a linha mais grossa representa o intervalo de valores de h_o onde esperamos que esteja localizado o ponto tri-crítico. p. 66
- 6.1 Representação esquemática de uma plaqueta 2×2 com 4 agentes vizinhos entre si (spins dentro do retângulo) e os 8 agentes vizinhos à plaqueta considerados na dinâmica do modelo (representados por spins cheios). Observe que os outros agentes (representados por spins pontilhados) não participam da dinâmica. p. 70
- 6.2 Evolução temporal da magnetização para $L = 53$, densidades iniciais de spins +1 iguais a $d = 0.4$ e $d = 0.6$ e diferentes realizações (figura do lado esquerdo). Podemos ver que os estados estacionários mostram situações onde o consenso não é obtido, em oposição ao modelo tradicional definido na rede quadrada [119]. Nesta figura também mostramos situações onde consenso é obtido, para densidades iniciais de spins +1 iguais a $d = 0.1$ e $d = 0.9$ (figura do lado direito). p. 71

- 6.3 Histogramas dos tempos de relaxação para $L = 53$ e $d = 0.8$, obtidos a partir de simulações sobre 10^4 realizações, com as reputações iniciais dos agentes seguindo uma distribuição gaussiana centrada em zero e com diferentes desvios padrões σ . A distribuição é compatível com uma função log-normal para todos os valores de σ , o que corresponde à parábola observada no gráfico na escala logarítmica nos dois eixos. p. 73
- 6.4 Tempo médio de relaxação τ , com média realizada sobre 10^4 realizações, contra o tamanho linear da rede L na escala log-log. A reta tem inclinação $5/2$. O resultado é robusto com relação à escolha de diferentes valores de σ . . . p. 74
- 6.5 Fração f de realizações que terminam com todos os spins $+1$ quando a densidade inicial d de spins $+1$ varia no intervalo $0.4 \leq d \leq 1.0$, para alguns tamanhos de rede L . O número total de realizações é 1000 (para $L = 23, 31$ e 53), 500 (para $L = 73$) e 200 (para $L = 101$ e 121). p. 75
- 6.6 Colapso dos dados para f , obtido com $a = 0.035$, $b = 0.44$ e $d_c = 0.88$ p. 75
- 6.7 Fração f de realizações que terminam com todos os spins $+1$ quando a densidade inicial d de spins $+1$ varia no intervalo $0.35 \leq d \leq 1.0$, para $L = 23$, 1000 realizações e alguns valores de σ . Este resultado mostra que o aumento de σ não modifica o comportamento de f , ou seja, o comportamento da transição de fase. p. 76
- 7.1 Densidade de indivíduos Suscetíveis $S(t)$ (lado esquerdo, de cima para baixo: $\varepsilon = 0.80, 0.85, \dots, 1.00$) e densidade de indivíduos Infectados $I(t)$ (lado direito, de cima para baixo: $\varepsilon = 1.00, 0.98, \dots, 0.80$) como funções do tempo t para uma população de tamanho $N = 10^5$, parâmetro de limite $l = 5$ e valores típicos de ε . Efetuamos médias sobre 200 realizações. Neste caso, para $\varepsilon \leq 0.87$ a doença não se espalha pela população. Os parâmetros utilizados foram $\alpha = 0.05$ e $\lambda_0 = 0.1$ p. 83

- 7.2 Densidade estacionária de indivíduos Suscetíveis S_{est} para $l = 5$ e alguns valores de ε na escala log-log. A reta tem inclinação -5 (lado esquerdo). Para a densidade estacionária de indivíduos Infectados I_{est} o sistema não apresenta um comportamento do tipo lei de potência com o parâmetro ε , como previsto analiticamente pela equação (7.5). Por outro lado, se plotarmos $I_{\text{est}}^* = 1 - I_{\text{est}}$ como função de ε , obtemos uma lei de potência, com expoente -5 (lado direito). Os parâmetros utilizados foram $N = 10^5$, $\alpha = 0.05$ e $\lambda_0 = 0.1$. Cada ponto é resultado de um média sobre 200 realizações. p. 84
- 7.3 Densidade de indivíduos Suscetíveis $S(t)$ (lado esquerdo, de cima para baixo: $\varepsilon = 0.90, 0.92, \dots, 1.00$) e densidade de indivíduos Infectados $I(t)$ (lado direito, de cima para baixo: $\varepsilon = 1.00, 0.98, \dots, 0.90$) como funções do tempo t para uma população de tamanho $N = 10^5$, parâmetro de limite $l = 10$ e valores típicos de ε . Efetuamos médias sobre 200 realizações. Neste caso, para $\varepsilon \leq 0.93$ a doença não se espalha pela população. Os parâmetros utilizados foram $\alpha = 0.05$ e $\lambda_0 = 0.1$ p. 85
- 7.4 Densidade estacionária de indivíduos Suscetíveis S_{est} para $l = 10$ e alguns valores de ε na escala log-log. A reta tem inclinação -10 . Os parâmetros são: $N = 10^5$, $\alpha = 0.05$ e $\lambda_0 = 0.1$. Cada ponto é resultado de um média sobre 200 realizações. p. 86
- 7.5 Densidade estacionária de indivíduos Suscetíveis S_{est} como função de ε para alguns valores de l . As retas são ajustes aos dados numéricos, e nos dão $S_{\text{est}} \sim \varepsilon^{-v(l)}$, com $v(l) = l$ (lado esquerdo). Na figura do lado direito exibimos o expoente v como função de l . Os quadrados foram estimados a partir dos dados numéricos (ajustes na figura do lado esquerdo), enquanto que a reta é a previsão analítica da teoria do campo médio, equação (7.6). p. 87

- 7.6 Diagrama de fases do modelo no plano ε contra l , separando as fases livre da doença (região **I**) e a fase epidêmica (região **II**), onde a doença prevalece. Os quadrados foram estimados a partir dos dados gerados pelas simulações, enquanto que a curva é a previsão analítica da teoria do campo médio, equação (7.4). p. 88
- 7.7 Densidade de indivíduos Infectados $I(t)$ como função do tempo de simulação t para $l = 5$ (lado esquerdo, de cima para baixo: $\varepsilon = 1.00, 0.90, \dots, 0.70$) e para $l = 10$ (lado direito, de cima para baixo: $\varepsilon = 1.00, 0.95, \dots, 0.83$) para valores típicos de ε . Os parâmetros utilizados foram $L = 400$, $\alpha = 0.05$ e $\lambda_0 = 0.1$. Cada ponto é resultado de uma média sobre 200 realizações. p. 89
- 7.8 Densidade estacionária de indivíduos Suscetíveis S_{est} para $l = 5$ (lado esquerdo) e $l = 10$ (lado direito), para alguns valores de ε , na escala log-log. Os círculos representam a localização dos pontos críticos de cada caso. Observe que S_{est} não apresenta somente uma lei de potência como função de ε , como acontece no limite de campo médio. No entanto, existem dois comportamentos distintos, ambos do tipo lei de potência (retas cheias e alternadas, com inclinações exibidas nas legendas da figuras). Os parâmetros utilizados foram $L = 400$, $\alpha = 0.05$ e $\lambda_0 = 0.1$. Cada ponto é resultado de uma média sobre 200 realizações. p. 90
- 7.9 Diagrama de fases comparativo no plano ε contra l , separando as fases livre da doença (região **I**) e a fase epidêmica (região **II**), onde a doença prevalece. Os símbolos (círculos para o campo médio e quadrados para o caso 2D) foram estimados a partir das simulações. Observe que a fase epidêmica aumenta no caso da rede quadrada, como discutido no texto. p. 91

A.1 Distribuição dos números gerados a partir do gerador linear congruencial, equação (A.1), com $a = 16807$, $c = 0$, $m = 2^{31} - 1$ e $x_0 = 12$ (lado esquerdo). Nesta figura foram gerados N números aleatórios no intervalo $[0, 1]$, para diferentes valores de N . Observe que para N grande o resultado se aproxima de uma distribuição uniforme. Também exibimos a correlação $C(k)$ entre os números gerados (lado direito), de acordo com a equação (A.4). p. 100

1 Introdução

O conceito de que muitas leis da natureza têm origem estatística está bem fundamentado nos dias de hoje. De fato, as teorias físicas com abordagem estatística, como a mecânica quântica e a mecânica estatística, têm obtido um enorme sucesso na descrição de diversos sistemas. Porém, nos últimos anos consolidou-se uma tendência em aplicar idéias e métodos da física estatística em áreas do conhecimento além da física, como a biologia, a sociologia, a linguística e a computação, entre outras, e comportamentos típicos de sistemas físicos apareceram nestes sistemas [1]. Em fenômenos sociais, por exemplo, os constituintes básicos não são partículas, mas indivíduos, e cada indivíduo interage com um número limitado de outros indivíduos. Porém, devido a efeitos das interações entre os indivíduos, ocorrem transições ordem-desordem, como a formação espontânea de uma linguagem comum ou a emergência de consenso sobre um assunto específico, e aparecem comportamentos de escala e universalidade [2]. Estes fenômenos macroscópicos naturalmente exigem uma abordagem da física estatística a sistemas sociais e biológicos, entre outros, de forma a entendermos as regularidades observadas.

Por outro lado, os sistemas conhecidos como complexos são os alvos centrais de grande parte da pesquisa atual em física estatística [3, 4, 5, 6, 7]. Muitos sistemas físicos e não-físicos são classificados nesta categoria, dos quais podemos destacar os citados sistemas biológicos, sociais e econômicos. Apesar de diferentes, todos estes sistemas têm em comum a presença de um número muito grande de unidades interagentes e não-linearidades. Como unidades interagentes podemos pensar em proteínas em uma rede de interação biológica, pessoas com diferentes opiniões, spins em sistemas magnéticos, corretores no mercado financeiro, e muitos

outros. A não-linearidade significa que o comportamento do sistema como um todo, levando em conta todas as interações com agentes externos e entre as unidades constituintes, é completamente diferente do comportamento individual de cada unidade interagente.

Muitas técnicas vêm sendo empregadas no estudo de sistemas complexos, mas sem dúvida as simulações computacionais têm papel de destaque neste ponto. Isso se deve, em grande parte, à grande melhoria dos recursos computacionais existentes, o que nos permite atualmente simular sistemas com muitas unidades interagentes e ter grande precisão nos resultados numéricos. Além disso, a *física computacional* já é considerada uma base da ciência moderna, ao lado da física teórica e da física experimental [8].

Da mesma forma que os tradicionais sistemas magnéticos, muitos sistemas complexos exibem transições de fase entre estados distintos [6, 9]. O objetivo desta tese é discutir resultados de simulações computacionais para diversos sistemas complexos, definidos em diferentes topologias. Apesar de serem diferentes, todos estes sistemas exibem transições de fase. No capítulo 2 revisamos brevemente alguns conceitos importantes da teoria de fenômenos críticos: parâmetro de ordem, expoentes críticos e classes de universalidade. Além disso, discutimos a técnica de análise de escala para sistemas finitos, que será usada em todos os capítulos seguintes (capítulos 3 a 7). No capítulo 3 discutimos a transição de fase geométrica que ocorre em redes complexas em crescimento onde levamos em conta a idade dos sítios. Mostramos, através de simulações computacionais e argumentos de escala, que a transição se dá em um ponto crítico de primeira ordem, e que esta transição pode ser vista como uma transição de mundo grande para mundo pequeno. A seguir, vamos propor no capítulo 4 um modelo que visa otimizar o transporte de matéria em uma rede com uma estrutura unidimensional. A partir de uma formulação Lagrangeana, calculamos os fluxos ótimos da rede e mostramos que podemos ver o problema como uma transição ocupação-desocupação. No capítulo 5 discutimos as transições de fase de não-equilíbrio que ocorrem em sistemas magnéticos com dinâmica conflitiva, definidos em redes regulares. A partir dos resultados obtidos, concluímos que estes modelos se mostram mais eficientes do que os correspondentes modelos de equilíbrio no que diz respeito à comparação com dados experimentais. No capítulo 6 discutimos resultados de uma modificação em um mo-

delo de dinâmica de opiniões, que exibe uma transição de fase entre dois estados distintos, cada qual com uma opinião dominante. No capítulo 7 discutimos o comportamento crítico de um modelo de propagação de epidemias. Finalmente, após os resultados, discutimos as conclusões gerais da tese e algumas perspectivas para trabalhos futuros.

Vale ressaltar que os resultados que serão apresentados aqui estão relacionados a parte do trabalho que foi desenvolvido durante o doutorado. Para que a tese seja concisa, não discutiremos aqui a teoria do campo médio [10, 11] e simulações [12] de sistemas magnéticos desordenados em equilíbrio termodinâmico, simulações do modelo de Ising utilizando a estatística de Tsallis [13] e ferromagnetismo em magnetos moleculares [14].

2 Noções sobre Transições de Fase, Universalidade e Hipótese de Escala para Sistemas Finitos

Neste capítulo discutiremos algumas noções sobre a teoria de fenômenos críticos, especificamente a classificação das transições de fase, a definição de expoentes críticos e a análise de escala para sistemas finitos. Estas noções são muito importantes em física estatística e serão utilizadas durante toda a tese.

2.1 Expoentes Críticos e Classificação das Transições de Fase

Transições de fase são fenômenos caracterizados por mudanças descontínuas nas quantidades termodinâmicas de um determinado sistema como resposta a variações contínuas de alguma condição externa, como por exemplo temperatura, pressão, campo magnético, etc [15]. A classificação moderna das transições de fase é devida à Fisher [16], segundo o qual uma transição é denominada de *primeira ordem* se a primeira derivada da energia livre é descontínua no ponto crítico, ou seja, se existem descontinuidades na magnetização e/ou na energia interna do sistema, por exemplo, quando o sistema está próximo do ponto crítico. Uma consequência importante disso é que em transições de primeira ordem ocorre uma coexistência de fases, e o sistema passa de uma fase a outra abruptamente. Como exemplo deste tipo de transição podemos citar a transição entre os estados sólido e líquido da água. Neste caso, percebemos facilmente a coexistência das duas fases, já que gelo e água podem permanecer presentes ao mesmo tempo, e observa-se uma descontinuidade na energia interna do sistema. Por outro lado,

segundo Fisher uma transição é caracterizada como *contínua* se a derivada da energia livre é contínua e a derivada segunda é descontínua ou divergente, ambas no ponto crítico. Neste caso, não ocorre coexistência de fases, e o sistema passa de uma fase a outra continuamente. Um exemplo clássico deste tipo de transição é a sofrida por alguns materiais magnéticos. Neste caso, o material apresenta magnetização finita abaixo da temperatura crítica e, à medida que a temperatura aumenta, a magnetização diminui continuamente até atingir o valor zero exatamente na temperatura crítica. Além disso, observa-se uma divergência da susceptibilidade, que é uma derivada segunda da energia livre, exatamente neste ponto crítico.

Uma forma comum de se caracterizar as fases de um sistema é por meio de um parâmetro que possui valor não-nulo abaixo do ponto crítico e que se anula no ponto crítico e acima dele. Este parâmetro é conhecido como parâmetro de ordem, e foi introduzido inicialmente por Landau no contexto de teorias do campo médio [17]. Quando estudamos transições de fase, a principal região de interesse é a próxima ao ponto crítico, onde devemos analisar o comportamento do sistema como um todo, devido às correlações de longo alcance que emergem nesta região. Resultados experimentais e argumentos do grupo de renormalização sugerem que, próximo ao ponto crítico, o comportamento das propriedades do sistema pode, em geral, ser descrito por leis de potência, o que caracteriza um conjunto de *exponentes críticos*. Um expoente crítico qualquer λ associado a uma certa função f do sistema pode ser obtido a partir da relação [17]

$$\lambda = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\ln f(t)}{\ln t}, \quad (2.1)$$

onde $t = (T - T_c)/T_c$ é a temperatura reduzida ¹. Desta forma, o comportamento da grandeza f nas proximidades do ponto crítico é dado por

$$f(t) \sim |t|^\lambda. \quad (2.2)$$

Assim, um dado sistema é representado por um conjunto de expoentes críticos que definem o comportamento de determinadas grandezas próximo ao ponto crítico. Em um sistema magnético,

¹Observe que estamos discutindo o caso da temperatura como o parâmetro externo ao sistema, mas a equação (2.1) pode ser generalizada para qualquer outro parâmetro.

por exemplo, que exiba uma transição de fase contínua, as quantidades físicas de interesse, especificamente a magnetização m , a susceptibilidade χ , o calor específico C e o comprimento de correlação ξ obedecem, respectivamente, às seguintes relações do tipo lei de potência nas proximidades da temperatura crítica [17],

$$m \sim |t|^\beta, \quad (2.3)$$

$$\chi \sim |t|^{-\gamma}, \quad (2.4)$$

$$C \sim |t|^{-\alpha}, \quad (2.5)$$

$$\xi \sim |t|^{-\nu}, \quad (2.6)$$

com os expoentes críticos β , γ , α e ν . Um ponto importante a ser destacado é que estes expoentes não são independentes. A partir de argumentos termodinâmicos é possível obter relações rigorosas entre eles [17], dentre as quais podemos destacar a desigualdade de Rushbrooke,

$$\alpha + 2\beta + \gamma \geq 2, \quad (2.7)$$

entre outras. Além disso, muitos sistemas obedecem a relações como a equação (2.7) na forma de igualdades [15, 17, 18].

Existem também relações envolvendo os expoentes críticos e a dimensão d do sistema em consideração, como por exemplo a relação de hiperescala

$$2\beta + \gamma = d\nu. \quad (2.8)$$

Uma conclusão importante que podemos obter analisando a equação (2.8) é que $\gamma/\nu < d$, ou seja, se a equação (2.8) é válida para um sistema que sofre uma transição de fase contínua, então temos que $\gamma/\nu < d$, já que $\beta > 0$. Por outro lado, se este sistema apresenta uma transição de fase de primeira ordem, temos que $\beta = 0$, o que implica que $\gamma/\nu = d$. Esta última igualdade usualmente é utilizada para caracterizar uma transição de primeira ordem [19].

Diversos sistemas já foram estudados na literatura científica, e percebeu-se que muitas vezes sistemas distintos apresentam o mesmo conjunto de expoentes críticos, apesar de apresentarem

diferentes pontos críticos, como é o caso de sistemas magnéticos e fluídos [17]. Este fato é chamado de *universalidade*, e dizemos então que estes dois sistemas pertencem à mesma classe de universalidade. Os expoentes críticos, em geral, dependem de poucos parâmetros, como dimensão espacial do sistema, dimensionalidade do parâmetro de ordem e alcance das interações [20]. As classes de universalidade permitem que, através do estudo de sistemas mais simples, possamos obter informações valiosas sobre as propriedades de sistemas mais complicados nas proximidades do ponto crítico.

2.2 Análise de Tamanho Finito

Quando estudamos sistemas físicos analiticamente, é natural que em algum momento tomemos o chamado limite termodinâmico, ou seja, o limite $N \rightarrow \infty$, onde N é o número de unidades interagentes. Isto se deve ao fato de que tudo o que foi discutido acima só vale neste limite específico. Porém, no caso de simulações computacionais, não é possível estudar sistemas infinitos, já que a capacidade de memória e de processamento dos computadores é finita. Assim, o estudo numérico é feito em sistemas com um número finito N de unidades interagentes.

Para adequar os resultados de simulações computacionais realizadas em sistemas finitos à teoria de fenômenos críticos, que foi desenvolvida para sistemas no limite termodinâmico, como discutido acima, foi criada a hipótese de escala para sistemas finitos. A idéia é simples, e vamos exemplificar aqui para um sistema magnético de dimensão linear L na presença de um banho térmico à temperatura T . Nas proximidades da temperatura crítica T_c , assume-se que o único comprimento característico do sistema é o comprimento de correlação ξ . Este comprimento de correlação diverge no ponto crítico em um sistema infinito (no limite termodinâmico), mas é limitado pela dimensão linear do sistema no caso de um sistema finito. Espera-se portanto que efeitos de tamanho finito não sejam relevantes quando $L \gg \xi$. Porém, quando $L \ll \xi$ os efeitos de tamanho finito são fundamentais para as propriedades do sistema. Assim, na temperatura crítica T_c devemos ter $\xi(T = T_c) \sim L$, que de fato diverge no limite termodinâmico,

quando $L \rightarrow \infty$. Da equação (2.6), obtemos então a relação

$$\xi \sim L \sim (T_c(L) - T_c)^{-\nu} \Rightarrow T_c(L) - T_c \sim L^{-1/\nu}, \quad (2.9)$$

que é válida para sistemas finitos de dimensão linear L , nas proximidades do ponto crítico. Observe que, como estamos analisando a equação (2.6) nas proximidades de $T = T_c$, escrevemos $T_c(L) - T_c$ ao invés de $t = T - T_c$ na equação (2.9), onde T_c é a temperatura crítica no limite termodinâmico, ou seja, $T_c = T_c(L \rightarrow \infty)$. A partir da equação (2.9), juntamente com as equações (2.3), (2.4) e (2.5), obtemos as demais equações de escala para sistemas finitos,

$$m \sim L^{-\beta/\nu}, \quad (2.10)$$

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu}, \quad (2.11)$$

$$C \sim L^{\alpha/\nu}. \quad (2.12)$$

Observe que as equações (2.9), (2.10), (2.11) e (2.12) são consistentes com o fato de que uma transição de fase, ou seja, uma singularidade em $T = T_c$, é definida apenas para sistemas infinitos. Assim, uma evidência dos efeitos de tamanho finito é que a altura dos picos da susceptibilidade χ e do calor específico C (nos pontos onde $T = T_c$ ou $t = 0$) cresce como uma lei de potência com o tamanho da rede L e que a posição deste pico está deslocada de uma quantidade proporcional a $L^{-1/\nu}$ da temperatura crítica no limite termodinâmico (veja a figura 2.1). Em outras palavras, de acordo com a equação (2.9), a temperatura de transição em uma rede finita $T_c(L)$ difere da temperatura crítica no limite termodinâmico $T_c = T_c(L \rightarrow \infty)$ de acordo com a equação

$$T_c(L) - T_c = a_1 L^{-1/\nu}, \quad (2.13)$$

onde a_1 é uma constante. Uma implicação importante das equações (2.9) a (2.12) é que elas podem ser usadas para estimar os expoentes críticos do sistema. Este método é conhecido como análise de escala para sistemas finitos (*finite size scaling*, em inglês). Observe que podemos reescrever as equações (2.9) a (2.12) como

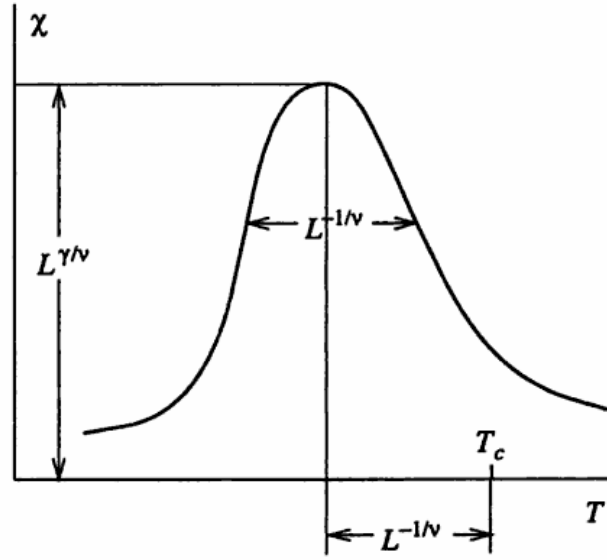


Figura 2.1: Forma esquemática da susceptibilidade em um sistema finito. Figura retirada da referência [18].

$$mL^{\beta/\nu} \sim a_4, \quad (2.14)$$

$$\chi L^{-\gamma/\nu} \sim a_3, \quad (2.15)$$

$$CL^{-\alpha/\nu} \sim a_2, \quad (2.16)$$

$$(T_c(L) - T_c)L^{1/\nu} \sim a_1, \quad (2.17)$$

onde a_1 , a_2 , a_3 e a_4 representam constantes. Rigorosamente, porém, as equações de escala (2.14) a (2.17) podem ser escritas como

$$mL^{\beta/\nu} = \tilde{m}(t L^{1/\nu}), \quad (2.18)$$

$$\chi L^{-\gamma/\nu} = \tilde{\chi}(t L^{1/\nu}), \quad (2.19)$$

$$CL^{-\alpha/\nu} = \tilde{C}(t L^{1/\nu}), \quad (2.20)$$

$$(T_c(L) - T_c)L^{1/\nu} = a_1, \quad (2.21)$$

onde \tilde{m} , $\tilde{\chi}$ e \tilde{C} são chamadas de funções de escala, que dependem somente do expoente ν e da temperatura crítica T_c . Assim, se obtivermos a partir de simulações curvas da magnetização em

função da temperatura para vários tamanhos do sistema L , poderemos reescalar os dados usando as equações (2.18) e (2.21) para obtermos uma única curva, ou seja, os dados para diferentes tamanhos irão colapsar, o que nos permite determinar os expoentes β e ν . Analogamente, podemos obter os expoentes γ e α se colapsarmos as curvas da susceptibilidade e do calor específico, usando as equações (2.19) e (2.20), respectivamente, juntamente com a equação (2.21), para diversos tamanhos diferentes.

Esta técnica de análise de escala para sistemas finitos é usualmente utilizada em simulações computacionais, e será portanto usada em todos os capítulos de resultados desta tese (capítulos 3 a 7).

3 Transição de Fase Geométrica em Redes em Crescimento com Envelhecimento dos Sítios

Neste capítulo discutiremos a transição de fase geométrica que ocorre em redes em crescimento quando consideramos a idade dos sítios. Vamos analisar algumas quantidades físicas de interesse, localizar o ponto crítico do sistema a partir da análise de tamanho finito e caracterizar a transição através do parâmetro de ordem usual de percolação. Os resultados são baseados na referência [21].

3.1 Introdução

Podemos entender o conceito de rede complexa como uma forma de modelar a natureza onde, dado um grupo de elementos constituintes de um sistema natural qualquer, devemos determinar algumas regras para estabelecer ligações entre estes elementos. Estes elementos podem ser pessoas, proteínas, a internet, aeroportos, entre outros. As ligações dependem da característica que se quer estudar, por exemplo, pessoas podem estar ligadas por conexões de amizade ou devido ao compartilhamento de alguma opinião e aeroportos estarão ligados se possuem rotas que os conectem. A área de redes complexas tem sido a mais ativa da física estatística nos últimos anos, e muitas técnicas da física, matemática, estatística e computação vêm sendo empregadas no seu estudo [7, 22].

Uma quantidade importante no estudo de redes complexas é o chamado menor caminho médio $\langle l \rangle$. Dado um par de sítios (i, j) de uma rede qualquer, o menor caminho entre eles é

definido como o menor número de ligações que temos que atravessar para sair de i e chegar a j [23]. Quando fazemos uma média sobre todos os pares de sítios da rede, obtemos então o menor caminho médio da rede. Considerando uma rede regular d -dimensional com tamanho linear L , ou seja, com $N = L^d$ sítios, podemos perceber facilmente que o menor caminho médio cresce linearmente com L , ou seja, temos que $\langle l \rangle \sim L$. Em outras palavras, se aumentarmos a rede por um fator f qualquer, o menor caminho médio irá aumentar também por um fator f . Por outro lado, certas redes complexas possuem menores caminhos médios com comportamentos do tipo $\langle l \rangle \sim \log N$, ou seja, a distância entre todos os pares de sítios nestas redes cresce com o tamanho da rede de uma forma muito mais lenta do que em uma rede regular. Redes com esta característica são chamadas de redes de mundo pequeno, ou *small world*, em inglês. Esta pequena distância entre pares de sítios faz com que redes de mundo pequeno sejam mais eficientes do que redes regulares para processos de transporte, por exemplo [24]. Existem outras redes complexas, chamadas de redes livres de escala (*scale free*, em inglês), que possuem uma distância ainda menor entre seus sítios, onde o menor caminho médio cresce com $\langle l \rangle \sim \log(\log N)$, o que alguns autores chamam de *ultra small world* [23, 25].

Uma das propriedades mais estudadas das redes complexas é a distribuição de conectividades $P(k)$, ou seja, uma função que nos dá a probabilidade de que um sítio da rede escolhido aleatoriamente tenha exatamente k ligações (ou k vizinhos). Muitos modelos geram redes livres de escala, que tem distribuição de conectividades dada por $P(k) \sim k^{-\gamma}$, com diferentes valores do expoente γ . Esta distribuição nos diz que a rede possui poucos sítios com muitos vizinhos, ao passo de que sítios com poucos vizinhos são estatisticamente muito prováveis. Muitas redes reais apresentam este tipo de comportamento livre de escala, como a internet [26] ($\gamma = 2.1$), redes de colaboração de atores de cinema [27] ($\gamma = 2.3$), redes metabólicas [28] ($\gamma = 2.0 - 2.4$), redes de interação entre proteínas [29] ($\gamma = 2.4$) e muitas outras.

O modelo mais famoso que gera redes livres de escala é o modelo de Barabási e Albert (BA) [27] (veja a figura 3.1). No modelo BA, a rede cresce com o tempo, e são acrescentados a cada passo temporal sítios e ligações. Um novo sítio é ligado a um sítio pré-existente na rede com uma probabilidade proporcional à conectividade do sítio antigo. Este procedimento gera

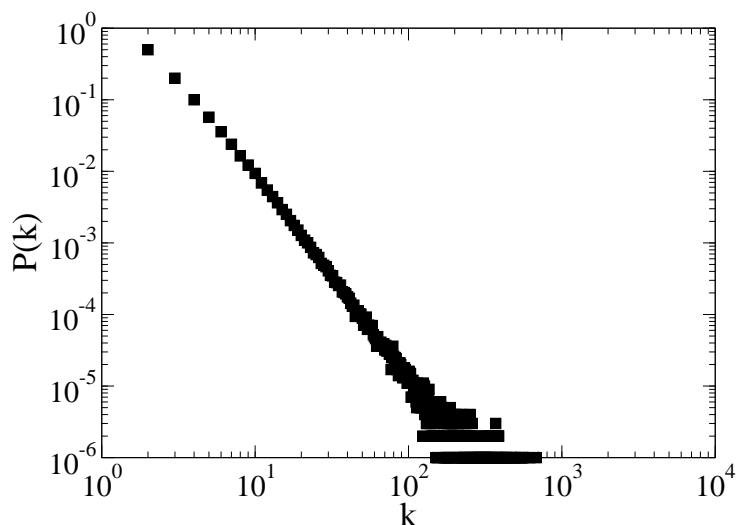


Figura 3.1: Distribuição de conectividades do modelo de Barabási-Albert [27]. O gráfico está na escala logarítmica nos dois eixos, o que indica que a forma geral desta distribuição é $P(k) \sim k^{-\gamma}$, sendo $\gamma = 3$ para este modelo.

redes com $\gamma = 3$ [26, 27]. Efeitos de idade dos sítios em redes do tipo BA foram analisados por alguns autores [30, 31, 32]. A principal motivação é que redes de citações de artigos tem este comportamento, já que é pouco comum citarmos artigos antigos. Além disso, redes sociais também apresentam este comportamento. De fato, é comum termos amigos na nossa mesma faixa etária [33].

Existem também outros modelos de redes complexas que se tornaram famosos, como o de Watts e Strogatz (WS) [34]. Este modelo gera redes com $P(k)$ que segue uma distribuição de Poisson. A rede é gerada no modelo WS da seguinte forma: começamos com uma rede unidimensional fechada (um anel), com N sítios, ligados cada um a m vizinhos (ou $m/2$ à direita e $m/2$ à esquerda). A seguir, cada ligação à direita de cada sítio será religada com probabilidade p a um outro sítio escolhido aleatoriamente, sendo p o parâmetro de controle do modelo. Múltiplas e auto-ligações não são permitidas. Com este algoritmo são criadas, em média, $pNm/2$ ligações de longo alcance na rede, e pode-se verificar que o menor caminho médio nesta rede é da ordem do logaritmo de N para valores de $p > 0$, ou seja, o modelo WS gera redes de mundo pequeno. Na figura 3.2 podemos ver o efeito de se variar o valor de p ,

entre os limites $p = 0$ (rede regular) e $p = 1$ (rede completamente aleatória).

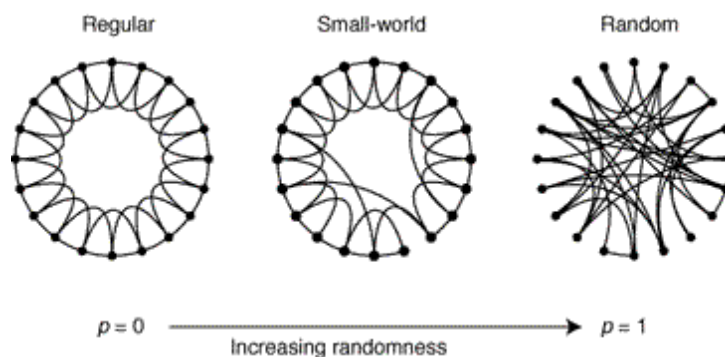


Figura 3.2: Efeitos da variação da probabilidade de reconexão p no modelo de Watts e Strogatz [34].

Nos últimos 6 anos intensificou-se o interesse pelo estudo de fenômenos críticos em redes complexas [9], especialmente transições de fase geométricas, como a percolação. Em redes complexas, como em geral não existe uma noção de espaço euclidiano ou um espaço de incorporação evidente, analisa-se a emergência de um aglomerado gigante, ou seja, o aglomerado com o maior número de sítios, que seria o análogo dos aglomerados de percolação em redes d -dimensionais [35]. A emergência de um aglomerado gigante em topologias complexas apresenta comportamentos bastante distintos de redes regulares. De fato, muitos modelos de redes em crescimento caracterizam esta transição como uma transição de fase de ordem infinita [36, 37, 38, 39], cuja origem ainda não é bem compreendida [9]. Além disso, o tamanho médio dos aglomerados finitos não diverge no ponto crítico, como usualmente ocorre em percolação, mas apresenta valor finito e um descontinuidade neste ponto crítico [9].

Como contribuição para o estudo de fenômenos críticos em redes complexas discutiremos neste capítulo um modelo de redes em crescimento com adição de sítios e ligações, onde sítios são conectados entre si com uma probabilidade que depende das suas idades e das suas conectividades. Através de simulações computacionais e argumentos de escala descreveremos a transição de fase geométrica que ocorre no sistema, e localizaremos a posição do ponto crítico utilizando a técnica de análise de tamanho finito.

3.2 Modelo

O algoritmo para construção da rede é o seguinte:

- Começamos com uma rede pequena, com 2 sítios conectados entre si;
- A cada passo temporal acrescentamos 1 sítio e 1 ligação. Esta nova ligação irá conectar dois sítios (i, j) escolhidos aleatoriamente com uma probabilidade $\Gamma(k_i, k_j, a_i, a_j, t) = \Gamma(k_i, a_i, t)\Gamma(k_j, a_j, t)$, em que

$$\Gamma(k, a, t) = C(t)(A_0 + k)e^{-\alpha(t-a)}, \quad (3.1)$$

é a probabilidade de que um sítio com k vizinhos e adicionado à rede no instante $a \leq t$ receba um link¹, e $C(t)$ é o fator de normalização tal que $\sum_i \Gamma(k_i, a_i, t) = 1$. Múltiplas ligações entre dois sítios diferentes e ligações entre o mesmo sítio (auto-ligações) são proibidas.

O parâmetro α faz o papel de inverso de uma certa escala de tempo β , que suprime a atratividade dos sítios antigos em relação a novas conexões. O caso $\alpha = 0$ ($\beta \rightarrow \infty$) foi estudado analiticamente em [39], onde os autores reportaram uma transição de fase de ordem infinita quando o número de ligações adicionadas a cada passo de tempo era variado em torno de um certo valor crítico. Neste capítulo iremos analisar o efeito da variação do parâmetro de memória dos sítios α , e iremos descrever a transição que ocorre no ponto crítico α_c , a ser determinado.

Para cada valor de α , foram geradas redes com tamanhos que variam entre 2000 e 15000 sítios. Geramos 1000 redes para um dado valor de α e N , a partir do estado inicial (com 2 sítios conectados entre si), e nas medidas das quantidades de interesse consideramos médias sobre estas 1000 realizações. Como os novos sítios não são forçados a se conectarem imediatamente a sítios quaisquer pré-existentes na rede, como nos modelos tipo BA, sempre há a possibilidade de gerarmos redes com aglomerados isolados. Para cada valor de α , os aglomerados foram

¹Note que uma atratividade inicial A_0 é necessária para os sítios novos, que tem $k = 0$, participarem da dinâmica. Neste capítulo, analisaremos o sistema com $A_0 = 1$.

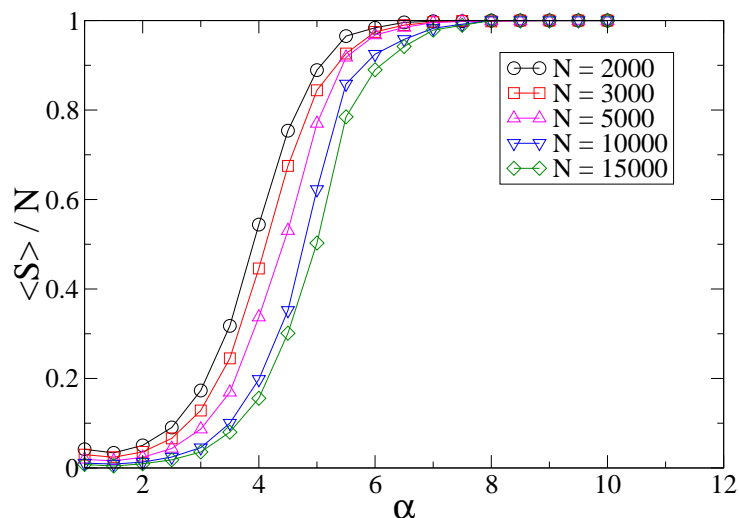


Figura 3.3: Tamanho relativo médio do maior aglomerado como função do parâmetro α . Podemos observar uma transição de fase em um certo valor $\alpha_c(N)$ onde o aglomerado gigante emerge. Cada ponto é resultado de uma média sobre 10^3 realizações de redes.

identificados pelo algoritmo de busca em largura [40, 41] (*breadth-first search*, em inglês), e calculamos o tamanho médio do maior aglomerado $\langle S(\alpha) \rangle$, normalizado pelo tamanho da rede N . Esta quantidade nos dá a probabilidade de que um sítio escolhido ao acaso pertença ao maior aglomerado. Esta quantidade é a que usualmente é usada como parâmetro de ordem em problemas de percolação em redes complexas, como discutido na seção anterior.

Como discutido na introdução deste capítulo, modelos de redes em crescimento com dependência na idade dos sítios têm aplicações em redes de citações de artigos. Ressaltamos que uma dependência na probabilidade de conexão como a da equação (3.1), ou seja, com ligação preferencial e dependência exponencial na idade dos sítios, foi verificada em redes de citações de artigos de diferentes áreas, como física, medicina e engenharia, em um trabalho posterior ao nosso [42].

3.3 Transição de Fase

Os resultados numéricos para o parâmetro de ordem e para o número médio de aglomerados em função do parâmetro α são exibidos nas figuras 3.3 e 3.4, respectivamente. Podemos

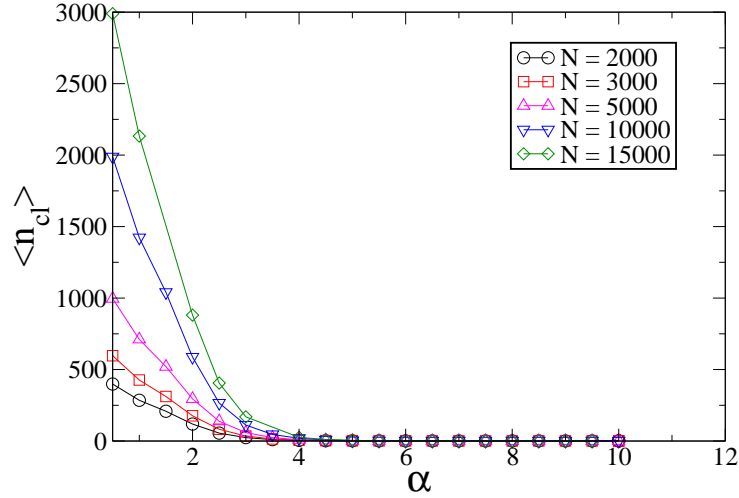


Figura 3.4: Número médio de aglomerados como função do parâmetro α . Assim como na figura 3.3 podemos observar um transição em um certo valor $\alpha_c(N)$ onde o aglomerado gigante emerge. Cada ponto é resultado de um média sobre 10^3 realizações de redes.

notar que para pequenos valores de α a rede é fragmentada em muitos aglomerados, enquanto que após um certo valor $\alpha_c(N)$, que depende do tamanho da rede, um aglomerado gigante emerge. Para determinar os valores $\alpha_c(N)$, analisamos as flutuações do parâmetro de ordem, ou seja, $\chi(\alpha, N) = \langle S^2 \rangle - \langle S \rangle^2$, e identificamos a posição do máximo de χ com $\alpha_c(N)$. Os resultados são mostrados na figura 3.5. A análise de tamanho finito para transições de fase sugere um deslocamento do tipo lei de potência do ponto crítico para sistemas finitos na forma (ver capítulo 2)

$$\alpha_c(N) = \alpha_c(\infty) + A N^{-1/\nu}, \quad (3.2)$$

onde A é uma constante e $\nu = 1/d$ para transições de fase de primeira ordem [19]. No entanto, os resultados numéricos nos sugerem um comportamento do tipo

$$\ln \alpha_c(N) = \ln \alpha_c(\infty) - b N^{-1}, \quad (3.3)$$

com $\ln \alpha_c(\infty) = 1.7171 \pm 0.0003$ e $b = 516.17 \pm 0.15$ (veja a figura 3.6). No limite termodinâmico, ou seja, para $N \rightarrow \infty$, obtemos $\alpha_c(\infty) = \alpha_c = 5.5682 \pm 0.0072$.

Um outro comportamento anômalo desta transição é que o parâmetro de ordem é uma

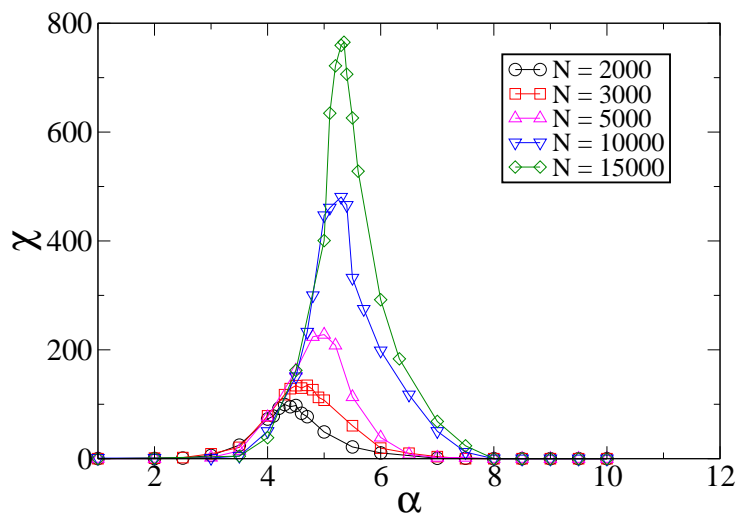


Figura 3.5: Flutuação do parâmetro de ordem para redes de diferentes tamanhos N como função de α . As curvas tem um comportamento típico de susceptibilidades, e os máximos se deslocam no eixo x quando aumentamos o tamanho da rede. Cada ponto é resultado de um média sobre 10^3 realizações de redes.

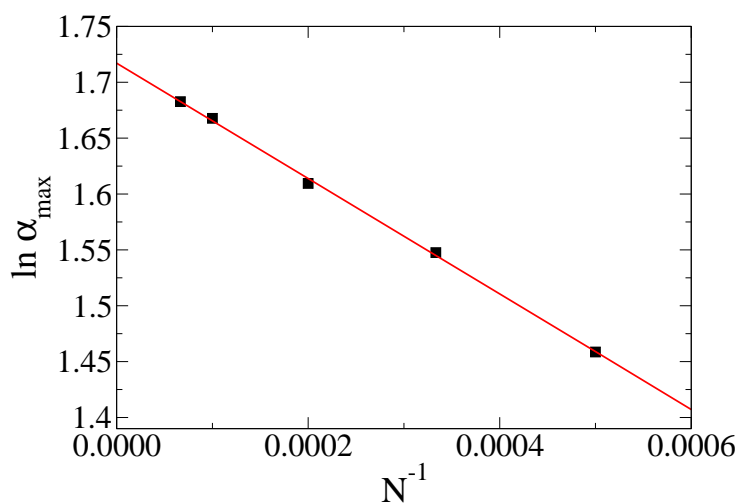


Figura 3.6: Posições dos máximos $\alpha_c(N)$ contra o inverso do tamanho da rede N^{-1} . A reta corresponde ao melhor ajuste numérico, o que nos dá $\ln y = 1.7171 - 516.17x$.

função da razão α/α_c , como pode ser visto na figura 3.7. Isto resulta do fato de que, próximo a α_c , a variável de escala do tamanho médio do maior aglomerado $\langle S \rangle$ é $x = \log(\alpha)$, como podemos ver na equação (3.3). Assim, uma função da distância na variável x se torna uma função da razão na variável α . É notável que o mesmo comportamento ocorre em percolação em 1 dimensão [43], onde o comprimento característico $\xi(p)$ escala com $\log(p/p_c)^{-1}$, que

pode ser expandido como $\xi(p) \sim |p - p_c|^{-1}$ quando p é suficientemente próximo de $p_c = 1$.

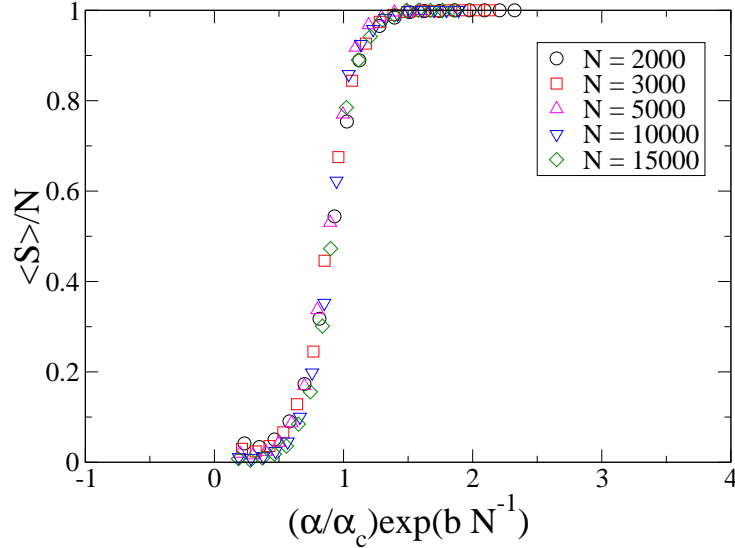


Figura 3.7: Colapso do parâmetro de ordem $\langle S \rangle / N$, onde utilizamos a função de escala $\frac{\alpha}{\alpha_c(N)}$, onde $\alpha_c(N) = \alpha_c e^{-bN^{-1}}$. Os valores dos parâmetros são $\alpha_c = 5.5682$ e $b = 516.17$.

A analogia com percolação em um sistema unidimensional fica mais clara quando consideramos a distribuição relativa de tamanhos de aglomerados, isto é, quando medimos a quantidade de aglomerados com tamanho s , dividido pelo tamanho da rede N , e analisamos esta quantidade em função de s (veja a figura 3.8). No limite $\alpha \rightarrow 0$, dependendo do número de ligações l adicionadas à rede a cada passo de tempo, o sistema pode apresentar uma fase crítica onde não existe um aglomerado gigante ou uma fase normal com a presença do aglomerado gigante, como previsto analiticamente em [39]. Como no nosso caso consideramos $l = 1$, não existe um aglomerado gigante para $\alpha \rightarrow 0$, de acordo com [39], e a rede consiste de muitos aglomerados de diferentes tamanhos s , distribuídos de acordo com uma função exponencial decrescente,

$$n(s) \sim e^{-s/\xi(\alpha)}. \quad (3.4)$$

Podemos agora notar que a função geral de escala para a distribuição relativa de tamanhos de aglomerados é dada por $n(s) \sim s^{-\tau} e^{-s/\xi}$ [43], com um tamanho característico ξ que diverge próximo ao ponto crítico como $\xi \sim |p - p_c|^{-\nu}$, e que em uma dimensão temos $\nu = 1$ e $\tau = 0$.

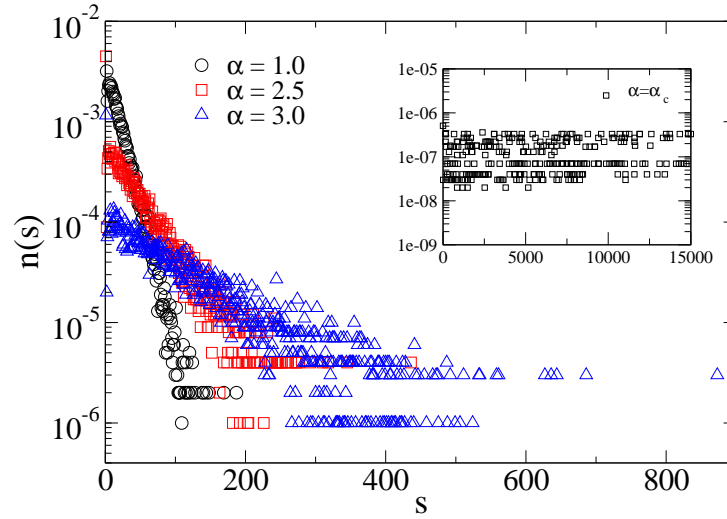


Figura 3.8: Distribuição relativa de tamanhos dos aglomerados $n(s)$ para $N = 15000$ sítios e alguns valores do parâmetro α , na escala log-linear. O decaimento exponencial de $n(s)$ para todos os valores de α sugerem que $\tau = 0$, como no caso do problema de percolação em 1 dimensão. Em destaque, na figura inserida, temos $n(s)$ no ponto crítico α_c .

De acordo com a equação (3.4), considerando a forma geral, também temos no nosso caso $\tau = 0$. Porém, como podemos ver em destaque na figura 3.8 (figura inserida), toda a fase na região $\alpha > \alpha_c$ é crítica no sentido em que $\xi(\alpha \geq \alpha_c) \rightarrow \infty$. Podemos entender este resultado notando que, quando $\alpha \gg \alpha_c$, a configuração estatisticamente mais provável é um linha de sítios conectados, ou seja, cada sítio se encontra conectado com o seu vizinho imediatamente anterior no passado (com idade 1 unidade menor). De fato, podemos fazer uma estimativa da probabilidade de formação de uma linha. Imagine um certo instante da rede onde temos uma linha de alguns sítios conectados. Dado que temos a probabilidade de conectar dois sítios a e b dada por $P(a, b) = C(1 + k_a)(1 + k_b)e^{-\alpha(t_a + t_b)}$, tais que as idades e as conectividades de a e b são t_a , t_b , k_a e k_b , respectivamente, e desprezando em uma primeira aproximação os termos com contribuições menores que $e^{-4\alpha}$, a probabilidade P_{con} de que um sítio recém adicionado à rede se conecte à linha é dada por

$$P_{\text{con}} = \frac{4}{27}(2e^{-\alpha} + 3e^{-2\alpha} + 3e^{-3\alpha} + 3e^{-4\alpha}). \quad (3.5)$$

Por outro lado, a probabilidade P_{novo} de um novo aglomerado se formar, ou seja, a probabilidade

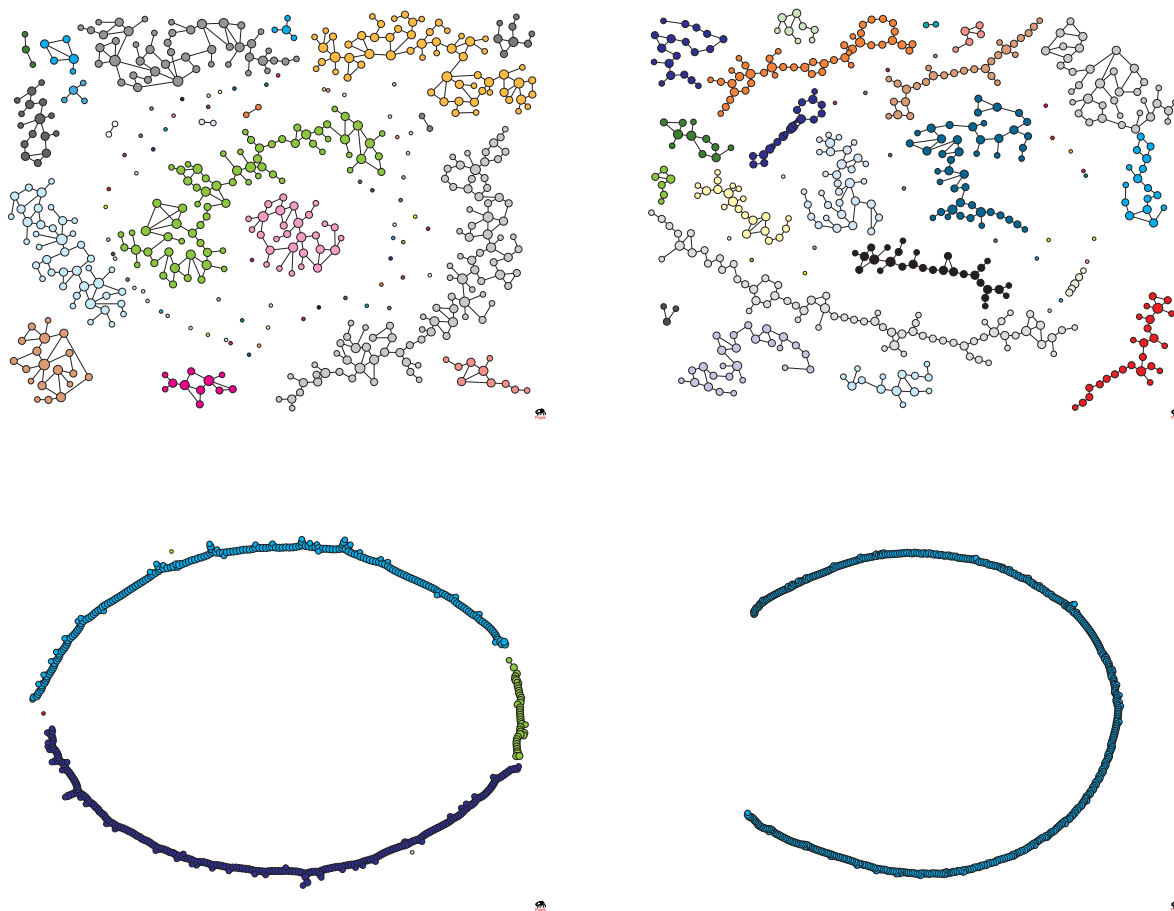


Figura 3.9: Representação esquemática da transição geométrica ocorrida nas redes em crescimento estudadas neste capítulo. Consideramos redes com $N = 500$ sítios e alguns valores de α : 0.5 (superior esquerda), 1.0 (superior direita), 2.0 (inferior esquerda) e 3.0 (inferior direita). Observe que no último caso a rede tem um estrutura unidimensional, como discutido no texto.

de que o novo sítio não se conecte à linha pré-existente, é dada por

$$P_{\text{novo}} = \frac{24}{27}(4e^{-4\alpha}). \quad (3.6)$$

Podemos notar que estas probabilidades são comparáveis para $4 < \alpha < 5$. Porém, como sempre existe a possibilidade de não conectar o novo sítio aos pré-existentes, podemos concluir que para valores maiores de α o sistema deve ter propriedades de escala de percolação em uma dimensão (em outras palavras, uma linha de sítios). Uma representação esquemática desta transição é exibida na figura 3.9, onde mostramos o estado final de redes com $N = 500$ sítios e diferentes valores de α . Observe que para o maior valor de α exibido, a rede tem uma estrutura

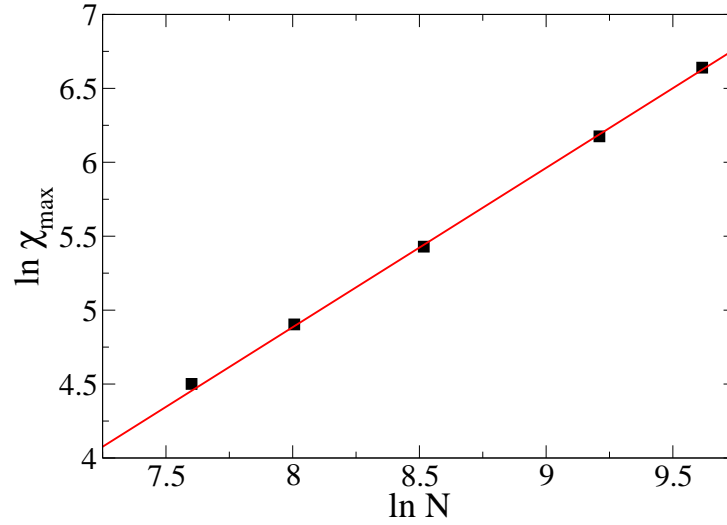


Figura 3.10: Máximos da susceptibilidade $\chi(\alpha_c(N))$ contra o tamanho da rede N na escala log-log. O melhor ajuste dos dados numéricos indica uma divergência do tipo lei de potência $\chi(\alpha_c) \sim N^\gamma$, com $\gamma = 1.02 \pm 0.02$.

unidimensional.

Uma outra quantidade que consideramos foi a divergência da susceptibilidade no ponto crítico. Observamos um comportamento do tipo lei de potência com o tamanho da rede, ou seja,

$$\chi(\alpha_c) \sim N^\gamma, \quad (3.7)$$

com $\gamma = 1.02 \pm 0.02$, como podemos observar na figura 3.10. Suficientemente perto do ponto crítico α_c , podemos aproximar a equação para o deslocamento do ponto crítico para sistemas finitos, equação (3.3), por

$$\ln \left(\frac{\alpha_c(N)}{\alpha_c(\infty)} \right) \approx \frac{\alpha_c(N) - \alpha_c(\infty)}{\alpha_c(\infty)} \sim N^{-1}, \quad (3.8)$$

e de acordo com a equação (3.2) encontramos que $\nu = 1$. Este é exatamente o resultado esperado para um transição de fase de primeira ordem em sistemas unidimensionais, baseado em argumentos de escala e do grupo de renormalização [19].

No limite $\alpha \rightarrow 0$, onde os efeitos de idade se tornam suficientemente pequenos, as ligações entre os sítios são adicionadas aleatoriamente, e os aglomerados finitos devem ter a topologia

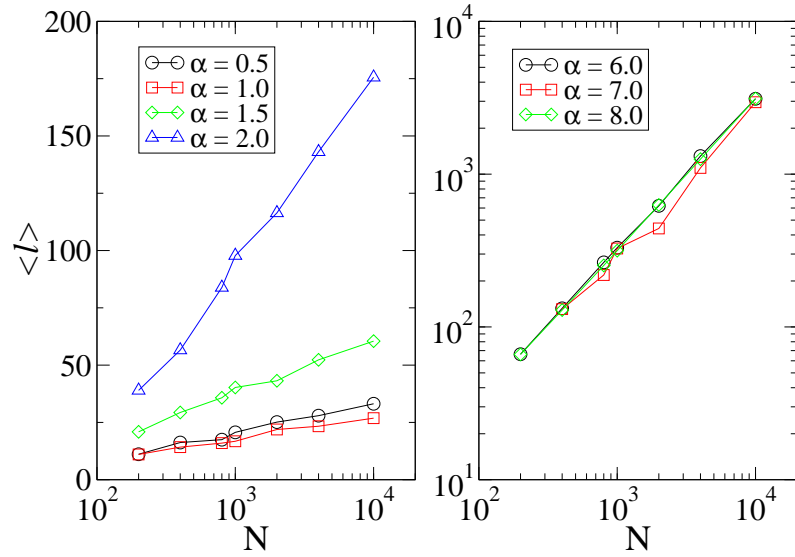


Figura 3.11: Comportamento de escala do menor caminho médio entre todos os pares de sítios que pertencem ao maior aglomerado de redes de tamanho N , para valores de α abaixo (esquerda) e acima do ponto crítico α_c (direita). A emergência do aglomerado gigante é acompanhada por uma mudança na topologia da rede de estilo árvore para quase unidimensional, como indica a mudança do comportamento de escala do menor caminho médio $\langle l \rangle$ de $\log N$ para linear com N .

do tipo árvore, localmente, no limite de redes grandes [39, 44]. Neste limite, podemos esperar uma dependência logarítmica com o tamanho da rede N do menor caminho médio $\langle l(N, \alpha) \rangle$, definido como [23]

$$\langle l \rangle = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{i,j=1}^N \langle l_{ij} \rangle, \quad (3.9)$$

onde l_{ij} é o menor número de ligações que devemos atravessar para sair do sítio i e chegar ao sítio j , e $\langle \rangle$ representa uma média sobre realizações. Por outro lado, em uma rede d -dimensional o menor caminho médio é proporcional à dimensão linear L . Assim, quando aumentamos o efeito de envelhecimento na rede, aumentando o parâmetro α , esperamos uma transição geométrica, de redes de mundo pequeno para mundo grande (*small to large world*, em inglês) [32], ou matematicamente uma mudança do comportamento logarítmico para linear do menor caminho médio em função do tamanho da rede. Na figura 3.11 exibimos o menor caminho médio $\langle l(N, \alpha) \rangle$ para todos os pares de sítios do maior aglomerado da rede, com médias sobre 10^3 realizações. Assim como discutido acima, encontramos um comportamento logarítmico de

$\langle l \rangle$ com N para $\alpha < \alpha_c$, enquanto que $\langle l \rangle \sim N$ para $\alpha > \alpha_c$, o que suporta a analogia feita neste capítulo sobre a ocorrência de uma transição de primeira ordem na mesma classe de universalidade de percolação em uma dimensão.

Como observação final a este capítulo, a distribuição de conectividades $P(k)$ deste problema é livre de escala somente para $\alpha = 0$, em acordo com o cálculo analítico da referência [39]. Para valores maiores de α , temos uma distribuição $P(k)$ exponencial, e que se aproxima de uma delta de Dirac em $k = 2$ quando $\alpha \rightarrow \alpha_c$, o que também confirma o caráter unidimensional da rede para $\alpha > \alpha_c$.

3.4 Conclusões

Neste capítulo estudamos as propriedades de percolação de redes em crescimento com envelhecimento dos sítios e conexão preferencial de ligações. Assim, sítios introduzidos anteriormente no tempo são exponencialmente menos prováveis de receber novas ligações que sítios mais “jovens” e estas ligações conectam preferencialmente sítios com maior grau (maior número de vizinhos). No nosso modelo, um sítio e uma ligação são adicionados a cada passo temporal, e o efeito de envelhecimento em um sítio com idade a e k vizinhos é controlado pela mudança de um expoente α na probabilidade de conexão $P(k, a) \propto (1 + k)e^{-\alpha a}$.

Este modelo apresenta uma transição descontínua no tamanho relativo do aglomerado gigante: abaixo de um certo valor crítico α_c existe um número grande de aglomerados topologicamente do tipo árvore, e em um ponto crítico de primeira ordem um componente gigante de sítios linearmente conectados emerge, ou seja, este aglomerado gigante tem uma estrutura unidimensional. Medidas do menor caminho médio $\langle l \rangle$ entre todos os pares de sítios situados no maior aglomerado corroboram este resultado: encontramos um comportamento logaritmico de $\langle l \rangle$ com o tamanho da rede N para $\alpha < \alpha_c$, enquanto que $\langle l \rangle \sim N$ para $\alpha > \alpha_c$.

Analisamos as propriedades desta transição através de simulações computacionais, e encontramos que as flutuações do parâmetro de ordem, que é o tamanho relativo do maior aglomerado, escalam linearmente com o tamanho do sistema e que, próximo do ponto crítico, o inverso de

um comprimento característico se anula linearmente com a distância ao ponto crítico. Estes resultados sugerem que a transição pertence à mesma classe de universalidade do problema de percolação em uma dimensão [43].

4 Otimização de Fluxos em Redes de Transporte: Transição de Ocupação e Padrões de Flutuação

Neste capítulo, iremos estudar um modelo de redes de transporte onde o custo para transportar matéria em um dado canal é uma função não-linear do fluxo neste canal. Otimizando o custo total de transporte podemos mostrar que ocorre uma transição ocupação-desocupação na rede, e que o sistema apresenta comportamentos distintos nas duas fases.

4.1 Introdução

Redes de transporte são sistemas desenvolvidos para realizar fluxo eficiente de matéria, como carros em rodovias, pacotes na Internet, nutrientes em células, grãos em silos e muitos outros. Um fenômeno comum a todos estes sistemas é o congestionamento do tráfego, causado pelo volume finito de matéria que pode ser transportada na rede e pela capacidade limitada dos canais de transporte [45, 46, 47, 48]. Fazer previsões sobre congestionamento de tráfego nesses sistemas é um problema de grande interesse prático, e tem motivado uma grande quantidade de esforços em pesquisas interdisciplinares, baseadas em idéias da física estatística [45, 49, 50, 51, 52, 53], princípios variacionais [54, 55], teoria de redes [56] e outras. Outra questão de interesse teórico e prático diz respeito à otimização do transporte em redes, o que tem sido alvo de intensa pesquisa nos últimos anos [57, 58, 59, 60, 61].

Em princípio, o movimento microscópico de partículas interagentes fluindo numa certa região pode ser descrito pelas equações de movimento de Newton, que por sua vez podem

ser devidamente substituídas por uma formulação Lagrangeana, onde a distribuição de velocidades das partículas, ou mais apropriadamente, o fluxo dos pontos no espaço, é obtido pela minimização da ação associada à Lagrangeana [62]. No entanto, desenvolver uma teoria similar para o tráfego veicular, por exemplo, torna-se um desafio já que temos que levar em consideração não apenas a velocidade dos veículos mas também o efeito das interações com os outros motoristas que, ao contrário do que ocorre com interações entre partículas, é uma característica particular de cada motorista [63, 64].

Um conceito que levou a um grande avanço na descrição do tráfego é o equilíbrio do tráfego [54, 65], que diz que cada motorista tende a otimizar a escolha de sua rota para minimizar o tempo de percurso. Suponha que desejamos descrever um sistema de estradas como um grafo $C(L, N)$ com L canais (ruas) e N sítios (interseções ou acessos de entrada/saída de veículos), e que f_i seja o fluxo num certo canal i . A variável que nós temos que otimizar neste caso é o tempo total de viagem,

$$\sum_{i=1}^L \hat{t}_i, \quad (4.1)$$

onde $\hat{t} = t_i(f_i) \cdot f_i$ é o tempo necessário para todos os veículo atravessarem o canal i . Se o fluxo em um determinado canal é suficientemente baixo, os motoristas não interagem uns com os outros, e o tempo de viagem é independente do fluxo no canal. No entanto, acima de um certo fluxo limite, o canal começa a apresentar congestionamento, e o tempo necessário para atravessá-lo passa a depender do fluxo [54, 66, 67]. A forma precisa desta dependência está associada a detalhes das condições da estrada, hora do dia e outros [68, 69], e pode ser escrita simplificadamente como

$$t_i = \bar{t}_i + [af_i + bf_i^2 + \dots]\theta(f_i - f_{ic}). \quad (4.2)$$

Em outras palavras, abaixo de um certo limite f_{ic} o sistema não apresenta congestionamento, e o tempo requerido para um veículo atravessar um canal i do sistema é dado por um certo valor médio \bar{t}_i que é uma função linear do fluxo f_i neste canal. Porém, se este fluxo f_i é maior que um valor limite f_{ic} , termos não-lineares devem ser considerados para modelar o congestionamento. Esse comportamento é universal, e geralmente representado em um gráfico conhecido como

diagrama fundamental do tráfego. Ilustramos na figura 4.1 este diagrama fundamental no plano fluxo F contra densidade D de veículos para um estrada (I-94 sentido leste, saída Park ave.) do estado de Minnesota [70].

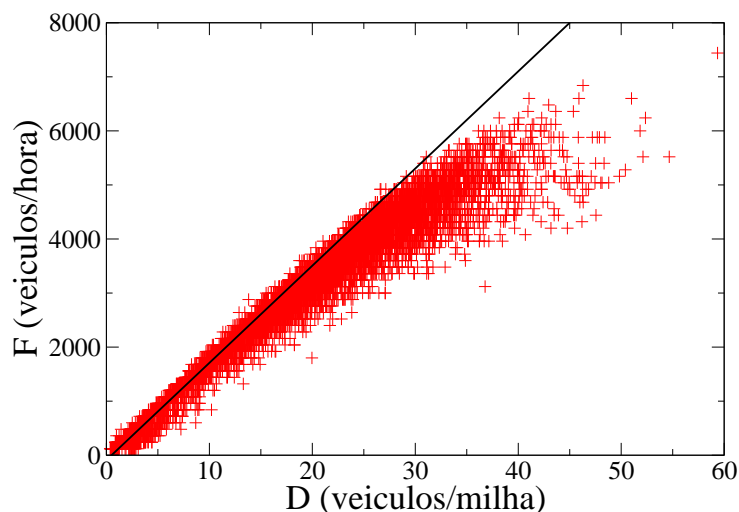


Figura 4.1: Diagrama fundamental do tráfego no plano fluxo F (veículos por hora) contra densidade D (veículos/milha) obtido a partir de dados de uma estrada do estado americano de Minnesota [70]. Observe que temos uma dependência linear $F \propto D$ para densidades baixas (observe a reta preta), mas para densidades altas esta dependência passa a ser não-linear.

Suponhamos que veículos entrem e saiam do sistema num certo conjunto de ruas E e S , respectivamente, e que o fluxo total no sistema seja I . Então, os vínculos de conservação do fluxo podem ser escritos como

$$\begin{aligned}
 f_i &\geq 0, \\
 \sum_{i \in E} f_i &= I, \\
 \sum_{i \in S} f_i &= I, \\
 \sum_{i \neq E, S} f_i &= 0.
 \end{aligned} \tag{4.3}$$

Assumindo estes vínculos, chegamos a uma formulação de tráfego em rotas que minimizam o problema, com fluxos ótimos dados pela solução das equações (4.1 - 4.3). É importante notar que essas idéias podem ser naturalmente estendidas para qualquer rede de transporte, como mostrado em [71, 72], onde foram obtidos resultados gerais sobre utilização otimizada destes

sistemas, sendo o tráfego em rodovias um exemplo particular, relacionando a topologia efetivamente utilizada da rede de transporte com a concavidade da função de custo, ou seja, relacionando custo e fluxo.

Baseado nestas idéias, será discutida a seguir uma formulação Lagrangeana para otimização de fluxos em redes de transporte [73]. A interação entre os motoristas é responsável por uma transição entre uma fase de ocupação densa da rede, onde cada canal disponível é usado de forma a evitar congestionamento, e uma fase de ocupação esparsa, onde a optimalidade do problema faz com que o tráfego ocupe apenas as rotas de menor custo.

4.2 Modelo e Solução Geral

Vamos considerar uma rede de transporte geral, com uma dada estrutura espacial, onde existe um fluxo de matéria nos canais devido à entrada de alguma corrente I no sistema em certos pontos (fontes), havendo também alguns pontos de saída (sorvedouros). Seja $f_i \geq 0$ o fluxo ou corrente em cada canal i . O estado da rede de transporte é então definido pela configuração de fluxos $\{f_i\}$ que satisfazem a conservação de fluxo em cada interseção do sistema e que minimiza o tempo necessário para transportar cada unidade que flui no sistema de um ponto inicial ao seu destino. O tempo de transporte em redes com capacidade finita de transporte, como rodovias, depende do fluxo f_i que atravessa cada canal i , como discutido acima, de forma que podemos escrever o custo total de transporte por unidade de tempo E como

$$E = \sum_i e_i \left(f_i + \frac{1}{2} f_i^2 \right), \quad (4.4)$$

onde usamos a forma geral do tempo de viagem t_i como função do tráfego f_i , dada pela equação (4.2), reescalado em unidades apropriadas, e negligenciamos os termos de ordem cúbica e superior. Na equação (4.4) as quantidades e_i são os custos associados à travessia de um canal i . Estes custos incluem, além do tempo de viagem t_i , outros custos possíveis, tais como condições do canal, entre outros. Consideremos então um fluxo injetado na rede I , n canais direcionados e custos $e_1 < e_2 < \dots < e_n$ como mostrado na figura 4.2. Assumindo equilíbrio do tráfego,

a configuração de fluxos ótimos desse sistema será dada pela minimização do problema de vínculos dados por

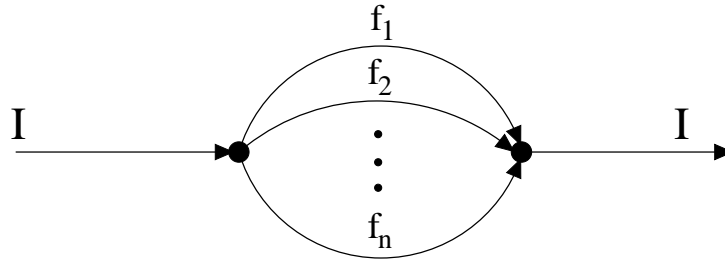


Figura 4.2: Representação esquemática de um sistema com n canais. Dois sítios são conectados por n canais direcionados com fluxos f_1, f_2, \dots, f_n e custos intrínsecos $e_1 < e_2 < \dots < e_n$. Uma corrente de entrada I é injetada no sítio da esquerda e removida no sítio da direita, garantindo a conservação do fluxo total.

$$L(\lambda) = \sum_i e_i \left(f_i + \frac{1}{2} f_i^2 \right) + \lambda \left(\sum_i f_i - I \right), \quad (4.5)$$

onde nós introduzimos um multiplicador de Lagrange λ associado ao vínculo

$$\sum_i f_i = I. \quad (4.6)$$

O mínimo local da função dada pela equação (4.5), tendo λ como parâmetro, é obtida pela solução do problema $\partial L(\lambda) / \partial f_i = 0$. Obtemos então

$$f_i = -\frac{\lambda}{e_i} - 1. \quad (4.7)$$

O multiplicador de Lagrange λ pode ser eliminado da equação (4.7) com o uso do vínculo (4.6). Assim, a equação (4.7) pode ser escrita finalmente como

$$f_i = -1 + \frac{n+I}{e_i} \left(\sum_{j=1}^n \frac{1}{e_j} \right)^{-1}. \quad (4.8)$$

Da convexidade da função de custo, equação (4.4), temos que esta solução é um mínimo global. No entanto, a solução obtida na forma acima pode conter fluxos negativos e, assim, não ser uma solução válida. Da equação (4.8) obtemos que a corrente mínima $I_c^{(k)}$ consistente com o vínculo

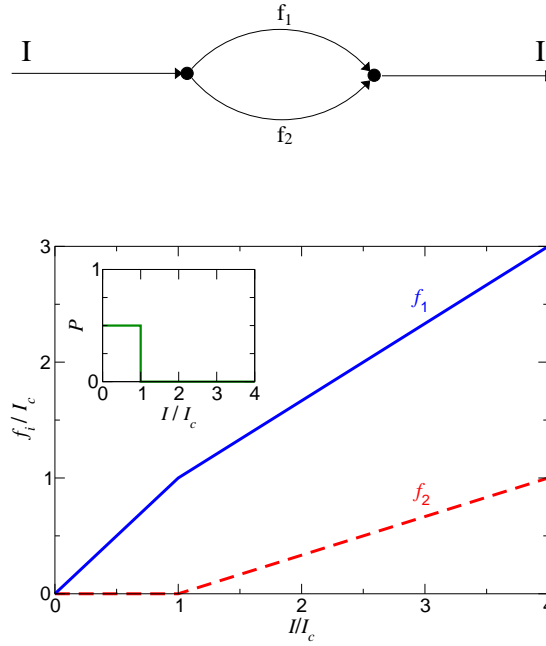


Figura 4.3: Figura superior: representação esquemática de um sistema com 2 canais, onde os dois sítios são conectados por 2 canais direcionados com fluxos f_1 e f_2 , custos intrínsecos $e_1 < e_2$ e uma corrente I é injetada no sítio à esquerda. Figura inferior: distribuição de fluxos que minimiza a função de custo E , equação (4.4) para $i = 2$, sujeita ao vínculo de conservação $f_1 + f_2 = I$. Para $I < I_c = e_2/e_1 - 1$, obtemos $f_1 = I$ e $f_2 = 0$, e somente o canal mais eficiente é utilizado (o com menor custo, canal 1). Para $I > I_c$, os canais 1 e 2 são utilizados, com fluxos ótimos $f_1 = I - f_2$ e $f_2 = (I - I_c)/(2 + I_c)$, respectivamente. Exibimos em destaque, na figura inserida, a fração de canais não-utilizados, que cai a zero em $I = I_c$.

$f_i > 0$ para todo $i < k$ e $f_i = 0$ para $i \geq k$ é

$$I_c^{(k)} = \sum_{j=1}^k \left(\frac{e_k}{e_j} - 1 \right). \quad (4.9)$$

Desta análise podemos ver que existe uma hierarquia de correntes $I_c^{(k)}$ ($k = 2, 3, \dots, n$) abaixo das quais os canais k, \dots, n não são utilizados. Podemos quantificar esta análise qualitativa medindo a fração P de canais não-utilizados (com $f_i = 0$) na rede, que neste caso varia no intervalo $1/n < P < 1$, quando $I < I_c^{(k)}$, para $P = 0$, quando $I > I_c^{(k)}$. O sistema mais simples neste caso, para $k = 2$, já exhibe duas configurações diferentes de fluxos ótimos, dependendo da corrente I injetada e do valor limite $I_c = I_c^{(2)} = e_2/e_1 - 1$. Como ilustrado na figura 4.3, a configuração de fluxos ótimos apresenta uma mudança de comportamento: para $I < I_c$ o sistema explora apenas um dos canais ($P = 1/2$), enquanto que para $I > I_c$ é mais eficiente usar os dois canais ($P = 0$). Ficou claro com este exemplo simples de dois canais que a quantidade I_c faz um papel

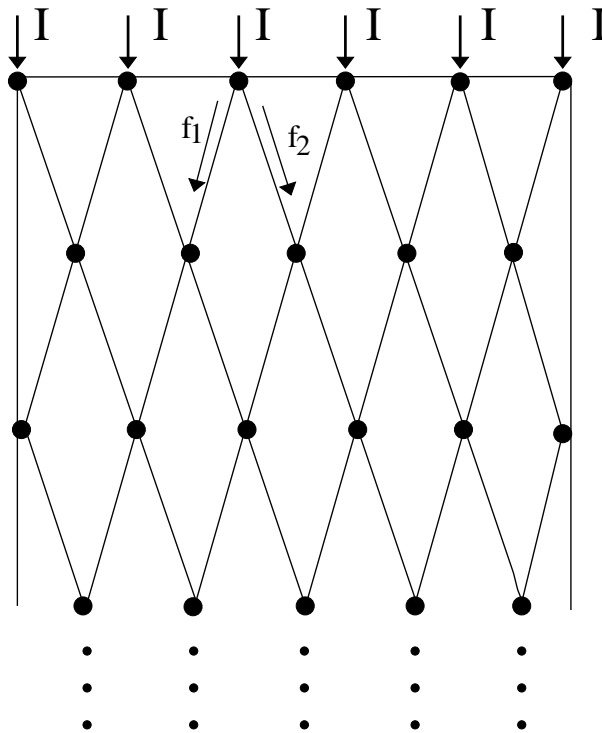


Figura 4.4: Rede quadrada direcionada usada nas simulações.

fundamental nesta transição, como veremos a seguir.

Outro ponto importante a ser destacado é que esta formulação Lagrangeana quantifica uma situação real do dia-a-dia. Considere que existem apenas dois caminhos (1 e 2) entre dois pontos A e B de uma cidade qualquer, e que o tempo necessário para atravessar estes dois caminhos sejam t_1 e t_2 , de forma que $t_1 < t_2$ nos horários de baixo fluxo. Naturalmente, qualquer motorista que queira ir do ponto A ao ponto B usará o caminho 1, porque neste caso a otimização é dada pela minimização do tempo de percurso, e $t_1 < t_2$. Assim, a otimização deste processo faz com que tenhamos um fluxo $f_1 \neq 0$ no caminho 1 e um fluxo $f_2 = 0$ no caminho 2. Porém, se vários motoristas tomarem esta mesma decisão, começará a ocorrer congestionamento no caminho 1, a partir de um certo número de veículos (associado à corrente injetada I) neste caminho 1. Para um fluxo de veículos maior que este valor limite (associado à corrente crítica I_c do modelo), será também vantajoso utilizar o caminho 2, já que agora o novo tempo t'_2 para atravessá-lo será da ordem do novo tempo t'_1 , considerando o congestionamento que se forma no caminho 1. Assim, o fluxo no caminho 1 irá diminuir ($f'_1 < f_1$) e o fluxo no caminho 2 será agora diferente

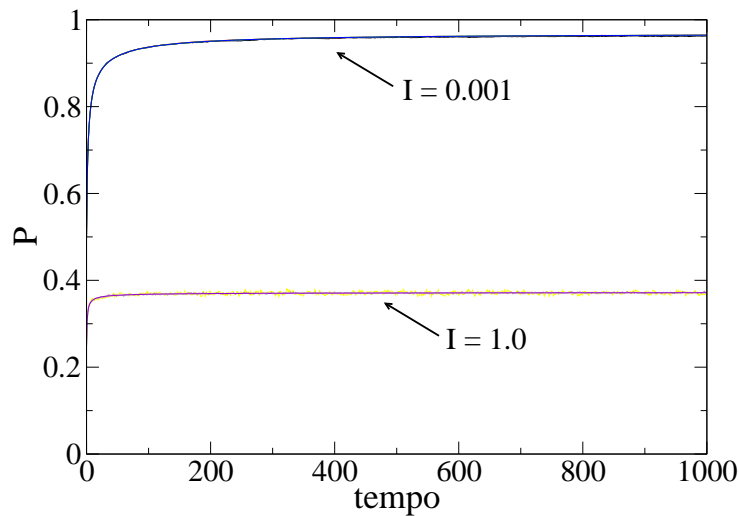


Figura 4.5: Evolução da fração de canais não-utilizados P com o tempo de simulação, para custos distribuídos uniformemente no intervalo $0 < e_i < 1000$. Para cada valor de I , mostramos resultados para $N = 10^2, 10^3, 10^4$ e 10^5 . Podemos notar que os estados estacionários são obtidos rapidamente, e que este tempo de relaxação não varia muito com os parâmetros do sistema. As curvas são resultados de médias sobre 10^3 realizações dos custos $\{e_i\}$.

de zero ($f'_2 > 0$). Esta situação é exatamente a mostrada na figura 4.3 (inferior).

Na próxima seção consideraremos o caso mais simples de uma rede quadrada direcionada, que tem 2 canais entrando e 2 canais saindo de cada sítio.

4.3 Resultados Numéricos

Vamos nos concentrar a partir de agora na formulação mais simples do problema geral apresentado na seção 4.2 [74]. Consideremos então o tráfego em uma rede quadrada direcionada, como a mostrada esquematicamente na figura 4.4. Esta rede pode ser vista também como uma rede unidimensional, onde o eixo horizontal representa os sítios e o eixo vertical o tempo. A solução numérica do problema consiste em considerar que as decisões sobre os caminhos a serem seguidos são tomadas localmente, e em cada interseção (ou sítio) resolvemos um problema com 2 canais para determinar a distribuição de fluxos ótimos após a interseção. Este problema pode ser formulado através das seguintes regras:

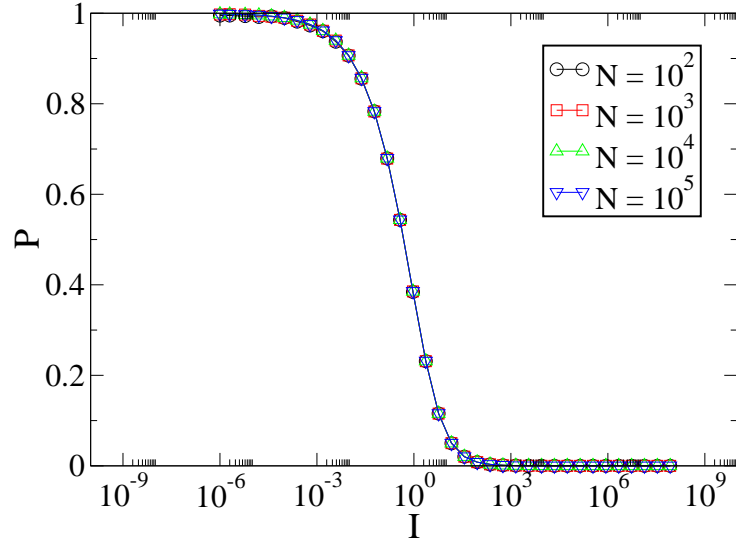


Figura 4.6: Fração média P de canais não-utilizados em função da corrente de entrada por sítio na rede I , para custos distribuídos uniformemente no intervalo $0 < e_i < 1000$. As simulações sugerem que o parâmetro de ordem não depende do tamanho da rede N . Resultados são médias temporais em 10^5 passos, e consideramos 10^3 realizações dos custos $\{e_i\}$.

1. Injetamos um fluxo I em cada um dos N sítios na parte superior da rede, como mostra a figura 4.4;
2. Os custos e_i de cada canal são distribuídos uniformemente no intervalo $0 < e_i < 1000$;
3. Calculamos o fluxo que sai de cada sítio localizado na parte superior da rede, usando a equação (4.8), e levando em conta a corrente crítica $I_c^{(2)}$, dada pela equação (4.9);
4. Calculamos o fluxo que chega às interseções seguintes, e consideramos condições de contorno periódicas para os sítios das bordas da rede;
5. Repetimos o procedimento do item 3 para as próximas interseções;
6. Após descartar o transiente inicial (veja a figura 4.5), medimos as quantidades de interesse.

A respeito dos tempos transientes, eles dependem da corrente injetada por sítio I , mas não dependem do tamanho da rede N . De forma geral, os tempos de relaxação para os estados

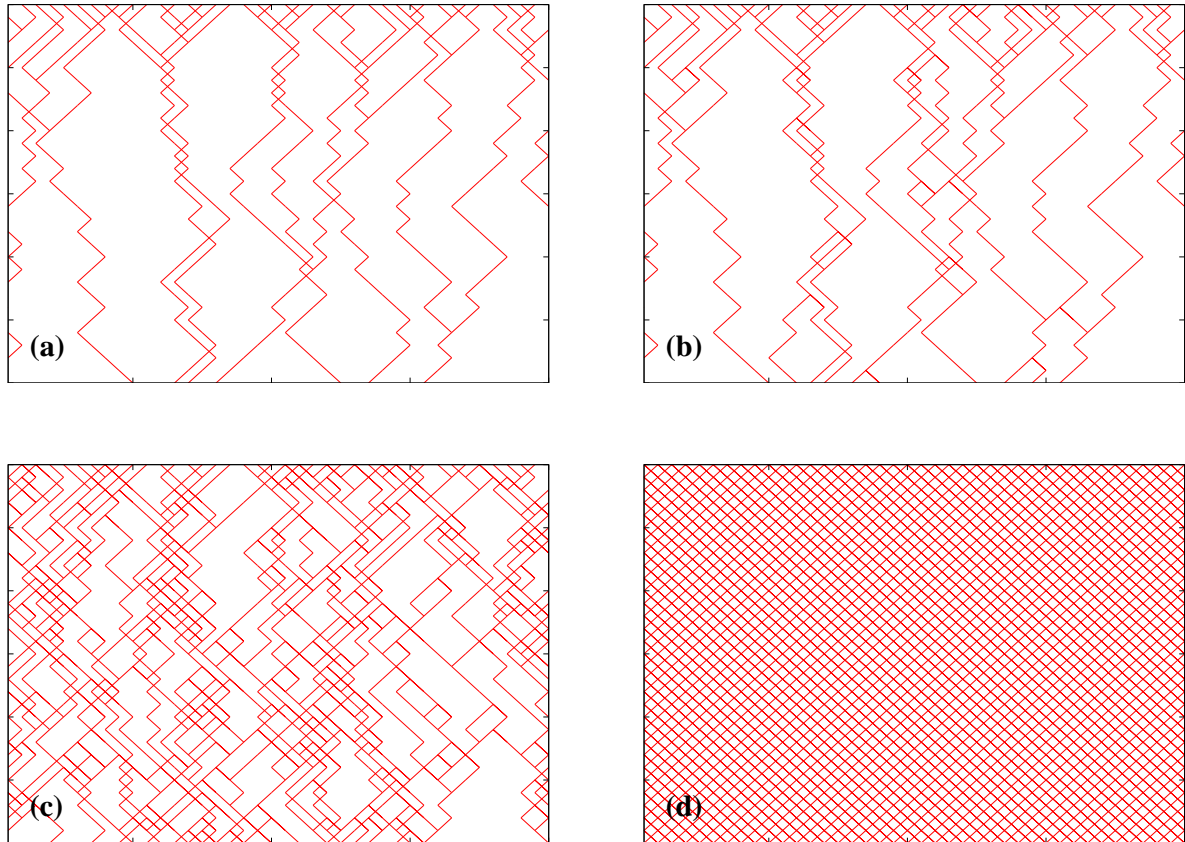


Figura 4.7: Representação esquemática da transição ocorrida na rede de transporte com topologia quadrada direcionada, quando aumentamos o valor da corrente de entrada por sítio I : (a) fase de ocupação esparsa, para $I = 10^{-4}$, (b) ocupação um pouco maior, com $I = 10^{-2}$, (c) ocupação perto da total, com $I = 0.3$ e (d) fase de ocupação densa ($P \rightarrow 0$), para $I = 10^6$.

estacionários não dependem muito dos parâmetros do sistema, como podemos ver na figura 4.5. Seguindo os passos acima, simulamos o problema em redes quadradas direcionadas com $N = 10^2, 10^3, 10^4$ e 10^5 sítios. Os resultados mostram que o comportamento da fração média de canais não-utilizados não depende do tamanho da rede N , como podemos ver na figura 4.6.

Assim, com o aumento da corrente de entrada por sítio I ocorre uma transição desocupação-ocupação da rede, entre uma fase de ocupação esparsa (com $P \rightarrow 1$, para pequenos valores de I), onde a distribuição de fluxos ótimos é dada pela ocupação de apenas alguns canais, de menor custo, e uma fase de ocupação densa ($P \rightarrow 0$, para valores maiores de I), onde o sistema ocupa todos os canais da rede. Na linguagem de tráfego em estradas, podemos dizer que na fase esparsa os veículos tendem a trafegar em ruas selecionadas, ou seja, aquelas que demandam

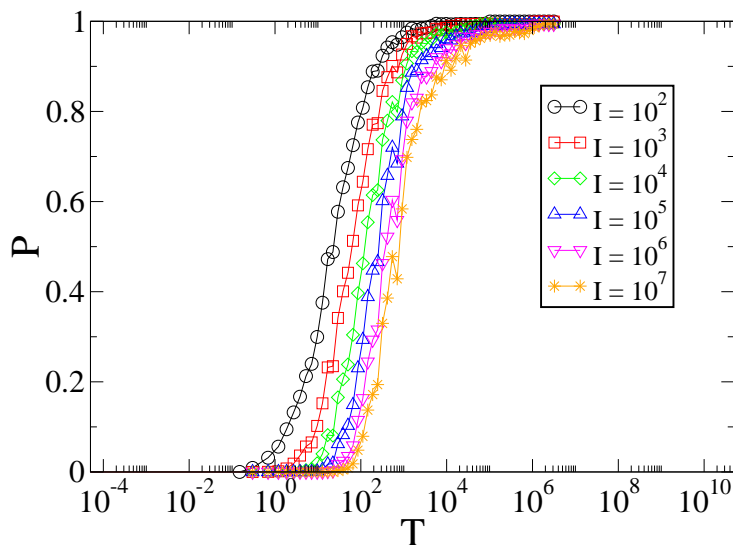


Figura 4.8: Fração média P de canais não-utilizados em função do parâmetro $T = e_2/e_1 - 1$ para diferentes valores de I , para o caso onde temos apenas 2 custos distribuídos aleatoriamente. Os resultados são para $N = 10^4$ sítios, médias temporais em 10^5 passos e consideramos 10^2 realizações dos custos $\{e_i\}$.

menos tempo para serem atravessadas, enquanto que na fase densa a grande maioria das ruas é utilizada pelos veículos para evitar congestionamentos, quando a capacidade das estradas é excedida. A figura 4.7 mostra uma situação esquemática desta transição. Na figura 4.7 (a) temos uma situação de corrente injetada por sítio extremamente baixa, $I = 10^{-4}$, onde somente poucos canais são utilizados, ou seja, o sistema se encontra na fase de ocupação esparsa. Na figura 4.7 (b) temos o caso $I = 10^{-2}$, um fluxo injetado por sítio um pouco maior, e podemos ver que mais alguns canais são ocupados, em relação à situação (a). Na figura 4.7 (c) o fluxo injetado por sítio é $I = 0.3$, e podemos ver uma situação onde o parâmetro de ordem P tem um valor pequeno, mas ainda temos $P > 0$. Finalmente, na figura 4.7 (d) o sistema está na fase de ocupação densa ($P \rightarrow 0$), para $I = 10^6$.

Note que estes resultados são para uma distribuição uniforme dos custos, com $0 < e_i < 1000$. Um outra distribuição simples e interessante de ser analisada é a seguinte. Podemos considerar apenas dois custos diferentes, e_1 e e_2 , mas eles são distribuídos da seguinte maneira: a cada interseção (sítio) temos dois canais deixando o sítio, e escolhemos aleatoriamente com

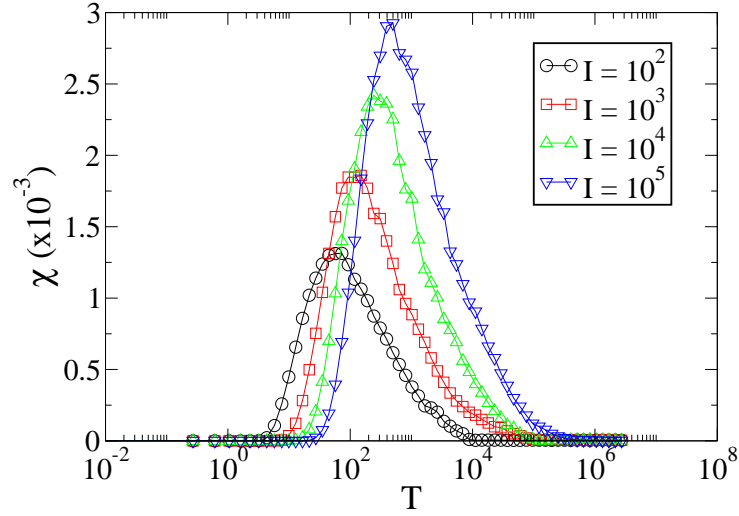


Figura 4.9: Flutuação do parâmetro de ordem $\chi = \langle P^2 \rangle - \langle P \rangle^2$ em função de T para diferentes valores de I , para o caso onde temos apenas 2 custos distribuídos aleatoriamente. As curvas têm comportamento típico de curvas de susceptibilidade magnética. Os resultados são para $N = 10^4$ sítios, médias temporais em 10^5 passos e consideramos 10^2 realizações dos custos $\{e_i\}$.

probabilidade $1/2$ o custo de um dos canais, ou seja, de acordo com

$$P(e_i) = \frac{1}{2}\delta(e_i - e_1) + \frac{1}{2}\delta(e_i - e_2), \quad (4.10)$$

de forma que se escolhermos e_1 (e_2) para um dos canais, imediatamente atribuiremos e_2 (e_1) para o outro. Desta forma, apesar de termos apenas dois custos, eles são distribuídos de forma aleatória na rede. Note que, independentemente da escolha dos custos para os canais em cada interseção, teremos sempre um mesmo valor de corrente crítica, que é dada por $I_c = I_c^{(2)} = e_2/e_1 - 1$, de acordo com a equação (4.9). Para evitar confusão na notação, vamos definir $T \equiv I_c = e_2/e_1 - 1$.

Podemos então analisar o parâmetro de ordem em função desta quantidade T . Para isso, fixamos o valor $e_1 = 0.3$, e variamos o valor de e_2 a partir de $e_2 = 0.3$, ou seja, começamos as simulações a partir de $T = 0$, e aumentamos gradativamente o valor de T , para um valor fixo de corrente de entrada por sítio I . Os resultados numéricos são mostrados na figura 4.8. A transição neste caso ocorre no sentido inverso ao do caso da distribuição uniforme de custo, ou seja, temos uma transição de uma fase de ocupação densa, para pequenos valores de T , para a fase

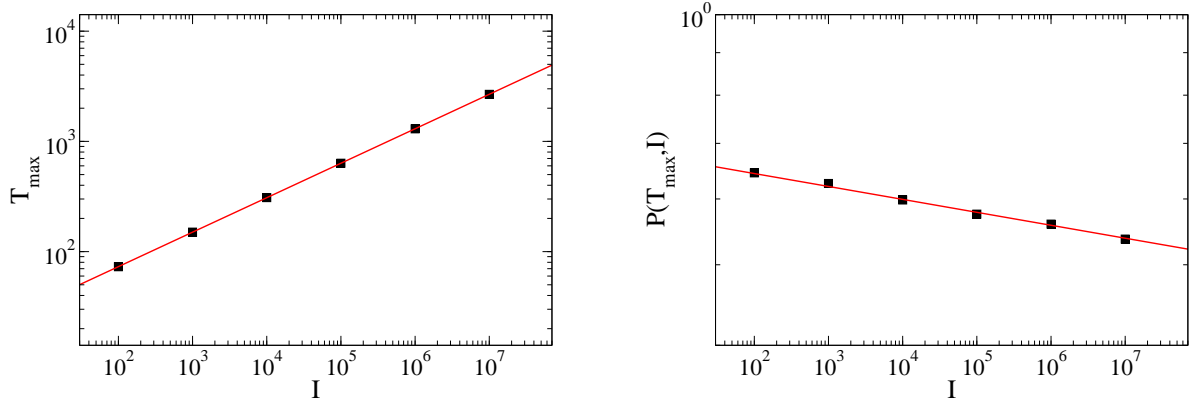


Figura 4.10: Valores de T correspondentes às posições dos máximos das flutuações do parâmetro de ordem P , isto é, $\chi = \langle P^2 \rangle - \langle P \rangle^2$, contra a corrente de entrada por sítio I (esquerda) e os correspondentes valores do parâmetro de ordem $P(T_{\max}, I)$ (direita), ambos na escala log-log. As retas são os melhores ajustes obtidos dos resultados numéricos, e nos dão relações do tipo lei de potência entre as quantidades do problema, $T_{\max} \sim I^\alpha$ e $P(T_{\max}, I) \sim I^{-\beta}$, com os expoentes $\alpha = 0.3127$ e $\beta = 0.0155$, conforme discutido no texto.

de ocupação esparsa, para grandes valores de T . Este resultado é fácil de ser compreendido. Já que o valor de e_1 é sempre fixo, então para termos T pequeno é necessário que e_2 seja pequeno, da ordem de e_1 . Neste caso, com os dois custos da mesma ordem, não há vantagem em se escolher apenas um dos dois canais em cada interseção para trafegar, e a rede fica praticamente toda ocupada ($P \rightarrow 0$). Por outro lado, se T é grande significa que o custo e_2 é muito maior que e_1 , e neste caso é vantajoso sempre utilizar os canais com custo e_1 , deixando a rede com uma ocupação esparsa quando $e_2 \gg e_1$.

Outra quantidade a ser analisada é a flutuação do parâmetro de ordem, dada por $\chi = \langle P^2 \rangle - \langle P \rangle^2$, em função de T para diferentes valores de I . Como podemos observar na figura 4.9, as curvas têm comportamento típico de curvas de susceptibilidade magnética, assim como as flutuações do parâmetro de ordem do problema discutido no capítulo 3. Se analisarmos as posições $T_{\max}(I)$ dos máximos das curvas em função da corrente de entrada por sítio I , podemos observar a relação

$$T_{\max} \sim I^\alpha, \quad (4.11)$$

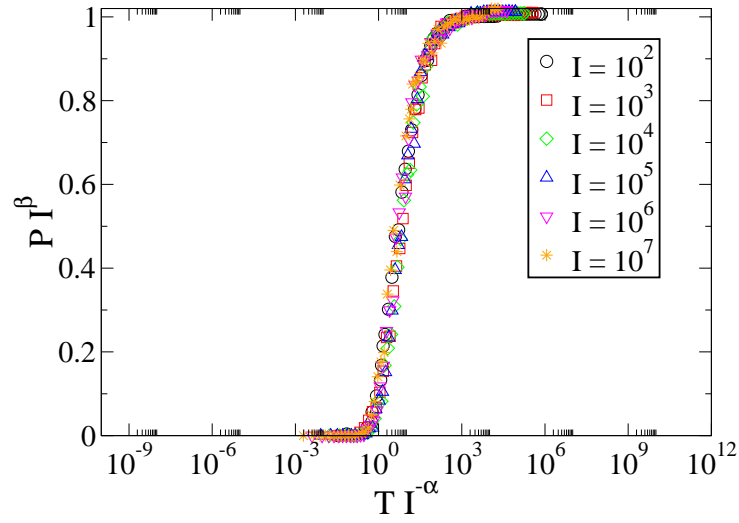


Figura 4.11: Colapso das curvas do parâmetro de ordem P em função do parâmetro $T = e_2/e_1 - 1$ para o caso onde temos apenas 2 custos distribuídos aleatoriamente. O melhor colapso foi obtido baseado nas equações (4.11), (4.12) e (4.13), com os expoentes $\alpha = 0.0155$ e $\beta = 0.3127$. Os resultados são para $N = 10^4$ sítios.

onde $\alpha = 0.3127 \pm 0.0007$ (veja a figura 4.10, lado esquerdo). Da mesma forma, os correspondentes valores do parâmetro de ordem P nos valores $T = T_{max}$, ou seja, $P(T_{max}, I)$, apresentam uma relação do tipo lei de potência com as correntes I (veja a figura 4.10, lado direito),

$$P(T_{max}, I) \sim I^{-\beta}, \quad (4.12)$$

onde $\beta = 0.0155 \pm 0.0008$. Em outras palavras, podemos definir uma função de escala f tal que

$$P(T, I) = I^{-\beta} f(T, I^{-\alpha}), \quad (4.13)$$

com os expoentes α e β dados acima. A validade destes valores numéricos para os expoentes pode ser verificada reescalando o gráfico da figura 4.8 com as equações (4.11) e (4.12). Podemos ver na figura 4.11 que as curvas para todos os valores de I colapsam muito bem. Assim como aconteceu com o parâmetro de ordem, que não depende do tamanho da rede N pra nenhuma das duas distribuições de probabilidades para os custos, podemos observar que a equação de escala (4.13) também não depende.

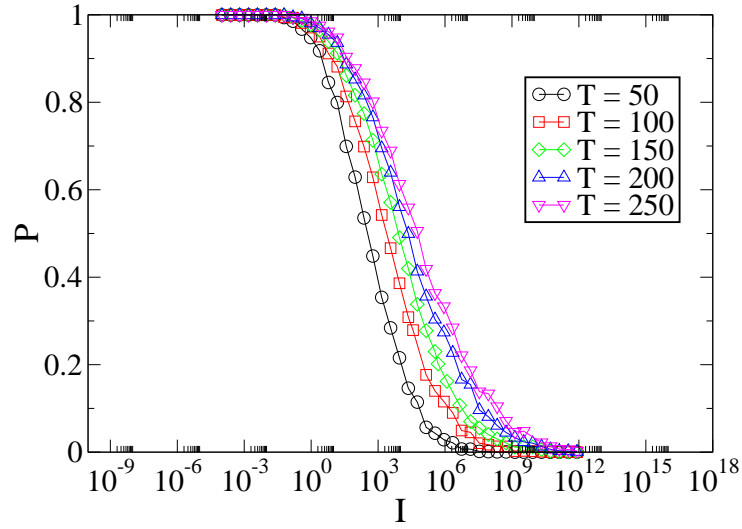


Figura 4.12: Fração média P dos canais não-utilizados em função da corrente de entrada por sítio I para diferentes valores do parâmetro $T = e_2/e_1 - 1$, para o caso onde temos apenas 2 custos distribuídos aleatoriamente. Podemos observar uma transição ocupação-desocupação com o aumento de I , apenas para valores de T no intervalo $10 < T < 300$. Os resultados são para $N = 10^4$ sítios, médias temporais em 10^5 passos e consideramos 10^2 realizações dos custos $\{e_i\}$.

Assim como feito com a distribuição aleatória dos custos, podemos estudar para o caso atual o comportamento do parâmetro de ordem com a corrente de entrada por sítio I , dado um valor fixo de T . Da figura 4.8, podemos notar que, dado um valor fixo de T , aumentando a corrente I para valores de T no intervalo $10 < T < 300$, podemos observar uma mudança considerável no valor do parâmetro de ordem. De fato, as simulações para valores fixos de T mostraram uma transição desocupação-ocupação semelhante ao caso da distribuição aleatória dos custos, como podemos ver na figura 4.12.

Analogamente ao que fizemos anteriormente, também encontramos leis de potência entre as variáveis do problema para P em função de I , ou seja,

$$\begin{aligned}
 I_{\max} &\sim T^\gamma, \\
 P(T, I_{\max}) &\sim T^{-\delta},
 \end{aligned}
 \tag{4.14}$$

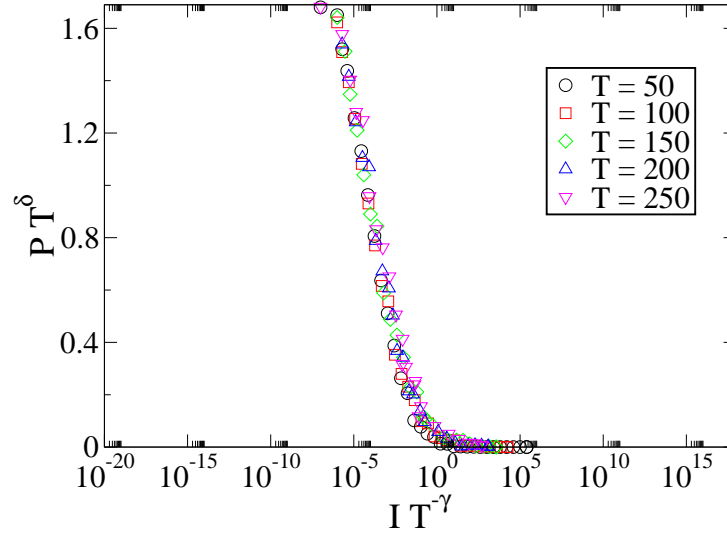


Figura 4.13: Colapso das curvas do parâmetro de ordem P em função da corrente de entrada por sítio I para diferentes valores de T , para o caso onde temos apenas 2 custos distribuídos aleatoriamente. O melhor colapso foi obtido baseado nas equações (4.14), com os expoentes $\delta = 0.19$ e $\gamma = 3.84$, conforme descrito no texto.

e novamente podemos definir uma função de escala g tal que

$$P(T, I) = T^{-\delta} g(I, T^{-\gamma}), \quad (4.15)$$

em que $\gamma = 3.84 \pm 0.03$ e $\delta = 0.19 \pm 0.01$. Novamente observamos um bom colapso das curvas baseado nas equações (4.14) (veja a figura 4.13). Observe que, assim como nas equações (4.11), (4.12) e (4.13), as equações (4.14) e (4.15) também não apresentam dependência com o tamanho do sistema. Isto se deve ao fato de injetarmos uma corrente I por sítio, ou seja, escalamos o fluxo total linearmente com o tamanho do sistema de modo que o fluxo médio por canal independe deste.

Ao investigar este problema, podemos também considerar como flutuações no fluxo total injetado na rede afetam o fluxo médio em um determinado canal i . Este procedimento pode modelar em um sistema de carros em estradas, por exemplo, flutuações no tempo de transporte (flutuações internas) e variações no número de carros nas estradas (flutuações externas). Em horários de pico ou em fins de semana e feriados observa-se uma variação grande nestes dois tipos de flutuação em sistemas de estradas reais. Sabemos que os tempos de transporte depen-

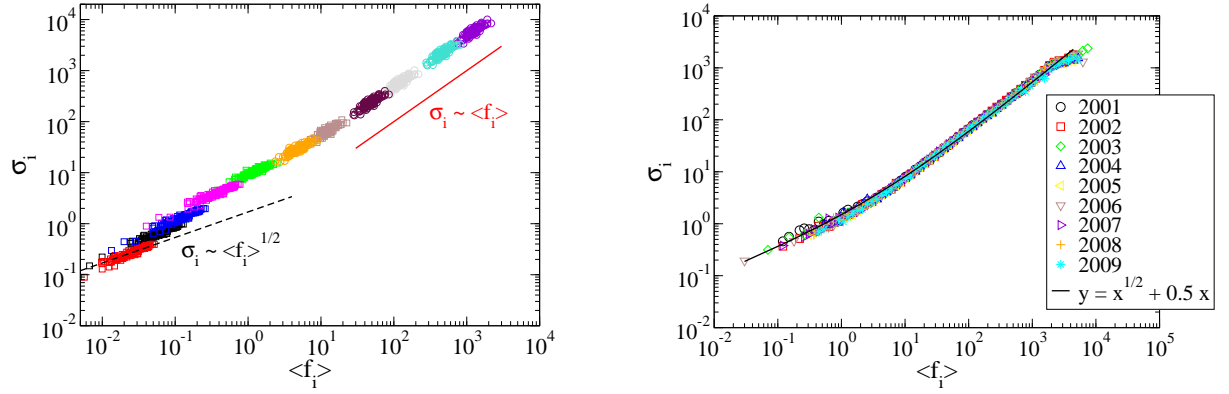


Figura 4.14: Previsão do modelo para as flutuações do tráfego σ_i em torno do fluxo médio $\langle f_i \rangle$ em cada canal i da rede (lado esquerdo). Cada aglomerado de pontos corresponde a um valor diferente de corrente injetada por sítio, no intervalo $2 \times 10^{-2} \leq I \leq 10^3$, e foram tomadas médias sobre 500 realizações. Podemos observar o comportamento de escala $\sigma_i \sim \langle f_i \rangle^\nu$, com $\nu = 1/2$ para a fase esparsa ($P \rightarrow 1$) e $\nu = 1$ para a fase densa ($P \rightarrow 0$). Exibimos também flutuações de tráfego real obtidas a partir de dados do estado americano de Nova Iorque [77]. A curva $y = x^{1/2} + 0.5x$ ajusta bem os dados reais, indicando o mesmo comportamento previsto pelo nosso modelo (lado direito).

dem do volume de tráfego [veja a equação (4.2)], e então carros que eventualmente entram e deixam uma determinada estrada provocam flutuações no tempo de tráfego. Por outro lado, se o volume total de veículos em uma determinada estrada varia, em horário de pico, por exemplo, o tempo de tráfego também varia no sistema. Estas duas fontes de flutuações de tráfego podem ser modificadas separadamente no modelo [75], permitindo que estudemos independentemente seus efeitos em certas propriedades do sistema, como o comportamento das flutuações do tráfego em um dado canal i , dada por

$$\sigma_i = (\langle f_i^2 \rangle - \langle f_i \rangle^2)^{1/2}, \quad (4.16)$$

em função do fluxo médio neste canal i , $\langle f_i \rangle$ [76]. Nós calculamos, para cada canal i , o fluxo médio e a flutuação σ_i para diferentes valores do fluxo de entrada por sítio na rede I . O resultado encontrado foi de que na fase esparsa ($P \rightarrow 1$) as flutuações escalam com $\sigma_i \sim \langle f_i \rangle^{1/2}$ e na fase densa ($P \rightarrow 0$) as flutuações escalam com $\sigma_i \sim \langle f_i \rangle$ (veja a figura 4.14, lado esquerdo), assim como observado em vários sistemas reais, como a internet, por exemplo [76]. Além disso, coletamos dados de tráfego real em períodos de 1 ano (entre 2001 e 2009), com resolução de 1

hora ou menos, em 1500 segmentos de estrada do estado de Nova York, nos Estados Unidos [77]. A figura 4.14 (lado direito) mostra a flutuação do tráfego obtida a partir destes dados. Observa-se claramente os dois regimes de escala, como reproduzido pelo modelo.

4.4 Conclusões

O objetivo central deste capítulo foi determinar distribuições ótimas de fluxos em redes de transporte. Propomos uma formulação Lagrangeana para o problema mais geral possível, e que pode ser resolvido analiticamente. Além disso, simulamos o sistema em redes quadradas direcionadas com $N = 10^2, 10^3, 10^4$ e 10^5 sítios. Mostramos que existe um corrente limite I_c acima da qual o sistema usa os dois canais que saem de cada sítio da rede, e abaixo da qual é mais vantajoso usar apenas um destes dois canais, o que tem o menor custo. Neste sentido, podemos concluir que a topologia conduz a dinâmica nesta rede de transporte.

A corrente limite I_c está relacionada aos custos de utilização dos canais, e mostramos que esta quantidade tem um papel muito importante no comportamento desta rede de transporte. Este fato fica bastante claro quando analisamos a fração dos canais não-utilizados P como função desta corrente limite I_c . Os resultados mostram que uma transição de fase ocorre no sistema entre uma fase de ocupação densa ($P \rightarrow 0$) e outra de ocupação esparsa ($P \rightarrow 1$). Algumas relações do tipo lei de potência foram encontradas entre quantidades importantes do problema, e determinamos expoentes característicos.

Do ponto de vista prático, como por exemplo em aplicações a tráfego de estradas, é mais interessante analisar a quantidade P como função do fluxo inicial injetado por sítio I na rede. Neste caso, uma transição de fase também ocorre na rede. Na linguagem de tráfego de veículos, para fluxo total baixo existem muitos caminhos não utilizados, e o tráfego em caminhos congestionados pode ser reencaminhado para outros caminhos de forma a evitar engarrafamentos, e então o tráfego relativo $\sigma_i / \langle f_i \rangle$ diminui com o fluxo. Por outro lado, quando o sistema está com um volume muito grande de veículos, como em horários de pico e fins de semana, a maioria das rotas é utilizada, e as flutuações escalam linearmente com o fluxo médio. Estes diferentes

padrões de flutuação foram observados em vários sistemas reais [76], e foram corretamente previstos pelo modelo apresentado neste capítulo.

Na fase densa, flutuações no tráfego total podem induzir fortes flutuações no fluxo que atravessa cada canal, de forma que os fluxos em alguns determinados canais eventualmente superam os valores limites, levando a congestionamentos. Assim, a transição de uma fase esparsa para uma fase densa pode ser interpretada como uma transição topológica na distribuição de fluxos, e pode estar diretamente relacionada com congestionamento.

5 *Transições de Fase de Não-Equilíbrio em Sistemas Magnéticos com Dinâmica Conflitiva*

Neste capítulo, estudaremos as transições de fase que ocorrem em modelos de spins na presença de campos magnéticos locais que flutuam no tempo, de acordo com uma certa distribuição de probabilidades. Os resultados são baseados nas referências [79, 80].

5.1 Introdução

Modelos de Ising na presença de campos magnéticos aleatórios (*Random Field Ising models*, ou RFIM's, em inglês) têm sido extensivamente estudados nos últimos 30 anos [81, 82, 83], especialmente após a realização experimental destes sistemas em antiferromagnetos diluídos, tais como $\text{Fe}_x\text{Mg}_{1-x}\text{Cl}_2$ e $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$ [82, 84, 85], na presença de um campo magnético uniforme [86, 87]. Várias técnicas analíticas e numéricas foram utilizadas para estudar o modelo no equilíbrio, entre as quais destacamos a Teoria do Campo Médio [88, 89, 90, 91, 92], o Grupo de Renormalização [93, 94, 95], as Simulações de Monte Carlo (MC) [96, 97] e métodos algorítmicos exatos a temperatura nula [98]. Porém, o comportamento crítico do sistema fora do equilíbrio [99] é pouco conhecido, tendo sido desenvolvida apenas a Teoria do Campo Médio para o modelo [100], além de estudos exatos em redes unidimensionais [101, 102, 103].

Considerando os modelo magnéticos de equilíbrio, existem dois tipos de desordem: temperada (*quenched*, em inglês) e recozida (*annealed*, em inglês) [81]. Na desordem temperada

as variáveis aleatórias flutuam no espaço mas não flutuam no tempo, ou seja, associamos diferentes valores das variáveis aleatórias a diferentes pontos do espaço (em cada sítio ou cada acoplamento, por exemplo), mas durante a evolução temporal do sistema estas variáveis não se alteram, e temos apenas as flutuações relativas à mudança de estado dos spins. No caso da desordem recozida, as variáveis aleatórias do sistema, além de flutuarem no espaço, também flutuam no tempo, porém esta flutuação no tempo é correlacionada com a flutuação dos spins. Assim, existem duas escalas de tempo diferentes em sistemas magnéticos desordenados: uma para as flutuações dos spins e outra para as flutuações das variáveis aleatórias [18, 81].

Apesar de existir um consenso de que os modelos de equilíbrio com desordem temperada são boas representações teóricas de situações realistas em física [104], algumas controvérsias persistem, e a interpretação de resultados experimentais por modelos deste tipo não é muito satisfatória [81, 104, 105, 106]. Considerando os vidros de spin, por exemplo, modelos com desordem temperada como o de Edwards-Anderson (EA) [107] negligenciam a difusão de desordem de íons magnéticos. Esta difusão modifica constantemente a distância entre cada par de spins em certos materiais como ligas magnéticas diluídas (CuMn, por exemplo) e, conseqüentemente, podem ocorrer variações das interações de troca tanto no espaço quanto no tempo [106]. Da mesma forma, podemos imaginar outros sistemas desordenados nos quais as variáveis aleatórias de interesse variam no espaço e no tempo, como modelos com campos magnéticos aleatórios. Estes efeitos, porém, não são corretamente descritos pelos modelos de equilíbrio com desordem recozida. Por exemplo, a flutuação no tempo das interações de troca dos spins na versão recozida do modelo EA [108] é vinculada ao equilíbrio entre a distribuição das interações e o sistema de spins [105]. Assim, a desordem tende a ser fortemente correlacionada, o que não é observado em sistemas reais [105]. Como consequência, a versão recozida do modelo EA não exibe um estado de vidro de spins [108]. Além disso, modelos de equilíbrio com campos aleatórios também apresentam problemas na descrição de resultados experimentais. Enquanto as versões recozida e temperada do RFIM prevêem transições de fase contínuas entre os estados ordenado e desordenado¹ [96, 97, 109], experimentos em antiferromagnetos diluídos como

¹Existem ainda algumas controvérsias sobre a ordem da transição no RFIM, mas simulações recentes sugerem fortemente a ocorrência de transições contínuas [96, 97].

$\text{Fe}_x\text{Mg}_{1-x}\text{Cl}_2$, que são protótipos de realizações experimentais de sistemas sob a ação de campos magnéticos aleatórios, mostraram que estes materiais exibem transições de fase de primeira ordem em baixas temperaturas [110].

Assim, existe uma discussão na literatura de que modelos de não-equilíbrio podem ser relevantes para explicar alguns comportamentos macroscópicos ainda não completamente entendidos de certos materiais que apresentam desordem microscópica, como os vidros de spins e sistemas reais com comportamento típico de sistemas com campos aleatórios [105], como os citados antiferromagnetos acima. Para este propósito, modelos de não-equilíbrio na presença de campos aleatórios (*Nonequilibrium Random Field Ising Models*, ou NRFIM's, em inglês), definidos pelo Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - \sum_i h_i s_i, \quad (5.1)$$

vêm sendo estudados. Na equação (5.1), $s_i = \pm 1$, a primeira soma representa a interação de troca (constante) entre pares de primeiros vizinhos e o segundo termo modela a interação com um campo magnético local. Observe que o Hamiltoniano acima é o mesmo que descreve os modelos de equilíbrio com desordem temperada, que são caracterizados por uma configuração congelada de desordem $\{h_i\}$, na qual as variáveis aleatórias h_i flutuam no espaço mas se mantêm fixas no tempo. Em outras palavras, o sistema apresenta diferentes valores de campo magnético em cada sítio i , e estes valores se mantêm fixos durante a evolução temporal. Por outro lado, o NRFIM é descrito a cada instante de tempo pelo Hamiltoniano da equação (5.1), e os campos aleatórios $\{h_i\}$ são distribuídos de acordo com uma dada distribuição de probabilidades $P(h_i)$. A diferença para o modelo de equilíbrio é que neste caso os valores $\{h_i\}$ são, *a cada passo de tempo*, um conjunto de variáveis aleatórias independentes distribuídas de acordo com $P(h_i)$. Assim, podemos assumir que os spins e o campo local comportam-se independentemente um do outro, e um estado estacionário é atingido assintoticamente [100, 102]. Isto é consistente com observações de efeitos de não-equilíbrio, por exemplo, a influência de detalhes do processo dinâmico (cinética) nos estados estacionários de alguns sistemas reais [102].

O estudo de modelos de não-equilíbrio definidos pela equação (5.1) mostrou uma rica var-

iedade de fenômenos críticos. Os resultados conhecidos revelam um comportamento crítico não-universal, que geralmente depende de detalhes da dinâmica como difusão de desordem, isto é, propriedades da distribuição de probabilidades das variáveis aleatórias, e das taxas de transição escolhidas. Além disso, modelos de não-equilíbrio podem ser relevantes para a descrição teórica de certos sistemas reais [105], como materiais magnéticos sob a ação de campos magnéticos que flutuam rapidamente no tempo, ou sistemas com uma rápida e aleatória difusão de desordem, como vidros de spins e sistemas magnéticos que apresentam comportamento típico de sistemas sob a ação de campos aleatórios [101].

Vale ressaltar também que modelos de não-equilíbrio como os definidos pelo Hamiltoniano da equação (5.1) só foram estudados no limite de campo médio [100] e em redes unidimensionais [101, 102, 103]. Em simulações de Monte Carlo só foi considerado o caso onde os acoplamentos entre spins flutuam no espaço e no tempo, na ausência de um campo magnético externo [106].

Com base nestas motivações, apresentamos neste capítulo o estudo do comportamento crítico de modelos magnéticos de não-equilíbrio na presença de desordem no campo magnético local, baseados no Hamiltoniano da equação (5.1). Foram realizadas simulações de Monte Carlo em sistemas definidos em redes quadradas e cúbicas, e a caracterização das transições de fase que ocorrem no modelo é discutida a seguir.

5.2 Modelo

Vamos considerar o sistema na presença de um banho térmico à temperatura T e de um campo magnético aleatório, e que é descrito pelo Hamiltoniano da equação (5.1). Definiremos este modelo em redes regulares de tamanho linear L , com o campo aleatório $\{h_i\}$ seguindo uma dada distribuição de probabilidades $P(h_i)$, que será definida nas seções seguintes. Qualquer configuração do sistema $\mathbf{s} = \{s_i\}$ evolui estocasticamente com o tempo por mudanças no estado dos spins dadas de acordo com a taxa de transição

$$\omega(s_i \rightarrow -s_i) = \min\{1, \exp(-\delta\mathcal{H}_i/T)\}, \quad (5.2)$$

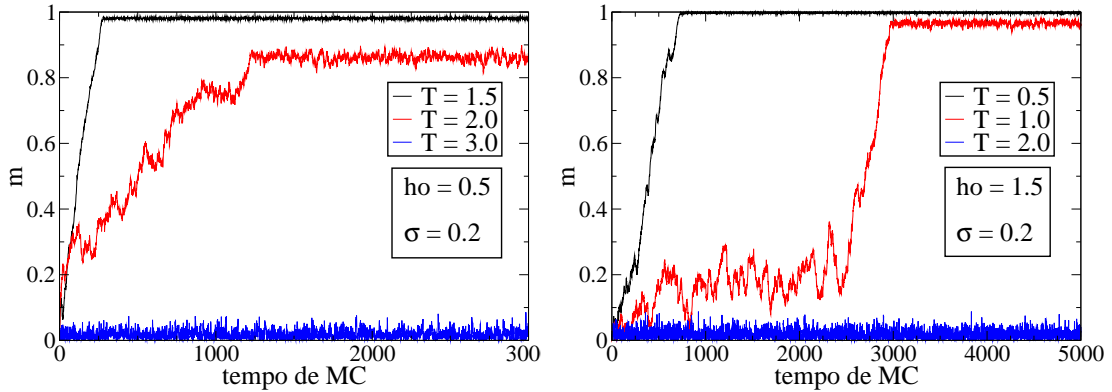


Figura 5.1: Evolução da magnetização por spin com o tempo de Monte Carlo para o caso da rede quadrada com $\sigma = 0.2$ e $L = 128$. Exemplos de intensidades do campo magnético h_o fraca (esquerda) e forte (direita) são mostrados.

que corresponde ao algoritmo de Metropolis [111], e $\delta\mathcal{H}_i$ é o custo associado para virar o spin na posição i (consideramos, por simplicidade, que a constante de Boltzmann é $k = 1$). Em outras palavras, se a mudança no estado de um spin i diminui a energia do sistema, aceitamos esta mudança; caso contrário, aceitaremos o novo estado com probabilidade $\exp(-\delta\mathcal{H}_i/T)$.

Para a implementação numérica do sistema, o algoritmo é o seguinte:

- geramos uma rede de dimensão linear L com os spins orientados aleatoriamente, e consideramos condições de contorno periódicas;
- a cada passo de tempo, uma nova configuração de campos aleatórios $\{h_i\}$ é gerada de acordo com a distribuição $P(h_i)$. Em seguida, cada sítio da rede é visitado, e o spin correspondente é virado de acordo com a taxa de transição dada pela equação (5.2);
- após atingir o estado estacionário, podemos calcular as quantidades físicas de interesse.

Em outras palavras, as variáveis aleatórias $\{h_i\}$ não flutuam somente no espaço, mas também flutuam no tempo, isto é, o sistema é descrito a cada passo de tempo pelo Hamiltoniano da equação (5.1), com as variáveis $\{h_i\}$ distribuídas de acordo com uma dada distribuição $P(h_i)$. Assim, o sistema apresenta duas escalas de tempo características diferentes, uma para as flutuações dos

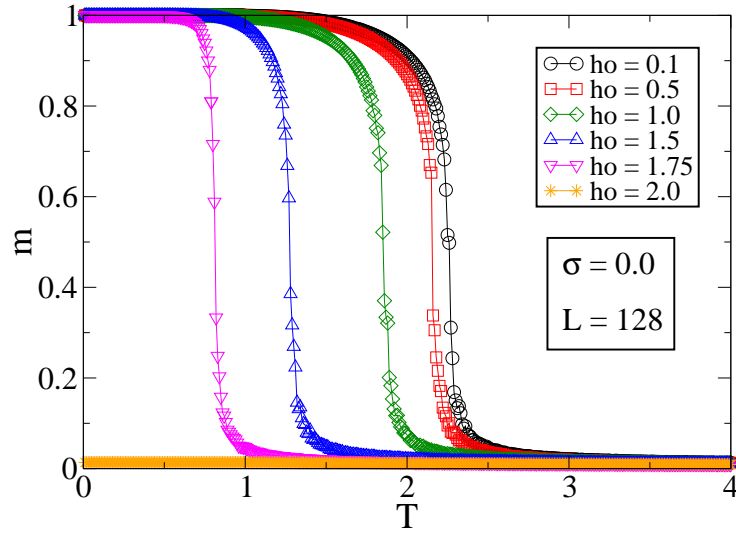


Figura 5.2: Magnetização por spin como função da temperatura para o caso da rede quadrada, com $L = 128$, $\sigma = 0.0$ e alguns valores típicos da intensidade do campo magnético h_o . Para intensidades $h_o \geq 2.0$ o sistema se encontra na fase paramagnética, mas para todos os outros valores menores de h_o podemos observar uma transição contínua entre as fases ordenada e desordenada. Os símbolos (círculo, quadrado, etc) são resultados das simulações, enquanto que as linhas são apenas guias para os olhos.

spins e outra para as flutuações do campo magnético aleatório, e neste caso, ao contrário do que ocorre no modelo de equilíbrio com desordem recozida, estas duas flutuações são independentes uma da outra (uma discussão formal sobre isto pode ser encontrada na referência [105], capítulo 7).

Nas próximas seções apresentaremos nossos resultados numéricos.

5.3 Simulações na Rede Quadrada

No caso da rede quadrada, temos $N = L^2$ spins no sistema. A distribuição de probabilidades que usaremos será uma gaussiana dupla [90],

$$P(h_i) = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \left\{ \exp \left[-\frac{(h_i - h_o)^2}{2\sigma^2} \right] + \exp \left[-\frac{(h_i + h_o)^2}{2\sigma^2} \right] \right\}, \quad (5.3)$$

que é dada pela superposição de duas distribuições gaussianas centradas em $\pm h_o$ e com largura σ cada. Esta distribuição apresenta como casos limites as distribuições gaussianas (para $h_o = 0$)

e bimodal (para $\sigma \rightarrow 0$). Consideramos nas simulações $L = 32, 64, 128, 256$ e 512 , e usamos por simplicidade $J = 1$. Analisamos os seguintes valores dos parâmetros: $0.0 < h_o < 3.0$, $0.01 < T < 4.0$ e $\sigma = 0.0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4$ e 0.5 . Os resultados para todos os valores dos parâmetros sugerem que os efeitos de tamanho finito são menos pronunciados para $L \geq 128$. Podemos testar a relaxação do sistema para os estados estacionários monitorando a magnetização como função do tempo de MC. Encontramos que, dado um valor fixo de σ , os estados estacionários são atingidos mais facilmente para menores valores de h_o , e demoram mais para serem atingidos para valores maiores de h_o , como mostrado na figura 5.1. Assim, utilizamos 10^4 passos de MC para relaxação do sistema e 10^6 passos de MC para calcular as médias das quantidades de interesse (após descartar os passos para atingir os estados estacionários).

Vamos começar com o caso mais simples, $\sigma = 0.0$, que é o limite da distribuição bimodal. Os resultados para a magnetização por spin como função da temperatura são mostrados na figura 5.2, para $L = 128$ e alguns valores de h_o . Estes resultados sugerem que o sistema passa continuamente do estado ferromagnético (com $m = 1$) para o estado paramagnético (com $m \rightarrow 0$) para valores da intensidade do campo $h_o < \sim 2.0$. Para valores maiores de h_o , o sistema se encontra na fase paramagnética.

Se considerarmos uma largura finita para a distribuição dada pela equação (5.3), por exemplo $\sigma = 0.2$, veremos que o comportamento do sistema muda. De fato, se observarmos os resultados para a magnetização por spin como função da temperatura (veja a figura 5.3), podemos notar que as curvas são qualitativamente similares aos resultados para $\sigma = 0.0$, com transições contínuas entre as fases paramagnética e ferromagnética. Porém, para valores próximos de $h_o = 2.0$ ocorrem descontinuidades nas curvas da magnetização, o que é um indicativo de que a transição nesta região pode ser de primeira ordem. Os saltos ficam mais claros quando analisamos a magnetização como função da temperatura para diferentes tamanhos de rede, como mostrado na figura 5.4.

Para a correta caracterização da transição descontínua, devemos analisar as flutuações do

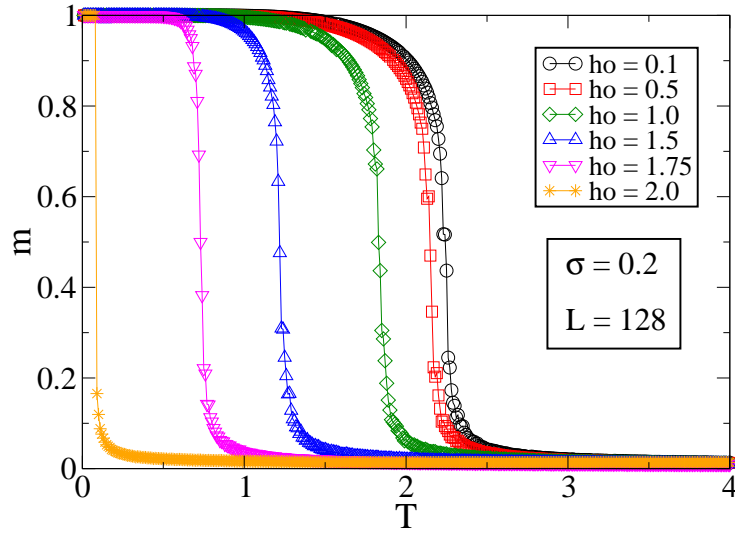


Figura 5.3: Magnetização por spin como função da temperatura para o caso da rede quadrada, com $L = 128$, $\sigma = 0.2$ e alguns valores típicos da intensidade do campo magnético h_o . Podemos observar que m diminui continuamente com o aumento de T para valores pequenos de h_o , mas ocorrem saltos na magnetização para valores próximos de $h_o = 2.0$.

parâmetro de ordem, dadas por

$$\chi(T) = L^2 \frac{\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2}{T}, \quad (5.4)$$

em que $\langle \rangle$ é a média temporal ou média de MC [106]. A susceptibilidade como função da temperatura é exibida na figura 5.5 (a) ². Como discutido no capítulo 2, as posições dos picos da susceptibilidade crescem com o tamanho linear do sistema na forma

$$\chi_{\max} \sim L^a, \quad (5.5)$$

onde $a = d$ para transições de fase de primeira ordem [19], d é a dimensão da rede ($d = 2$ no nosso caso) e $a = \gamma/\nu < d$ para transições contínuas. Ajustando os dados numéricos de χ_{\max} nós podemos obter, para $h_o = 2.0$, que [veja a figura 5.5(b)]

$$\chi_{\max} \sim L^b, \quad (5.6)$$

²Mostramos a susceptibilidade para um único tamanho de rede, $L = 128$, porque as curvas crescem muito rapidamente com L .

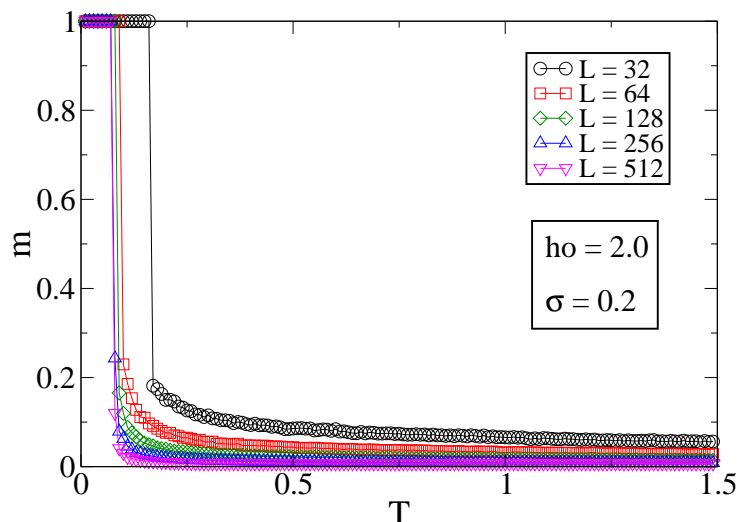


Figura 5.4: Magnetização por spin como função da temperatura para o caso da rede quadrada, com $\sigma = 0.2$, $h_o = 2.0$ e diferentes tamanhos de rede. Podemos observar saltos nas curvas para todos os tamanhos.

em que

$$b = 2.08 \pm 0.03, \quad (5.7)$$

o que é compatível com uma transição de primeira ordem. Assim, para $\sigma = 2.0$ e $h_o = 2.0$, as simulações sugerem que uma transição de fase de primeira ordem ocorre no sistema, em baixas temperaturas. Verificamos um comportamento similar, ou seja, saltos na magnetização, com os máximos da susceptibilidade divergindo com L^2 , para outros valores da largura da distribuição σ , como $\sigma = 0.1$ e 0.3 , com curvas similares às apresentadas nas figuras 5.4 e 5.5. Numericamente é difícil determinar o valor limite σ_{crit} acima do qual temos somente transições contínuas. Porém, as simulações sugerem que para $\sigma > 0.3$ não ocorrem transições de primeira ordem [79].

Realizamos também um cálculo preliminar dos expoentes críticos na região de campo magnético fraco, com o objetivo de verificar se o sistema segue as tradicionais equações de escala para tamanhos finitos de transições contínuas (veja a seção 2.2). Assim, escolhemos os valores $\sigma = 0.2$ e $h_o = 0.5$, para os quais as simulações sugerem transições de fase contínuas (veja a figura 5.3), e calculamos a magnetização e a susceptibilidade para vários tamanhos de rede. A temperatura crítica no limite termodinâmico, $T_c = T_c(L \rightarrow \infty)$ foi obtida extrapolando os

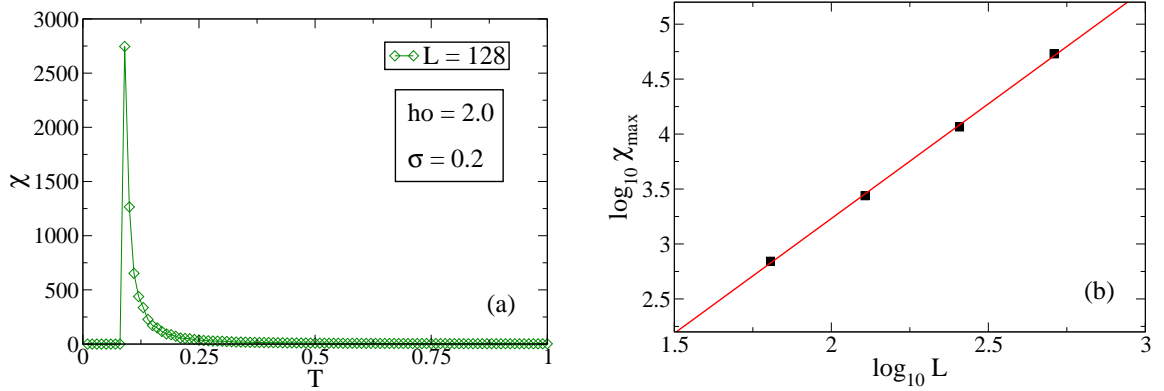


Figura 5.5: Susceptibilidade χ como função da temperatura para o caso da rede quadrada, com $\sigma = 0.2$, $h_o = 2.0$ e $L = 128$ (a) e posições do máximos da susceptibilidade χ_{\max} contra L na escala log-log para alguns tamanhos de rede (b). A reta é o melhor ajuste dos dados, e tem inclinação 2.08. Descartamos o menor tamanho $L = 32$ para o ajuste, para minimizar os efeitos de tamanho finito.

valores $T_c(L)$ dados pelas posições dos máximos da susceptibilidade, e para este caso achamos $T_c = 2.125 \pm 0.001$. O expoente ν , relacionado à divergência do comprimento de correlação, foi calculado por meio do cumulante de Binder [112],

$$U_L = 1 - \left[\frac{\langle m^4 \rangle}{3 \langle m^2 \rangle^2} \right], \quad (5.8)$$

que obedece à seguinte equação de escala para tamanhos finitos:

$$U_L = \tilde{U}_L((T - T_c) L^{1/\nu}), \quad (5.9)$$

onde \tilde{U}_L é uma função de escala que não depende do tamanho da rede. Na figura 5.6 exibimos o cumulante de Binder para alguns tamanhos de rede (a) e o melhor colapso dos dados (b), baseado na equação (5.9), obtido com o valor acima mencionado da temperatura crítica T_c e $\nu = 1.027 \pm 0.010$. O expoente β , que caracteriza o comportamento da magnetização próximo ao ponto crítico T_c , foi calculado de forma a nos dar o melhor colapso dos dados das curvas da magnetização. Na figura 5.7 nós mostramos as curvas da magnetização por spin contra temperatura (a) e o melhor colapso dos dados (b), baseado nas equações tradicionais de escala

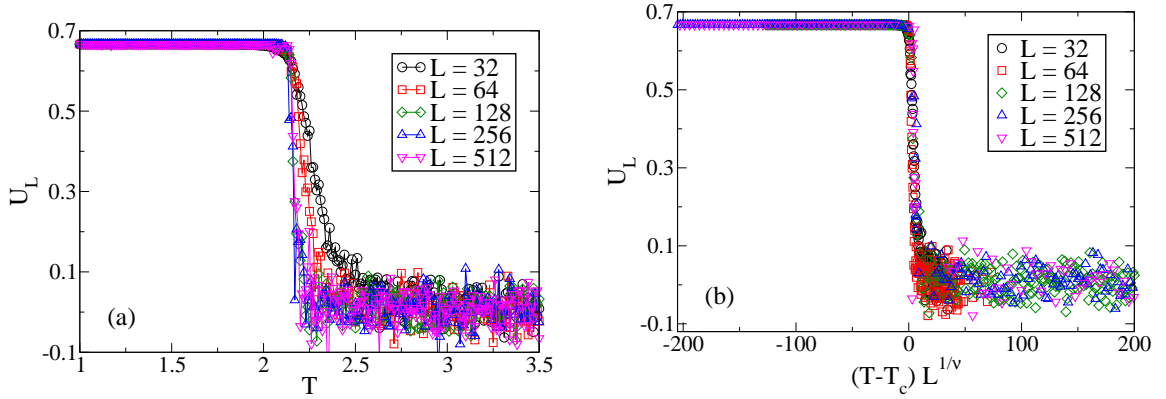


Figura 5.6: Cumulante de Binder U_L , Eq. (5.8), como função da temperatura para o caso da rede quadrada, com $\sigma = 0.2$, $h_o = 0.5$ e alguns tamanhos de rede (a) e o melhor colapso dos dados (b), baseado na equação (5.9). Os valores críticos são $T_c = 2.125$ e $\nu = 1.027$, como discutido no texto.

para tamanhos finitos,

$$T_c(L) = T_c - a L^{-1/\nu},$$

$$m(T, L) = L^{-\beta/\nu} \tilde{m}((T - T_c) L^{1/\nu}), \quad (5.10)$$

onde a é uma constante e \tilde{m} é uma função de escala (ver seção 2.2). Das equações acima, encontramos $\beta = 0.068 \pm 0.003$. Assim como no caso $\sigma = 0.2$ e $h_o = 2.0$, neste caso os máximos da susceptibilidade crescem muito rapidamente com o tamanho da rede. Assim, exibimos somente um tamanho de rede, $L = 128$, para compararmos com o caso $\sigma = 0.2$ e $h_o = 2.0$. Estes máximos crescem com o tamanho do sistema com a tradicional lei de potência, isto é,

$$\chi_{max} \sim L^{\gamma/\nu}, \quad (5.11)$$

onde $\gamma/\nu = 1.715 \pm 0.049$. Para o valor obtido de ν , $\nu = 1.027$, temos que $\gamma = 1.763 \pm 0.001$. Em outras palavras, as equações usuais de escala para sistema finitos, no caso de transições de fase contínuas, Eqs. (5.10) e (5.11), são válidas no caso deste modelo de não-equilíbrio [79]. Este era o propósito deste cálculo de expoentes; como eles dependem dos parâmetros da distribuição de desordem (σ e h_o) está além dos nossos objetivos.

Para resumir os resultados obtidos, e levando em consideração as temperaturas críticas cal-

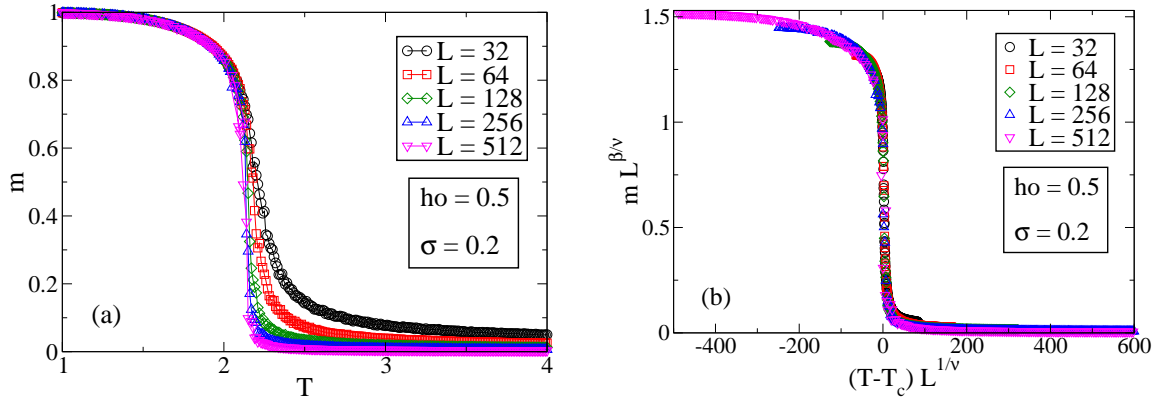


Figura 5.7: Magnetização por spin como função da temperatura para o caso da rede quadrada, com $\sigma = 0.2$, $h_o = 0.5$ e alguns tamanhos de rede (a) e o melhor colapso de dados (b). Este colapso foi obtido com $T_c = 2.125$, $\beta = 0.068$ e $\nu = 1.027$, como discutido no texto.

culadas pelo processo de extrapolação discutido acima para vários valores de h_o e σ , exibimos na figura 5.8 um esboço do diagrama de fases do modelo, no plano temperatura T contra intensidade do campo aleatório h_o , para alguns valores de σ [79]. Observe que a transição de primeira ordem, representada por uma linha pontilhada, não ocorre no caso limite da distribuição bimodal ($\sigma = 0.0$) e nem no caso $\sigma = 0.5$, como discutido no texto.

5.4 Simulações na Rede Cúbica

No caso da rede cúbica, temos $N = L^3$ spins no sistema. A distribuição de probabilidades que usaremos será uma bimodal,

$$P(h_i) = \frac{1}{2}\delta(h_i - h_o) + \frac{1}{2}\delta(h_i + h_o). \quad (5.12)$$

Estudamos sistemas em redes cúbicas de tamanhos $L = 10, 12, 16, 20, 24, 30, 40$ e 60 . Analisamos os seguintes valores dos parâmetros: $0.0 < h_o < 5.0$ e $0.01 < T < 10.0$. Os resultados para todos os valores da intensidade do campo magnético h_o sugerem que os efeitos de tamanho finito são menos pronunciados para $L \geq 16$. Assim como no caso da rede quadrada, testamos a relaxação do sistema para os estados estacionários monitorando a magnetização como função do tempo de MC. Encontramos que os estados estacionários são atingidos rapidamente para

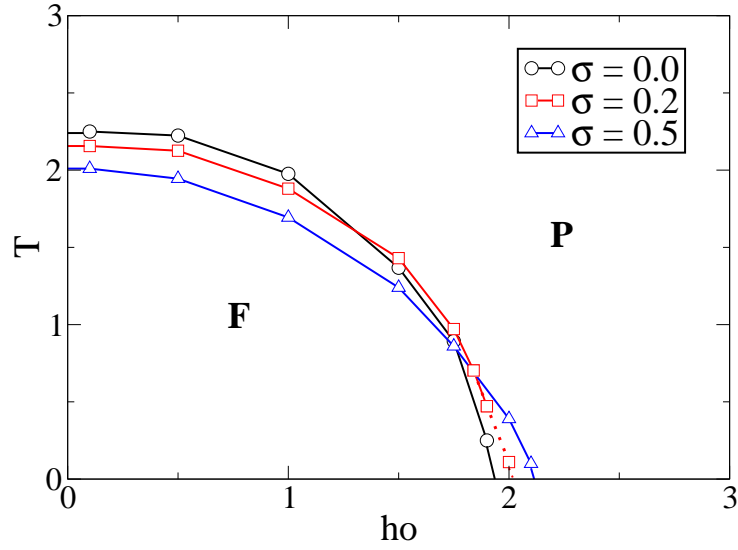


Figura 5.8: Esboço do diagrama de fases do modelo para o caso da rede quadrada, separando as fases Paramagnética (**P**) e Ferromagnética (**F**), para $\sigma = 0.0, 0.2$ e 0.5 . Os símbolos (círculo, quadrado e triângulo) são resultados das simulações, enquanto as linhas são apenas guias para os olhos. Linhas cheias (pontilhadas) representam transições de fase contínuas (de primeira ordem).

valores pequenos e grandes de h_o , como mostrado na figura 5.9. Assim, utilizamos 5×10^3 passos de MC para relaxação do sistema e 3×10^6 passos de MC para calcular as médias das quantidades de interesse (após descartar os passos para atingir os estados estacionários).

Os resultados para a magnetização por spin como função da temperatura são mostrados na figura 5.10, para $L = 60$ e vários valores de h_o . Estes resultados sugerem que o sistema passa continuamente do estado ferromagnético (com $m = 1$) para o estado paramagnético (com $m \rightarrow 0$) para valores da intensidade do campo $h_o < \sim 3.7$. Para maiores valores de h_o , a transição entre os estados estacionários se torna descontínua, o que é um indicativo de que a transição nesta região pode ser de primeira ordem [veja a figura 5.11 (a)]. Para $h_o > \sim 4.3$ o sistema se encontra na fase paramagnética.

Assim como fizemos para o caso da rede quadrada, para a correta caracterização da transição descontínua devemos analisar as flutuações do parâmetro de ordem, dadas por

$$\chi(T) = L^3 \frac{\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2}{T}. \quad (5.13)$$

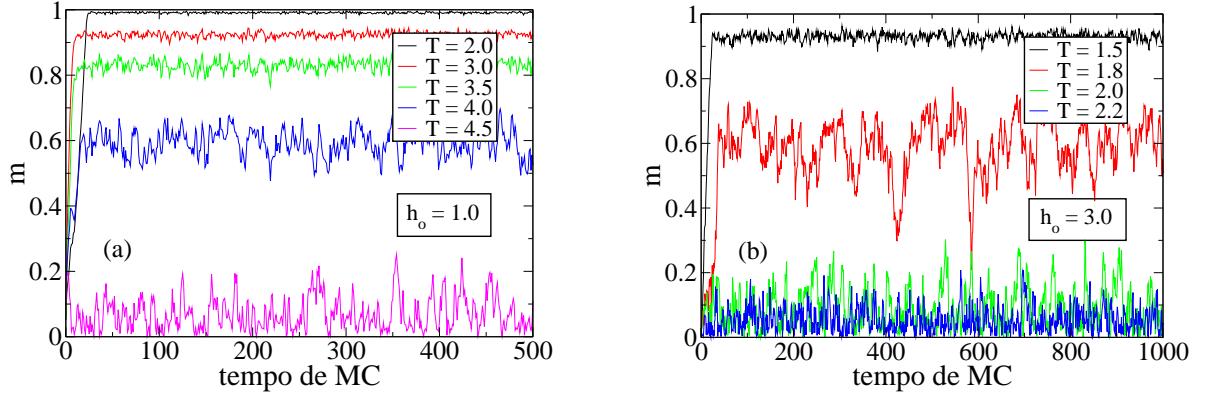


Figura 5.9: Evolução da magnetização por spin com o tempo de Monte Carlo para o caso da rede cúbica com $L = 16$. Exemplos de intensidades do campo magnético h_o fraca (esquerda) e forte (direita) são mostrados.

A susceptibilidade $\chi(T)$ como função da temperatura é exibida na figuras 5.12 (a) e 5.13 (a), onde podemos facilmente distinguir entre dois comportamentos diferentes, para transições descontínuas ($h_o = 4.0$) e contínuas ($h_o = 3.5$), respectivamente. Como discutido na seção anterior [79], as posições dos picos da susceptibilidade crescem com o tamanho linear do sistema na forma

$$\chi_{\max} \sim L^a, \quad (5.14)$$

onde $a = d$ para transições de fase de primeira ordem [19], d é a dimensão da rede ($d = 3$ no nosso caso) e $a = \gamma/\nu < d$ para transições contínuas. Ajustando os dados numéricos de χ_{\max} nós podemos obter, para $h_o = 4.0$, que [veja em destaque na figura 5.12(a)]

$$\chi_{\max} \sim L^b, \quad (5.15)$$

em que

$$b = 3.05 \pm 0.05, \quad (5.16)$$

o que é compatível com uma transição de fase de primeira ordem. Além disso, o caráter de primeira ordem de transição é confirmado pelo comportamento de outras quantidades: o cumulante de Binder [112], dado pela equação (5.8), que apresenta um mínimo bem definido próximo da temperatura crítica [113] e o histograma da magnetização próximo de T_c , que ap-

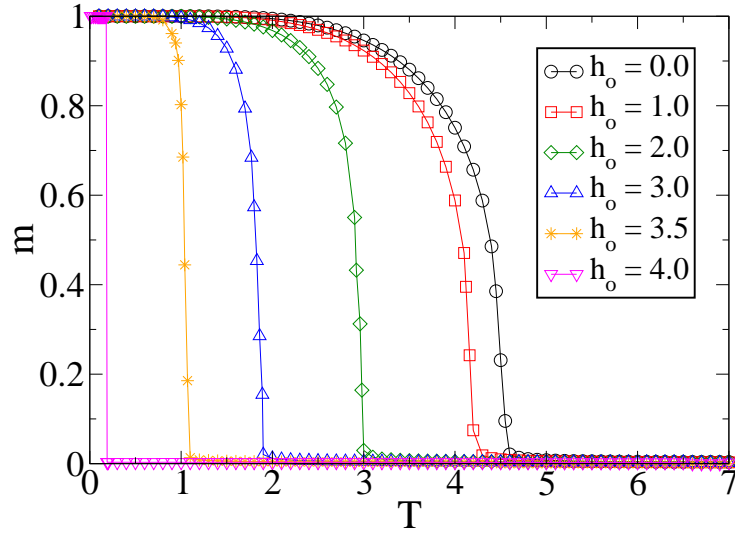


Figura 5.10: Magnetização como função da temperatura para o caso da rede cúbica, com $L = 60$ e valores típicos da intensidade de desordem h_o . Podemos observar transições de fase contínuas entre os estados estacionários ferromagnéticos e paramagnéticos para os menores valores de h_o , mas para valores próximos de $h_o = 4.0$ o sistema apresenta transições descontínuas. Para desordens mais elevadas, o sistema se encontra no estado paramagnético para qualquer temperatura.

resenta dois picos [veja a figura 5.12 (b)]. Por outro lado, para $h_o = 3.5$ encontramos a relação $\chi_{\max} \sim L^{2.63}$ [veja a figura 5.13 (b)], confirmando o caráter contínuo da transição [veja também a figura 5.14 (a)], como observado anteriormente. A transição descontínua também ocorre no modelo para outros valores de h_o (3.9, 4.1, 4.2, por exemplo), e o comportamento discutido acima ($\chi_{\max} \sim L^d$, histogramas da magnetização m com dois picos e um mínimo bem definido do cumulante de Binder), sugerindo que transições de fase de primeira ordem ocorrem no modelo para uma pequena faixa de valores da intensidade do campo magnético h_o , em baixas temperaturas. Por outro lado, para altas temperaturas a transição é claramente contínua, indicando portanto a ocorrência de um ponto tri-crítico a temperatura finita, onde as fases ferromagnética e paramagnética se tornam idênticas. A localização exata deste ponto tri-crítico é difícil de ser determinada numericamente, mas as simulações sugerem que ele esteja localizado no intervalo $3.7 < h_o < 3.8$ (veja a figura 5.14). Este cenário é diferente do apresentado pelo NRFIM na rede quadrada [79] e na abordagem de campo médio [100], quando consideramos a taxa de transição de Metropolis. Enquanto o caso 2D é compatível com uma transição contínua entre

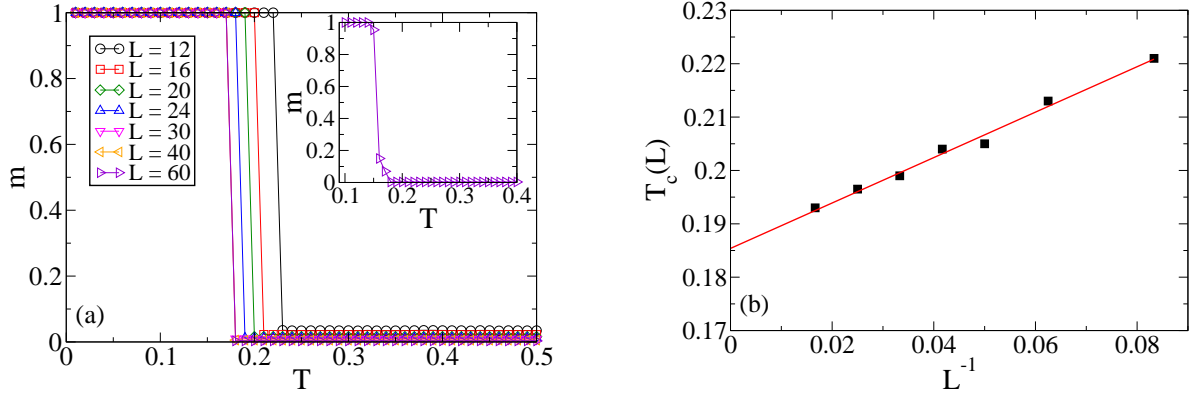


Figura 5.11: Magnetização por spin como função da temperatura para o caso da rede cúbica, com $h_o = 4.0$ e alguns tamanhos de rede L , mostrando saltos nas temperaturas pseudo-críticas $T_c(L)$ (a). Em destaque, na figura inserida, exibimos resultados de simulações para $L = 60$ considerando um intervalo pequeno entre temperaturas. Também mostramos uma ilustração do procedimento de extrapolação para determinar a temperatura crítica T_c para $h_o = 4.0$ (b). Ajustando os dados com uma reta, obtemos $T_c(L) = 0.186 + 0.424L^{-1}$, que resulta em $T_c(L) = 0.186$ no limite termodinâmico ($L^{-1} \rightarrow 0$).

as fases ordenada e desordenada, e a teoria do campo médio prevê uma transição de primeira ordem para qualquer valor de h_o , nossas simulações sugerem para a rede cúbica a ocorrência de uma transição de fase contínua para altas temperaturas e uma transição de primeira ordem para baixas temperaturas.

No modelo de não-equilíbrio considerado na seção anterior [79], o cálculo dos expoentes críticos na região de intensidade fraca do campo magnético, onde a transição de fase é contínua, sugeriu que as tradicionais equações de escala para tamanhos finitos, isto é,

$$\begin{aligned}
 T_c(L) &= T_c - aL^{-1/\nu}, \\
 m(T, L) &= L^{-\beta/\nu} \tilde{m}((T - T_c) L^{1/\nu}),
 \end{aligned}
 \tag{5.17}$$

são válidas. Baseado nas equações (5.17), calculamos os expoentes críticos β e ν para $h_o = 2.0$, um valor de desordem para o qual as simulações sugerem uma transição de fase contínua (veja a figura 5.10). A magnetização por spin em função da temperatura para $h_o = 2.0$ e vários valores de L é exibida na figura 5.15(a), assim como o melhor colapso dos dados [figura 5.15 (b)], o que prova a validade das equações de escala (5.17). A temperatura crítica no limite

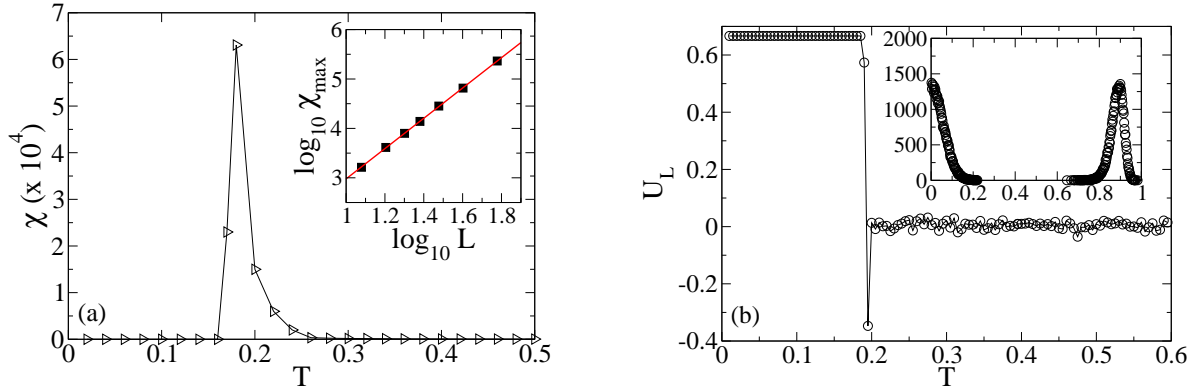


Figura 5.12: Susceptibilidade $\chi(T)$ como função da temperatura para o caso da rede cúbica, com $L = 40$ e $h_o = 4.0$, onde mostramos o salto próximo da temperatura crítica (c). Em destaque, na figura inserida, também exibimos as posições dos picos da susceptibilidade χ_{\max} contra tamanho da rede L na escala log-log. A inclinação da reta é 3.05 ± 0.05 , o que sugere uma transição de primeira ordem para $h_o = 4.0$. O caráter de primeira ordem da transição é confirmado pelo comportamento do cumulante de Binder, que apresenta um mínimo característico bem definido perto da transição (d). Em destaque, na figura inserida, ainda mostramos um histograma da magnetização próxima do ponto crítico, onde vemos claramente dois picos, assinatura de uma transição de primeira ordem.

termodinâmico $T_c = T_c(\infty)$ foi obtida pela extrapolação das temperaturas pseudo-críticas $T_c(L)$ [veja a figura 5.11 (b)], dadas pelas posições dos picos da susceptibilidade, e encontramos neste caso $T_c = 2.97 \pm 0.11$. O expoente ν foi calculado novamente com o uso do cumulante de Binder [veja a figura 5.16 (a)], cuja equação de escala para tamanhos finitos é dada pela equação (5.9). Encontramos neste caso o valor $\nu = 1.67 \pm 0.03$ [veja a figura 5.16 (b)]. O expoente β foi determinado pelo melhor colapso dos dados da magnetização [veja a figura 5.15 (a)]. O valor encontrado foi $\beta = 0.051 \pm 0.003$. Assim, os resultados do modelo na rede cúbica confirmam as indicações dadas na seção anterior de que a versão de não-equilíbrio do RFIM obedece às tradicionais equações de escala para tamanhos finitos na região de campo magnético fraco [80].

Existem importantes diferenças entre o comportamento crítico apresentando pelo NRFIM na presença de um campo aleatório que segue uma distribuição de probabilidades bimodal estudado aqui e o correspondente modelo no equilíbrio, com desordem temperada. Apesar de ainda haver um certo debate sobre a existência de transições de fase de primeira ordem no modelo no equilíbrio, os resultados mais recentes sugerem transições contínuas, e justificam o fato de

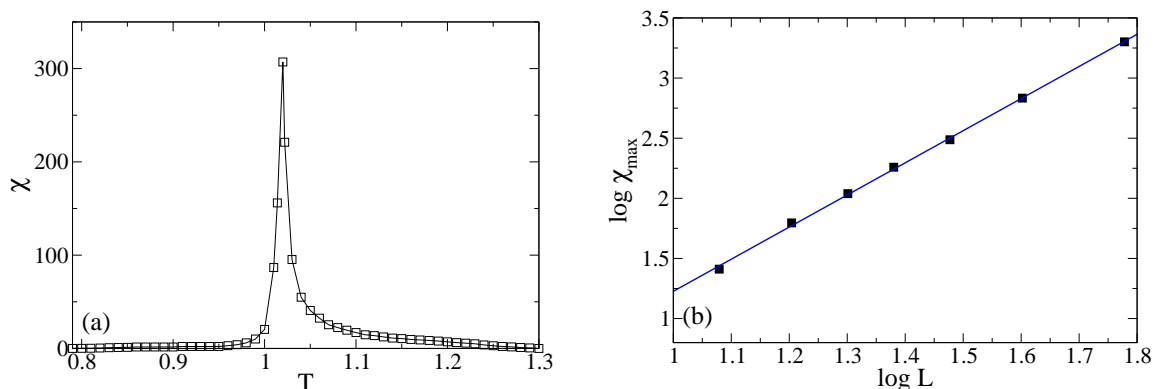


Figura 5.13: Susceptibilidade $\chi(T)$ como função da temperatura para o caso da rede cúbica, com $h_o = 3.5$ e $L = 40$ (a) e as posições dos máximos da susceptibilidade χ_{\max} contra tamanho da rede L na escala log-log (b). A inclinação da reta é 2.63 ± 0.10 , o que sugere uma transição de fase contínua para $h_o = 3.5$.

o sistema apresentar características típicas de transições de primeira ordem como fortes efeitos de tamanho finito das redes [96, 97]. Por outro lado, nossas simulações sugerem fortemente a existência de um ponto tri-crítico no modelo de não-equilíbrio. Em outras palavras, a rápida flutuação do campo local, que é peculiar do NRFIM, pode ser responsável pela ocorrência de transições de primeira ordem. Se levarmos em consideração que experimentos em antiferromagnetos diluídos sob a ação de campos magnéticos uniformes como $\text{Fe}_x\text{Mg}_{1-x}\text{Cl}_2$, que são protótipos de realizações experimentais de sistemas sob a ação de campos aleatórios [82], sugerem que transições de fase de primeira ordem ocorrem nestes materiais em baixas temperaturas [110], nossos resultados sugerem que o modelo de não-equilíbrio pode ser mais apropriado para a descrição teórica de sistemas reais do que o modelo no equilíbrio.

Levando em consideração as temperaturas críticas calculadas pelo processo de extrapolação discutido acima para vários valores de h_o , exibimos na figura 5.17 um esboço do diagrama de fases do modelo no plano temperatura T contra intensidade do campo magnético h_o , separando as fases ferromagnética e paramagnética [80]. Em destaque, na figura inserida, mostramos a região próxima ao ponto tri-crítico. Podemos notar também um efeito claro da dimensionalidade da rede: a transição de fase de primeira ordem a baixas temperaturas não ocorre no modelo definido na rede quadrada [79].

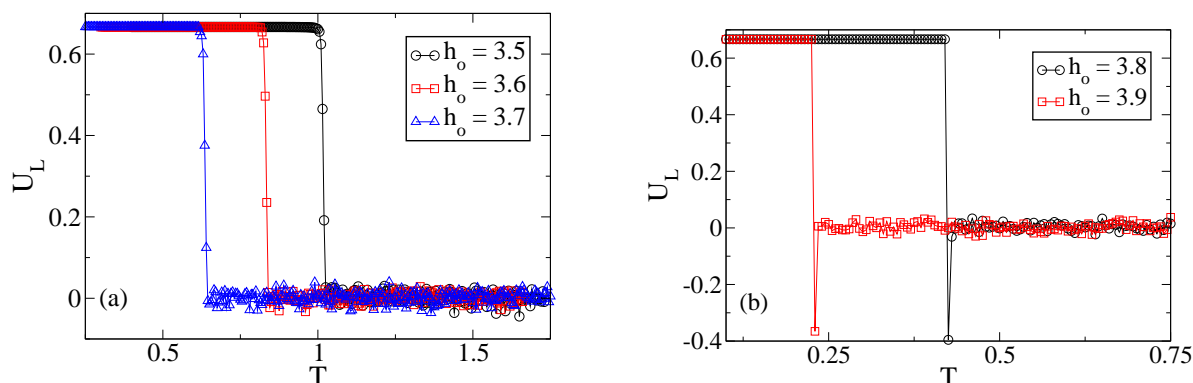


Figura 5.14: Resultados numéricos próximos ao ponto tri-crítico para o caso da rede cúbica, com $L = 30$ e um intervalo muito pequeno entre temperaturas ($\Delta T = 0.005$). Na figura (a) mostramos o cumulante de Binder para intensidades do campo $h_o = 3.5, 3.6$ e 3.7 , onde pode-se ver o caráter contínuo da transição, enquanto que em (b) podemos ver comportamentos típicos de transições de primeira ordem, para $h_o = 3.8$ e 3.9 .

5.5 Conclusões

Neste capítulo discutimos as propriedades críticas de um modelo de Ising na presença de um campo magnético local que flutua no tempo. O sistema estudado foi definido nas redes quadrada e cúbica, com interações (constantes) entre primeiros vizinhos, e realizamos simulações de Monte Carlo em redes com tamanhos variados. Este sistema pode ser visto como a versão de não-equilíbrio do tradicional modelo de Ising com desordem temperada.

A evolução do sistema em estudo é estocástica devido à dinâmica conflitiva que, além das flutuações usuais dos spins devido à presença do banho térmico, envolve também a flutuação do campo magnético local. Esta competição induz uma espécie de frustração dinâmica que pode estar presente em sistemas desordenados reais como vidros de spins e materiais que apresentam comportamento típico de sistemas na presença de campos aleatórios induzidos [102]. Este sistema difere dos modelos usuais de equilíbrio: enquanto o campo local é atribuído aleatoriamente no espaço de acordo com uma certa distribuição $P(h_i)$, e esta configuração se mantém congelada no caso da desordem temperada, e $P(h_i)$ contém correlações no caso da desordem recozida, onde a distribuição de impurezas está em equilíbrio com o sistema de spins, o nosso caso é similar ao caso da desordem temperada em cada instante de tempo durante o regime estacionário,

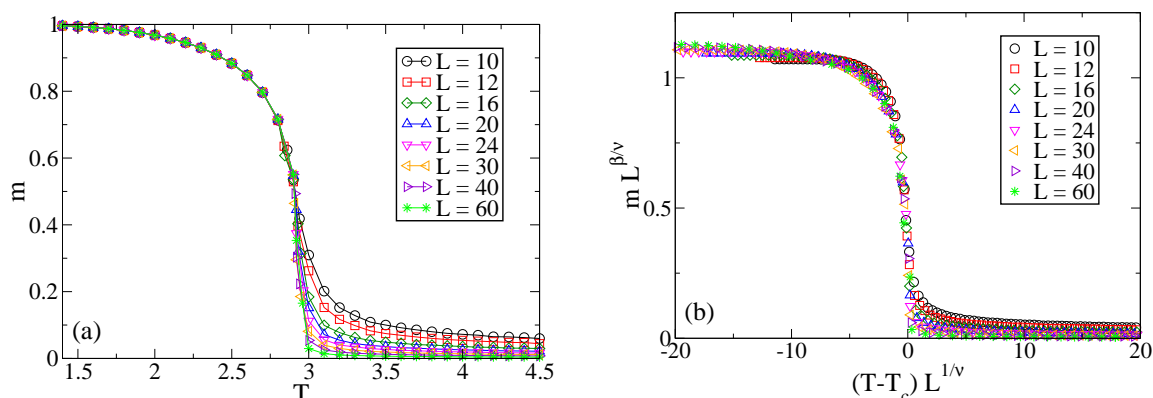


Figura 5.15: Magnetização por spin como função da temperatura para o caso da rede cúbica (a) e colapso dos dados de acordo com as equações (5.17) para $h_o = 2.0$ e vários tamanhos de rede L diferentes (b). O colapso foi obtido com $T_c = 2.97$, $\beta = 0.051$ e $\nu = 1.67$, como discutido no texto.

mas h_i mantém-se aleatoriamente variando com o tempo, também de acordo com $P(h_i)$, em cada sítio da rede i . Consequentemente, enquanto a frustração e a aleatoriedade tem uma importância pequena no caso de desordem recozida, elas são fundamentais para o comportamento do sistema de não-equilíbrio, de forma que pode produzir diferenças macroscópicas no sistema em comparação ao caso de desordem temperada. De fato, no caso da distribuição bimodal, por exemplo, no diagrama de fases do sistema recozido [109] a temperatura crítica aumenta quando a intensidade do campo magnético é aumentada, enquanto que no sistema temperado [97] e no sistema de não-equilíbrio o aumento da desordem pode destruir o ordenamento ferromagnético. No entanto, em baixas temperaturas, acredita-se que o sistema temperado apresenta transições de fase contínuas em 3 dimensões, enquanto que as nossas simulações sugerem a ocorrência de transições de fase de primeira ordem no sistema de não-equilíbrio.

No caso do sistema definido na rede quadrada, vimos que as simulações sugerem transições de primeira ordem somente para pequenos valores de $\sigma > 0.0$. Em outras palavras, no limite da distribuição bimodal o sistema não apresenta transição descontínua. Por outro lado, considerando o caso da rede cúbica, os nossos resultados numéricos sugerem a ocorrência de transições de fase de primeira ordem, mas somente em baixas temperaturas [80]. A ordem da transição foi confirmada por três quantidades medidas no sistema, que apresentam comporta-

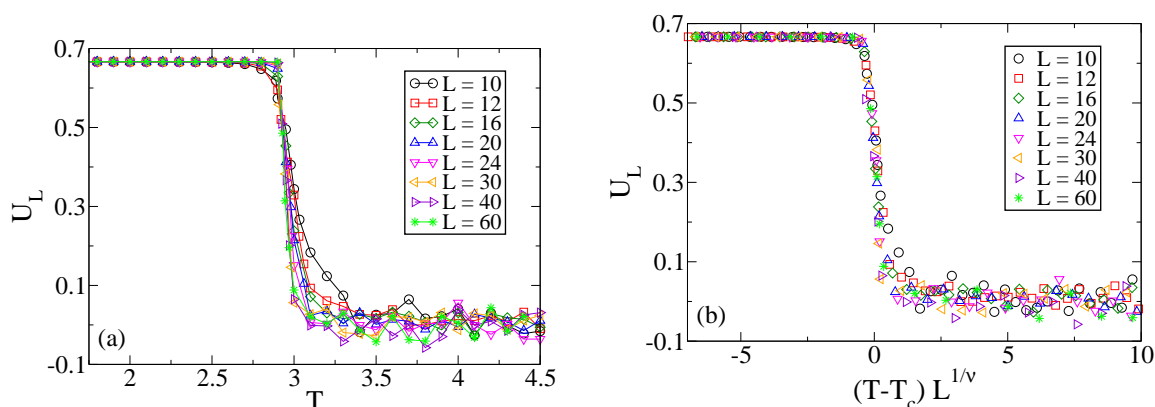


Figura 5.16: Cumulante de Binder como função da temperatura para o caso da rede cúbica, com $h_o = 2.0$ e alguns tamanhos de rede (a) e o melhor colapso dos dados (b), baseado na equação (5.9). O colapso foi obtido com $T_c = 2.97$, $\beta = 0.051$ e $\nu = 1.67$, como discutido no texto.

mentos típicos de transições de fase de primeira ordem: (i) o comportamento de escala dos picos da susceptibilidade, que crescem com o número de spins do sistema L^3 [19]; (ii) o cumulante de Binder, que apresenta um mínimo bem definido próximo de T_c [113]; (iii) histogramas da magnetização por spin, que apresentam dois picos, que indicam coexistência de fases [113].

A ocorrência de transições de fase de primeira ordem em baixas temperaturas no caso 3D sugere a existência de um ponto tri-crítico a temperatura finita, cujas coordenadas são difíceis de se calcular numericamente. No entanto, as simulações sugerem que este ponto está localizado no intervalo $3.7 < h_o < 3.8$. Vale ressaltar que o mesmo resultado, ou seja, a ocorrência de transições de fase de primeira ordem em baixas temperaturas, foi verificado experimentalmente nos antiferromagnetos diluídos $\text{Fe}_x\text{Mg}_{1-x}\text{Cl}_2$ na presença de um campo magnético uniforme [110], que são protótipos de realizações experimentais de sistemas sob a ação de campos magnéticos aleatórios [82]. Este resultado sugere que o modelo de não-equilíbrio pode ser mais apropriado para a descrição teórica de sistemas reais, em comparação com os modelos de equilíbrio.

Realizamos também um cálculo preliminar dos expoentes críticos na região de campo magnético fraco, para testarmos a validade das equações usuais de escala de tamanhos finitos. O resultado encontrado foi de que o modelo de não-equilíbrio obedece a estas equações,

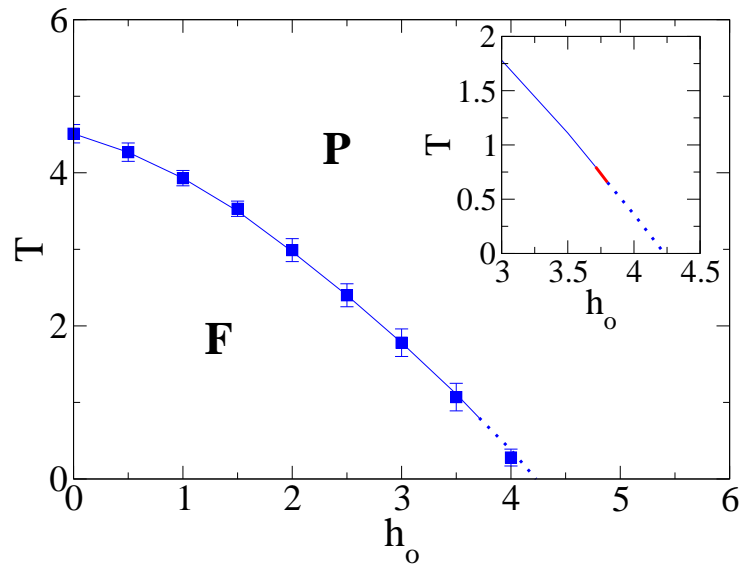


Figura 5.17: Esboço do diagrama de fases do modelo para o caso da rede cúbica, separando os estados ferromagnético (**F**) e paramagnético (**P**). Os quadrados são estimativas numéricas das temperaturas de transição, enquanto que a linha é apenas um guia para os olhos. A linha pontilhada na região de baixas temperaturas representa a região para a qual as simulações sugerem transições de fase de primeira ordem. Em destaque, na figura inserida, mostramos em mais detalhes a região próxima ao ponto tri-crítico (retiramos os pontos calculados, pra ficar mais claro), e a linha mais grossa representa o intervalo de valores de h_o onde esperamos que esteja localizado o ponto tri-crítico.

tanto no caso da rede quadrada [79] quanto no caso da rede cúbica [80].

6 *Efeitos de Reputação na Dinâmica de Opiniões do Modelo de Sznajd*

Neste capítulo, discutiremos a formação de consenso no modelo de opiniões de Sznajd [114], considerando um mecanismo de reputação para os agentes, de forma a limitar sua capacidade de convencimento. Analisaremos a transição de fase usual do problema, e mostraremos que situações realistas são possíveis utilizando regras muito simples. Os resultados são baseados na referência [115].

6.1 Introdução

Nos últimos 10 anos, o modelo de socio-física de Sznajd [114] vem sendo aplicado com sucesso em diferentes áreas do conhecimento, como política, economia e *marketing* (para revisões, ver [116, 117] e mais recentemente [118]). O maior sucesso do modelo é a emergência de consenso a partir de uma população de agentes que interagem através de regras locais simples, baseadas em modelos do tipo Ising. Após a introdução do modelo original em uma dimensão em 2000 [114], muitas modificações foram propostas, como a extensão para as redes quadrada [119], triangular [120] e cúbica [121], o aumento do alcance das interações [122] e do número de estados das variáveis (ou do número de opiniões) [123, 124, 125], difusão dos agentes na rede [123, 126], e muitas outras.

O modelo de Sznajd original é definido de forma que a cada sítio de uma rede com estrutura qualquer (linear, quadrada, cúbica, complexa, etc) é associado um spin de Ising, que pode ser $+1$ ou -1 , ou seja, o sítio representa um agente que pode ter uma de duas opiniões diferentes em

um determinado assunto. O modelo foi primeiramente estudado em um anel unidimensional, e foi definido pelas seguintes regras [114]: (1) se 2 agentes vizinhos $(i, i + 1)$ tem a mesma opinião (ou mesmo spin), os agentes vizinhos a eles, ou seja, os agentes que ocupam os sítios $i - 1$ e $i + 2$ seguem a opinião do par $(i, i + 1)$; (2) se 2 agentes vizinhos $(i, i + 1)$ tem opiniões (ou orientações de spins) contrárias, o agente do sítio $i - 1$ segue a opinião do agente $i + 1$ e o agente do sítio $i + 2$ segue a opinião do agente i . Apesar de se mostrar um modelo interessante, ele não apresenta transição de fase, como muitos sistemas em 1d [105, 127], e a dinâmica sempre leva a um estado ferromagnético (consenso) ou a um estado antiferromagnético [114].

O modelo na rede quadrada foi inicialmente estudado por Stauffer e colaboradores [119]. Considerando que uma plaqueta de 4 sítios vizinhos, ou seja, uma plaqueta 2×2 , com todos os spins paralelos, pode convencer os seus oito vizinhos, os autores em [119] encontraram uma transição de fase para uma densidade inicial de spins $+1$ igual a $d = 1/2$. Neste modelo, a transição se dá entre dois estados distintos: um estado onde o consenso com todos os spins apontando para cima nunca é obtido na população (para $d < 1/2$) e um estado onde este consenso é sempre obtido (para $d > 1/2$). O modelo bidimensional também foi considerado em uma rede quadrada diluída [128], onde cada sítio pode carregar um spin ou estar vazio, e uma situação com correlações de longo alcance entre os sítios ocupados da rede foi também analisada, mas nos dois casos os resultados obtidos foram muito similares aos resultados em redes regulares [116]. Uma situação mais realística para o modelo em 2 dimensões é considerar uma probabilidade de convencimento. O modelo de Sznajd é robusto nesta situação: se um agente convence algum outro apenas com probabilidade p , e não realiza nenhuma ação com probabilidade $1 - p$, ainda assim o consenso na população é obtido, porém os tempos de relaxação são bem maiores que nos casos anteriores [116]. Modelos que consideram mais de duas opiniões (usando spins de Potts, por exemplo) ou definidos em redes de mundo pequeno [129, 130] foram investigados de forma a representar um comportamento mais realista de sociedades (veja [116] e referências contidas). Ainda com o objetivo de evitar o consenso total na população, e assim tornar o modelo de Sznajd mais realista, Schneider introduziu agentes especiais na população, especificamente oportunistas e agentes com opiniões contrárias [131].

Porém, a dinâmica de relações sociais no mundo real apresenta uma grande quantidade de detalhes e ingredientes que são normalmente negligenciados em muitos modelos. Com o objetivo de estudar um modelo mais realista, neste capítulo introduziremos no modelo de Sznajd um mecanismo de reputação dos agentes, que limita a sua capacidade de convencimento. Esperamos que a inclusão de reputação torne o modelo de Sznajd mais próximo do comportamento de um sistema social real, onde não importa apenas o número de indivíduos com a mesma opinião, mas também a reputação destes agentes com mesma opinião dentro da comunidade, ou seja, a sua capacidade de convencer outros agentes da sua opinião. Em outras palavras, é natural que indivíduos mudem a sua opinião em um assunto qualquer somente se são influenciados por outros indivíduos com alta reputação, ou alto poder de convencimento. De fato, com esta consideração, mostraremos que uma situação de democracia, onde o sistema apresenta ordenamento ferromagnético com a maioria dos spins paralelos (ou seja, com magnetização por spin menor do que 1), é possível no modelo usando regras microscópicas simples.

6.2 Modelo

Consideramos o modelo de Sznajd definido em uma rede quadrada com tamanho linear L , isto é, com L^2 agentes. Nosso modelo é baseado em uma regra considerada no trabalho de Stauffer e colaboradores, a regra Ia da referência [119]. Nesta regra, uma plaqueta 2×2 com 4 agentes vizinhos é escolhida aleatoriamente, e assim os 8 vizinhos desta plaqueta são convencidos a seguir a opinião da plaqueta se os 4 agentes iniciais possuem a mesma opinião (ou mesmo spin). Caso os agentes da plaqueta não possuam a mesma orientação de spin, nada acontece. Assim, iremos considerar um número inteiro (R) que é associado a cada agente e representa a sua reputação na comunidade, em analogia a um estudo recente do chamado Jogo de Nomeação (*Naming game*, em inglês) [132]. A reputação é introduzida como um valor que varia no tempo. Os agentes iniciam o jogo com uma distribuição aleatória de valores R , e durante a evolução temporal do modelo as reputações de cada agente são modificadas de acordo com as regras microscópicas explicadas a seguir.

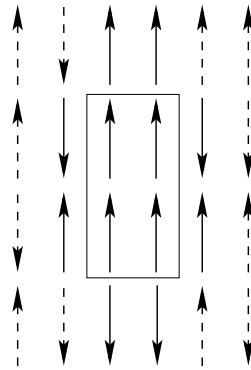


Figura 6.1: Representação esquemática de uma plaqueta 2×2 com 4 agentes vizinhos entre si (spins dentro do retângulo) e os 8 agentes vizinhos à plaqueta considerados na dinâmica do modelo (representados por spins cheios). Observe que os outros agentes (representados por spins pontilhados) não participam da dinâmica.

1. Escolhemos aleatoriamente uma plaqueta 2×2 com 4 agentes vizinhos (veja a representação esquemática na figura 6.1).
2. Se os 4 spins não tem a mesma orientação, nada acontece.
3. Se os 4 spins são paralelos, ou seja, se os 4 agentes escolhidos aleatoriamente tem a mesma opinião, calculamos a reputação média RM da plaqueta:

$$RM = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^4 R_i ,$$

onde cada termo R_i representa a reputação de um dos agentes da plaqueta ¹.

4. Neste caso, comparamos as reputações de cada um dos oito vizinhos da plaqueta com a reputação média RM da plaqueta. Se a reputação de um vizinho qualquer é menor que a reputação média da plaqueta, este vizinho segue a orientação da plaqueta, ou seja, ela adquire a mesma opinião da plaqueta. Para cada indivíduo convencido, cada um dos agentes da plaqueta aumenta sua reputação em 1 unidade (em outras palavras, a reputação média da plaqueta aumenta em 1 unidade).

Assim, mesmo no caso onde todos os spins da plaqueta aleatoriamente escolhida apontam na mesma direção, um número variável de agentes pode ser convencido, a saber 8, 7, 6, ..., 1 ou

¹Note que iremos considerar a parte inteira da razão $\sum_{i=1}^4 R_i/4$, já que os números R de cada agente são inteiros

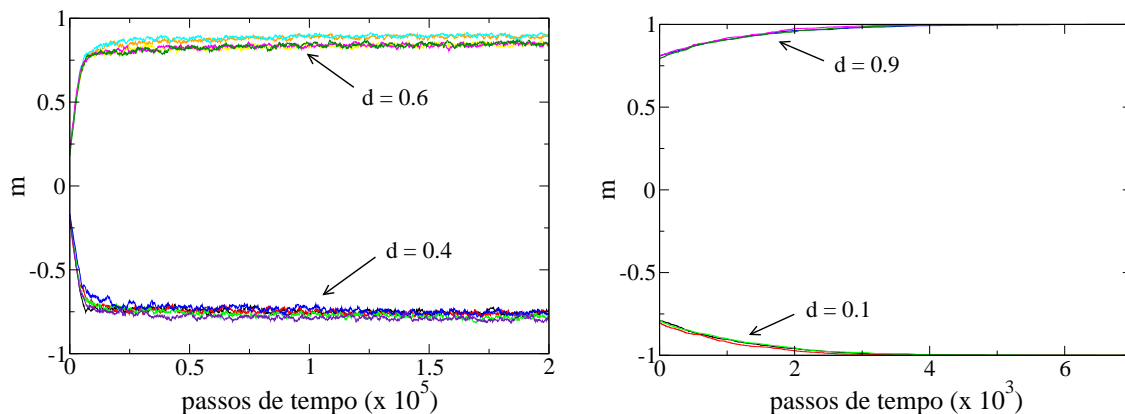


Figura 6.2: Evolução temporal da magnetização para $L = 53$, densidades iniciais de spins $+1$ iguais a $d = 0.4$ e $d = 0.6$ e diferentes realizações (figura do lado esquerdo). Podemos ver que os estados estacionários mostram situações onde o consenso não é obtido, em oposição ao modelo tradicional definido na rede quadrada [119]. Nesta figura também mostramos situações onde consenso é obtido, para densidades iniciais de spins $+1$ iguais a $d = 0.1$ e $d = 0.9$ (figura do lado direito).

nenhum. Como sugerido por Stauffer [116], podemos imaginar que cada agente no modelo de Sznajd carrega uma opinião, que pode ser relacionada ao spin pra cima (por exemplo, um eleitor favorável a um candidato da direita) ou para baixo (por exemplo, um eleitor favorável a um candidato da esquerda), e representa uma de duas possíveis opiniões em uma questão qualquer. O objetivo dos agentes no jogo é convencer os seus vizinhos da sua opinião. Podemos esperar que, se um certo grupo de agentes consegue convencer muitos outros agentes, então a capacidade de convencimento destes agentes aumenta. Assim, a inclusão de reputação no modelo de Sznajd deve capturar esta característica do mundo real.

6.3 Resultados

Nas simulações, o valor inicial das reputações dos agentes segue uma distribuição gaussiana centrada em zero com desvio padrão $\sigma = 5^2$. Seguindo a linha dos trabalhos anteriores no modelo de Sznajd, começamos analisando a evolução temporal da magnetização por

²Mais a frente, discutimos o efeito da variação do valor de σ .

spin, ou seja,

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N s_i, \quad (6.1)$$

onde $N = L^2$ é o número total de agentes e $s_i = \pm 1$. No modelo de Sznajd padrão, definido na rede quadrada [119], a aplicação da regra discutida acima (regra Ia da referência [119]), com uma densidade inicial de spins +1 igual a $d = 1/2$ leva o sistema para os pontos fixos com todos os spins pra cima ou todos os spins pra baixo com igual probabilidade. O sistema não muda mais a sua configuração, o que caracteriza um estado absorvente [127]. Para $d < 1/2$ ($> 1/2$) o sistema atinge um estado ferromagnético com todos os spins para baixo (para cima) em todas as realizações do modelo, o que caracteriza uma transição de fase para $d = 1/2$ no limite termodinâmico ($L \rightarrow \infty$). Como discutido pelos autores em [119], pontos fixos com todos os spins paralelos descrevem uma situação de ditadura, o que não é comum nos tempos atuais. Porém, ferromagnetismo com a maioria dos spins paralelos, ou seja, com $m < 1$ ou $m > -1$, corresponde a uma situação de democracia, sendo uma situação bastante comum no mundo atual. Podemos ver na figura 6.2 o comportamento da magnetização por spin como função do tempo de simulação no nosso modelo, para várias amostras, considerando as regras microscópicas discutidas na seção 6.2. No gráfico do lado esquerdo da figura 6.2 exibimos resultados para um valor $d > 1/2$ ($< 1/2$), onde podemos ver que o consenso com todos os spins para cima (para baixo) não é obtido na população em nenhuma amostra, o que nos sugere que:

- uma situação de democracia é possível no modelo sem considerar uma mistura de regras diferentes [119] ou sem incluir agentes especiais no sistema, como agentes que mantêm a opinião contrária à da maioria e oportunistas, que modificam a sua opinião de acordo com a maioria [131];
- se uma transição de fase também ocorre no nosso modelo, o ponto de transição deve estar localizado na região $d > 1/2$.

Ainda na figura 6.2 (gráfico do lado direito), mostramos situações onde o consenso é obtido com todos os spins para cima (para $d = 0.9$) e todos os spins para baixo (para $d = 0.1$). Isto

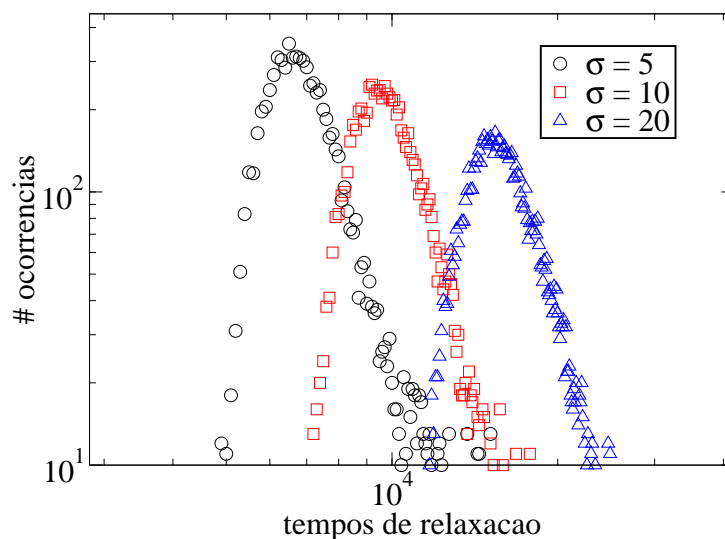


Figura 6.3: Histogramas dos tempos de relaxação para $L = 53$ e $d = 0.8$, obtidos a partir de simulações sobre 10^4 realizações, com as reputações iniciais dos agentes seguindo uma distribuição gaussiana centrada em zero e com diferentes desvios padrões σ . A distribuição é compatível com uma função log-normal para todos os valores de σ , o que corresponde à parábola observada no gráfico na escala logarítmica nos dois eixos.

significa que situações de consenso são também possíveis no modelo, mas somente para valores muito altos ou muito baixos da densidade inicial de spins $+1$. Em outras palavras, situações realistas de democracia ocorrem no modelo para vários valores de d .

Uma quantidade usualmente analisada em estudos do modelo de Sznajd é a distribuição dos tempos de relaxação [114, 116, 119, 133], ou seja, o tempo necessário para encontrar todos os agentes do sistema com a mesma opinião. Para esta quantidade, consideramos 10^4 realizações do sistema e medimos o número de passos temporais necessários para que um ponto fixo seja obtido. Na figura 6.3 exibimos a distribuição dos tempos de relaxação para $L = 53$, $d = 0.8$ e alguns valores de σ . Podemos observar que a distribuição é compatível com uma log-normal para todos os valores de σ , o que corresponde à parábola que observamos no gráfico da figura 6.3 na escala log-log. O mesmo comportamento foi também observado em outros estudos do modelo de Sznajd [119, 131, 133], considerando diferentes regras e/ou topologias. Medimos também o tempo médio de relaxação τ em função do tamanho da rede L . Realizamos novamente médias sobre 10^4 realizações. Na figura 6.4 exibimos os dados para τ contra L na escala

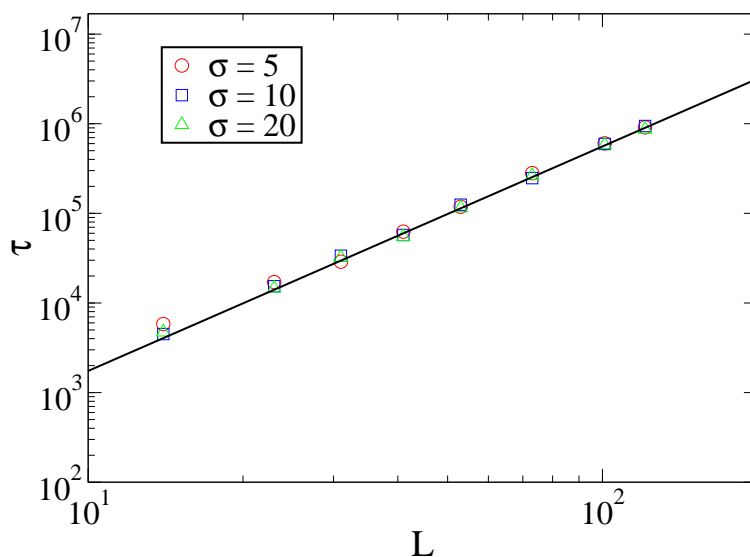


Figura 6.4: Tempo médio de relaxação τ , com média realizada sobre 10^4 realizações, contra o tamanho linear da rede L na escala log-log. A reta tem inclinação $5/2$. O resultado é robusto com relação à escolha de diferentes valores de σ .

logarítmica, onde podemos verificar uma relação do tipo lei de potência entre estas duas quantidades na forma $\tau \sim L^{5/2}$, para todos os valores do desvio padrão σ , o que indica que este resultado é robusto com relação à escolha de diferentes valores de σ . Destacamos que leis de potência entre τ e L são reportadas na literatura em outros estudos do modelo de Sznajd [133].

Para analisarmos em detalhes a possibilidade da ocorrência de uma transição de fase, simulamos o sistema para diferentes tamanhos de rede L e medimos a fração de realizações que apresentam todos os spins para cima ao fim da simulação, quando a densidade inicial de spins $+1$ varia no intervalo $0.4 \leq d \leq 1.0$. Em outras palavras, esta quantidade nos dá a probabilidade de o sistema terminar no estado absorvente com todos os agentes com opinião $+1$, dado que a simulação começa com uma densidade d de spins pra cima. Nós consideramos 1000 realizações para $L = 23, 31$ e 53 , 500 realizações para $L = 73$ e 200 realizações para $L = 101$ e 121 . Os resultados são mostrados na figura 6.5. Podemos observar que o ponto de transição está localizado em algum lugar na região $d > 1/2$, como discutido acima. Para localizar a posição do ponto crítico, fizemos uma análise de tamanho finito, baseado nas equações de escala usuais

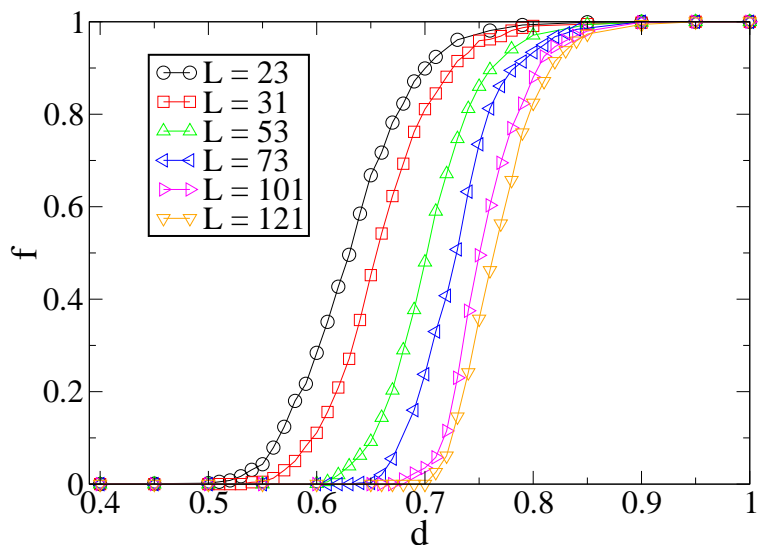


Figura 6.5: Fração f de realizações que terminam com todos os spins +1 quando a densidade inicial d de spins +1 varia no intervalo $0.4 \leq d \leq 1.0$, para alguns tamanhos de rede L . O número total de realizações é 1000 (para $L = 23, 31$ e 53), 500 (para $L = 73$) e 200 (para $L = 101$ e 121).

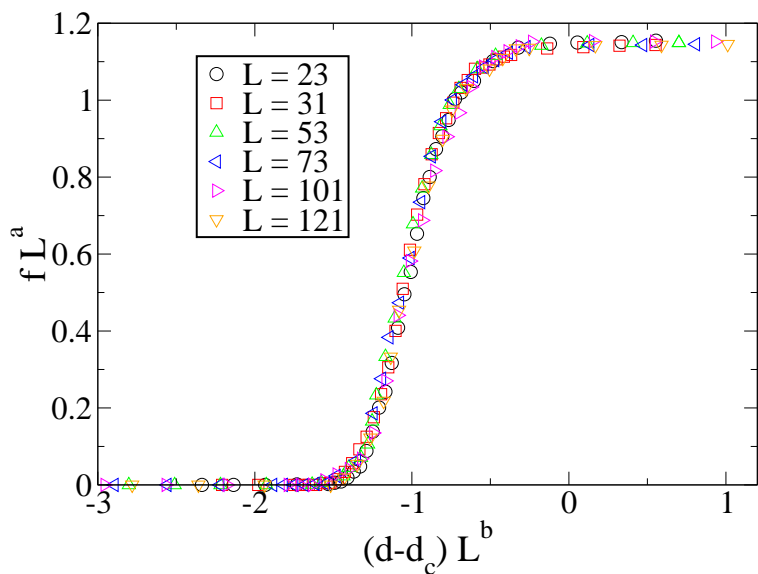


Figura 6.6: Colapso dos dados para f , obtido com $a = 0.035$, $b = 0.44$ e $d_c = 0.88$.

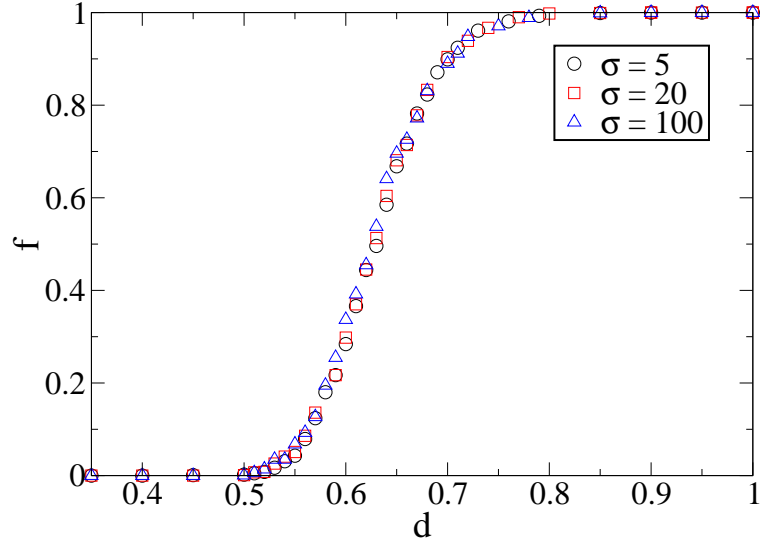


Figura 6.7: Fração f de realizações que terminam com todos os spins $+1$ quando a densidade inicial d de spins $+1$ varia no intervalo $0.35 \leq d \leq 1.0$, para $L = 23$, 1000 realizações e alguns valores de σ . Este resultado mostra que o aumento de σ não modifica o comportamento de f , ou seja, o comportamento da transição de fase.

[133],

$$f(d, L) = L^{-a} \tilde{f}((d - d_c) L^b), \quad (6.2)$$

$$d_c(L) = d_c + a L^{-b}. \quad (6.3)$$

O resultado é mostrado na figura 6.6, e encontramos que

$$d_c = 0.88 \pm 0.01, \quad (6.4)$$

no limite termodinâmico ($L \rightarrow \infty$). O ponto crítico realmente está localizado em um valor $d > 1/2$, diferentemente do que ocorre no modelo padrão de Sznajd definido na rede quadrada [119]. Este fato pode ser facilmente entendido: no nosso modelo, a cada passo de tempo a plaqueta 2×2 aleatoriamente escolhida pode convencer 8, 7, 6, ..., 1 ou nenhum vizinho, mesmo se os spins da plaqueta são paralelos. No modelo padrão, se os spins da plaqueta têm a mesma orientação, 8 vizinhos são imediatamente convencidos, de forma que é necessária então uma densidade inicial de spins $+1$ menor para o sistema atingir o ponto fixo com todos os spins pra cima. No entanto, a existência de um valor crítico $d_c < 1.0$ indica que uma transição de

fase também ocorre na nossa versão do modelo de Sznajd [115]. Este resultado é robusto com relação à escolha de diferentes valores de σ , como podemos ver na figura 6.7.

6.4 Conclusões

Neste capítulo analisamos os efeitos de reputação dos agentes no modelo de sociofísica de Sznajd, definido na rede quadrada. A reputação é introduzida como um valor (R) que varia no tempo. Os agentes iniciam o jogo com valores de R seguindo uma distribuição gaussiana [132], e durante a evolução temporal do sistema a reputação dos agentes muda de acordo com a sua capacidade de convencimento, seguindo algumas regras microscópicas simples. Esperamos que a consideração de reputação dos agentes torne o modelo social de Sznajd mais realista. De fato, levando em consideração regras muito simples, situações de democracia, ou seja, situações nas quais o sistema apresenta a maioria dos spins apontando em uma direção, emergem espontaneamente no modelo, para uma grande faixa de valores da densidade inicial d de spins para cima (+1). Situações de consenso com todos os spins para cima (para baixo) só ocorrem se considerarmos grandes (pequenos) valores de d .

Realizamos simulações de Monte Carlo em redes quadradas com tamanhos lineares L no intervalo $23 \leq L \leq 121$, e utilizamos tipicamente da ordem de $10^3 - 10^4$ realizações para medirmos as quantidades de interesse. Assim como no modelo usual de Sznajd [119], encontramos uma distribuição log-normal dos tempos de relaxação. Além disso, o tempo médio de relaxação τ depende do tamanho da rede na forma de uma lei de potência, $\tau \sim L^{5/2}$, que é independente do desvio padrão σ da distribuição inicial de reputações dos agentes.

O sistema também apresenta uma transição de fase, como no modelo usual, entretanto encontramos $d_c = 0.88$ para a densidade crítica inicial de spins +1, maior que $1/2$, o valor encontrado por Stauffer e colaboradores para o modelo padrão [119]. Este fato pode ser facilmente entendido: no nosso modelo, a cada passo de tempo a plaqueta 2×2 aleatoriamente escolhida pode convencer 8, 7, 6, ..., 1 ou nenhum vizinho, mesmo se os spins da plaqueta são paralelos. No modelo padrão, se os spins da plaqueta têm a mesma orientação, 8 vizinhos são imediata-

mente convencidos, de forma que é necessária então uma densidade inicial de spins $+1$ menor para o sistema atingir o ponto fixo com todos os spins pra cima. No entanto, a existência de um valor crítico $d_c < 1.0$ indica que uma transição de fase também ocorre na nossa versão do modelo de Sznajd [115]. As simulações sugerem que esta transição é robusta com relação à escolha de diferentes valores de σ .

Como extensões deste trabalho, pode ser interessante explorar o efeito da topologia da rede usada para acomodar os agentes do modelo. Diferentes topologias podem ser estudadas, como por exemplo redes de Barabási [27] e de mundo pequeno [129, 130], que são mais realistas do que redes regulares como a que consideramos aqui. Situações com agentes com mais de duas opiniões, usando spins de Potts, por exemplo, podem ser também interessantes para futuros estudos.

7 *Transição de Fase em um Modelo de Propagação de Epidemias*

Neste capítulo discutiremos um modelo de propagação de uma epidemia, baseado no tradicional modelo SIS (*Susceptible-Infected-Susceptible*, em inglês). Analisaremos o modelo no limite de campo médio e também em uma rede quadrada, e mostraremos que o sistema sofre uma transição entre uma fase na qual a doença atinge uma fração finita da população e uma fase onde a doença é extinta [134].

7.1 Introdução

Modelos de propagação de epidemias vêm sendo estudados através de técnicas da física estatística nos últimos vinte anos. A abordagem usual é tomar por base os modelos SI (*Susceptible-Infected*), SIS (*Susceptible-Infected-Susceptible*) e SIR (*Susceptible-Infected-Recovered*) [135, 136]. Apesar da simplicidade destes modelos, eles têm sido aplicados com sucesso a uma variedade de doenças como a dengue [137, 138, 139], a aids [140, 141] e mais recentemente a gripe suína (H1N1) [142, 143].

Uma questão fundamental na análise de modelos de epidemias é: a doença se espalhará pela população ou será extinta? Em outras palavras, existe uma taxa de infecção crítica λ_c acima da qual a doença sobrevive? Considerando a formulação mais simples dos modelos acima mencionados, isto é, levando em conta que cada indivíduo na população está em contato com todos os outros (em outras palavras, uma abordagem de campo médio), a doença sempre desaparece no modelo SIR e sobrevive no modelo SIS para uma certa faixa de parâmetros

[136]. No caso do modelo definido em uma rede quadrada, sempre existe uma taxa de infecção crítica para os dois modelos [144, 145]. Por outro lado, os modelos SIS e SIR definidos em redes livres de escala não apresentam taxa de infecção crítica e sempre uma fração finita da população permanece infectada, enquanto que no caso de redes aleatórias existe um λ_c finito [146, 147, 148, 149, 150, 151].

No modelo SIS, a população é dividida em duas classes: Suscetíveis (**S**) e Infectados (**I**). Dado um certo instante de tempo t , os indivíduos **S** são os que estão saudáveis, mas que estão propícios a contrair a doença, enquanto que os indivíduos **I** são os que já estão doentes. No modelo padrão [135, 136], as transições entre os estados **S** e **I** são dadas de acordo com as seguintes regras:

1. Se um indivíduo j está Infectado num instante de tempo t , ele se tornará Suscetível no instante $t + 1$ com probabilidade α ;
2. Se, por outro lado, um indivíduo j está Suscetível num instante de tempo t , ele se tornará Infectado no instante $t + 1$ com probabilidade λ se ele estiver em contato com algum indivíduo Infectado;

No caso de termos o modelo definido em uma rede regular qualquer, de acordo com a regra 2 acima um indivíduo Suscetível irá se tornar Infectado dependendo dos vizinhos Infectados. Uma abordagem é considerar que a probabilidade de um indivíduo **S** se tornar **I** é dada por $m\lambda/z$, onde m é o número de primeiros vizinhos infectados ($m = 0, 1, 2, \dots, z$) do indivíduo **S** em consideração e z é o número de coordenação da rede [144, 145]. Outra forma é considerar que o indivíduo **S** se tornará **I** com probabilidade λ se pelo menos um dos seus primeiros vizinhos estiver no estado **I** [147]. Se considerarmos, no entanto, que todos os indivíduos da população podem interagir entre si, estaremos no limite de campo médio, para o qual podemos desenvolver uma solução analítica, baseada nas equações diferenciais ordinárias usuais de modelos de epidemias [135, 136].

Neste capítulo iremos nos concentrar no modelo SIS, e assim propor uma modificação a

ele. Em particular, vamos considerar uma taxa de infecção λ decrescente no tempo, ou seja, cada indivíduo j que se recupera da doença e retorna ao estado suscetível em um dado instante de tempo t diminui sua probabilidade de se tornar infectado novamente no passo de tempo seguinte $t + 1$ de acordo com $\lambda_j(t + 1) = \varepsilon \lambda_j(t)$, onde ε é um parâmetro do modelo. Além disso, esta diminuição na taxa de infecção ocorre um número máximo l de vezes. Estudaremos o modelo em redes quadradas e no limite de campo médio, e mostraremos que o sistema sofre uma transição de fase em certos valores críticos $\varepsilon_c(l)$ que separam uma fase na qual a doença atinge uma fração finita da população ($\varepsilon > \varepsilon_c$) e uma fase onde a doença é extinta ($\varepsilon \leq \varepsilon_c$).

7.2 Modelo e Abordagem de Campo Médio

Agora, incluiremos nossa modificação. As duas regras discutidas na seção anterior são a base para o nosso modelo. Porém, iremos agora considerar que cada indivíduo j começa com uma probabilidade de infecção $\lambda(j, t = 0) = \lambda_0$, mas λ varia no tempo, e depende de quantas vezes este indivíduo j foi infectado anteriormente. Em outras palavras, se um indivíduo j sofreu a transição $\mathbf{I} \rightarrow \mathbf{S}$ em um dado instante de tempo t , no instante de tempo seguinte a sua probabilidade de infecção λ será atualizada de acordo com a equação

$$\lambda(j, t + 1) = \varepsilon \lambda(j, t), \quad (7.1)$$

em que ε é um parâmetro menor do que 1 que controla a diminuição da probabilidade de infecção. Além disso, iremos considerar também que este decaimento ocorre um número máximo l de vezes, ou seja, cada indivíduo tem uma capacidade finita de diminuir sua chance de ser infectado novamente.

Esta dinâmica pode ser relevante para descrever doenças como a gripe, já que é normal que com o passar do tempo a nossa chance de se infectar com gripe novamente diminui (mas não vai a zero). As regras acima definem um modelo no limite de campo médio, já que todos os indivíduos interagem com todos os outros. Assim, podemos desenvolver uma solução analítica baseada nas equações diferenciais ordinárias usuais de modelos do tipo SIS [135, 136]. Vamos

definir S_k como a densidade de indivíduos Suscetíveis que já se recuperaram k vezes da doença, ou seja, que passaram pela transição $\mathbf{I} \rightarrow \mathbf{S}$ exatamente k vezes. Neste caso, a probabilidade de infecção destes indivíduos é dada por $\lambda_k = \varepsilon^k \lambda_0$. Considerando que após um longo tempo (que não tem nada a ver com o estado estacionário do sistema) todos os indivíduos estarão em dois estados, I ou S_l , podemos perceber facilmente que a única equação importante na evolução do sistema é a equação para S_l , ou seja,

$$\frac{dS_l}{dt} = \alpha I - \lambda_l S_l I . \quad (7.2)$$

Na equação (7.2), o termo do lado esquerdo descreve a evolução temporal da densidade de indivíduos \mathbf{S} que já sofreram a transição $\mathbf{I} \rightarrow \mathbf{S}$ exatamente l vezes (o número máximo de vezes). Do lado direito da equação, o primeiro termo descreve a regra (1) acima, enquanto que o segundo termo descreve a regra (2) acima. Assim, o número de indivíduos Suscetíveis S_l irá aumentar em um dado instante t (com probabilidade α) se indivíduos Infectados tornarem-se Suscetíveis, enquanto que S_l irá diminuir (com probabilidade λ_l) se indivíduos Suscetíveis entrarem em contato com indivíduos Infectados.

Levando em conta que no estado estacionário do sistema, ou seja, para $t \rightarrow \infty$, nós temos que $S_l = S_{\text{est}}$ e $dS_l/dt = dS_{\text{est}}/dt = 0$, a equação (7.2) nos dá

$$I_{\text{est}} \left(\alpha - \varepsilon^l \lambda_0 S_{\text{est}} \right) = 0 , \quad (7.3)$$

onde nós usamos as notações S_{est} e I_{est} para representar as densidades estacionárias de indivíduos Suscetíveis e Infectados, respectivamente, isto é, $S_{\text{est}} = S(t \rightarrow \infty)$ e $I_{\text{est}} = I(t \rightarrow \infty)$. Existem duas soluções para a equação (7.3): $I_{\text{est}} = 0$ e $I_{\text{est}} = 1 - (\alpha/\lambda_0)\varepsilon^{-l}$, onde usamos a relação $S + I = 1$. Podemos ver que a solução não-trivial de I_{est} pode se anular para determinados valores críticos ε_c dados por

$$\varepsilon_c = \left(\frac{\alpha}{\lambda_0} \right)^{1/l} . \quad (7.4)$$

Usando este resultado, podemos reescrever a expressão para I_{est} como

$$I_{\text{est}} = 1 - \left(\frac{\varepsilon_c}{\varepsilon} \right)^l . \quad (7.5)$$

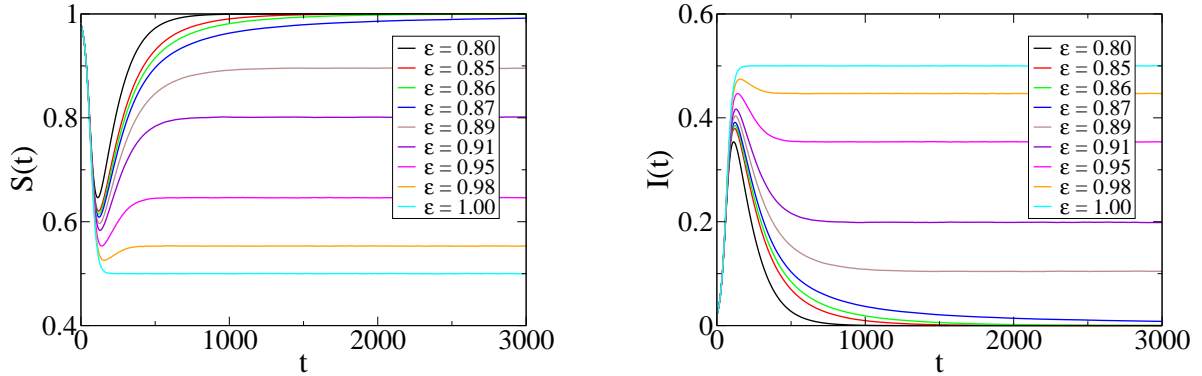


Figura 7.1: Densidade de indivíduos Suscetíveis $S(t)$ (lado esquerdo, de cima para baixo: $\varepsilon = 0.80, 0.85, \dots, 1.00$) e densidade de indivíduos Infectados $I(t)$ (lado direito, de cima para baixo: $\varepsilon = 1.00, 0.98, \dots, 0.80$) como funções do tempo t para uma população de tamanho $N = 10^5$, parâmetro de limite $l = 5$ e valores típicos de ε . Efetuamos médias sobre 200 realizações. Neste caso, para $\varepsilon \leq 0.87$ a doença não se espalha pela população. Os parâmetros utilizados foram $\alpha = 0.05$ e $\lambda_0 = 0.1$.

Em outras palavras, o sistema exibe uma fase onde a doença é extinta da população, para $\varepsilon \leq \varepsilon_c(l)$, com os valores críticos $\varepsilon_c(l)$ dados pela equação (7.4). Por outro lado, para $\varepsilon > \varepsilon_c(l)$ o sistema se encontra na fase epidêmica, na qual a doença sobrevive e atinge uma fração finita da população. Considerando novamente a equação $S + I = 1$, podemos obter uma relação do tipo lei de potência entre a densidade estacionária de indivíduos suscetíveis e os parâmetros do modelo,

$$S_{\text{est}} = \left(\frac{\alpha}{\lambda_0} \right) \varepsilon^{-l}. \quad (7.6)$$

Após desenvolvermos a solução analítica do problema, podemos discutir os resultados numéricos. Simulamos populações de diversos tamanhos, e notamos que o sistema não apresenta fortes dependências com o tamanho. Assim, iremos exibir resultados para populações de tamanhos $N = 10^5$, com probabilidades $\alpha = 0.05$ e $\lambda_0 = 0.1$ e diferentes valores dos parâmetros ε e l . Consideramos inicialmente uma fração de 2% de indivíduos Infectados. Em todos os resultados numéricos foram feitas médias sobre 200 realizações. Seguindo as regras apresentadas no início desta seção, o algoritmo para simular o problema é o seguinte: (i) a cada passo de tempo, cada indivíduo Infectado j retorna ao estado Suscetível com probabilidade α ; (ii) ao mesmo tempo, cada indivíduo Suscetível j se torna Infectado com probabilidade λ_j se um outro

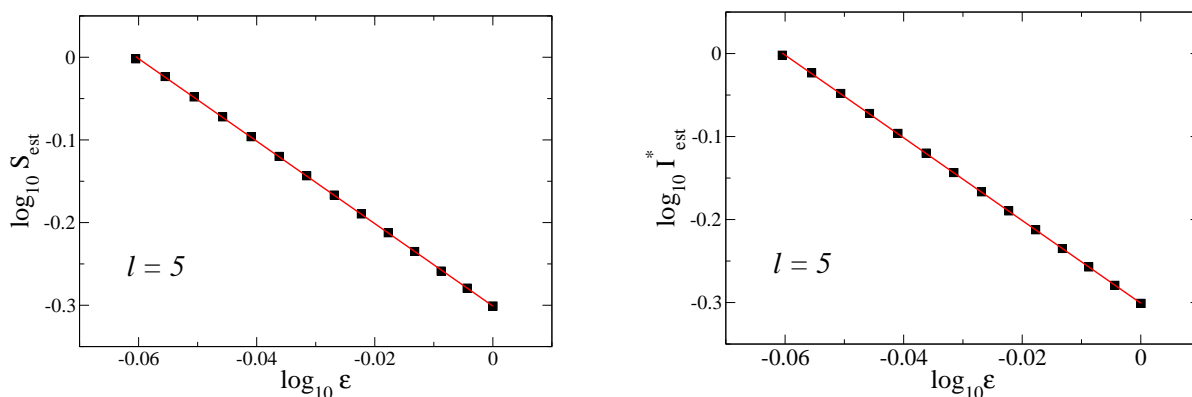


Figura 7.2: Densidade estacionária de indivíduos Suscetíveis S_{est} para $l = 5$ e alguns valores de ϵ na escala log-log. A reta tem inclinação -5 (lado esquerdo). Para a densidade estacionária de indivíduos Infectados I_{est} o sistema não apresenta um comportamento do tipo lei de potência com o parâmetro ϵ , como previsto analiticamente pela equação (7.5). Por outro lado, se plotarmos $I_{\text{est}}^* = 1 - I_{\text{est}}$ como função de ϵ , obtemos uma lei de potência, com expoente -5 (lado direito). Os parâmetros utilizados foram $N = 10^5$, $\alpha = 0.05$ e $\lambda_0 = 0.1$. Cada ponto é resultado de uma média sobre 200 realizações.

indivíduo aleatoriamente escolhido está Infectado. Após cada transição $\mathbf{I} \rightarrow \mathbf{S}$, a probabilidade de infecção do indivíduo j diminui de acordo com $\lambda_j \rightarrow \epsilon \lambda_j$. Ainda sobre a implementação computacional, visitamos uma vez cada um dos N indivíduos da população e atualizamos os seus estados somente após estas N visitas. Isto define um passo temporal no nosso modelo.

Na figura 7.1 exibimos resultados para a densidade de indivíduos Suscetíveis $S(t)$ e a densidade de indivíduos Infectados $I(t)$ como funções do tempo de simulação t para $l = 5$ e alguns valores típicos de ϵ . Podemos observar que o sistema atinge estados estacionários para todos os valores de ϵ , e que para $\epsilon < \sim 0.87$ a doença desaparece do sistema, isto é, nós temos que $I = 0$ para tempos t longos. Considerando a solução analítica apresentada acima, a previsão da equação (7.4) para $l = 5$ é $\epsilon_c(l = 5) \cong 0.87055$, em excelente acordo com o resultado numérico.

Podemos analisar como os valores estacionários da densidade de indivíduos Suscetíveis $S_{\text{est}} = S(t \rightarrow \infty)$ dependem do parâmetro ϵ . Para isso, consideramos médias temporais da densidade de indivíduos Suscetíveis (após o sistema atingir o estado estacionário), e fizemos ainda uma média sobre 200 realizações do sistema, para cada valor de ϵ . Podemos observar um

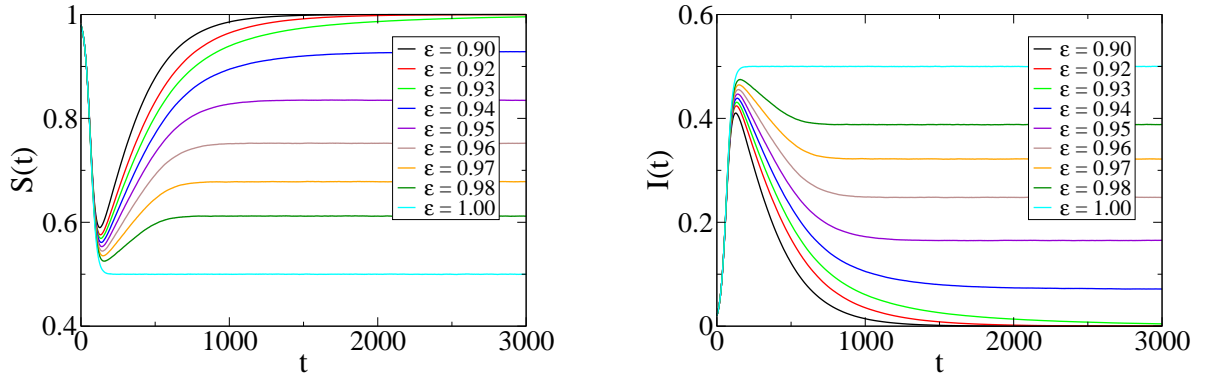


Figura 7.3: Densidade de indivíduos Suscetíveis $S(t)$ (lado esquerdo, de cima para baixo: $\varepsilon = 0.90, 0.92, \dots, 1.00$) e densidade de indivíduos Infectados $I(t)$ (lado direito, de cima para baixo: $\varepsilon = 1.00, 0.98, \dots, 0.90$) como funções do tempo t para uma população de tamanho $N = 10^5$, parâmetro de limite $l = 10$ e valores típicos de ε . Efetuamos médias sobre 200 realizações. Neste caso, para $\varepsilon \leq 0.93$ a doença não se espalha pela população. Os parâmetros utilizados foram $\alpha = 0.05$ e $\lambda_0 = 0.1$.

comportamento do tipo lei de potência (veja a figura 7.2, lado esquerdo)

$$S_{\text{est}} \sim \varepsilon^{-\nu}, \quad (7.7)$$

com $\nu = 5$ neste caso ($l = 5$). Por outro lado, no caso dos valores estacionários $I_{\text{est}} = I(t \rightarrow \infty)$ nós não observamos uma lei de potência, como previsto analiticamente pela equação (7.5). No entanto, podemos analisar o comportamento de $I_{\text{est}}^* = 1 - I_{\text{est}}$, para o qual a equação (7.5) nos dá

$$I_{\text{est}}^* = \left(\frac{\varepsilon_c}{\varepsilon}\right)^l, \quad (7.8)$$

ou, em outras palavras, $I_{\text{est}}^* \sim \varepsilon^{-l}$, isto é, o mesmo comportamento que obtivemos anteriormente para S_{est} [veja a equação (7.6)]. Assim, na figura 7.2 (lado direito), exibimos os resultados das simulações para I_{est}^* como função de ε para $l = 5$. Fazendo o ajuste dos dados com uma reta, obtemos $I_{\text{est}}^* \sim \varepsilon^{-5}$, em acordo com o resultado analítico, equação (7.8).

Na figura 7.3 exibimos resultados para $l = 10$ e diferentes valores de ε . Novamente, o sistema atinge estados estacionários para todos os valores de ε , mas a doença sobrevive no sistema e atinge uma fração finita da população para $\varepsilon > \sim 0.93$, um valor maior do que o que

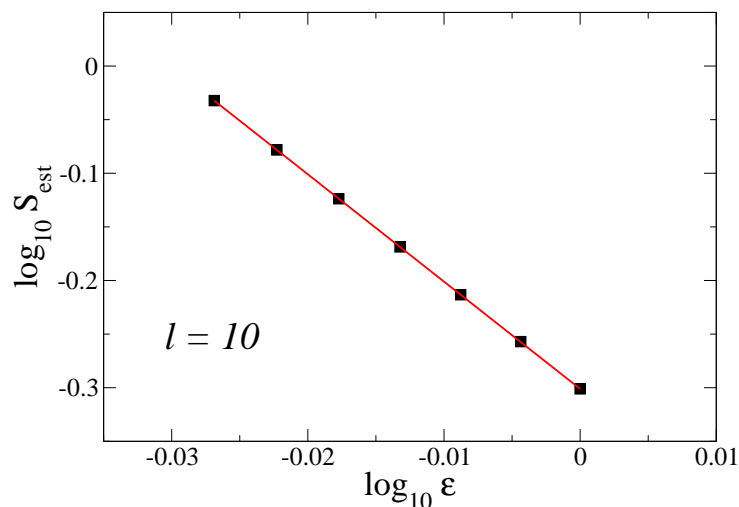


Figura 7.4: Densidade estacionária de indivíduos Suscetíveis S_{est} para $l = 10$ e alguns valores de ϵ na escala log-log. A reta tem inclinação -10 . Os parâmetros são: $N = 10^5$, $\alpha = 0.05$ e $\lambda_0 = 0.1$. Cada ponto é resultado de um média sobre 200 realizações.

encontramos para o caso $l = 5$ [$\epsilon_c(l = 5) = 0.83$]. Este é um resultado esperado, já que agora com $l = 10$ os indivíduos apresentam uma maior capacidade de diminuir as suas probabilidades de reinfecção. O resultado analítico da equação (7.4) para este valor crítico é $\epsilon_c(l = 10) \cong 0.93303$, novamente em excelente acordo com o resultado numérico.

Considerando os valores estacionários S_{est} para diferentes valores de ϵ , novamente observamos uma lei de potência $S_{\text{est}} \sim \epsilon^{-\nu}$ (veja a figura 7.4), mas agora obtivemos um expoente diferente, $\nu = 10$ ¹. Em outras palavras, temos a forma geral

$$S_{\text{est}} \sim \epsilon^{-\nu(l)}, \quad (7.9)$$

com $\nu(l) = l$, resultado confirmado por simulações para outros valores de l (veja a figura 7.5, lado esquerdo). Além disso, a previsão analítica da equação (7.6) nós dá o mesmo comportamento do resultado numérico, equação (7.9), como podemos ver na figura 7.5 (lado direito).

Levando em conta os resultados numéricos para $\alpha = 0.05$, $\lambda_0 = 0.1$ e diferentes valores de ϵ e l , exibimos na figura 7.6 o diagrama de fases do modelo, separando as fases livre da

¹Já que o comportamento das quantidades S_{est} e I_{est}^* como funções de ϵ é o mesmo, iremos analisar somente a quantidade S_{est} .

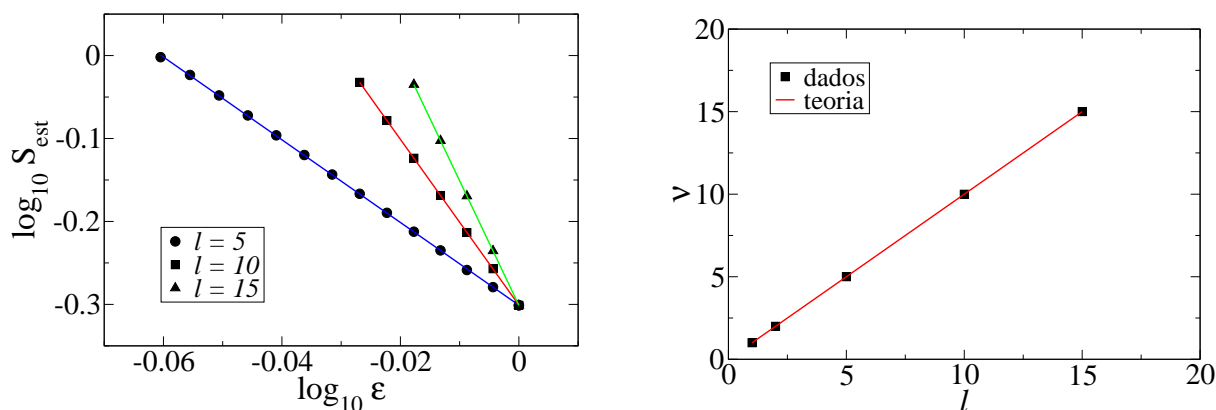


Figura 7.5: Densidade estacionária de indivíduos Suscetíveis S_{est} como função de ϵ para alguns valores de l . As retas são ajustes aos dados numéricos, e nos dão $S_{\text{est}} \sim \epsilon^{-\nu(l)}$, com $\nu(l) = l$ (lado esquerdo). Na figura do lado direito exibimos o expoente ν como função de l . Os quadrados foram estimados a partir dos dados numéricos (ajustes na figura do lado esquerdo), enquanto que a reta é a previsão analítica da teoria do campo médio, equação (7.6).

doença (I) e epidêmica (II). Os quadrados são os valores críticos $\epsilon_c(l)$ estimados a partir das simulações, enquanto que a curva é a previsão analítica da abordagem de campo médio, equação (7.4). Podemos observar um excelente acordo entre os resultados analítico e numérico.

7.3 Simulações na Rede Quadrada

Nesta seção iremos analisar o mesmo modelo apresentado na seção anterior, mas agora iremos estudá-lo na rede quadrada, de forma a identificar os efeitos da presença de uma vizinhança no modelo. Assim, teremos $N = L^2$ indivíduos no sistema, onde L é o tamanho linear da rede, e cada indivíduo poderá interagir com seus quatro primeiros vizinhos. Simulamos populações de diversos tamanhos, e verificamos que os resultados não possuem dependência para tamanhos maiores que $L = 100$. Assim, iremos exibir resultados para o tamanho $L = 400$, isto é, as populações consideradas possuem $N = 1.6 \times 10^5$ indivíduos. Além disso, iremos considerar as mesmas probabilidades da seção anterior, $\alpha = 0.05$ e $\lambda_0 = 0.1$, para diferentes valores dos parâmetros ϵ e l . Consideramos, assim como na seção anterior, que 2% dos indivíduos estão inicialmente Infectados. Todos os dados que exibiremos são resultados de médias sobre 200 realizações. O algoritmo que iremos considerar é baseado na referência [147], onde os au-

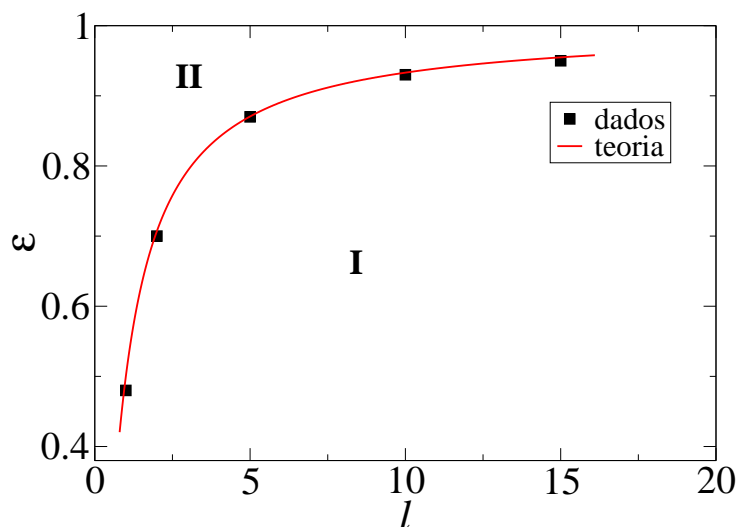


Figura 7.6: Diagrama de fases do modelo no plano ε contra l , separando as fases livre da doença (região **I**) e a fase epidêmica (região **II**), onde a doença prevalece. Os quadrados foram estimados a partir dos dados gerados pelas simulações, enquanto que a curva é a previsão analítica da teoria do campo médio, equação (7.4).

tores consideraram o modelo SIR. Em outras palavras, o algoritmo para simular o problema é o seguinte: (i) a cada passo de tempo, cada indivíduo Infectado j retorna ao estado Suscetível com probabilidade α ; (ii) ao mesmo tempo, cada indivíduo Suscetível j se torna Infectado com probabilidade λ_j se pelo menos um dos seus quatro primeiros vizinhos está infectado. Após cada transição $\mathbf{I} \rightarrow \mathbf{S}$, a probabilidade de infecção do indivíduo j diminui de acordo com $\lambda_j \rightarrow \varepsilon \lambda_j$. O passo de tempo é definido da mesma forma que na seção anterior.

Na figura 7.7 exibimos resultados para a densidade de indivíduos Infectados como função do tempo para $l = 5$ (lado esquerdo) e $l = 10$ (lado direito). Podemos ver que, ao menos qualitativamente, os resultados são semelhantes aos resultados obtidos na abordagem de campo médio. No entanto, podemos observar na figura 7.7 que os valores críticos $\varepsilon_c(l)$ são diferentes. Como exemplos, temos para o caso 2D os valores $\varepsilon_c(l = 5) \sim 0.74$ e $\varepsilon_c(l = 10) \sim 0.86$, enquanto que no caso da abordagem de campo médio temos $\varepsilon_c(l = 5) \sim 0.87$ e $\varepsilon_c(l = 10) \sim 0.93$ (compare as figuras 7.1, 7.3 e 7.7). Em outras palavras, a diferença entre as duas análises aumenta quando diminuirmos os valores de l . Esta é a primeira consequência que podemos observar da presença de uma topologia (vizinhança) no modelo.

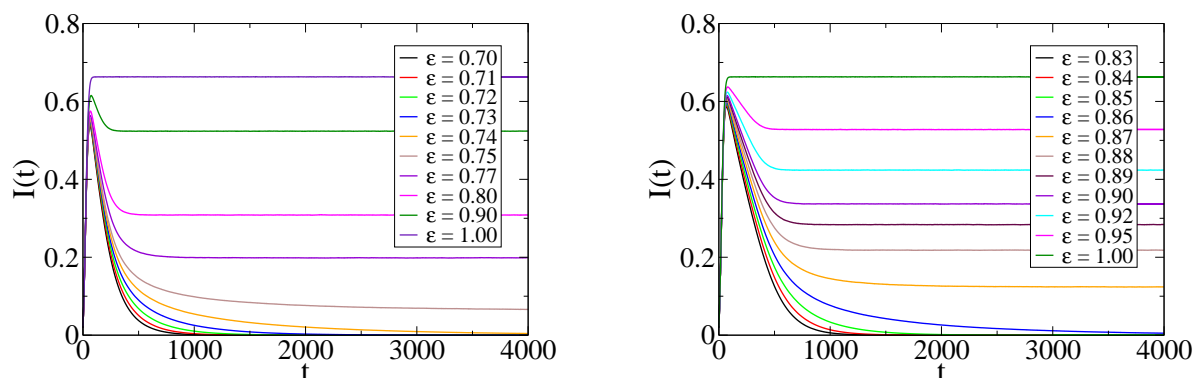


Figura 7.7: Densidade de indivíduos Infectados $I(t)$ como função do tempo de simulação t para $l = 5$ (lado esquerdo, de cima para baixo: $\varepsilon = 1.00, 0.90, \dots, 0.70$) e para $l = 10$ (lado direito, de cima para baixo: $\varepsilon = 1.00, 0.95, \dots, 0.83$) para valores típicos de ε . Os parâmetros utilizados foram $L = 400$, $\alpha = 0.05$ e $\lambda_0 = 0.1$. Cada ponto é resultado de uma média sobre 200 realizações.

Seguindo o procedimento da seção 7.2, iremos analisar o comportamento da densidade de indivíduos Suscetíveis S_{est} como função de ε , para diferentes valores de l . Na figura 7.8 exibimos resultados para $l = 5$ (lado esquerdo) e $l = 10$ (lado direito). Podemos observar um desvio em relação ao comportamento do tipo lei de potência simples dado pela equação (7.6). No entanto, os valores de S_{est} seguem duas leis de potência com expoentes diferentes: um expoente para valores de ε próximos do ponto crítico (com maior inclinação, veja as retas tracejadas na figura 7.8), e outro expoente para valores intermediários e grandes de ε (com a menor inclinação, veja as retas cheias na figura 7.8), para os dois casos analisados ($l = 5$ e $l = 10$). Note, porém, que o comportamento para valores de ε próximos de ε_c é basicamente o mesmo que no caso da abordagem de campo médio, isto é, as maiores inclinações observadas para S_{est} no caso 2D são as mesmas observadas na formulação de campo médio do modelo. De fato, nós temos que $S_{\text{est}}(l = 5) \sim \varepsilon^{-5}$ e $S_{\text{est}}(l = 10) \sim \varepsilon^{-10}$ para o caso do campo médio e $S_{\text{est}}(l = 5) \sim \varepsilon^{-5.2}$ e $S_{\text{est}}(l = 10) \sim \varepsilon^{-10.4}$ para o caso do modelo considerado na rede quadrada. Podemos entender este fato da seguinte forma. Considerando o modelo definido na rede quadrada, para valores de ε acima e próximos de ε_c (e portanto, dentro da fase epidêmica), o sistema apresenta um número pequeno de indivíduos infectados. Assim, a probabilidade de um certo indivíduo Suscetível ter ao menos um vizinho Infectado é muito pequena, comparável

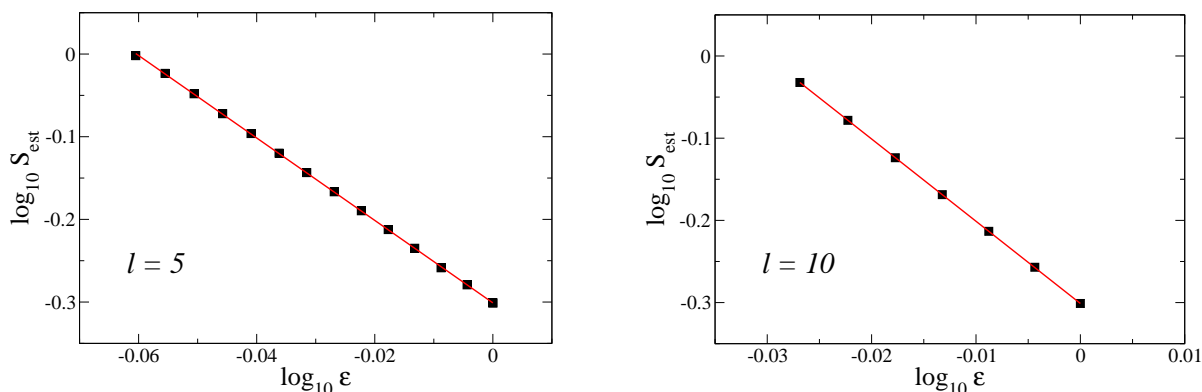


Figura 7.8: Densidade estacionária de indivíduos Suscetíveis S_{est} para $l = 5$ (lado esquerdo) e $l = 10$ (lado direito), para alguns valores de ϵ , na escala log-log. Os círculos representam a localização dos pontos críticos de cada caso. Observe que S_{est} não apresenta somente uma lei de potência como função de ϵ , como acontece no limite de campo médio. No entanto, existem dois comportamentos distintos, ambos do tipo lei de potência (retas cheias e alternadas, com inclinações exibidas nas legendas da figuras). Os parâmetros utilizados foram $L = 400$, $\alpha = 0.05$ e $\lambda_0 = 0.1$. Cada ponto é resultado de uma média sobre 200 realizações.

à probabilidade de um indivíduo escolhido ao acaso ser Infectado, que é exatamente o procedimento usado na abordagem de campo médio. Por outro lado, para valores maiores de ϵ (e portanto, longe da fronteira de transição), existem no sistema muitos indivíduos Infectados, e a presença de uma vizinhança (topologia) muda o comportamento de S_{est} . Observe que este resultado também é um reflexo da dinâmica utilizada, que considera um único "vizinho" para o caso do campo médio e quatro vizinhos para o caso bidimensional. De fato, verificamos que, se sortearmos quatro "vizinhos" ao invés de um para o caso do campo médio, obtemos também duas leis de potência para S_{est} . Da mesma forma, se considerarmos que no caso 2D a probabilidade de infecção de um indivíduo suscetível j qualquer num instante de tempo t é dada por $m\lambda(t)/4$, onde m é o número de vizinhos infectados do indivíduo j no instante t , obtemos também duas leis de potência para S_{est} , porém não observamos um comportamento similar ao de campo médio nas proximidades de ϵ_c .

Na figura 7.9 exibimos um diagrama de fases comparativo dos casos da rede quadrada e do campo médio, no plano ϵ contra l . Podemos observar que a diferença entre os valores numéricos de ϵ_c das duas abordagens aumenta quando diminuimos o valor de l , como discutido

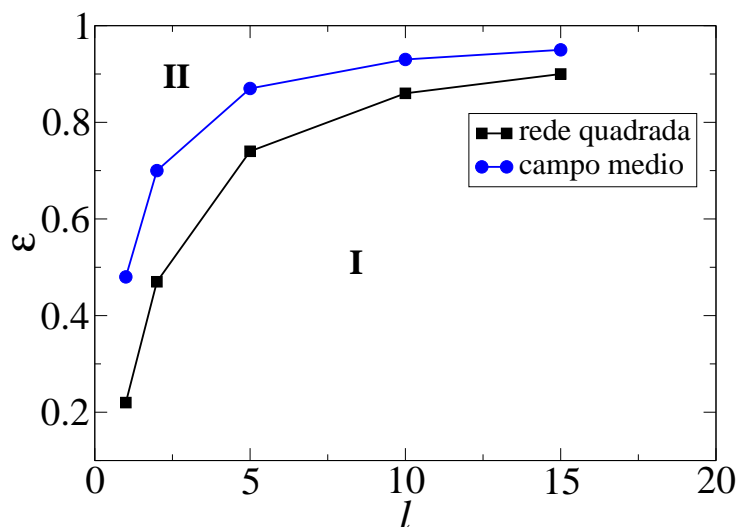


Figura 7.9: Diagrama de fases comparativo no plano ϵ contra l , separando as fases livre da doença (região I) e a fase epidêmica (região II), onde a doença prevalece. Os símbolos (círculos para o campo médio e quadrados para o caso 2D) foram estimados a partir das simulações. Observe que a fase epidêmica aumenta no caso da rede quadrada, como discutido no texto.

anteriormente, e que a fase epidêmica é maior no caso bidimensional. Estas diferenças podem ser entendidas se nos basearmos na discussão do parágrafo anterior, e podemos realmente esperar que a presença de uma topologia modifique o comportamento do sistema. De fato, na rede quadrada cada indivíduo tem sempre os mesmos quatro vizinhos, e cada um destes vizinhos pode infectar o indivíduo central com probabilidade $\lambda(t)$. Por outro lado, na abordagem de campo médio nós escolhemos aleatoriamente um único "vizinho" para infectar um certo indivíduo com probabilidade $\lambda(t)$, e cada indivíduo pode ter diferentes "vizinhos" em diferentes passos de tempo. Assim, os indivíduos na rede quadrada têm mais chances de serem infectados, o que faz com que a fase epidêmica seja maior que no caso de campo médio.

7.4 Conclusões

Neste capítulo estudamos uma versão modificada do modelo SIS (*Susceptible-Infected-Susceptible*) na qual consideramos que cada indivíduo na população que se recupera da doença diminui a sua chance de reinfecção. Esta diminuição ocorre um número máximo l de vezes para cada indivíduo. Assim, a cada recuperação da doença, na qual o indivíduo deixa o estado

Infectado e retorna ao estado Suscetível, a probabilidade de infecção λ diminui de acordo com a forma $\lambda \rightarrow \varepsilon\lambda$, e esta diminuição é limitada a um número máximo de l vezes para cada indivíduo da população. Esta dinâmica pode ser relevante para descrever doenças como a gripe comum, para a qual a nossa chance de reinfeção diminui com o aumento da idade.

Estudamos o problema definido na rede quadrada e também no limite de campo médio. No caso da abordagem de campo médio, em que cada indivíduo pode interagir com todos os outros indivíduos, analisamos o problema analiticamente através de equações diferenciais ordinárias e também através de simulações. Considerando a probabilidade de infecção inicial λ_0 (para a transição $S \rightarrow I$) e a probabilidade de recuperação α (para a transição $I \rightarrow S$), obtemos uma dependência do tipo lei de potência entre a densidade estacionária de indivíduos Suscetíveis S_{est} e o parâmetro ε que controla a diminuição da probabilidade de infecção na forma $S_{\text{est}} = (\alpha/\lambda_0)\varepsilon^{-l}$. Além disso, mostramos que o sistema sofre uma transição de fase em certos valores críticos dados por $\varepsilon_c(l) = (\alpha/\lambda_0)^{1/l}$, que separam uma fase onde a doença prevalece e atinge uma fração finita da população (chamada de fase epidêmica, para $\varepsilon > \varepsilon_c$) de uma fase onde a doença é extinta do sistema (chamada de fase livre da doença, para $\varepsilon \leq \varepsilon_c$). Todos os resultados analíticos foram confirmados por simulações computacionais.

No caso do sistema definido na rede quadrada nós estudamos o modelo somente através de simulações. A evolução temporal da densidade de indivíduos Suscetíveis e Infectados é qualitativamente semelhante à evolução da abordagem de campo médio, mas a presença de uma vizinhança (topologia) modifica algumas características do modelo. Em particular, os valores críticos $\varepsilon_c(l)$ são menores que no caso de campo médio, o que implica em um aumento da fase epidêmica. Além disso, os valores estacionários S_{est} seguem duas leis de potência distintas: uma para valores de ε próximos do ponto crítico e outra para valores intermediários e grandes de ε . No entanto, o comportamento para valores de ε próximos de ε_c é o mesmo observado na abordagem de campo médio. Estas diferenças ocorrem devido à topologia e à dinâmica adotada no caso 2D.

8 *Discussão Final, Conclusões e Perspectivas*

Nesta tese analisamos, por meio de simulações computacionais e técnicas oriundas da física estatística, como hipótese de escala e análise de tamanho finito, as transições de fase que ocorrem em diversos sistemas complexos. Estes sistemas foram definidos em diferentes topologias, e cada um deles apresentou um comportamento distinto no que se refere à natureza da transição.

No capítulo 2 fizemos uma breve introdução a alguns conceitos da teoria de fenômenos críticos. Definimos ordem de uma transição de fase, que pode ser classificada em contínua ou de primeira ordem, e discutimos teoria de escala, expoentes críticos e classes de universalidade. Além disso, descrevemos uma técnica muito importante e que foi utilizada em todos os capítulos de resultados da tese, a análise de escala para sistemas finitos. Com esta técnica, determinamos expoentes críticos e a localização dos pontos críticos dos sistemas complexos estudados.

No capítulo 3 discutimos um modelo de redes complexas em crescimento onde levamos em conta a idade dos sítios desde o seu nascimento. Em outras palavras, a rede cresce com o tempo devido à adição de sítios e ligações, e a probabilidade de dois sítios serem conectados é proporcional à conectividade (número de vizinhos) dos sítios e à exponencial da diferença entre as suas idades, multiplicada por um parâmetro α . Este parâmetro leva a uma transição de fase geométrica, onde a estrutura da rede é drasticamente modificada: em uma fase a rede apresenta vários aglomerados isolados e na outra fase existe um único aglomerado gigante que ocupa toda a rede. Este aglomerado gigante emerge em um ponto crítico de primeira ordem, que foi identificado usando a técnica de análise de escala para sistemas finitos. Medidas do

menor caminho médio entre todos os pares de sítios pertencentes ao aglomerado gigante nos mostraram que essa transição pode ser vista também como uma transição mundo grande-mundo pequeno, já que o menor caminho médio escala com $\log N$ para $\alpha < \alpha_c$ e escala com N para $\alpha > \alpha_c$, onde N é o número de sítios da rede e α_c é o ponto crítico que separa as duas fases. Além disso, os resultados numéricos sugerem que as flutuações do parâmetro de ordem, que é o tamanho relativo do maior aglomerado, escalam linearmente com o tamanho do sistema, e que nas proximidades do ponto crítico o inverso de um comprimento característico se anula linearmente com a distância ao ponto crítico. Baseado nestes resultados, podemos concluir que a transição observada pertence à mesma classe de universalidade do problema de percolação em uma dimensão.

No capítulo 4 estudamos um modelo que visa otimizar o transporte de matéria em uma rede com estrutura dimensional $1 + 1$, ou seja, uma dimensão espacial e uma dimensão temporal, mas que pode ser vista também como uma rede quadrada direcionada. A partir de uma formulação Lagrangeana, resolvemos analiticamente o problema local na sua forma mais geral, e a partir de simulações estudamos a transição ocupação-desocupação que ocorre na rede. Encontramos algumas relações do tipo lei de potência entre certas quantidades físicas de interesse, e vimos que estas quantidades de interesse não dependem do tamanho da rede, mas somente dos parâmetros do modelo. Analisamos também as flutuações do tráfego em diversos canais da rede, e observamos diferentes padrões: estas flutuações escalam com $\langle f_i \rangle^{1/2}$ para fluxo de entrada na rede baixo, e escalam com $\langle f_i \rangle$ para fluxo de entrada alto, onde $\langle f_i \rangle$ é o fluxo médio de matéria através de um determinado canal i da rede. O mesmo tipo de comportamento foi observado em vários sistemas reais, como a Internet e sistemas reais de estradas, e foi corretamente previsto pelo nosso modelo.

No capítulo 5 discutimos modelos magnéticos com desordem no campo magnético local. Este campo local flutua no espaço e no tempo de acordo com uma dada distribuição de probabilidades, o que mantém o sistema fora do equilíbrio. Consideramos o sistema definido nas redes quadrada e cúbica, e utilizamos as distribuições gaussiana dupla e bimodal, respectivamente, para atribuir os valores para os campos locais $\{h_i\}$ em cada sítio i . No caso da rede quadrada, as

simulações sugerem a ocorrência de transições de fase de primeira ordem para alguns valores de $\sigma > 0$, onde σ é a largura das gaussianas. No caso da rede cúbica, a transição descontínua já ocorre para a distribuição bimodal. Estas transições, nos dois casos, ocorrem na região de baixas temperaturas e campo magnético intenso. Ainda considerando o caso 3D, analisamos as transições em detalhes, e já que temos transição contínua em altas temperaturas, então o sistema apresenta um ponto tri-crítico a temperatura finita. Determinamos a localização aproximada deste ponto por meio da análise de quantidades físicas tais como a magnetização, o cumulante de Binder e a susceptibilidade. Vale ressaltar também que esta transição de fase de primeira ordem em sistemas magnéticos na presença de campos aleatórios foi prevista experimentalmente nos antiferromagnetos diluídos $\text{Fe}_x\text{Mg}_{1-x}\text{Cl}_2$, que são realizações experimentais de sistemas de spins sob a ação de campos magnéticos aleatórios. Este resultado nos sugere que estes modelos desordenados de não-equilíbrio podem ser mais relevantes para a descrição teórica destes materiais do que os correspondentes modelos de equilíbrio, que por sua vez não prevêem esta transição.

No capítulo 6 discutimos um modelo de dinâmica de opiniões, o chamado modelo de Sznajd, baseado em spins do tipo Ising. Propomos uma generalização onde levamos em conta um mecanismo de reputação, que limita a capacidade de convencimento dos agentes. A reputação é introduzida como um número inteiro que varia durante a dinâmica do sistema, de acordo com as regras do modelo. Utilizando regras muito simples, e sem a necessidade de incluir agentes especiais (contrários e oportunistas, por exemplo, como feito em outras generalizações do modelo de Sznajd), o modelo foi capaz de prever situações realistas de democracia, onde a maioria dos spins aponta em uma direção, para uma grande faixa de valores dos parâmetros. Ressaltamos que situações de consenso, onde todos os spins apontam na mesma direção, e que são resultado de muitas generalizações do modelo de Sznajd, não são situações realistas, pois representam uma ditadura, ou seja, todos os indivíduos da população têm a mesma opinião, como por exemplo, escolhem um mesmo candidato entre dois possíveis. Assim, o modelo apresentado se mostra mais realista do que alguns outros encontrados na literatura.

Finalmente, no capítulo 7 discutimos o comportamento crítico de um modelo de propagação

de epidemias. O nosso modelo foi baseado no tradicional modelo de epidemias SIS. Propomos uma modificação na probabilidade de infecção, de forma que ela diminua com o tempo. Assim, os indivíduos da população aumentam suas resistências a reinfecções. Tratamos o modelo em duas situações diferentes: no limite de campo médio e na rede quadrada. No primeiro caso, resolvemos o problema analiticamente, e obtivemos relações do tipo lei de potência entre quantidades de interesse do problema e os parâmetros. Além disso, mostramos que o sistema sofre uma transição entre uma fase na qual a doença atinge uma fração finita da população e uma fase onde a doença é extinta. Todos os resultados analíticos foram confirmados por simulações. No caso da rede quadrada, tratamos o sistema somente através de simulações. Observamos algumas diferenças para o modelo no limite de campo médio, diferenças estas devidas à dinâmica adotada no caso 2D e à presença de uma vizinhança (topologia). No entanto, a transição de fase também ocorre neste caso, mas as fases possuem extensões diferentes, com a fase epidêmica sendo maior no caso da rede quadrada.

Algumas extensões dos resultados apresentados nesta tese podem ser interessantes de serem analisadas, a saber:

- Em relação às redes em crescimento do capítulo 3, podemos analisar os efeitos de um termo não-linear na probabilidade de conexão, da forma $\Gamma(k, a, t) \propto (A_0 + k)^\delta e^{-\alpha(t-a)}$, com um expoente δ a ser variado. Além disso, podemos também analisar os menores caminhos médios entre sítios separados por uma distância temporal Δt , o que nos dará mais informações a respeito da estrutura geométrica da rede e da transição de fase.
- Em relação às redes de transporte do capítulo 4, pretendemos estudar a otimização global da função de custo. Podemos fazer isso utilizando diferentes técnicas, como por exemplo programação quadrática, o que nos daria uma solução exata, e arrefecimento simulado (*simulated annealing*, em inglês), o que nos daria uma solução aproximada do problema.
- Em relação aos modelos magnéticos do capítulo 5, podemos considerar também flutuações nas interações entre os spins, o que seria uma versão de não-equilíbrio de um vidro de spins. Além disso, também seria interessante considerar outras distribuições de proba-

bilidades para os campos aleatórios, assim como obter a solução analítica via teoria do campo médio para o problema já estudado numericamente no capítulo 5.

- Em relação ao modelo social do capítulo 6, pretendemos buscar uma solução analítica do problema, assim como considerar resistência dos agentes ao convencimento e efeitos externos.
- Em relação à dinâmica de epidemias apresentada no capítulo 7, pretendemos estudar o modelo em redes regulares de dimensão d , considerando que a probabilidade de infecção diminui com o tempo mas depende do número de vizinhos infectados. Pretendemos determinar a dimensão crítica superior do modelo. Além disso, pretendemos considerar um modelo com duas populações diferentes de vírus, de forma a tornar o problema mais realista.

Para finalizar, ressaltamos que algumas das idéias apresentadas acima já começaram a ser desenvolvidas.

APÊNDICE A – Geradores de Números Aleatórios

O objetivo deste apêndice é fazer uma breve discussão sobre geradores de números aleatórios, que são ferramentas indispensáveis em simulações computacionais. Em todos os capítulos de resultados desta tese (capítulos 3 a 7) foram realizadas simulações computacionais utilizando números aleatórios. Basicamente qualquer simulação ou método que faça uso de variáveis aleatórias para a solução de algum problema é denominado de **Monte Carlo** [8], em analogia à suposta aleatoriedade das roletas na cidade do principado de Mônaco. Na aplicação de métodos do tipo Monte Carlo a sistemas de interesse físico, dependemos da geração de uma grande quantidade de números aleatórios de boa qualidade. Assim, é importante o uso de um gerador de confiança, para evitar resultados espúrios.

Qualquer gerador de números aleatórios produz um sequência de números onde cada um destes números pode ser representado por um conjunto de n bits. Estes bits, por sua vez, produzem pelo menos 2^n outros números, no intervalo entre 0 e $2^n - 1$. No entanto, em algum momento, usualmente antes de serem gerados 2^n números, qualquer algoritmo para geração de números aleatórios irá produzir um dos números gerados anteriormente, o que define o **período** do gerador. Assim, um gerador de números aleatórios será bom quando tiver um período grande.

O gerador mais utilizado atualmente é baseado no método linear congruencial [152]. A idéia é que, dado um número inicial x_0 , chamado de *semente do gerador*, cada número na sequência é determinado pela relação

$$x_n = (ax_{n-1} + c) \bmod m, \quad (\text{A.1})$$

onde a , c e m são inteiros. A operação “ $y \bmod z$ ” nos dá o resto inteiro da divisão de y por

z , o que define a nomenclatura mod na equação (A.1). A equação (A.1) é caracterizada por 3 parâmetros: o multiplicador a , o incremento c e o módulo m . Observe que, analisando a equação (A.1), podemos notar que m é o maior inteiro gerado, de forma que o maior período que podemos obter com a equação (A.1) é m . Porém, em geral, o período depende dos 3 parâmetros a , c e m . Por exemplo, se utilizarmos $a = 3$, $c = 4$, $m = 32$ e $x_0 = 1$, a sequência gerada pela equação (A.1) é

$$1, 7, 25, 15, 17, 23, 9, 31, 1, 7, 25, \dots, \quad (\text{A.2})$$

e portanto o período seria 8, bem menor que o máximo possível que seria $m = 32$. Assim, devemos escolher com cuidado os valores a , c e m de forma a obtermos o máximo período, o que faria com que todos os números inteiros entre 0 e $m - 1$ ocorram na sequência gerada. Além disso, como normalmente estamos interessados em números aleatórios r no intervalo $0 \leq r < 1$ ao invés de números inteiros, é natural fazermos com que o gerador retorne os valores $r = x_n/m$, que são sempre menores do que 1. Este procedimento é útil em simulações de Monte Carlo porque sempre comparamos os números gerados com probabilidades, e estas por sua vez estão sempre no intervalo $[0, 1]$.

Algumas regras para a escolha dos números a , c e m foram discutidas em diversos trabalhos, dentre os quais se destaca a referência [153]. Um bom gerador de números aleatórios deve possuir as seguintes propriedades:

- Acima de tudo, os números devem parecer distribuídos uniformemente entre 0 e 1, e não devem exibir qualquer correlação entre eles. Caso contrário, o resultado da simulação pode ser completamente inválido;
- Ser rápido e não necessitar de muito armazenamento;
- Permitir repetir a geração de uma dada sequência de números. Isto facilita a depuração do programa que simula o modelo, e permite a comparação de sistemas diferentes quando submetidos aos mesmos eventos.

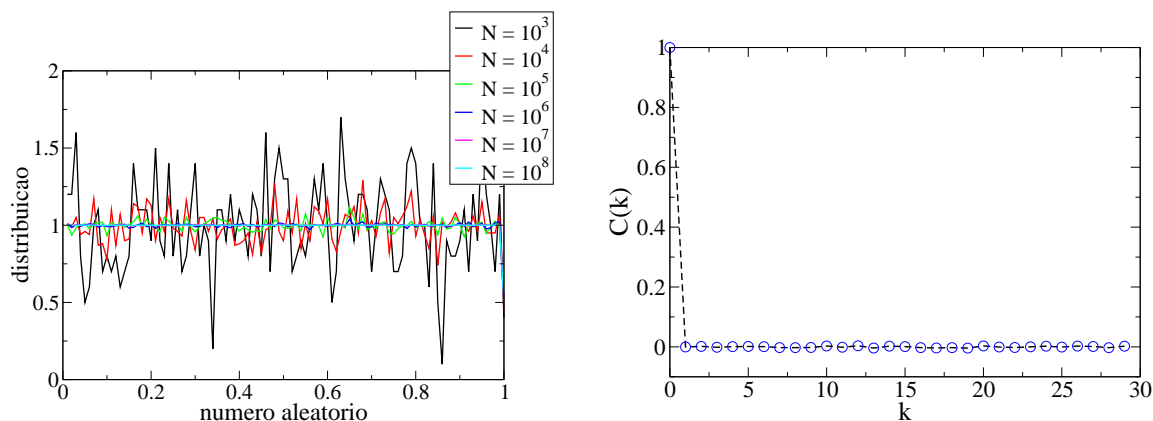


Figura A.1: Distribuição dos números gerados a partir do gerador linear congruencial, equação (A.1), com $a = 16807$, $c = 0$, $m = 2^{31} - 1$ e $x_0 = 12$ (lado esquerdo). Nesta figura foram gerados N números aleatórios no intervalo $[0, 1]$, para diferentes valores de N . Observe que para N grande o resultado se aproxima de uma distribuição uniforme. Também exibimos a correlação $C(k)$ entre os números gerados (lado direito), de acordo com a equação (A.4).

Assim, um bom gerador que segue as regras acima é baseado nos números [153]

$$\begin{aligned} a &= 16807, \\ c &= 0, \\ m &= 2^{31} - 1. \end{aligned} \tag{A.3}$$

Como teste deste gerador, exibimos na figura A.1 (lado esquerdo) a distribuição dos números aleatórios gerados a partir da equação (A.1) utilizando os números dados pela equação (A.3). Observe que para uma quantidade grande N de números gerados o resultado se aproxima de uma distribuição uniforme. Em relação às correlações entre os números gerados, elas são calculadas a partir da relação

$$C(k) = \frac{\langle x_{i+k}x_i \rangle - \langle x_i \rangle^2}{\langle x_i x_i \rangle - \langle x_i \rangle \langle x_i \rangle}, \tag{A.4}$$

onde x_i é o i -ésimo número da sequência e tomamos a média sobre todos os números i . De acordo com a equação (A.4), um bom gerador de números aleatórios deve nos dar

$$C(k) = \begin{cases} 1 & , \text{ se } k = 0 \\ 0 & , \text{ se } k > 0 \end{cases} \tag{A.5}$$

Baseado no gerador linear congruencial da equação (A.1) e utilizando as escolhas da equação (A.3) para a , c e m , exibimos na figura A.1 (lado direito) a função $C(k)$ para alguns valores de k . Observe que obtemos exatamente o comportamento desejado, dado pela equação (A.5). Assim, o uso do gerador discutido nesta seção nos garante que podemos obter resultados confiáveis nas nossas simulações.

Referências Bibliográficas

- [1] D. Stauffer, S. Moss de Oliveira, P. M. C. de Oliveira, J. S. Sá Martins, *Biology, Sociology, Geology by Computational Physicists* (Elsevier, Amsterdam, 2006).
- [2] C. Castellano, S. Fortunato, V. Loreto, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 591 (2009).
- [3] R. Axelrod, *The Complexity of Cooperation: Agent-Based Models of Competition and Collaboration* (Princeton University Press, Princeton, 2007).
- [4] P. Bak, *How Nature Works: The Science of Self-organized Criticality* (Springer Verlag, New York, 1996).
- [5] A. -L. Barabási, *Linked: How Everything is Connected to Everything Else and What it Means for Business, Science and Everyday Life* (Perseus Publishing, Cambridge, 2002).
- [6] D. Sornette, *Critical Phenomena in Natural Sciences: Chaos, Fractals, Self-organization and Disorder: Concepts and Tools* (Springer, Berlin, 2000).
- [7] S. N. Dorogovtsev, J. F. F. Mendes, *Evolution of Networks* (Cambridge University Press, Cambridge, 2001).
- [8] D. P. Landau, K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics* (Cambridge University Press, Cambridge, 2000).
- [9] S. N. Dorogovtsev, A.V. Goltsev, J. F. F. Mendes, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 1275 (2008).
- [10] O. R. Salmon, N. Crokidakis, F. D. Nobre, *J. Phys.: Condens. Matt.* **21**, 056005 (2009).
- [11] S. M. Duarte Queiros, N. Crokidakis, D. O. Soares-Pinto, *Phys. Rev. E* **80**, 011143 (2009).
- [12] N. Crokidakis, S. M. Duarte Queiros, arXiv: 1011.3337 (2010).
- [13] N. Crokidakis, D. O. Soares-Pinto, M. S. Reis, A. M. Souza, R. S. Sarthour, I. S. Oliveira, *Phys. Rev. E* **80**, 051101 (2009).
- [14] A. P. Lima, N. Crokidakis, M. S. Reis (em andamento).
- [15] S. Salinas, *Introdução à Física Estatística* (Editora Edusp, São Paulo, 1997).
- [16] M. E. Fisher, *Rev. Mod. Phys.* **46**, 597 (1974).
- [17] H. E. Stanley, *Introduction to Phase Transition and Critical Phenomena* (Oxford University Press, Oxford, 1971).

- [18] J. Cardy, *Scaling and Renormalization in Statistical Physics* (Cambridge University Press, Cambridge, 1996).
- [19] M. E. Fisher, A. N. Berker, Phys. Rev B **26**, 2507 (1982).
- [20] P. C. Hohenberg, B. I. Halperin, Rev. Mod. Phys. **49**, 435 (1977).
- [21] N. Crokidakis, M. A. de Menezes, J. Stat. Mech. **P04018** (2009).
- [22] R. Albert, A. -L. Barabási, Rev. Mod. Phys. **74**, 47 (2002).
- [23] R. Cohen , S. Havlin, Phys. Rev. Lett. **90**, 058701 (2003).
- [24] X. Guardiola, R. Guimera, A. Arenas, A. Diaz-Guilera, D. Streib, L. A. N. Amaral, cond-mat/0206240 (2002).
- [25] S. N. Dorogovtsev, J. F. F. Mendes, A. N. Samukhin, Nuc. Phys. B **653**, 307 (2003).
- [26] A. -L. Barabási, R. Albert, H. Jeong, Phys. A **272**, 173 (1999).
- [27] A. -L. Barabási, R. Albert, Science **286**, 509 (1999).
- [28] H. Jeong, B. Tombor, R. Albert, Z. N. Oltvai, A. -L. Barabási, Nature **407**, 651 (2000).
- [29] H. Jeong, S. P. Mason, Z. N. Oltvai, A. -L. Barabási, Nature **411**, 41 (2001).
- [30] S. N. Dorogovtsev, J. F. F. Mendes, Phys. Rev E **62**, 1842 (2000).
- [31] K. B. Hajra, P. Sen, Phys. Rev E **70**, 056103 (2004).
- [32] S. N. Dorogovtsev, P. L. Krapivsky, J. F. F. Mendes, Europhys. Lett. **81**, 30004 (2008).
- [33] M. Wang, G. Yu, D. Yu, Phys. A **388**, 4273 (2009).
- [34] D. J. Watts, S. W. Strogatz, Nature **393**, 440 (1998).
- [35] H. D. Rozenfeld, H. A. Makse, Chem. Eng. Sci. **64**, 4572 (2009).
- [36] J. Kim, P. L. Krapivsky, B. Kahng, S. Redner, Phys. Rev E **66**, 055101(R) (2002).
- [37] P. L. Krapivsky, B. Derrida, Phys. A **340**, 714 (2004).
- [38] D. C. Callaway, J. E. Hopcroft, J. M. Kleinberg, M. E. J. Newman, S. H. Strogatz, Phys. Rev E **64**, 041902 (2001).
- [39] S. N. Dorogovtsev, J. F. F. Mendes, A. N. Samukhin, Phys. Rev E **64**, 066110 (2001).
- [40] J. Van Leeuwen, *Handbook of Theoretical Computer Science* (Elsevier Publishers, 1990).
- [41] T. H. Cormen, C. E. Leiserson, R. L. Rivest, *Introducton to Algorithms* (McGraw-Hill, New York, 1993).
- [42] M. Wang, G. Yu, D. Yu, Physica A **388**, 4273 (2009).
- [43] D. Stauffer, A. Aharony, *Introduction to Percolation Theory* (Taylor & Francis, London, 1991).

- [44] M. E. J. Newman, S. H. Strogatz, D. J. Watts, *Phys. Rev. E* **64**, 026118 (2001).
- [45] D. Helbing, *Rev. Mod. Phys.* **73**, 1067 (2001), e referências contidas.
- [46] J. E. Moore II, G. Kim, S. Cho, H. Hu, R. Xu, Report no. UCB-ITS-PRR-97-54 (1997).
- [47] C. Labovitz, G. R. Malan, F. Jahanian, *Origins of Internet Routing Instability*, INFOCOM '99, Eighteenth Annual Joint Conference of the IEEE Computer and Communications Societies Proceedings, IEEE, Vol. 1 (1999).
- [48] H. J. Herrmann, J. -P. Hovi, S. Luding, *Physics of Dry Granular Media*, NATO ASI Series (Kluwer, Dordrecht, 1998).
- [49] D. Chowdhury, L. Santen, A. Schadschneider, *Phys. Rep.* **329**, 199 (2000).
- [50] M. Takayasu, H. Takayasu, T. Sato, *Physica A* **233**, 824 (1996).
- [51] A. Y. Tretyakov, H. Takayasu, M. Takayasu, *Physica A* **253**, 315 (1998).
- [52] T. Ohira, R. Sawatari, *Phys. Rev. E* **58**, 193 (1998).
- [53] S. Valverde, R. V. Solé, *Physica A* **289**, 595 (2001).
- [54] A. Nagurney, *Sustainable Transportation Networks* (Edward Elgar, Massachusetts, 2000).
- [55] *Operations Research* **41**, Issue 1 (1993). Special Issue on Stochastic and Dynamic Models in Transportation.
- [56] R. K. Ahuja, T. L. Magnanti, J. B. Orlin, *Network Flows: Theory, Algorithms and Applications* (Pentice Hall, New Jersey, 1993).
- [57] D. De Martino, L. Dall'Astra, G. Bianconi, M. Marsili, *Phys. Rev. E* **79**, 015101(R) (2009).
- [58] D. De Martino, L. Dall'Astra, G. Bianconi, M. Marsili, *J. Stat. Mech* **P08023** (2009).
- [59] Yu-hua Xue, J. Wang, L. Li, D. He, B. Hu, *Phys. Rev. E* **81**, 037101 (2010).
- [60] C. H. Yeung, K. Y. M. Wong, *J. Stat. Mech* **04017** (2010).
- [61] B. Tadic. G. J. Rodrigues, S. Thurner, *Inter. Journ. Bifurcation and Chaos* **17**, 2363 (2007).
- [62] L. Landau, E. Lifchitz, *Classical Theory of Fields* (Pergamon, Oxford, 1975).
- [63] T. Q. Tang, C. Y. Li, H. J. Huang, *Phys. Lett. A* **374**, 3951 (2010).
- [64] T. Q. Tang, H. J. Huang, H. Y. Shang, *Phys. Lett. A* **374**, 1668 (2010).
- [65] J. Wardrop, *Proc. of the Inst. of Civil Engin.* **1**, 325 (1952).
- [66] C. Chen, Z. Jia, P. Varaiya, *IEEE Control System Mag.* **20**, 6 (2001).
- [67] I. Prigogine, R. Herman, *Kinetic Theory of Vehicular Traffic* (American Elsevier Pub. Co., New York, 1971).

- [68] R. Akçelik, Australian Road Research **21**, 45 (1991).
- [69] Special Report 209: Highway Capacity Manual. TRB, National Research Council, Washington, D.C. (1994).
- [70] The Minnesota Department of Transportation, <http://data.dot.state.mn.us/datatools/>
- [71] J. R. Banavar, A. Maritan, A. Rinaldo, Nature **399**, 130 (1999).
- [72] J. R. Banavar, F. Colaiori, A. Flammini, A. Maritan, A. Rinaldo, Phys. Rev. Lett. **84**, 4745 (2000).
- [73] A. Vazquez, M. A. de Menezes (não publicado).
- [74] N. Crokidakis, M. A. de Menezes (em andamento).
- [75] M. A. de Menezes, A. -L. Barabási, Phys. Rev. Lett **93**, 068701 (2004).
- [76] M. A. de Menezes, A. -L. Barabási, Phys. Rev. Lett **92**, 028701 (2004).
- [77] New York Department of Transportation, <https://www.nysdot.gov/divisions/engineering/technical-services/highway-data-services/hdsb>
- [78] A. Izmailov, M. V. Solodov, *Otimização - Métodos Computacionais*, vol. 2 (IMPA, Rio de Janeiro, 2007).
- [79] N. Crokidakis, J. Stat. Mech. **P02058** (2009).
- [80] N. Crokidakis, Phys. Rev. E **81**, 041138 (2010).
- [81] K. Binder, A. P. Young, Rev. Mod. Phys. **58**, 801 (1986).
- [82] D. P. Belanger, *Spin Glasses and Random Fields*, editado por A. P. Young (World Scientific, Singapore, 1998).
- [83] V. S. Dotsenko, J. Stat. Mech. **P09005** (2007).
- [84] D. P. Belanger, A. R. King, V. Jaccarino, J. L. Cardy, Phys. Rev. B **28**, 2522 (1983).
- [85] R. J. Birgeneau, J. Magn. Magn. Mater. **177**, 1 (1998).
- [86] S. Fishman, A. Aharony, J. Phys. C: Solid State Phys. **12**, L729 (1979).
- [87] J. L. Cardy, Phys. Rev. B **29**, 505 (1984).
- [88] A. Aharony, Phys. Rev. B **18**, 3318 (1978).
- [89] T. Schneider, E. Pytte, Phys. Rev. B **15**, 1519 (1977).
- [90] N. Crokidakis, F. D. Nobre, J. Phys.: Condens. Matter **20**, 145211 (2008).
- [91] I. A. Hadjiagapiou, Physica A **389**, 3945 (2010); Physica A **390**, 2229 (2011).
- [92] N. Crokidakis, *Phase Transitions in Disordered Systems under Random Magnetic Fields* (LAP Lambert Academic Publishing, Alemanha, 2010).

- [93] K. Hui, A. N. Berker, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2507 (1989).
- [94] M. Aizenman, J. Wehr, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2503 (1989).
- [95] S. M. de Oliveira, M. A. Continentino, P. M. C. de Oliveira, *Physica A* **162**, 458 (1990).
- [96] L. Hernández, H. Ceva, *Phys. A* **387**, 2793 (2008).
- [97] N. G. Fytas, A. Malakis, *Eur. Phys. Journ. B* **61**, 111 (2008).
- [98] M. Alava, P. M. Duxbury, C. F. Moukarzel, H. Rieger, em *Phase Transitions and Critical Phenomena: Volume 18*, editado por C. Domb e J. L. Lebowitz (Academic Press, Londres, 2001).
- [99] P. L. Garrido, J. Marro, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 1929 (1989).
- [100] J. J. Alonso, J. Marro, *J. Phys.: Condens. Matter* **4**, 9309 (1992).
- [101] A. I. López-Lacomba, J. Marro, *Europhys. Lett.* **25**, 169 (1994).
- [102] A. I. López-Lacomba, J. Marro, *Phys. Rev. B* **46**, 8244 (1992).
- [103] P. L. Garrido, J. Marro, *Europhys. Lett.* **15**, 375 (1991).
- [104] M. Mezard, G. Parisi and M. A. Virasoro, *Spin Glass Theory and Beyond* (World Scientific, Singapore, 1987).
- [105] J. Marro, R. Dickman, *Nonequilibrium Phase Transitions in Lattice Models* (Cambridge University Press, Cambridge, 1999).
- [106] J. M. González-Miranda, A. Labarta, M. Puma, J. F. Fernández, P. L. Garrido, J. Marro, *Phys. Rev. E* **49**, 2041 (1994).
- [107] S. F. Edwards, P. W. Anderson, *J. Phys. F: Met. Phys* **5**, 965 (1975).
- [108] M. F. Thorpe, D. Beeman, *Phys. Rev. B* **14**, 188 (1976).
- [109] C. E. Cordeiro, L. L. Gonçalves, *Mod. Phys. Lett. B* **12**, 231 (1998).
- [110] J. Kushauer, R. van Bentum, W. Kleemann, D. Bertrand, *Phys. Rev. B* **53**, 11647 (1996).
- [111] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, N. M. Rosenbluth, A. H. Teller, E. Teller, *J. Chem. Phys.* **21**, 1087 (1953).
- [112] K. Binder, *Z. Phys. B* **43**, 119 (1981).
- [113] S.-Ho Tsai, S. R. Salinas, *Braz. J. Phys.* **28**, 587 (1998).
- [114] K. Sznajd-Weron, J. Sznajd, *Int. J. Mod. Phys. C* **11**, 1157 (2000).
- [115] N. Crokidakis, F. L. Forgerini, *Phys. Lett. A* **374**, 3380 (2010).
- [116] D. Stauffer, *J. Artif. Soc. Soc. Simul.* **5**, 1 (2001). Disponível on line em <http://jasss.soc.surrey.ac.uk/5/1/4.html>
- [117] K. Sznajd-Weron, *Acta Phys. Pol. B* **36**, 2537 (2005).

- [118] C. Castellano, S. Fortunato, V. Loreto, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 591 (2009).
- [119] D. Stauffer, A. O. Sousa, S. Moss de Oliveira, *Int. J. Mod. Phys. C* **11**, 1239 (2000).
- [120] I. Chang, *J. Mod. Phys.* **12**, 1509 (2001).
- [121] A. T. Bernardes, D. Stauffer, J. Kertezs, *Eur. Phys. J. B* **25**, 123 (2002).
- [122] C. Schulze, *Physica A* **324**, 717 (2003).
- [123] D. Stauffer, *Adv. Comp. Sys.* **5**, 97 (2002).
- [124] K. Sznajd-Weron, J. Sznajd, *Physica A* **351**, 593 (2005).
- [125] J. Bonnekoh, *Int. J. Mod. Phys. C* **14**, 1231 (2003).
- [126] C. Schulze, *Int. J. Mod. Phys. C* **14**, 95 (2003).
- [127] T. Tomé, M. J. de Oliveira, *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade* (Editora Edusp, São Paulo, 2001).
- [128] A. A. Moreira, J. S. Andrade Jr., D. Stauffer, *Int. J. Mod. Phys. C* **12**, 39 (2001).
- [129] P. Erdős, A. Rényi, *Publications Mathematicae* **6**, 290 (1959).
- [130] P. Erdős, A. Rényi, *Publ. Math. Inst. Hung. Acad. Sci.* **5**, 17 (1960).
- [131] J. J. Schneider, *Int. J. Mod. Phys. C* **15**, 659 (2004).
- [132] E. Brigatti, *Phys. Rev. E* **78**, 046108 (2008).
- [133] A. O. Sousa, T. Yu-Song, M. Ausloos, *Eur. Phys. J. B* **66**, 115 (2008).
- [134] N. Crokidakis, M. A. de Menezes (em andamento).
- [135] R. M. Anderson, R. M. May, *Infectious Diseases of Humans: Dynamics and Control* (Oxford University Press, 1991).
- [136] N. T. J. Bailey, *The Mathematical Theory of Infectious Diseases and its Applications* (Hafner Press, New York, 1975).
- [137] M. Derouich, A. Boutayeb, E. H. Twizell, *BioMedical Engineering* 2:4 (2003).
- [138] L. Esteva, C. Vargas, *J. Math. Biol.* **46**, 31 (2003).
- [139] N. Nuraini, E. Soewono, K. A. Sidarto, *Bull. Malays. Math. Sci. Soc* **30**, 143 (2007).
- [140] R. M. Z. dos Santos, S. Coutinho, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 168102 (2001).
- [141] F. Baryarama, L. S. Luboobi, J. Y. T. Mugisha, *Amer. J. Infect. Diseases* **1**, 55 (2005).
- [142] I. Gordo, M. G. M. Gomes, D. G. Reis, P. R. A. Campos, *PLoS ONE* 4(3):e4876 (2009).
- [143] G. Katriel, L. Stone, *PLoS Curr.* 1: RRN10460 (2009).
- [144] T. Tomé, R. M. Ziff, *Phys. Rev. E* **82**, 051921 (2010).

- [145] K. Sogiura, Y. Sakisaka, N. Nakagiri, J. Yoshimura, K. Tainaka, Effects of prevention and quarantine for SIS model on a square lattice, em 18th World IMACS Congress and MODSIM09 International Congress on Modelling and Simulation, July 2009, pp. 197-203.
- [146] R. M. May, A. L. Lloyd, *Phys. Rev. E* **64**, 066112 (2001).
- [147] Y. Moreno, R. Pastor-Satorras, A. Vespignani, *Eur. Phys. J. B* **26**, 521 (2002).
- [148] R. Pastor-Satorras, A. Vespignani, *Phys. Rev. E* **63**, 066117 (2001).
- [149] R. Pastor-Satorras, A. Vespignani, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 3200 (2001).
- [150] R. Parshani, S. Carmi, S. Havlin, *Phys. Rev. Lett* **104**, 258701 (2010).
- [151] M. Boguñá, R. Pastor-Satorras, A. Vespignani, em *Statistical Mechanics of Complex Networks*, editado por R. R. Pastor-Satorras, M. Rubi e A. Díaz-Guilera (Springer Verlag, Berlib, 2003), vol. 625 de *Lecture Notes in Physics*.
- [152] H. Gould, J. Tobochnik, *An Introduction to Computer Simulation Methods: Applications to Physical Systems* (Addison-Wesley Publishing Company, Reading MA, 1996).
- [153] D. Knuth, *The Art of Computer Programming*, vol. 2 (Addison-Wesley Publishing Company, 2nd edition, 1981).