



INSTITUTO DE FÍSICA
Universidade Federal Fluminense

Vitor de Oliveira Moraes Lara

Recobrimentos no Espaço Hiperbólico e Percolação na Árvore Binária Estendida

Niterói
2011

Vitor de Oliveira Moraes Lara

Recobrimentos no Espaço Hiperbólico e Percolação na Árvore Binária Estendida

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal Fluminense, como requisito parcial para obtenção do Título de Mestre em Física.

Orientador:
Prof. Dr. Marcio Argollo de Menezes

Niterói
2011

Agradecimentos

Primeiramente, agradeço aos meus pais. Se eles não tivessem se conhecido e se enamorado, eu jamais teria existido, e o mundo teria sido privado da minha existência. Também devo a eles muito do que sou. Por isso, eu agradeço a eles.

Existe uma lista de pessoas que contribuíram indiretamente com este trabalho. Para não cometer injustiças, não citarei estas pessoas.

Agradeço à CAPES, por ter financiado minhas bolsas de mestrado. Agradeço a todos os professores que tive, até mesmo os ruins, que ao menos me mostraram o que eu não devia fazer, e aos bons professores, que foram referências de excelência e de um objetivo a ser alcançado. Agradeço à Universidade Federal Fluminense pela minha formação, e em especial ao Instituto de Física da mesma instituição.

Meu agradecimento especial vai para todo o grupo de sistemas complexos da nossa instituição, onde sem dúvida aprendi bastante. Por causa disso, o professor Thadeu Penna merece um agradecimento especial. Não posso deixar de agradecer também aos colegas Marlon Ramos e Nuno Crokidakis, por toda ajuda em ler as minhas parcas anotações iniciais, e por fornecerem ótimas sugestões. Não poderia deixar também de agradecer ao talento artístico do amigo Marlon, que me ajudou a elaborar belas imagens. Agradeço, finalmente, à minha namorada Dayanne Fernandes Amaral, por ter tido que ler essa dissertação tanto quanto (ou mais) do que eu e ter corrigido tantos erros infantis que cometi com a língua de Camões, e ao meu orientador Márcio Argollo de Menezes, por que também teve que sofrer, tanto quanto ela, lendo e relendo este trabalho diversas vezes, além de ter dado muito apoio, incentivo e centenas de correções, e também pelo excelente trabalho de orientação que ele exerceu ao longo deste intervalo de tempo um pouco maior que um ano.

Resumo

Neste trabalho estudamos o problema de percolação na árvore binária estendida, uma estrutura simples que apresenta características de geometrias hiperbólicas: a relação não-nula entre área de superfície e volume, sendo este último compacto. A violação do quinto postulado de Euclides, permitindo a existência de múltiplas paralelas a uma reta vizinha passando por um mesmo ponto no espaço, dá lugar a uma estrutura mais rica de fenômenos, como a existência de infinitos aglomerados percolantes em toda uma fase crítica.

Encontramos duas transições de fase para esta árvore, conforme reportado na literatura, sendo a primeira transição pertencente à mesma classe de universalidade de percolação dos recobrimentos hiperbólicos regulares. Os resultados que obtivemos para a segunda transição são condizentes com os obtidos por alguns dos trabalhos desta área. Entretanto, a caracterização precisa desta segunda transição continua em aberto.

Abstract

We study the percolation problem on the enhanced binary tree, a simple structure that exhibits geometric features of hyperbolic spaces: a non-vanishing surface-volume ratio, the latter being compact. The violation of Euclid's fifth postulate, assuring the possibility of an infinity of parallel to a given ray meeting at a point, allows for a richer set of phenomena, like the existence of infinite giant clusters coexisting on a critical phase.

We find two phase transitions for this tree, as reported on the literature, the first being on the universality class as percolation on hyperbolic lattices. Our results for the second phase transition agree with some results from the literature, although better studies are needed in order to assess its true scaling behavior.

Sumário

Lista de Figuras	x
Lista de Tabelas	xi
Introdução	1
1 Fenômenos críticos, Percolação e Teoria de Grafos	3
1.1 Transições de fase e Universalidade	4
1.2 O problema de percolação	9
1.2.1 Percolação em uma dimensão	11
1.3 Grafos e Redes	16
1.3.1 Grafos regulares	17
2 Geometria Hiperbólica	26
2.1 Axiomas da geometria	26
2.2 O modelo de Meio Plano Superior	28
2.3 Transformações de Möbius e Movimentos hiperbólicos rígidos	33
2.4 Inversões	34
2.5 Disco de Poincaré	36
2.6 Triângulos hiperbólicos	39
2.7 Área Hiperbólica	41
2.8 Recobrimento regular	44
3 Percolação em redes hiperbólicas	48

3.1	A árvore Binária Estendida	48
3.2	Percolação na ABE	49
3.3	Resultados	51
A	Breadth First Search	58
A.1	Ideia do Algoritmo	58
B	Análise de Tamanho Finito	64
B.1	Ideia e fundamentos do método	64
B.2	Análise de tamanho finito: prática	65
B.3	Análise de tamanho finito: O colapso dos dados	69
	Referências Bibliográficas	71

Lista de Figuras

- 1.1 *Diagramas de fases $p \times v$ e $p \times T$ de um fluido simples. A curva de fusão (sólido-líquido) pode ter curvatura negativa, como é o caso da água, ou não.* 6
- 1.2 *Figura que ilustra o processo de "coarse graining". Utilizou-se neste procedimento a regra da maioria aplicada a cada conjunto de 2×2 sítios. Em (a), temos $T = 0.95T_c$, em (b), $T = T_c$ e em (c), $T = 1.05T_c$. Podemos observar que sucessivas aplicações da regra da maioria não alteram o comportamento do sistema em (b), ilustrando a invariância de escala apresentada pelo sistema em $T = T_c$. A lenta distorção observada deve-se ao fato de o sistema em questão ser finito ($L = 512$) [35].* 8
- 1.3 *Rede quadrada com $L = 20$, onde os sítios pretos representam terminais de resistência elétrica, e cada uma resistências (em vermelho) estão presentes com probabilidade $p = 0.5$* 9
- 1.4 *Rede unidimensional de sítios, distribuídos com probabilidade p . Sítios ativos estão representados por bolas pretas, e sítios não ativos estão representados por bolas brancas. Nesta imagem temos um cluster de tamanho 4.* 11
- 1.5 *Rede unidimensional de sítios, com condições de contorno periódicas. Neste caso, $L = 14$. Sendo o tamanho do cluster igual a 5, podemos contar quantos clusters de tamanho 5 podem existir, simplesmente transladando o cluster de um em um sítio. Esta quantidade é dada por $N_s = L(1 - p)^2 p^s$ * 12
- 1.6 *Em (a), temos um mapa da cidade de Königsberg com as 7 pontes do problema. Em (b), uma descrição cômica do problema, e em (c), a representação do sistema na forma de grafo [30].* 16

1.7	<i>Rede quadrada. Cada elemento possui quatro ligações, mas como toda ligação conecta um par de elementos, o número total de ligações é o dobro do número de elementos.</i>	18
1.8	<i>Neste pentagrama, cada elemento possui quatro ligações. Entretanto, trata-se de um grafo de 5 elementos totalmente conectado, bastante diferente de uma rede quadrada, em que cada elemento também tem 4 ligações.</i>	19
1.9	<i>Representação da rede formada por átomos de carbono, num cristal de diamante. Vemos que a conectividade é a mesma da rede quadrada, mas a dimensionalidade é diferente![31]</i>	19
1.10	<i>Matriz de conectividade para uma rede unidimensional de N elementos com condições de contorno periódicas. É fácil perceber que a matriz representada acima está correta. Basta desenhar algumas redes unidimensionais pequenas, com condições de contorno periódicas.</i>	20
1.11	<i>Grafo simples, para exemplificar a estrutura de lista de vizinhança [32].</i>	21
1.12	<i>Árvore de Cayley, com conectividade $z = 3$. A árvore binária corresponde a um dos ramos desta árvore de Cayley (como a parte abaixo da linha pontilhada) [1].</i>	23
1.13	<i>Árvore binária enumerada, para ilustrar o algoritmo que gera a lista de adjacência.</i>	24
2.1	<i>Cartman dando uma volta no espaço hiperbólico: ao movimentar-se na direção vertical, ele se comprime. Nada ocorre caso ele ande na direção horizontal. . .</i>	29
2.2	<i>Os pontos P e Q unidos por uma curva g qualquer. Impondo que o comprimento do arco g seja o menor possível, obtemos a equação da geodésica que liga P e Q [3].</i>	30
2.3	<i>Alguns exemplos de geodésicas no meio plano superior [2].</i>	32
2.4	<i>Quatro geodésicas no meio plano superior model. Podemos ver que para um ponto que não toque a mais externa, existem diversas (na verdade, infinitas) outras geodésicas que passem por este ponto e que não tocam a mais externa [2].</i>	33
2.5	<i>A definição de ângulos é a mesma utilizada no espaço euclideano, com a adição das retas tangentes às curvas no ponto de interseção [3].</i>	34

2.6	<i>Alguns casos euclidianos. Em (a) uma translação obtida através de duas reflexões seguidas. Em (b), uma rotação de $\pi/2$ decomposta numa reflexão. O teorema 5.6 de [3] assegura que todo movimento rígido no espaço hiperbólico pode ser decomposto em no máximo 3 inversões.</i>	35
2.7	<i>Problema do método das imagens; deseja-se calcular o potencial de uma configuração correspondente a uma esfera condutora aterrada e uma carga q, localizada a uma distância r fora da esfera [33].</i>	36
2.8	<i>O produto do segmento CP pelo segmento CP' deve ser igual ao raio k ao quadrado: $CP \cdot CP' = k^2$ [3].</i>	36
2.9	<i>Algumas geodésicas no disco de Poincaré. As geodésicas são diâmetros ou arcos de circunferência que fazem ângulos de 90 graus com as bordas do disco [3].</i>	39
2.10	<i>Hexágonos e quadrados euclidianos regulares, compostos por triângulos. A mesma decomposição pode ser feita para polígonos hiperbólicos regulares [3].</i>	39
2.11	<i>Um típico triângulo na posição padrão. Neste caso, todos os ângulos deste triângulo hiperbólico são iguais a $\frac{\pi}{4}$ [3].</i>	40
2.12	<i>Um típico triângulo na posição padrão, gerado no programa visualizador de gráficos gnuplot. Para que a comparação pudesse ser feita, os ângulos são os mesmos da figura 2.11.</i>	41
2.13	<i>Desejamos calcular a área da região R em particular. Esta região é delimitada inferiormente pelo arco de geodésica DE, e não é delimitada superiormente [3].</i>	42
2.14	<i>A área do triângulo nesta figura é dada pela diferença entre as áreas das regiões R e S. Agora já somos capazes de efetuar esses cálculos [3].</i>	43
2.15	<i>As três formas de recobrimento regular no plano euclidiano, com seus respectivos símbolos de Schläfli [34].</i>	45
2.16	<i>Alguns tipos diferentes de recobrimentos regulares no disco de Poincaré.</i>	47
2.17	<i>Obra "Anjos & Demônios", de M. Escher. O recobrimento associado a esta pintura é o $\{6, 4\}$.</i>	47
3.1	<i>Em (a), temos a árvore binária convencional. Em (b) a ABE[14].</i>	48

3.2	<i>Gráfico que mostra o cruzamento de curvas para determinação de p_{c1}. Em y, temos B, e em x, p. Os tamanhos utilizados neste gráfico foram 8, 10, 12 e 15, com número respectivo de amostras de 9×10^6, 9×10^6, 4.5×10^6 e 5×10^5.</i>	52
3.3	<i>Colapso do parâmetro de ordem B contra p. Os tamanhos utilizados foram $L = 8, 10, 12, 15$ e 18, e os respectivos números de amostra utilizados foram $4 \times 10^7, 9 \times 10^6, 3 \times 10^6, 1 \times 10^6$ e 1×10^6. O valor $\nu = 0.5$ sugere que a primeira transição na ABE pertence à mesma classe de universalidade de percolação em recobrimentos hiperbólicos.</i>	53
3.4	<i>Gráfico do parâmetro de ordem $F = \frac{S_2}{S_1}$ contra p. Os tamanhos utilizados foram $L = 5, 8, 10, 12, 15$ e 18, e os respectivos números de amostra utilizados foram $9 \times 10^6, 4 \times 10^7, 9 \times 10^6, 3 \times 10^6, 1 \times 10^6$ e 1×10^6.</i>	54
3.5	<i>A susceptibilidade associada ao parâmetro de ordem F, χ_F, contra p. Os tamanhos utilizados foram $L = 8, 10, 12, 15$ e 18, e os respectivos números de amostra utilizados foram $9 \times 10^7, 4 \times 10^7, 9 \times 10^6, 3 \times 10^6, 1 \times 10^6$ e 1×10^6.</i>	54
3.6	<i>Este gráfico refere-se aos mesmos dados utilizados na figura (3.4), onde apenas aumentamos a definição nos entornos do cruzamento para determinar com maior precisão o valor do cruzamento (tiramos a curva referente ao tamanho 5). Podemos ver que a curva vermelha (referente a $L = 8$) cruza as outras para $p \cong 0.49$, e que o cruzamento das outras ocorre em torno de 0.48.</i>	55
3.7	<i>Colapso dos dados, realizado para os tamanhos $L = 8, 10, 12, 15$ e 18. Utilizamos O valor de $p_{c2} = 0.48$, obtido do cruzamento de curvas (figura (3.6)). Não foi necessário reescalar o eixo y (que contém χ_L). No eixo x, temos $(p - p_c)L^b$, onde o valor de b obtido foi de 0.38 (isto significa que $\nu \cong 2.63$).</i>	55
3.8	<i>Colapso dos dados, realizado para os tamanhos $L = 8, 10, 12, 15$ e 18. Utilizamos O valor de $p_{c2} = 0.48$, obtido do cruzamento de curvas (figura (3.6)). Não foi necessário reescalar o eixo y (que contém F). No eixo x, temos $(p - p_c)L^b$, onde o valor de b obtido foi de 0.38 (isto significa que $\nu \cong 2.63$), o mesmo utilizado no colapso da figura (3.7).</i>	56

3.9	<i>Comparação de colapsos do parâmetro de ordem obtidos com diferentes funções de escala. Observamos um colapso razoável tanto em (a) quanto em (b).</i>	57
3.10	<i>Comparação de colapsos da flutuação do parâmetro de ordem obtidos com diferentes funções de escala. Observamos um colapso razoável tanto em (a) quanto em (b).</i>	57
A.1	<i>Ilustração do algoritmo de "burning" na rede quadrada. Incendiamos a árvore central, e temos disposta a evolução temporal do incêndio.</i>	59
A.2	<i>Figura que ilustra o funcionamento da fila para um caso simples. Podemos ver que a variável top aponta para uma "casa" acima do elemento de cima da fila.</i>	61
B.1	<i>Nesta figura, temos o comportamento típico das grandezas termodinâmicas para uma transição de fase contínua. À esquerda, temos o comportamento qualitativo de χ, ξ e c contra T, de onde percebemos o comportamento divergente destas grandezas no limite termodinâmico. À direita, temos m contra T. Este gráfico foi obtido através de uma simulação (não corresponde ao limite termodinâmico) [9].</i>	66
B.2	<i>A linha cheia representa ξ do sistema magnético infinito, enquanto que a pontilhada mostra a limitação que ξ sofre num sistema de tamanho finito. Na região 1 ξ já atingiu seu valor máximo devido a efeitos de tamanho finito (ξ não pode ser maior que L). Na região 2, percebemos a concordância entre os sistemas finito e infinito, e em 3 estamos afastados da criticalidade[9].</i>	67
B.3	<i>Colapso dos dados extraído de [9]. A simulação correspondente a este colapso foi realizada para o modelo de Ising na ausência de campo, na rede quadrada.</i>	70
B.4	<i>$\chi_L(T)$ para três tamanhos distintos ($L_1 < L_2 < L_3$). Observe que o pico das curvas desloca-se em direção à temperatura crítica do sistema infinito.</i>	70

Lista de Tabelas

1.1	<i>Tabela que representa a estrutura de vizinhança do grafo da figura (1.11).</i>	. . .	22
-----	---	-------	----

Introdução

"It has been argued that one of the appeals of science as a career is that it enables one to go on playing with toys after the age when it normally ceases to be socially acceptable. Experimentalists are well supplied, although at increasing expense, with toys in the shape of complex apparatus. Theoreticians are expected to be more economical and to make their own; these are the models which all physicists use, modify, reject and justify"

R. Peierls (1980)

Neste trabalho estudamos o problema de percolação na árvore binária estendida, uma estrutura simples que apresenta características de geometrias hiperbólicas: a relação não-nula entre área de superfície e volume, sendo este último compacto.

Iniciamos o capítulo 1 com uma discussão dos conceitos de transição de fase e universalidade, que faz com que vários problemas distintos tenham as mesmas características próximos do seus respectivos pontos críticos, pontos especiais no espaço de parâmetros termodinâmicos associados com invariâncias por transformações de escala e comportamento tipo lei de potência para as densidades e funções-resposta termodinâmicas. Em seguida revisamos o problema de percolação, o sistema mais simples que apresenta transição de fase, um fenômeno cotidiano, observado ao se ferver uma panela de água e ao se desmagnetizar um cartão de banco esquecido no porta-luvas de um carro estacionado em pleno verão carioca. Finalizamos o capítulo com uma revisão do conceito de grafos, dando ênfase nos grafos regulares e na árvore de Cayley, uma estrutura que serve de base para cálculos de campo médio e que apresenta solução analítica para o problema de percolação.

Estudamos no capítulo 2 um tipo de geometria não euclideana bidimensional chamada geometria hiperbólica planar e o problema de recobrimento deste espaço hiperbólico por polígonos regulares. As propriedades não triviais do espaço hiperbólico permitem a realização de uma infinidade de recobrimentos possíveis, em oposição ao que acontece no espaço euclidiano, onde quadrados, triângulos e hexágonos são as únicas figuras geométricas regulares que recobrem o espaço sem sobreposição de polígonos ou vazios entre eles.

Por fim, no capítulo 3, estudamos o problema de percolação na árvore binária estendida, que é um modelo simplificado de estrutura hiperbólica, e obtivemos duas probabilidades críticas de diluição p_{c1} e p_{c2} , um resultado característico nestas estruturas. O resultado para p_{c1} concorda unanimemente com a literatura, enquanto que o valor de p_{c2} , controverso na literatura, concorda com um dos 2 valores discordantes entre si da literatura atual. Fazendo análises de escala para encontrar os expoentes críticos associados às duas transições e encontramos que a primeira está na classe de universalidade de percolação em recobrimentos hiperbólicos.

Encerramos a introdução com a apresentação de algumas aplicações que podem ser feitas com as ferramentas que apresentamos e estudamos neste trabalho. A primeira das aplicações se refere ao problema de recobrimento regular, e é de cunho artístico. O recobrimento hiperbólico regular foi explorado em alguns dos trabalhos do famoso artista Maurits Cornelis Escher, como na bela pintura "Anjos e Demônios". Outras imagens um tanto quando psicodélicas podem ser geradas explorando as peculiaridades deste tipo de geometria. Outro tipo de aplicação bastante interessante é o de utilizar o modelo de disco de Poincaré, que será apresentado no capítulo 2, para representar e visualizar informações referentes à árvores, que podem representar diagramas evolutivos, árvores genealógicas, etc..

Capítulo 1

Fenômenos críticos, Percolação e Teoria de Grafos

"What distinguishes computer simulation in general from other forms of computation, if such distinction can be made, is the manner in which the computer is used: rather than merely performing a calculation, the computer becomes the virtual laboratory in which a system is studied"

D. Rapaport, "The Art of Molecular Dynamics Simulation"

Qualquer pessoa que se lembre razoavelmente bem de seu ensino médio se recorda de ter pelo menos visto a equação

$$pV = NRT, \tag{1.1}$$

embora não saiba necessariamente o seu significado. Talvez até mesmo conheça uma ou duas frases mnemônicas que sejam de alguma utilidade para a memorização desta fórmula. O que nos importa nesse contexto não é testar a memória do leitor, e sim dizer que a equação (1.1) serve para descrever o sistema macroscópico mais simples que a termodinâmica pode explicar: o gás ideal. Em princípio, pouco importa, dirão a você num curso tradicional de termodinâmica, do que a matéria é composta: se existem átomos ou não, se tudo o que existe é composto da quintessência ou mesmo se o ar que estamos respirando neste exato momento é feito de

pequenos duendes engraçados. A termodinâmica descreve um gás ideal a partir da equação (1.1) à revelia do mundo microscópico.

O objetivo da mecânica estatística, por outro lado, é, partindo de leis básicas (sejam as leis de Newton ou as da mecânica quântica, o contexto dará o tom) que descrevem os componentes microscópicos da matéria e suas interações, caracterizar a matéria em seu estado macroscópico fazendo uso de ferramentas estatísticas e um número reduzido de observáveis macroscópicos, como temperatura e pressão.

Infelizmente, como acontece com mais frequência do que gostaríamos, existe um pequeno e seleto conjunto de problemas que possuem solução analítica exata (o livro [23] é um compêndio de problemas solúveis em mecânica estatística). Por conta disso, muito do que se faz em física é utilizar e desenvolver ferramentas aproximativas para atacar os mais variados sistemas. Nesse sentido, a computação desempenha um papel importantíssimo. Somos capazes de resolver numericamente equações diferenciais, e mais, podemos efetuar simulações computacionais, realizando uma espécie de "laboratório virtual", que nos ajuda a prever resultados e realizar experimentos que seriam perigosos (ou dispendiosos) demais para um laboratório real.

1.1 Transições de fase e Universalidade

Para introduzir de maneira adequada os conceitos de transições de fase e universalidade, definiremos uma grandeza chamada comprimento de correlação, denotada por ξ . Existem algumas maneiras distintas de definir esta grandeza. A definição que será dada agora é fenomenológica.

Suponha que temos um certo sistema macroscópico, como a água em sua fase líquida, e que sejamos capazes de medir suas grandezas termodinâmicas, como por exemplo sua pressão, temperatura e densidade. Se dividimos este sistema em duas partes iguais, obteremos, em qualquer uma das metades, essencialmente as mesmas propriedades. Se repetimos este processo continuamente, em algum dado momento, chegaremos numa escala de comprimento em que o comportamento das grandezas termodinâmicas se tornará diferente. O motivo disto é que a fase líquida possui, devido a sua temperatura finita, pequenas regiões de água na fase gasosa em forma de bolhas de vapor d'água, que possuem, para uma dada temperatura e pressão, um tamanho característico. Por exemplo, quando fervemos uma certa quantidade de água numa

panela, podemos ver a olho nu o surgimento de bolhas de vapor, que começam a se desprender da água na fase líquida. Definimos qualitativamente então o comprimento de correlação ξ como sendo a escala de comprimento típica do tamanho destas bolhas de vapor.

À medida que a panela recebe calor, a temperatura do líquido aumenta até que, se estamos à pressão de um *atm* a 100°C inicia-se a ebulição (ver figura (1.1a)). Líquido e gás coexistem em proporções volumétricas distintas V_l e V_g , com bolhas de gás de diâmetro característico ξ finito. Nesta região de coexistência o calor recebido através da panela altera apenas a proporção líquido-gás até que tenhamos apenas vapor de água no recipiente (ver figura 1.1b). Agora o calor recebido volta a aumentar a temperatura do gás. Se definirmos a diferença entre os volumes específicos (ou volume por quantidade de moléculas)

$$P_\infty = v_l - v_g \quad (1.2)$$

como um "parâmetro de ordem", este assume um valor finito na região de coexistência. No entanto, se caminhamos pela curva de coexistência líquido-gás aumentando apropriadamente temperatura e pressão atingimos um ponto terminal, chamado "ponto crítico"¹. Vemos na figura (1.1) que a região de coexistência se anula, e o parâmetro de ordem P_∞ vale zero neste ponto (acima de T_c líquido e gás são indistinguíveis e P_∞ também se anula). Uma das características marcantes do ponto crítico é a divergência da escala de tamanho médio das bolhas de gás na fase líquida, que percebemos visualmente por um forte espalhamento de luz pela substância, conhecida como "opalescência crítica"(figura (1.6) de [41]). Podemos classificar as transições de fase de acordo com o comportamento do parâmetro de ordem próximo à transição de fase: se P_∞ varia *descontinuamente* ao mudarmos algum parâmetro termodinâmico chamamos a transição de *primeira ordem*, caso contrário chamamos a transição de *segunda ordem*².

Esperamos que as grandezas termodinâmicas, tais como o calor específico c (que mede o quanto a temperatura de um material varia à medida que lhe fornecemos calor) se comportem como simples leis de potência nas proximidades de uma transição de fase deste tipo³, tais como

¹Não há indícios de ponto crítico na curva de coexistência sólido-líquido)

²O nome da transição deriva da classificação de Ehrenfest, onde em uma transição de ordem n a n -ésima derivada da energia livre é a derivada de ordem mais baixa a sofrer uma descontinuidade [41]

³É necessário dizer aqui que existem sistemas cujas grandezas termodinâmicas exibem leis de potência nas proximidades de uma transição de fase descontínua (em [40] e [39] discute-se o surgimento de comportamento de

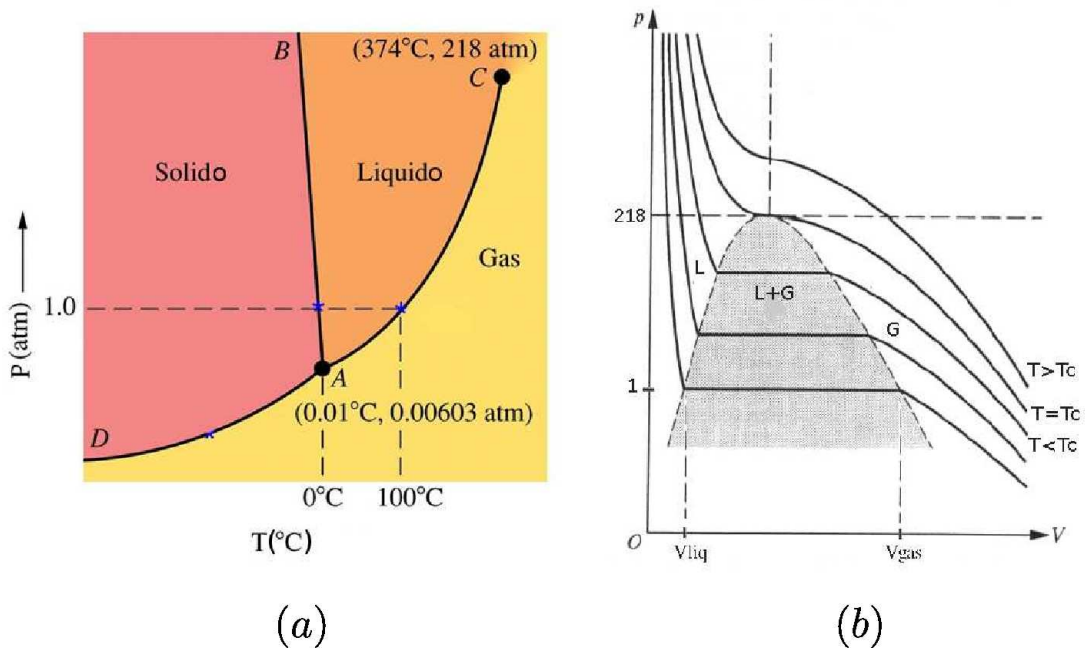


Figura 1.1: Diagramas de fases $p \times v$ e $p \times T$ de um fluido simples. A curva de fusão (sólido-líquido) pode ter curvatura negativa, como é o caso da água, ou não.

(ver equações B.1-4):

$$c \sim |T - T_c|^{-\gamma}. \quad (1.3)$$

Cada grandeza termodinâmica possui um expoente característico, similar a γ na equação anterior, que chamaremos de expoente crítico.

A despeito de sua simplicidade, as leis de potência possuem uma característica notável que ilustramos a seguir:

Consideremos $f(x) = x^{-\gamma}$ e $g(x) = e^x$ como sendo as formas funcionais de uma dada propriedade de dois sistemas distintos. Imagine que estamos interessados num dado intervalo em que x vá de $0.5x_0$ a $2x_0$. Se calculamos a razão entre os limites destes intervalos para $f(x)$ e $g(x)$, obteríamos $f(2x_0)/f(0.5x_0) = 4^\gamma$, e $g(2x_0)/g(0.5x_0) = e^{1.5x_0}$. Se repetimos este procedimento para o intervalo de $5x_0$ a $20x_0$, as frações serão agora $f(20x_0)/f(5x_0) = 4^\gamma$ e $g(20x_0)/g(5x_0) = e^{15x_0}$. O que fizemos foi aumentar a escala do intervalo por 10. Se repetimos este procedimento, uma função do tipo lei de potências continuará a exibir a mesma razão. Já

escala para transições descontínuas. Esse comportamento é justificado pela teoria do Grupo de Renormalização). A partir de agora, iremos nos referir a este tipo de fenômeno, em que aparecem simples leis de potência como fenômenos críticos, sem nos referir à natureza da transição.

no caso de uma função exponencial, por exemplo, as razões ficam cada vez mais diferentes. Por esta característica, dizemos que as leis de potência são livres de escala (utilizamos a função exponencial como exemplo, mas esta sensibilidade às escalas se repete para diversas outras funções).

Um exemplo interessante (e que preocupa bastante os moradores da Califórnia, embora nós brasileiros estejamos relativamente sossegados a este respeito) é o dos terremotos. Histogramas que registram a intensidade dos tremores contra a frequência com que cada intensidade de terremoto exhibe, indicam que a distribuição de probabilidades que governa a intensidade dos terremotos segue uma lei de potência. Isto significa que, se esperamos por tempo suficiente, um terremoto de intensidade jamais vista antes ocorrerá. Recentemente, pudemos observar um fenômeno deste tipo ocorrer no Japão.

O surgimento dessas leis de potência e outros fenômenos relacionados à criticalidade estão intimamente relacionados à divergência de ξ . Como o comprimento de correlação é, grosso modo, o comprimento em que as flutuações dos graus de liberdade microscópicos estão significativamente relacionados entre si, o seu comportamento divergente nas proximidades de uma transição de fase implica dizer que não importa o quão distantes estejam duas partículas quaisquer do sistema, elas estarão correlacionadas! Por conta disso, não há nenhuma escala que caracterize o sistema, de modo que, na região de criticalidade ⁴ o sistema apresenta invariância de escala. A figura (1.2) mostra os resultados de uma simulação computacional de uma mistura líquido-vapor a diferentes temperaturas em que sucessivos aumentos de escala ("zooms"; em inglês, chamamos este procedimento de "coarse graining") são realizados, de modo a ilustrar a invariância de escala.

Esta invariância implica também na perda de relevância dos detalhes relacionados às interações microscópicas, o que justifica, por sua vez, um dos mais interessantes conceitos relacionados aos fenômenos críticos⁵, o conceito de universalidade. À medida que os detalhes microscópicos das interações específicas perdem relevância, poucos parâmetros passam a caracterizar uma transição de fase deste tipo, tais como o número de dimensões espaciais do sis-

⁴Um sistema pode apresentar comportamento crítico nas proximidades de uma transição de fase. Chamamos a esta região, que se localiza nos entornos do ponto crítico, de região de criticalidade.

⁵Nome dado ao conjunto de fenômenos exibidos por sistemas físicos nas vizinhanças de alguns tipos de transição de fase.

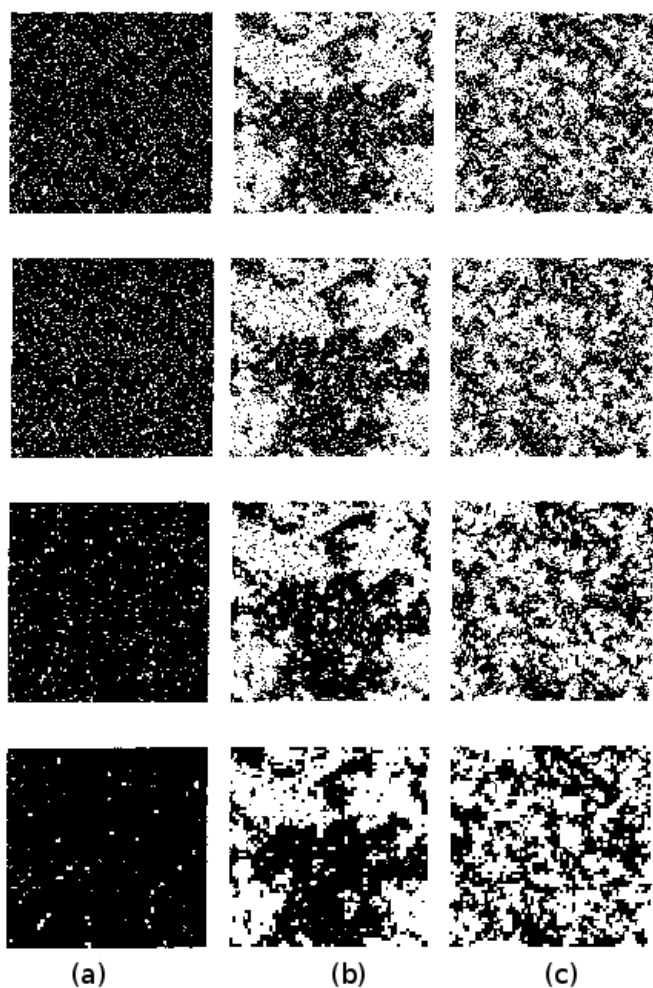


Figura 1.2: Figura que ilustra o processo de "coarse graining". Utilizou-se neste procedimento a regra da maioria aplicada a cada conjunto de 2×2 sítios. Em (a), temos $T = 0.95T_c$, em (b), $T = T_c$ e em (c), $T = 1.05T_c$. Podemos observar que sucessivas aplicações da regra da maioria não alteram o comportamento do sistema em (b), ilustrando a invariância de escala apresentada pelo sistema em $T = T_c$. A lenta distorção observada deve-se ao fato de o sistema em questão ser finito ($L = 512$) [35].

tema, as simetrias do hamiltoniano que descreve suas interações, dentre outros. Desta maneira, todo sistema que passa por uma transição líquido-vapor, independente de seus constituintes, exibe o mesmo conjunto de expoentes críticos. Mais ainda, a transição de fase paramagneto-ferromagneto em um paramagneto uniaxial (isto é, aquele que possui uma direção preferencial de alinhamento), que ocorre quando elevamos suficientemente a temperatura de um ímã de modo a fazer com que ele perca suas propriedades magnéticas, e que está relacionada aos momentos magnéticos dos átomos de um certo material, também possui os mesmos expoentes críticos que a transição líquido-vapor! Estas propriedades aqui descritas são justificadas de maneira mais rigorosa pelo ferramental do Grupo de Renormalização, que está, entretanto, fora do

escopo deste trabalho.

1.2 O problema de percolação

Suponha que temos uma rede quadrada, similar a um tabuleiro de xadrez, e que em cada vértice desta rede existam terminais de resistência. Suponha agora que para cada lado de um quadrado desta rede, colocaremos uma resistência elétrica com a mesma probabilidade p (por normalização, as resistências estarão ausentes com probabilidade $1 - p$). A figura (1.3) ilustra uma possível realização para este sistema, com $L = 20$ e $p = 0.5$.

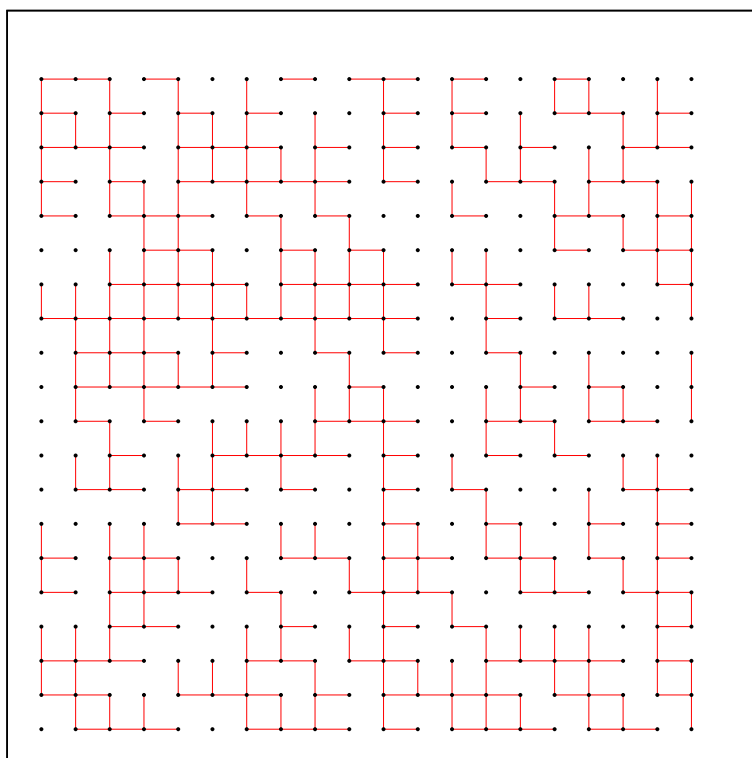


Figura 1.3: Rede quadrada com $L = 20$, onde os sítios pretos representam terminais de resistência elétrica, e cada uma resistências (em vermelho) estão presentes com probabilidade $p = 0.5$.

Se existe uma diferença de potencial entre a parte superior e a inferior desta rede, dependendo do valor de p , alguma corrente elétrica fluirá na direção vertical, atravessando a malha. Por exemplo, para baixos valores de p , digamos, 0.01, muito dificilmente haverá algum caminho de resistências que possa conduzir a corrente elétrica verticalmente, enquanto que se o valor de p fosse por exemplo 0.95, poderíamos afirmar com quase total certeza que haverá

passagem de corrente, uma vez que pouquíssimas resistências estariam ausentes. Deste modo, somos capazes de prever a existência de duas fases, uma condutora, e outra isolante, sendo a fase intimamente relacionada a probabilidade p de cada uma das resistências existir. Estamos interessados em saber para qual valor mínimo de p a corrente será capaz de atravessar o sistema, e daremos o nome ao estado em que há um cluster de resistências que atravessa todo o sistema de estado percolante. O que é bastante interessante é que uma variação desta experiência mental que acabamos de propor foi de fato realizada experimentalmente! Em [24], os autores utilizam uma placa quadrada condutora, e efetuam furos aleatoriamente nos vértices dos quadrados nesta placa, para em seguida analisar a condutividade elétrica desta placa em função da probabilidade de cada furo ser efetuado. Observou-se nesta experiência real a existência de um valor crítico para probabilidade, que separa uma fase condutora de outra isolante. Este tipo de problema serve para descrever, ainda que de modo pictórico, diversos sistemas físicos reais, tais como incêndios florestais, a distribuição de óleo ou gás numa rocha porosa, etc.. Se o leitor aprecia um bom café, gostará de saber que o nome que este problema leva se deve ao bom e velho líquido escuro e amargo. Em inglês, existe uma máquina de café que leva a alcunha de percolator (para o leitor que desconhece este aparelho, ele se parece com a chamada cafeteira italiana).

No experimento mental que propusemos (e que está ilustrado na figura (1.3)), optamos por diluir as resistências (ligações), e deixamos todos os terminais (sítios) presentes. Dizemos que neste caso, estamos realizando percolação por ligações. Se optamos por diluir os sítios e preservar as ligações, tratamos do problema de percolação por sítios, e se diluímos ambos, fazemos percolação por sítios e ligações.

De um ponto de vista histórico, o problema de percolação remonta aos estudos de Flory & Stockmayer, que na época da segunda guerra mundial utilizaram a percolação para descrever o processo de gelação, um tipo de polimerização que se origina da formação de uma rede de ligações químicas que atravessam todo o sistema (similarmente ao processo de cozimento de um ovo, em que um estado líquido passa para um estado gelatinoso, o do ovo cozido, ou ao processo de preparo da gelatina - para mais detalhes, ver [1]). Apesar disto, costuma-se creditar a origem do problema de percolação a Broadbent & Hammersley, que em 1957 introduziram o problema na literatura matemática (ver [4]). Nossa abordagem neste trabalho, como esperado,

é mais física do que matemática, e segue de perto o desenvolvido no clássico livro [1] do autor D. Stauffer.

1.2.1 Percolação em uma dimensão

Estudaremos o caso unidimensional de percolação por sítios. Para tanto, analisemos agora a figura (1.4).



Figura 1.4: Rede unidimensional de sítios, distribuídos com probabilidade p . Sítios ativos estão representados por bolas pretas, e sítios não ativos estão representados por bolas brancas. Nesta imagem temos um cluster de tamanho 4.

Se cada sítio existe com a mesma probabilidade p , a probabilidade de que dois sítios quaisquer existam vale p^2 , e que n sítios quaisquer existam vale p^n . Como a probabilidade de que um sítio qualquer não exista, por normalização, vale $1 - p$, a probabilidade de que um cluster (aglomerado de sítios) de tamanho n exista é $(1 - p)^2 p^n$, uma vez que um cluster termina nas duas extremidades por que não há sítios ativos (se houvesse, o cluster teria um tamanho maior do que n). Agora, se o sistema tem um tamanho L ($L > n + 2$) e negligenciamos efeitos de fronteira, a probabilidade de um cluster de tamanho n existir é $L(1 - p)^2 p^n$, uma vez que podemos pensar na translação do cluster de um em um sítio (ver figura (1.5)).

Definimos então a quantidade N_s como sendo a quantidade de clusters de tamanho s nesta rede unidimensional, dada por $N_s \equiv L(1 - p)^2 p^s$. Desta forma, agora, utilizaremos n_s , que é a quantidade de clusters de tamanho s por sítio, como sendo

$$n_s = (1 - p)^2 p^s. \quad (1.4)$$

Assim, a probabilidade de um sítio pertencer ao cluster de tamanho s é dada por n_s vezes s , uma vez que ele pode ser qualquer um dos sítios do cluster. Um fato interessante relacionado ao problema de percolação é que desde que o sistema seja suficientemente grande, existe uma

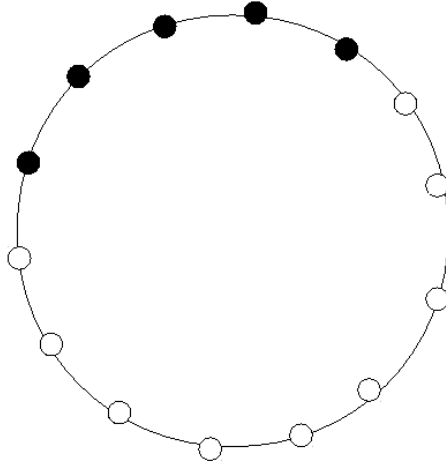


Figura 1.5: Rede unidimensional de sítios, com condições de contorno periódicas. Neste caso, $L = 14$. Sendo o tamanho do cluster igual a 5, podemos contar quantos clusters de tamanho 5 podem existir, simplesmente transladando o cluster de um em um sítio. Esta quantidade é dada por $N_s = L(1 - p)^2 p^s$

probabilidade crítica p_c para a qual o sistema nunca percola, para valores menores que p_c , e que sempre percola, para valores maiores que p_c . Este resultado possui amparo na teoria do grupo de renormalização. Para mais detalhes, ver [8].

Para qual valor de concentração p_c ocorrerá o salto neste caso unidimensional? Para qualquer valor de concentração p menor que 1, sempre haverá pelo menos um sítio não ativo, no limite em que $L \rightarrow \infty$, porque, pela própria definição de probabilidade, o número médio de sítios ativos será Lp e o de inativos, $L(1 - p)$. Isto implica que para qualquer valor de p menor que 1, não haverá um cluster que atravesse o sistema de ponta a ponta, de modo que

$$p_c = 1. \tag{1.5}$$

Deste modo, só há uma região acessível, no caso 1D, que é correspondente a $p < 1$ (não consideramos que o valor de $p = p_c = 1$ seja uma região). Como a probabilidade de um sítio pertencer a um cluster de tamanho s é dada por $n_s s$, e todo sítio ativo pertence a um cluster (mesmo que de tamanho unitário), temos que a relação

$$\sum_s sn_s = p \quad (1.6)$$

deve ser satisfeita. Isto pode ser verificado, se utilizarmos a forma explícita obtida para n_s , $n_s = (1 - p)^2 p^s$:

$$\begin{aligned} \sum_s sn_s &= (1 - p)^2 \sum_s sp^s = (1 - p)^2 p \frac{d}{dp} \sum_s p^s \\ &= (1 - p)^2 p \frac{d}{dp} \left(\frac{1}{1 - p} \right) = p, \end{aligned} \quad (1.7)$$

onde usamos um truque recorrente em cálculos de mecânica estatística, o de derivar um somatório com respeito a um de seus parâmetros, para poder reescrevê-lo de um modo conveniente, e usamos a soma dos termos da série geométrica infinita na terceira igualdade. Podemos nos perguntar agora: qual a probabilidade de escolhermos um sítio ativo, pertencente a um cluster finito, e este cluster possuir tamanho s ? A resposta desta pergunta é dada por $p_s = sn_s / (\sum_s sn_s)$, onde utilizamos a própria definição de probabilidade. Sendo assim, o tamanho médio de cluster, que denotaremos por \bar{S} , é dado por

$$\begin{aligned} \bar{S} &= \sum_{s'} sp_s = \frac{\sum_{s'} s^2 n_s}{\sum_{s'} sn_s} = \frac{(1 - p)^2 \sum_{s'} s^2 p^s}{p} \\ &= \frac{(1 - p)^2}{p} \left(p \frac{d}{dp} \right)^2 \sum_{s'} p^s = \frac{1 + p}{1 - p}, \end{aligned} \quad (1.8)$$

onde s' nas somas indica que estamos excluindo os clusters de tamanho infinito (se houver), porque estes clusters fazem as somas divergirem.

Podemos perceber da equação (1.8) que \bar{S} diverge à medida que nos aproximamos de $p_c = 1$. O mesmo tipo de comportamento é exibido em dimensões superiores. De maneira geral podemos dizer que S diverge nas proximidades do ponto crítico como

$$\bar{S} \sim |p - p_c|^{-\gamma}, \quad (1.9)$$

sendo $\gamma = 1$, neste caso. Em dimensões superiores, γ pode assumir outros valores (para consultar valores de γ , indicamos [1]). O que importa é que de modo geral, nas proximidades do ponto crítico, \bar{S} diverge assintoticamente como uma simples lei de potência ⁶. Para encerrar esta digressão, vamos definir as outras duas grandezas de maior importância, o comprimento de correlação ξ e o parâmetro de ordem P_∞ .

O comprimento de correlação ξ , que já foi definido de modo qualitativo na parte referente às transições de fase, será definido agora através da função de correlação $g(r)$, que representa a probabilidade de um sítio pertencer ao mesmo cluster que outro sítio ocupado, se a distância entre ambos for r . Como caso limite, temos que $g(0) = 1$. Se estamos a uma distância r do sítio ocupado e desejamos que o sítio localizado em r pertença ao mesmo cluster que o localizado na origem, todos os sítios entre 0 e r também devem estar ativos, de modo que

$$g(r) \propto p^r. \quad (1.10)$$

Se p é menor que um, $g(r)$ decai exponencialmente com r , à medida que este último vai ao infinito (basta perceber que $g(r) = e^{r \ln(p)}$, e que como $p < 1$, $\ln(p) < 0$).

Temos então que

$$g(r) \propto \exp\left(\frac{-r}{\xi}\right),$$

onde

$$\xi = -\frac{1}{\ln(p)} \cong \frac{1}{p - p_c}, \quad (1.11)$$

sendo que a última igualdade da equação depende de estarmos nas proximidades de $p = p_c = 1$, que é a condição para que seja válida a expansão $\ln(1 - x) \cong -x$ (não custa reforçar aqui que a relação (1.11) só é válida no caso unidimensional). Podemos perceber de novo que, a despeito do comportamento de ξ ser relativamente complicado (envolve um logaritmo), seu comportamento nas proximidades de $p = p_c$ também diverge como uma simples lei de potências. De uma maneira geral, escrevemos ξ como:

⁶Neste contexto, quando utilizarmos o símbolo \sim , seu significado será este: a grandeza em questão se comportará de tal modo assintoticamente.

$$\xi(p) \sim |p - p_c|^{-\nu}. \quad (1.12)$$

Por fim, resta definir a grandeza P_∞ , associada ao último dos 3 expoentes críticos mais "importantes". A definição de P_∞ é bastante simples. Definimos P_∞ simplesmente como sendo a probabilidade de um sítio ativo pertencer ao cluster infinito (por isto o símbolo na forma de sub-índice nesta grandeza). Infelizmente, neste caso unidimensional, o comportamento de P_∞ tem pouca utilidade, uma vez que o limiar de p_c faz com que P_∞ seja zero para qualquer valor de p menor que 1, já que o sistema não percola antes disso. De todo modo, similarmente ao que fizemos para ξ e \bar{S} , vamos escrever, de um modo geral, que nas proximidades de $p = p_c$, temos que

$$P_\infty \sim (p - p_c)^\beta, \quad (1.13)$$

sendo β o último dos expoentes críticos. Vale dizer a importância de P_∞ , uma vez que esta grandeza seria a análoga da diferença $\rho_L - \rho_V$ no caso da transição líquido-vapor, já que o valor de P_∞ nos permite saber em qual fase o sistema se encontra (se estamos na fase percolante ou não).

Embora a obtenção analítica das grandezas físicas de interesse tenha sido possível para o caso da percolação em uma dimensão, deve-se ter em mente que esta é uma raríssima exceção. Quando analisamos o caso bidimensional, somos capazes de obter a solução na rede quadrada para o caso de percolação por ligações, mas o problema de percolação por sítios permanece sem solução analítica exata. Por conta disto, temos que apelar frequentemente para simulações computacionais. Faz-se então necessária a técnica de Análise de Tamanho Finito (em inglês, Finite Size Scaling), que nada mais é que uma análise numérica sistemática de sistemas finitos para a obtenção, através de extrapolações, do comportamento termodinâmico de um sistema físico com infinitos graus de liberdade. Para mais detalhes desta técnica, ver o apêndice (B).

1.3 Grafos e Redes

Pode-se dizer, de maneira geral, que redes nada mais são do que um conjunto N qualquer de elementos que se relacionam entre si, digamos, através de M relações. Matematicamente, um conjunto deste tipo pode ser representado como

$$G(N, M). \tag{1.14}$$

A escolha da letra G na representação deste conjunto não é despropositada; na literatura matemática, o ramo dedicado ao estudo de redes é chamado de Teoria de Grafos. A partir deste ponto, passamos então a utilizar intercambiavelmente as palavras redes e grafos, sendo ambas consideradas, para todos os fins, sinônimos.

Numa perspectiva histórica, costuma-se creditar o início dos estudos da chamada teoria de grafos ao trabalho pioneiro do famoso matemático Euler de 1736 (o que não é muito surpreendente, uma vez que esse prolífico matemático deu diversas contribuições a variados ramos da matemática) e nos conduz ao famoso problema das pontes de Königsberg. Este problema é inicialmente mais urbanístico do que matemático.

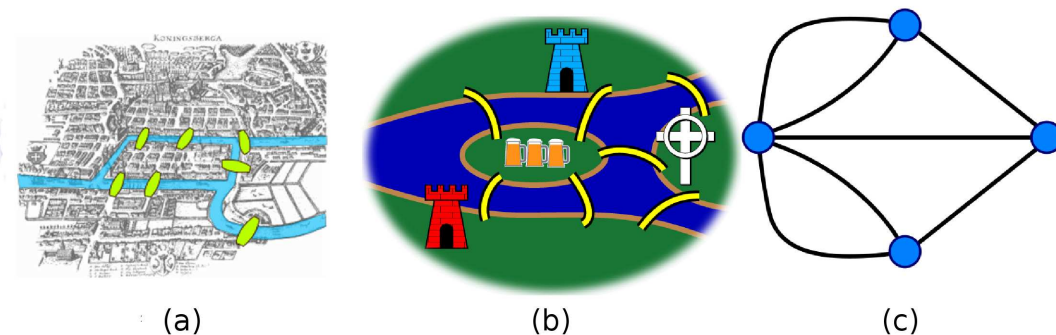


Figura 1.6: Em (a), temos um mapa da cidade de Königsberg com as 7 pontes do problema. Em (b), uma descrição cômica do problema, e em (c), a representação do sistema na forma de grafo [30].

A cidade de Königsberg, hoje conhecida como Kaliningrado, na Rússia, localizava-se na antiga Prússia. Como mostra a figura (1.6), a cidade é cortada por um rio chamado Pregel. O problema proposto consiste em obter um caminho que atravessasse a cidade, de modo que cada

ponte deve ser cruzada ao menos uma, e somente uma vez. Só se pode chegar de um lado ao outro da cidade através das pontes, e cada ponte deve ser atravessada por completo (não é permitido que se cruze apenas metade da ponte de um lado, e que a outra metade seja atravessada do outro lado desta mesma ponte).

A solução de Euler (que na verdade provou que o problema proposto não possui solução) é importantíssima do ponto de vista histórico, uma vez que marca o início da chamada teoria de grafos, e constitui um pontapé inicial do estudo acerca da topologia. Euler inicialmente percebe que o caminho tomado em cada um dos pedaços de terra (que serão chamados agora de vértices) é irrelevante, sendo fundamental apenas a escolha da ordem de pontes nesta caminhada. Deste modo, podemos ignorar a distribuição geográfica das ilhas que compõe a cidade, e a "distorção" gradativa sofrida na figura (1.6) é então justificada.

Pensando agora neste modelo simplificado da cidade, a solução de Euler consiste em perceber que uma vez que um caminhante atinja um dos vértices deste grafo, ele precisa sair (exceto no caso em que este vértice seja o ponto inicial ou final da jornada deste caminhante). Assim, excetuando estes dois vértices, se atingimos um vértice n vezes, também teremos de deixá-lo n vezes. Como cada ponte só pode ser cruzada uma vez, um vértice comum deste grafo (isto é, todos os vértices, exceto o primeiro e o último) precisa necessariamente ter um número par de pontes, para que o número de vezes que um caminhante o atinja seja igual ao número de vezes que o deixe. Já que todos os vértices do grafo que corresponde a cidade de Königsberg possuem um número ímpar de pontes (e somente dois destes podem ser os vértices final e inicial), chegamos então a conclusão de que o problema de fato não possui solução.

Feita então esta descrição e apresentação da solução do problema das pontes de Königsberg, cuja importância já foi citada acima, esperamos ter motivado o leitor mostrando as origens da fundamentação histórica da chamada teoria de grafos. Desta forma, passemos então a estudar em específico outros tipos de redes bastante comuns.

1.3.1 Grafos regulares

Imaginemos uma rede quadrada, similar a um tabuleiro de xadrez, como representado na figura (1.7) (este grafo será recorrente neste trabalho).

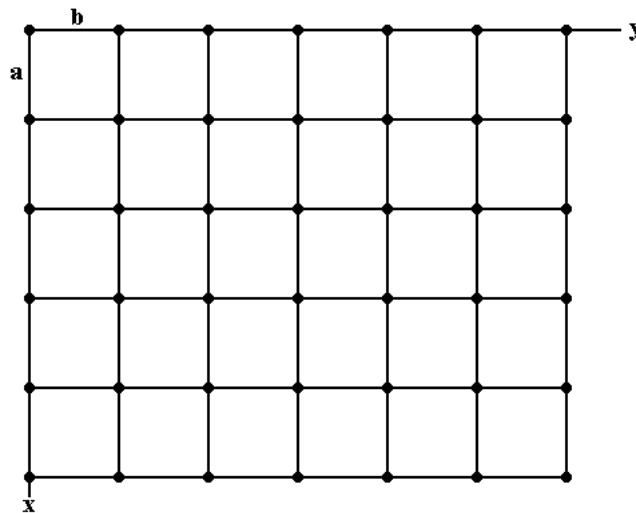


Figura 1.7: Rede quadrada. Cada elemento possui quatro ligações, mas como toda ligação conecta um par de elementos, o número total de ligações é o dobro do número de elementos.

Definiremos então a rede quadrada como sendo o conjunto de pontos que se encontram nos vértices dos quadrados do tabuleiro. As ligações serão os lados dos quadrados. Podemos perceber que todos os elementos da rede, a menos dos elementos pertencentes a fronteira em que acaba o reticulado, possuem quatro ligações⁷. Se quiséssemos saber quantas ligações existem em nosso sistema, poderíamos dizer, a primeira vista que $M = 4N$, onde $N = L^2$ é o número de elementos que existem nesta rede quadrada. Entretanto, isto estaria errado. O correto para este sistema é

$$G(N, M) = G(N, 2N), \quad (1.15)$$

uma vez que toda ligação da rede relaciona dois elementos de maneira simétrica, e portanto, é contada duas vezes⁸.

Além da conectividade dos elementos, para caracterizar efetivamente um grafo, é necessário que, dado um elemento qualquer da rede, saibamos também quais são os elementos que estão conectados a ele, isto é, quem são os seus vizinhos. Por exemplo, na rede representada na figura

⁷Este "problema"gerado pelos elementos da superfície pode ser facilmente contornado empregando-se condições de contorno periódicas; no entanto, por facilidade do ponto de vista de algoritmo, as condições de contorno empregadas aqui serão as mesmas utilizadas em [1] - num dos apêndices deste livro, o autor descreve como implementar condições de contorno helicoidais para uma estrutura hipercúbica de d dimensões.

⁸Note que podemos ter ligações assimétricas, como por exemplo no grafo de chamadas telefônicas efetuadas em um dia, onde sítios são pessoas e ligações correspondem às chamadas feitas pelas pessoas: é possível que A telefone para B sem que B retorne a ligação.

(1.8), todos os elementos possuem conectividade 4, mas dificilmente alguém classificaria este grafo como sendo uma rede quadrada.

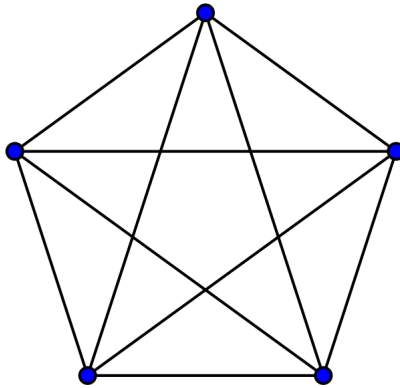


Figura 1.8: Neste pentagrama, cada elemento possui quatro ligações. Entretanto, trata-se de um grafo de 5 elementos totalmente conectado, bastante diferente de uma rede quadrada, em que cada elemento também tem 4 ligações.

Um outro exemplo bastante elucidativo que mostra como a conectividade por si só não nos permite classificar por completo um grafo é o caso da rede formada por átomos de carbono, num cristal de diamante, figura (1.9), em que novamente, todos os elementos possuem 4 ligações, mas a dimensionalidade da rede mudou!

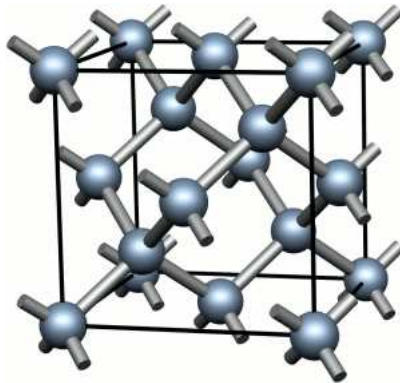


Figura 1.9: Representação da rede formada por átomos de carbono, num cristal de diamante. Vemos que a conectividade é a mesma da rede quadrada, mas a dimensionalidade é diferente![31]

Podemos utilizar diversas maneiras distintas para representar este conjunto A de relações entre os elementos de uma rede. Começemos então definindo a matriz de conectividade \hat{A} . Cada elemento a_{ij} ⁹ desta matriz é definido como

⁹Os elementos a_{ij} não devem valer necessariamente 0 ou 1. Isto pode ser generalizado, para que possamos lidar com relações entre elementos que possuam pesos distintos, da mesma maneira que o leitor gosta mais de

$$a_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{caso haja uma ligação que conecte } i \text{ e } j, \\ 0, & \text{caso } i \text{ e } j \text{ não estejam conectados.} \end{cases} \quad (1.16)$$

Para ilustrar adequadamente a matriz de conectividades, consideremos a rede unidimensional com $N = L$, onde utilizaremos condições de contorno periódicas. Enumerando os elementos da rede de 1 a $N = L$, podemos perceber que a matriz de conectividades para a rede unidimensional seria uma matriz simétrica (se o grafo fosse composto de ligações direcionadas, isto não seria necessariamente verdadeiro, uma vez que o elemento A poderia estar ligado a B, sem que B estivesse conectado a A. Isto não será tratado aqui, entretanto), recheada de zeros, com elementos não nulos apenas nas duas diagonais paralelas mais próximas à diagonal principal, e nos elementos a_{1N} e a_{N1} . A figura (1.10) ilustra esta matriz com as condições de contorno periódicas. Para visualizar como a matriz da figura (1.10) representa a rede unidimensional descrita neste parágrafo, sugerimos que o leitor desenhe anéis (que simbolizam as condições periódicas neste caso) com um número pequeno de constituintes, e que identifique, para cada elemento, os seus vizinhos.

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Figura 1.10: *Matriz de conectividade para uma rede unidimensional de N elementos com condições de contorno periódicas. É fácil perceber que a matriz representada acima está correta. Basta desenhar algumas redes unidimensionais pequenas, com condições de contorno periódicas.*

Embora a matriz de conectividades seja bastante útil em algumas circunstâncias, sobretudo umas pessoas que de outras. Dessa forma, a_{ij} poderiam ser representados como números reais no intervalo de 0 a 1, sendo maior o peso da ligação conforme mais próximo a_{ij} esteja de 1. Entretanto, ligações com pesos não serão discutidas neste trabalho.

em alguns cálculos analíticos, ela não é tão vantajosa do ponto de vista computacional. A razão disto é que, quando estivermos trabalhando com redes não regulares, esta matriz significará uma complicação do ponto de vista do consumo de memória (alocar uma matriz $N \times N$ é um desperdício, quando apenas alguns poucos elementos dela serão não nulos) e de implementação (isto poderia ser contornado; entretanto, a implementação da lista de vizinhança revela-se mais adequada aos nossos propósitos - ver o apêndice (A)). Passaremos a utilizar agora a chamada lista de vizinhança.

Suponhamos agora que cada elemento de nosso grafo possui um rótulo, pouco importando se este rótulo será "0", "Hildebrando" ou "Coca-cola". A lista de vizinhança consiste em uma tabela, onde, para cada um dos elementos, temos listados cada um dos seus vizinhos. Voltando a rede quadrada, se enumerássemos cada um dos seus elementos de 0 a $L^2 - 1$, o elemento i teria como vizinhos $(i - 1 + L^2) \% L^2$, $(i + 1) \% L^2$, $(i + L) \% L^2$ e $(i - L + L^2) \% L^2$, onde % representa aqui a operação modular, que consiste em extrair o resto da divisão inteira entre dois números (deixamos como exercício para o leitor a verificação da relação de vizinhança para um elemento i qualquer na rede quadrada com condições de contorno helicoidais. Basta escrever algumas redes quadradas pequenas para que se possa convencer das relações escritas). Esta operação modular é importante aqui por conta das condições de contorno helicoidais adotadas, citadas anteriormente. Esta estruturação de dados na forma de lista de vizinhanças será extremamente útil no caso da implementação do algoritmo de busca em grafos chamado B.F.S. (do inglês Breadth First Search), que é discutido no apêndice homônimo. Um exemplo bastante simples, e que serve ao nosso propósito de ilustrar a lista de vizinhança, pode ser visto na figura (1.11).

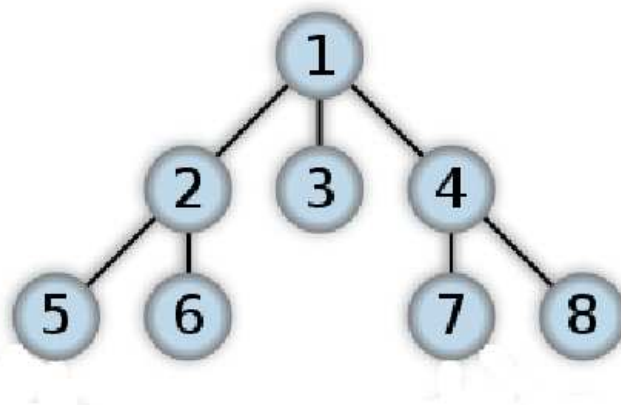


Figura 1.11: Grafo simples, para exemplificar a estrutura de lista de vizinhança [32].

Vizinhos	Vizinho 0	Vizinho 1	Vizinho 2
Vértice			
1	2	3	4
2	1	5	6
3	1	Não tem	Não tem
4	1	7	8
5	2	Não tem	Não tem
6	2	Não tem	Não tem
7	4	Não tem	Não tem
8	4	Não tem	Não tem

Tabela 1.1: Tabela que representa a estrutura de vizinhança do grafo da figura (1.11).

Poderíamos desenvolver de modo análogo ao que foi feito anteriormente a lista de conectividade de uma rede cúbica. Sabemos que cada elemento na rede cúbica possui 6 ligações. A vizinhança de um elemento i seria a mesma escrita para o caso quadrado (se trocamos L^2 por L^3), sendo necessário apenas acrescentar os vizinhos $(i + L^2)\%L^3$ e $(i - L^2 + L^3)\%L^3$. De modo geral, se estamos lidando com uma estrutura hipercúbica de d dimensões, cada elemento desta rede possuiria $2d$ ligações. A generalização para os vizinhos de um elemento i numa rede hipercúbica é "straightforward". Na verdade, no caso d dimensional, basta conectar todo elemento i a $(i + 1)\%L^d$, $(i + L)\%L^d$, \dots , $(i + L^{d-1})\%L^d$, se tomamos o cuidado de fazer com que cada um destes vizinhos $(i + L^j)\%L^d$ (onde $j = 0, 1, \dots, d - 1$) também seja vizinho de i .

De posse desta generalização para uma rede hipercúbica em d dimensões, poderíamos tomar o limite de uma estrutura hipercúbica à medida que $d \rightarrow \infty$. Uma das implicações na física deste sistema, chamado agora de sistema de dimensão infinita, é o de que as contribuições devidas a hiperárea não podem ser negligenciadas com respeito as contribuições devidas ao hipervolume. Os seguintes passos ilustram esta característica, tomando como exemplo uma hiperesfera num espaço euclidiano de d dimensões e de raio R ¹⁰:

$$\begin{aligned}
S &\propto R^{d-1} & V &\propto R^d & \therefore \\
R &\propto S^{1/(d-1)} & R &\propto V^{1/d} & \therefore \\
S^{\frac{1}{d-1}} &\propto V^{\frac{1}{d}} & \rightarrow & S \propto V^{\frac{d-1}{d}} = V^{1-1/d} & (1.17)
\end{aligned}$$

¹⁰Para mais detalhes acerca desta peculiaridade, indicamos [22].

Existem outros tipos de grafos que exibem uma dimensionalidade infinita (no sentido de que há tantos elementos na "superfície" quanto elementos no "volume"), como por exemplo estruturas do tipo árvore, sendo a árvore de Cayley o exemplo mais representativo. A figura (1.12) ilustra uma árvore de Cayley com conectividade $z = 3$. Grafos do tipo árvore possuem dimensionalidade infinita, porque o número de elementos cresce exponencialmente conforme acrescentamos uma nova geração á árvore. Isso faz com que o número de elementos pertencentes a uma nova geração seja sempre comparável ao número de elementos somados das gerações anteriores.

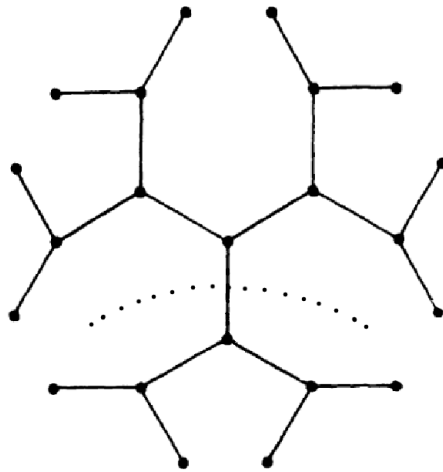


Figura 1.12: *Árvore de Cayley, com conectividade $z = 3$. A árvore binária corresponde a um dos ramos desta árvore de Cayley (como a parte abaixo da linha pontilhada) [1].*

Já que derivamos a relação de vizinhança para estruturas cúbicas, podemos perguntar qual seria a lista de adjacência para uma árvore. Para escrever esta relação, tomemos como exemplo a árvore binária (ver figura (1.12)). Se numeramos os elementos da árvore binária da mesma forma que o indicado na figura (1.13), um algoritmo bastante simples que nos permite gerar a lista de adjacência para o elemento i é conectar i com $2i$ e com $2i + 1$ (e vice-versa, isto é, conectar $2i$ e $2i + 1$ com i).

Uma característica marcante (e que nos permitirá, como veremos a seguir, resolver o problema de percolação para esta árvore) das estruturas do tipo árvore é a ausência de loops, isto é, dados dois elementos quaisquer do grafo há somente um caminho que os conecte (não há formação de triângulos).

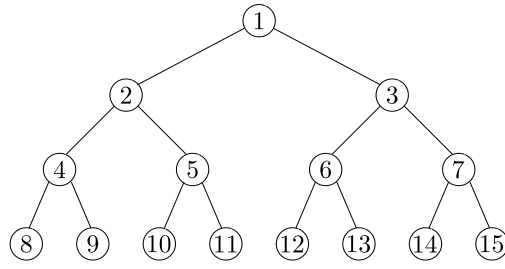


Figura 1.13: *Árvore binária enumerada, para ilustrar o algoritmo que gera a lista de adjacência.*

Estudaremos o problema de percolação por ligações na árvore de Cayley. O argumento que nos permite obter o valor de p_c é bastante simples. Primeiro, levemos em consideração que estamos interessados na árvore de Cayley macroscópica, isto é, infinita. Podemos escolher um sítio qualquer da árvore como "root node". Queremos saber se existe um cluster de tamanho infinito que passe por este "root node". Partindo deste elemento, há z novos elementos a serem atingidos. De cada um dos z elementos alcançados, há $z - 1$ novos sítios para onde podemos ir (descontamos uma das ligações, uma vez que ela nos conduz a um sítio pelo qual já passamos). O mesmo acontece repetidamente. Uma vez que um sítio é alcançado, há mais $z - 1$ novos sítios para onde podemos prosseguir sem retroceder. A probabilidade com que cada ligação existe vale p . Como queremos sempre avançar (uma vez que queremos que haja algum cluster que atravesse todo o sistema), pelo menos uma dessas $z - 1$ novas ligações deve estar presente. Se não for assim, encontraremos, em média, cada vez menos ligações possíveis (e o decréscimo é exponencial, similarmente ao que ocorre na equação (1.10)). Se $p(z - 1)$ for maior que um, poderá haver um caminho que conecte o "root node" ao infinito (poderá, uma vez que podemos escolher um "root node" que pertence a um cluster finito). Isto nos permite concluir que ¹¹

$$p_c = \frac{1}{z - 1}. \quad (1.18)$$

A equação (1.18) nos diz que se p for maior que p_c , haverá um cluster de tamanho infinito. Entretanto, isto não significa que todo sítio pertence a este cluster infinito (similarmente ao que ocorre na figura (1.3), onde vemos que existe um cluster que atravessa todo o sistema, e ainda

¹¹O fato de o "root node" conduzir a z novos vizinhos não altera em nada a derivação de p_c obtida aqui, uma vez que estamos estudando a árvore de Cayley infinita.

existem furos que não pertencem a este cluster). Esta informação é dada por P_∞ . Claramente, P_∞ vale 0 para $p < p_c$, uma vez que não existe um cluster infinito antes disso.

Para derivar a grandeza P_∞ para na árvore de Cayley com conectividade $z = 3$, vamos considerar agora o problema de percolação por sítios nesta estrutura (como a árvore de Cayley não apresenta loops, não há diferença entre a percolação por sítios ou ligações. Neste caso consideraremos a percolação por sítios por que os argumentos utilizados são mais simples neste caso). Seja Q a probabilidade de que um sítio não pertença ao cluster de tamanho infinito através de uma de suas ligações¹². Para que um elemento não esteja conectado ao cluster de tamanho infinito através de uma de suas ligações, ou esta ligação não existe (probabilidade dada por $1 - p$), ou, se existir, nenhum dos outros dois vizinhos pode estar conectado ao cluster infinito (probabilidade que vale pQ^2). Isto implica que Q deve satisfazer a seguinte relação :

$$Q = 1 - p + pQ^2 . \quad (1.19)$$

Resolvendo esta equação, obtemos $Q = 1$ ou $Q = (1 - p)/p$. Agora, se um elemento está ativo (o que ocorre com probabilidade p), ou ele pertence ao cluster de tamanho infinito (probabilidade dada por P_∞) ou não pertence (que corresponde a pQ^3). Isto implica que

$$p = P_\infty + pQ^3 \rightarrow P_\infty = p - pQ^3 = p(1 - Q^3) \quad (1.20)$$

e finalmente, obtemos, para $Q = (1 - p)/p$

$$P_\infty = p - \frac{(1 - p)^3}{p^2} = \frac{2p^3 - 3p^2 + 3p - 1}{p^2} = \frac{2(p - 1/2)(p^2 - p + 1)}{p^2} \quad (1.21)$$

(para $Q = 1$, $P_\infty = 0$, o que corresponde a $p < p_c$).

¹²Esta probabilidade é igual para todos os elementos, uma vez que no sistema infinito, todos os elementos são equivalentes.

Capítulo 2

Geometria Hiperbólica

"Oh! Deus. Eu poderia viver recluso numa casca de noz e me considerar rei do espaço infinito."

W. Shakespeare, "Hamlet, Ato II, Cena 2"

2.1 Axiomas da geometria

É fundamental, uma vez que estamos discutindo geometria hiperbólica, que apresentemos os postulados da geometria. Aos olhos de um estudante atual, a descrição axiomática de uma teoria pode não ser nenhuma novidade. Na física, por exemplo, temos uma descrição termodinâmica que segue essa linha, como feito no clássico livro *Introduction to thermodynamics*, do autor Callen, ou a famosa abordagem axiomática da mecânica quântica.

O que talvez o leitor não saiba é que do ponto de vista histórico, a ideia de construir um corpo axiomático sólido, para em seguida derivar os teoremas a partir destes postulados, inicia-se com o pai da lógica, Aristóteles¹. Por muito tempo, essa maneira axiomática de se fundamentar uma teoria, seja ela física ou matemática, foi um paradigma, por vezes levado ao extremo, e sem dúvida, a geometria euclideana é uma referência de teoria axiomática. Um exemplo bastante curioso, quase patológico, é o do geômetra do século XIX chamado Steiner, que chegava ao ponto de ministrar, por diversas vezes, suas aulas no escuro, para evitar que seus estudantes

¹No caso específico da geometria, o primeiro a desenvolver uma geometria axiomática foi o filósofo grego Eudoxo, mas ao que parece seus escritos foram perdidos, e infelizmente tudo que se sabe dele deve-se a outras fontes.

utilizassem suas observações do mundo como ferramenta em seus argumentos geométricos.

De todo modo, esperamos que o leitor esteja familiarizado com essa abordagem axiomática. Assim, dispomos a seguir os 5 axiomas da geometria euclideana, que é uma geometria plana (bidimensional)²:

1. Um segmento de reta pode ser criado unindo-se dois pontos quaisquer.
2. Um segmento de reta pode ser estendido indefinidamente, de modo a formar uma linha reta.
3. Dado qualquer segmento de reta, uma circunferência pode ser formada, usando-se o segmento de reta como o raio da circunferência, e uma das extremidades do segmento de reta como centro da circunferência.
4. Todos os ângulos retos são iguais entre si.
5. Postulado das paralelas: Dada uma reta e um ponto que não pertença a esta reta, só existe uma única outra reta que passe por este ponto e que não intercepte a primeira reta, não importando o quanto elas se prolonguem. Chamamos a este par de retas de retas paralelas.

Devemos discutir agora um aspecto fundamental referente ao quinto postulado, que está no cerne do desenvolvimento da geometria de Lobachevsky (nome do matemático russo que desenvolveu a geometria hiperbólica. É o nome russo de nossa geometria).

Por muito tempo, acreditava-se que seria possível derivar o 5 postulado a partir dos 4 primeiros, de modo que o postulado das paralelas não seria na verdade um axioma, e sim um teorema. Muitos esforços foram feitos nessa direção, todos eles em vão. Hoje sabe-se que o quinto postulado não pode ser derivado dos quatro primeiros, e mais ainda, modificando o seu enunciado, obtemos outras formas de geometria³. A história dessas descobertas é fascinante. O leitor que se interessa por essas curiosidades é indicado a ler a referência [3], capítulos 1 (começo) e 15.

²Geometria euclideana não é necessariamente a geometria de Euclides. O capítulo 1 da referência [3] afirma que o que hoje chamamos de geometria euclideana é na verdade uma reformulação da geometria do filósofo grego, uma vez que, de acordo com a mesma referência, os axiomas da geometria desenvolvida por ele são incompletos, e suas demonstrações não eram exatamente perfeitas. Deste modo, a rigor, geometria euclideana seria diferente da geometria de Euclides. Para evitar esses detalhes minuciosos, passaremos a chama-las sem distinção.

³Excetuando-se o quinto postulado e mais alguns detalhes que não vem ao caso aqui, existe um conjunto de axiomas e teoremas que se aplicam a todas estas formas de geometria. Por conta dessa generalidade, chamamos este conjunto de geometria absoluta.

Estamos interessados em estudar o problema de percolação na geometria hiperbólica bidimensional, uma vez que as estruturas geradas nesta geometria curiosamente exibem a existência de duas probabilidades críticas, como demonstrado em [16]. Uma vez esclarecido que estamos interessados na geometria hiperbólica bidimensional, primeiramente, vamos definir o(s) modelo(s) de geometria hiperbólica com os quais vamos trabalhar. Por modelo, seguimos de perto a definição utilizada em [2], isto é, escolhemos um "lugar" onde representaremos as entidades geométricas e "escolhemos" a métrica do espaço (uma definição de métrica será dada um pouco mais a frente). Existem diversos modelos utilizados na literatura, mas optamos por utilizar basicamente apenas dois deles: o modelo de Meio Plano Superior e o disco de Poincaré.

2.2 O modelo de Meio Plano Superior

O modelo de Meio Plano Superior leva este nome por que escolhemos apenas a metade superior do plano cartesiano para a sua representação, a parte positiva do eixo y . No plano complexo, isso seria equivalente a dizer que o modelo de meio plano superior consiste no conjunto dos números complexos tais que $Im(z) > 0$, de tal forma que o eixo real não está incluído neste espaço. O plano complexo será constantemente utilizado a partir de agora.

Vamos escolher a seguinte abordagem neste trabalho: partiremos da métrica do espaço hiperbólico no Meio Plano Superior, isto é, da noção de distância entre dois pontos pertencentes ao espaço e derivaremos quais são as geodésicas. Uma outra abordagem consiste em escolher as geodésicas e delas derivar a métrica do modelo de Meio Plano Superior. Para ver esta segunda abordagem, o leitor é indicado a ler [2].

Façamos agora então o esforço imaginativo de conceber o mundo de seres que habitam em nosso espaço hiperbólico bidimensional, na região em que $Im(z) > 0$. Por algum motivo, suponhamos que o eixo x seja infinitamente frio, e a medida em que um habitante desta terra lisérgica se aproxime do eixo real, a queda na temperatura o faça contrair-se. Devido a esta imposição, seria impossível aos habitantes desta terra à la Alice no País das Maravilhas atingirem o eixo real, uma vez que a redução em seus tamanhos faria com que a distância dos mesmos do eixo das abcissas fosse ficando cada vez maior. A figura (2.1) ilustra um pouco o cotidiano destes pobres diabos.

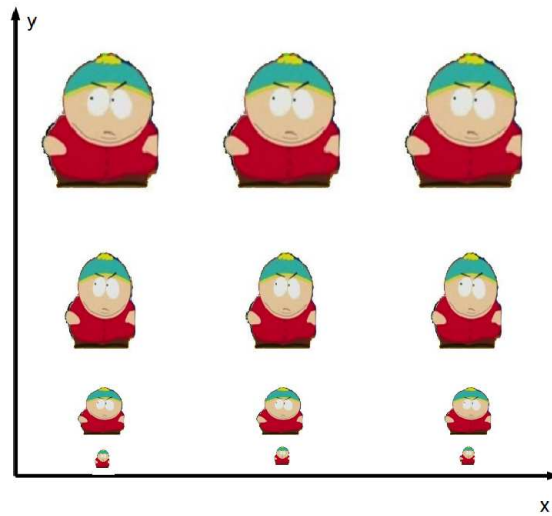


Figura 2.1: *Cartman dando uma volta no espaço hiperbólico: ao movimentar-se na direção vertical, ele se comprime. Nada ocorre caso ele ande na direção horizontal.*

Deste modo, podemos escrever, de maneira um pouco imprecisa, que a distância hiperbólica é dada por:

$$\text{Distância Hiperbólica} = \frac{\text{Distância Euclideana}}{y}. \quad (2.1)$$

Agora, fazendo uso de cálculo infinitesimal, sabemos que a distância euclideana infinitesimal ds entre os pontos $P(x, y)$ e $Q(x + dx, y + dy)$ é dada por

$$ds = \sqrt{dx^2 + dy^2}. \quad (2.2)$$

e finalmente, definimos de maneira mais formal qual a maneira de calcular o comprimento hiperbólico de um arco que seja definido por uma curva γ arbitrária:

$$s = \int_{\gamma} \frac{\sqrt{dx^2 + dy^2}}{y} = \int_{\gamma} \frac{|dz|}{y} \quad (2.3)$$

onde $dz = dx + idy$ (lembrando aqui que $|z|^2 = z\bar{z}$, sendo \bar{z} o complexo conjugado do número complexo z , definido como $\bar{z} \equiv x - iy$). Apesar de a integral acima não ser, de maneira geral, facilmente solúvel do ponto de vista analítico, não há com o que se preocupar; ela pode ser

calculada com precisão arbitrária utilizando algum método numérico, como por exemplo, a regra de Simpson.

Vamos agora provar, que uma vez definida esta geometria, as geodésicas do plano hiperbólico ou são arcos de semicírculo euclidianos, centrados no eixo real, ou segmentos de reta euclidianos paralelos ao eixo x .

Sejam $P(x_1, y_1)$ e $Q(x_2, y_2)$ dois pontos quaisquer do plano hiperbólico e g uma curva qualquer que os una. Seja $C(c, 0)$ o ponto em que o bissetor perpendicular a PQ intercepta o eixo x . Colocando um sistema de coordenadas polar centrado em C , o segmento de geodésica g será parte de uma dada curva $r = f(\theta)$. Com este novo sistema de coordenadas, os pontos $P(x_1, y_1)$ e $Q(x_2, y_2)$ serão agora $P(r_P, \alpha)$ e $Q(r_Q, \beta)$ (ver figura 2.2), e um ponto $R(x, y)$ fica na forma

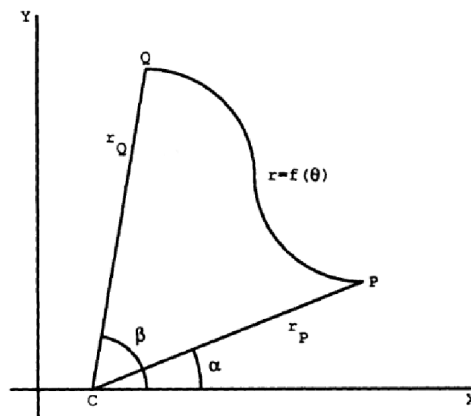


Figura 2.2: Os pontos P e Q unidos por uma curva g qualquer. Impondo que o comprimento do arco g seja o menor possível, obtemos a equação da geodésica que liga P e Q [3].

$$x = c + r \cos \theta$$

$$y = r \sin \theta \tag{2.4}$$

de onde tiramos que

$$\begin{aligned} \frac{dx}{d\theta} &= \frac{dr}{d\theta} \cos \theta + r \frac{d \cos \theta}{d\theta} = r' \cos \theta - r \sin \theta, \\ \frac{dy}{d\theta} &= \frac{dr}{d\theta} \sin \theta + r \frac{d \sin \theta}{d\theta} = r' \sin \theta + r \cos \theta. \end{aligned} \tag{2.5}$$

Temos então que

$$\begin{aligned}
 dx^2 + dy^2 &= (r' \cos \theta - r \sin \theta)^2 d\theta^2 + (r' \sin \theta + r \cos \theta)^2 d\theta^2 \\
 &= [r'^2(\cos^2 \theta + \sin^2 \theta) + 2rr'(\cos \theta \sin \theta - \sin \theta \cos \theta) + r^2(\cos^2 \theta + \sin^2 \theta)]d\theta^2 \\
 &= (r'^2 + r^2)d\theta^2.
 \end{aligned} \tag{2.6}$$

Agora, substituímos os resultados acima na equação que nos permite obter a distância hiperbólica:

$$\begin{aligned}
 \int_{\alpha}^{\beta} \frac{\sqrt{r'^2 + r^2}}{r \sin \theta} d\theta &\geq \int_{\alpha}^{\beta} \frac{\sqrt{r^2}}{r \sin \theta} d\theta = \int_{\alpha}^{\beta} \csc \theta d\theta \\
 &= \ln \frac{\csc \beta - \cot \beta}{\csc \alpha - \cot \alpha}.
 \end{aligned} \tag{2.7}$$

O resultado acima é o comprimento hiperbólico de um arco de circunferência euclideana (uma vez que $r' = dr/d\theta = 0$), centrada no eixo real! Isso implica que arcos de circunferência cujos centros se localizam no eixo real são geodésicas (para verificar o que acabamos de afirmar, basta escrever qual o comprimento hiperbólico de um arco de circunferência centrado na origem, utilizando a equação (2.3)). Está implícito nesta demonstração que as coordenadas x_1 e x_2 dos dois pontos acima são diferentes. Para o caso em que $x_1 = x_2$, façamos agora com que a geodésica g seja dada pela equação $x = f(y)$. Deste modo, temos que $dy = \frac{dy}{dx} dx = f' dx$. Substituindo esta expressão na equação que nos fornece a distância entre dois pontos, temos

$$\int_{y_1}^{y_2} \frac{\sqrt{f'^2 dy^2 + dy^2}}{y} = \int_{y_1}^{y_2} \frac{\sqrt{f'^2 + 1}}{y} dy \geq \int_{y_1}^{y_2} \frac{dy}{y} = \ln \frac{y_2}{y_1} \tag{2.8}$$

Não é difícil mostrar que esta é a equação que fornece a distância entre dois pontos separados por uma reta vertical no modelo de meio plano superior (o que é consistente com o fato de que obtemos esta expressão fazendo $f' = dy/dx = 0$). Basta fazer com que γ seja igual a uma reta vertical com extremidades y_1 e y_2 , e se convencer de que a integral que fornece a distância hiperbólica entre estes pontos tem exatamente o mesmo valor obtido acima.

A figura (2.3) possui alguns exemplos diferentes de geodésicas no modelo do meio plano

superior.

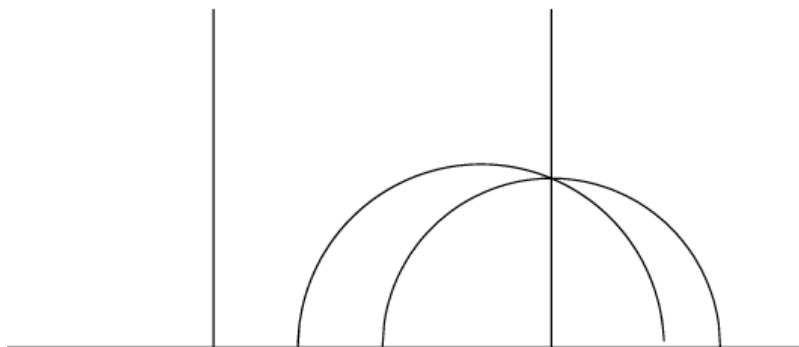


Figura 2.3: *Alguns exemplos de geodésicas no meio plano superior [2].*

O motivo de as geodésicas não serem necessariamente retas (ao menos de uma perspectiva euclideana) pode ser entendido pictoricamente através da seguinte analogia com o espaço esférico: qualquer representação plana de um mapa mundi num plano necessariamente sofre deformações; é o preço que se paga por tentar representar uma geometria "estranha" num espaço bidimensional euclideano. De qualquer forma, visto por habitantes que vivessem num mundo hiperbólico, as geodésicas pareceriam linhas retas, assim como as nossas nos parecem. De fato, essencialmente, a geometria hiperbólica é localmente euclideana, isto é, somente observando as propriedades globais de uma geometria podemos determinar se ela é euclideana ou hiperbólica. Para mais detalhes da geometria esférica, ver [3], capítulo 11).

Finalmente estamos agora em condições de apreciar como este aspecto bastante interessante da geometria hiperbólica bidimensional, o fato de as geodésicas serem ou arcos de circunferência euclideana centrados na origem, ou linhas retas verticais, relaciona-se com o quinto postulado da geometria de Euclides. Vejamos por exemplo a figura (2.4).

Esta figura é um exemplo patente que ilustra como a geometria hiperbólica viola claramente o postulado das paralelas de Euclides. Dada uma geodésica qualquer e um ponto que não pertença a ela, existem infinitas outras geodésicas que passem por este ponto sem tocar na primeira. A nós, basta uma "demonstração" visual deste fato; para uma demonstração mais rigorosa, indicamos [3].

Estamos particularmente interessados no problema de percolação aplicado às estruturas geradas pelo recobrimento regular do espaço hiperbólico, que como muitos outros aspectos desta geometria, exhibe propriedades interessantíssimas, como a existência de uma segunda probabili-

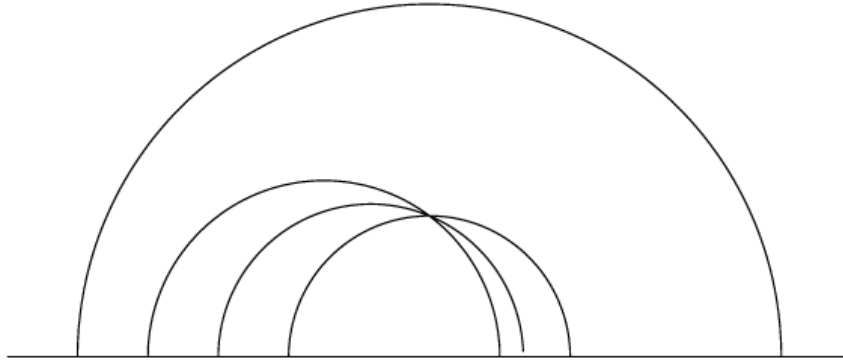


Figura 2.4: *Quatro geodésicas no meio plano superior model. Podemos ver que para um ponto que não toque a mais externa, existem diversas (na verdade, infinitas) outras geodésicas que passem por este ponto e que não tocam a mais externa [2].*

dade crítica, como já citado anteriormente. A visualização do recobrimento é muito mais ilustrativa e esclarecedora no contexto do disco de Poincaré. A passagem do meio plano superior ao disco de Poincaré é feita de modo bastante natural uma vez que entendamos um pouco mais a fundo os conceitos de transformações de Möbius e movimentos rígidos. É o que pretendemos fazer agora.

2.3 Transformações de Möbius e Movimentos hiperbólicos rígidos

Estamos particularmente interessados nos movimentos hiperbólicos rígidos, que nada mais são do que as transformações que preservam comprimentos. A aplicação que faremos destas transformações será o de recobrir o espaço hiperbólico e explorar computacionalmente a física desta geometria. De uma maneira geral, uma transformação de Möbius é uma transformação que sempre pode ser escrita na forma

$$f(z) = \frac{az + b}{cz + d}, \quad (2.9)$$

onde a , b , c e d podem ser quaisquer números complexos, contanto que $ad - bc \neq 0$ ⁴. As principais características destas transformações são o fato de ela serem rígidas, de preservarem

⁴O motivo desta desigualdade ser uma condição necessária para a existência de uma transformação de Möbius está relacionado à Álgebra Linear. Esta transformação, descrita de forma sintética usando esta notação complexa, representa uma matriz bidimensional, que deve ter seu determinante não nulo. Para mais detalhes, ver [3].

ângulos entre geodésicas e de transformarem geodésicas em geodésicas. Cabe neste ponto definir ângulos neste contexto, uma vez que linhas retas não são necessariamente retas. Dadas duas geodésicas que se cruzam num dado ponto D , o ângulo formado entre as duas é dado pelo ângulo euclideo formado pelas duas linhas retas euclideanas paralelas às geodésicas neste ponto D . Esta definição fica menos obscura observando uma figura ilustrativa, como na figura (2.5).

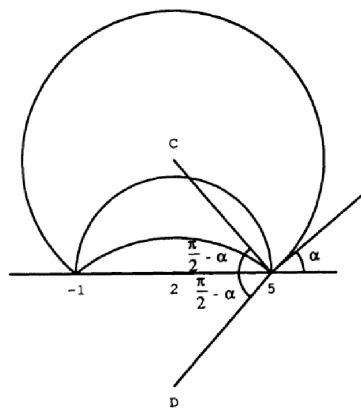


Figura 2.5: A definição de ângulos é a mesma utilizada no espaço euclideo, com a adição das retas tangentes às curvas no ponto de interseção [3].

Continuando então, uma vez que apliquemos a mesma transformação de Möbius a ambos os arcos de geodésicas da figura acima, obteremos outros dois arcos de geodésicas, que possuirão os mesmos comprimentos e continuarão fazendo o mesmo ângulo .

Para encerrar esta discussão, um fato a respeito das transformações de Möbius que nos será extremamente útil é o de que este tipo de transformação leva circunferências noutras circunferências ou em linhas euclideanas retas, e leva linhas euclideanas retas em outras linhas euclideanas retas ou em circunferências.

2.4 Inversões

Na direção do que foi anteriormente discutido, nos será particularmente útil aprender a fazer a reflexão no plano hiperbólico, uma vez que esta é a transformação fundamental, no sentido de que qualquer outra transformação pode ser decomposta num conjunto de reflexões (ver a figura 2.6)

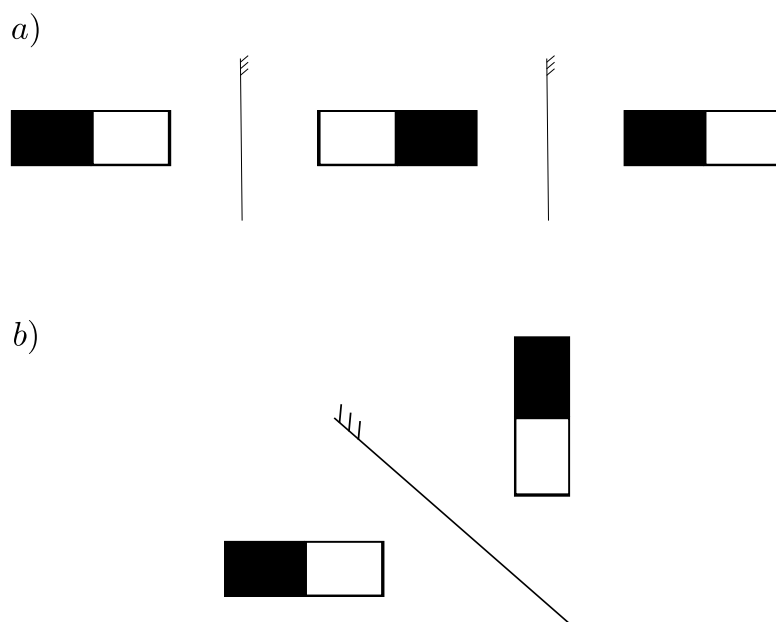


Figura 2.6: *Alguns casos euclidianos. Em (a) uma translação obtida através de duas reflexões seguidas. Em (b), uma rotação de $\pi/2$ decomposta numa reflexão. O teorema 5.6 de [3] assegura que todo movimento rígido no espaço hiperbólico pode ser decomposto em no máximo 3 inversões.*

Entretanto, esta transformação exibe, assim como outras características do espaço hiperbólico, algumas peculiaridades. Por exemplo, como fazer a reflexão de um ponto numa linha reta hiperbólica que seja um arco de circunferência euclideana? Apesar de parecer um tanto quanto complicado, a solução deste problema é bastante conhecida pelos físicos, sobretudo os que já cursaram algum curso de eletromagnetismo. Basta se lembrar do clássico problema de uma esfera aterrada de raio r , em que se coloca uma carga q a uma distância d da mesma, e se deseja calcular o potencial elétrico em todo o espaço. Resolvemos isto fazendo uso do método das imagens. Pode parecer um tanto quanto misteriosa a maneira de se obter a distância onde se deve colocar a carga imagem q' . Mas esta é na verdade a distância que seria onde se localiza a imagem da carga q , sendo feita a inversão (em [5], nas referências do capítulo 2, há uma série de referências que mostram a relação entre o método das imagens e a inversão. Ao que parece, Lord Kelvin e o próprio Maxwell faziam uso da inversão na resolução do método das imagens...).

A distância onde se deve colocar a carga imagem é $r' = \frac{R^2}{r}$, sendo R o raio da esfera. Desse modo, vamos definir que a inversão de um ponto r numa circunferência de raio R é o ponto

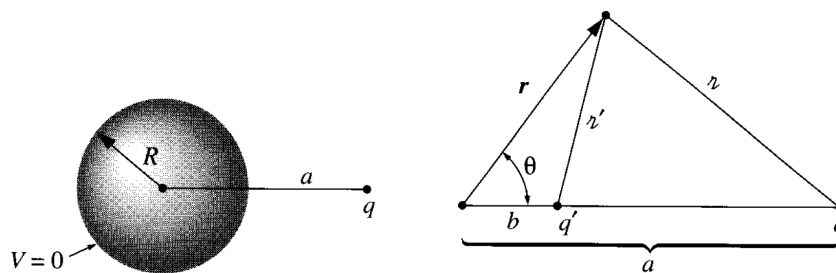


Figura 2.7: *Problema do método das imagens; deseja-se calcular o potencial de uma configuração correspondente a uma esfera condutora aterrada e uma carga q , localizada a uma distância r fora da esfera [33].*

r' dado pela mesma fórmula $r' = \frac{R^2}{r}$, e que se encontra na reta que une os dois pontos ([3] ver a figura 2.8). Essa definição é arbitrária (como toda definição), mas esperamos ter dado alguma motivação para o leitor físico através da utilização do problema clássico de método das imagens.

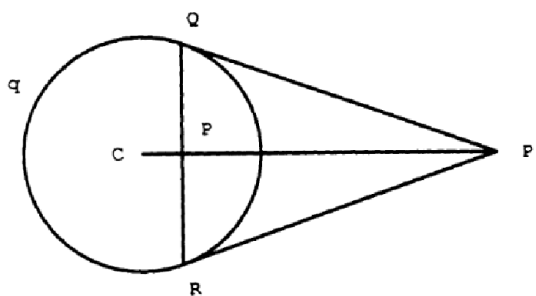


Figura 2.8: *O produto do segmento CP pelo segmento CP' deve ser igual ao raio k ao quadrado: $CP \cdot CP' = k^2$ [3].*

Feita então essa discussão, passemos para o segundo modelo de espaço hiperbólico discutido nesta dissertação, a dizer, o modelo do disco de Poincaré, que a despeito das diferentes características com relação ao meio plano superior, é particularmente útil na visualização do recobrimento do espaço hiperbólico.

2.5 Disco de Poincaré

Primeiro, consideremos a seguinte transformação de Möbius:

$$U(z) = \frac{iz + 1}{z + i} \quad (2.10)$$

Esta é a transformação que leva toda a parte superior do plano complexo num disco unitário centrado na origem. Para que nos convençamos disto, primeiro, constatamos que $U(0) = -i$, $U(1) = 1$ e que $U(-1) = -1$. Feito isto, há um teorema que garante que se uma transformação de Möbius atua sobre uma linha reta euclideana ou sobre um círculo, o resultado desta operação será também uma linha reta euclideana ou um círculo ⁵. A ação de $U(z)$ sobre os três pontos acima os levou num círculo de raio unitário centrado na origem. Esta transformação é a que leva todo o meio plano superior no novo modelo do disco de Poincaré. É um mero exercício algébrico mostrar que a transformação inversa de $U(z)$ que leva o disco de Poincaré de volta no meio plano superior, que chamaremos de $V(z)$, é dada por

$$V(z) = \frac{iz - 1}{-z + i} \quad (2.11)$$

Agora, de certo modo, já encerramos nosso estudo do disco de Poincaré, uma vez que qualquer transformação que saibamos fazer no meio plano superior pode ser feita no "unit disk" (outro nome do disco de Poincaré) fazendo uso de $V(z)$ e de $U(z)$, através da composição

$$f* = U \circ f \circ V, \quad (2.12)$$

sendo $f*$ a transformação no unit disk, e f a sua equivalente no meio plano superior. O que a composição anterior significa é: levamos todo ponto do unit disk para o meio plano superior utilizando a equação (2.11), onde sabemos a forma de f , aplicamos f , e enfim retornamos ao unit disk, obtendo assim a transformação $f*$ desejada.

Algo bastante interessante (ao menos para um estudante de cálculo complexo ávido por algebrismos) é a derivação da métrica do disco de Poincaré, utilizando a transformação $V(z)$. Se $z = x + iy$ é um ponto qualquer no interior do disco de Poincaré e $w = u + iv$ é o ponto equivalente no meio plano superior, queremos obter a métrica no disco de Poincaré (que envolve

⁵Na verdade, trata-se de um corolário, o corolário (13.5) de [3].

du^2 e dv^2) uma vez que conhecemos a métrica do modelo de meio plano superior (que envolve dx^2 e dy^2). Assim,

$$w = V(z) = \frac{iz - 1}{-z + i}. \quad (2.13)$$

Pondo $x + iy$ no lugar de z na equação anterior e efetuando os passos necessários, obtemos

$$\begin{aligned} u &= \frac{2x}{x^2 + (y - 1)^2} \text{ e} \\ v &= \frac{1 - x^2 - y^2}{x^2 + (y - 1)^2}, \end{aligned} \quad (2.14)$$

e como estamos interessados em du^2 e dv^2 (uma vez que a métrica envolve termos deste tipo), devemos calcular a diferencial das expressões acima, quadrá-las e substituir na equação que nos fornece a distância entre os elementos no meio plano superior, para enfim obter o equivalente no unit disk. As diferenciais das equações acima são grandes, sobretudo elevadas ao quadrado, mas lembremos que estas funções devem obedecer as condições de Cauchy-Riemann (isto é, $\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y}$ e $\frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial v}{\partial x}$, por que estas transformações são funções analíticas), o que reduz bastante o nosso esforço. Após alguns passos, finalmente obtemos a métrica no modelo do disco de Poincaré,

$$ds_{pd}^2 = \frac{4(dx^2 + dy^2)}{(1 - x^2 - y^2)^2}. \quad (2.15)$$

A maneira de obter esta métrica ilustra bem a maneira com que derivamos as grandezas no disco de Poincaré a partir do que já possuímos no meio plano superior. Feito isso finalmente veremos o recobrimento do espaço hiperbólico fazendo uso de polígonos regulares. Uma vez que já sabemos o mapeamento que uma transformação de Möbius faz, que no espaço hiperbólico significa mapear geodésicas em outras geodésicas, já sabemos, de antemão, que as geodésicas no disco de Poincaré são também arcos de circunferência que fazem ângulos de 90 graus com as bordas do disco, ou linhas retas euclidianas que são também perpendiculares ao disco (logo, são necessariamente diâmetros). A figura (2.9) ilustra estas geodésicas.

Antes de finalmente adentrarmos no problema de recobrimento regular no espaço hiperbó-

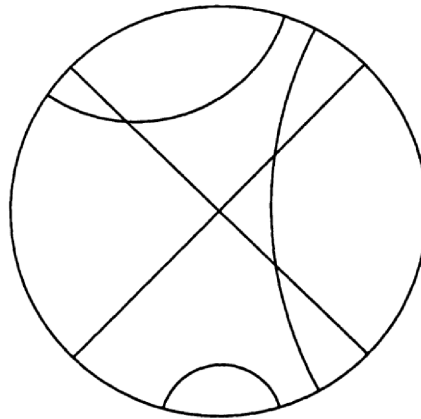


Figura 2.9: Algumas geodésicas no disco de Poincaré. As geodésicas são diâmetros ou arcos de circunferência que fazem ângulos de 90 graus com as bordas do disco [3].

lico, faremos, ainda no modelo de meio plano superior, uma pequena discussão de triângulos e áreas. O motivo de fazermos isto é bastante simples. Todo polígono regular pode ser decomposto em um conjunto de triângulos (ver figura (2.10)), mesmo na geometria hiperbólica.

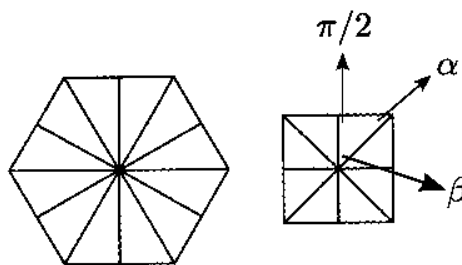


Figura 2.10: Hexágonos e quadrados euclidianos regulares, compostos por triângulos. A mesma decomposição pode ser feita para polígonos hiperbólicos regulares [3].

Desta maneira, é de suma importância que possamos entender um pouco mais profundamente o triângulo hiperbólico.

2.6 Triângulos hiperbólicos

Primeiramente, já adiantaremos algumas particularidades do triângulo hiperbólico. A soma dos seus ângulos, digamos, α , β e γ , sempre é menor do que π . E mais: para quaisquer 3 ângulos α , β e γ , contanto que $\alpha + \beta + \gamma < \pi$, existe um triângulo hiperbólico com esse conjunto de ângulos. Uma série de demonstrações será omitida; para vê-las, recomendamos a leitura de [3].

Abordaremos também o fato de que a área dos triângulos hiperbólicos depende apenas de seus ângulos α , β e γ .

Primeiramente, começamos definindo uma posição padrão para os triângulos hiperbólicos. Diremos que um dado triângulo está na posição padrão se os seus vértices A , B e C tiverem coordenadas $A = A(0, 1)$, $B = B(0, k)$ e $C = C(s, t)$, onde $k > 1$ e $s > 0$.

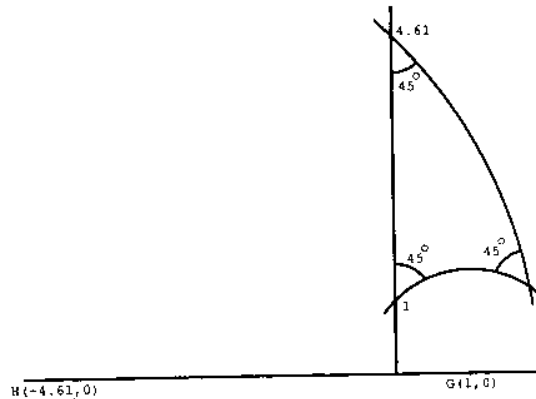


Figura 2.11: Um típico triângulo na posição padrão. Neste caso, todos os ângulos deste triângulo hiperbólico são iguais a $\frac{\pi}{4}$ [3].

Pode-se provar que qualquer triângulo pode ser levado por um conjunto de movimentos hiperbólicos rígidos para a posição padrão. A demonstração desse fato, embora não seja complicada, é para nós um tanto quanto desinteressante. Caso o leitor deseje vê-la, é indicado a ler o começo do capítulo 6 de [3]. Deste modo, introduzimos a posição padrão por comodidade, uma vez que algumas das demonstrações aqui realizadas utilizam triângulos nesta posição.

Não iremos demonstrar aqui que dados α , β e γ como sendo os ângulos de um triângulo hiperbólico, $\alpha + \beta + \gamma < \pi$, por que esta demonstração contém uma série de pequenos detalhes, e apesar de não ser complicada, envolve um número razoável de passos.

Na demonstração do fato de que para $\alpha + \beta + \gamma < \pi$, α , β e γ correspondem aos ângulos de algum triângulo hiperbólico, o livro [3] nos deu as pistas necessárias para a construção de um triângulo hiperbólico com os ângulos α , β e γ desejados, na posição padrão. O método consiste no seguinte: uma vez que se especifica os ângulos do triângulo, impõe-se quais serão as geodésicas que constituirão os seus lados. Como podemos ver da figura (2.11), um dos lados é composto por uma geodésica vertical que coincide com o eixo y . O triângulo na posição padrão sempre é formado por esta geodésica, e por outras duas geodésicas curvas, uma com

centro na parte positiva do eixo dos x , e outra na parte negativa. A imposição dos ângulos amarra onde estão os centros e quais são os raios das circunferências que correspondem as geodésicas curvas através de fórmulas simples (que podem ser vistas no capítulo 6 de [3]).

A figura (2.12) corresponde a um triângulo gerado desta maneira, com ângulos $\alpha = \beta = \gamma = \frac{\pi}{4}$.

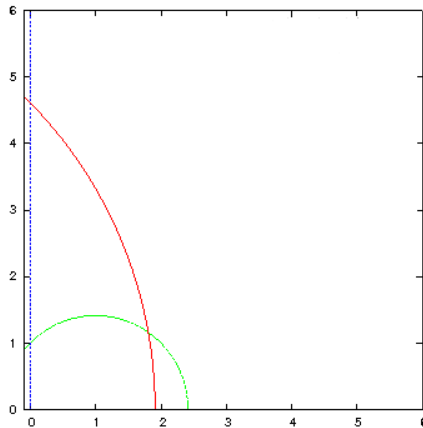


Figura 2.12: Um típico triângulo na posição padrão, gerado no programa visualizador de gráficos gnuplot. Para que a comparação pudesse ser feita, os ângulos são os mesmos da figura 2.11.

Finalmente, para encerrar esta discussão acerca dos triângulos hiperbólicos, vamos definir o conceito de área no meio plano superior, e aplica-la em específico para o triângulo hiperbólico.

2.7 Área Hiperbólica

Embora não seja tão fácil definir o conceito de área no contexto de geometria hiperbólica, uma maneira de fazer isto que é simples e bem sucedida é através de uma integral. Primeiro, recordemos que no contexto euclideano, a área de uma região R qualquer pode ser definida como ⁶

$$A_E = \int \int_R dx dy. \quad (2.16)$$

De maneira análoga ao que foi feito quando introduzimos o meio plano superior, apenas argumentaremos que simples substituições como $dx \rightarrow \frac{dx}{y}$ e $dy \rightarrow \frac{dy}{y}$ resolvem o problema, uma

⁶Existem outras definições de área euclideana. No capítulo 7 de [3] outras definições de área são apresentadas.

vez que essas substituições aparecem devido a métrica do modelo do meio plano superior. Novamente, pode-se provar que essa nova integral satisfaz uma série de noções que esperamos para o conceito de área (como discutido no capítulo referente a área hiperbólica, em [3]). Podemos escrever então que a área de uma região R no espaço hiperbólico é obtida da seguinte forma:

$$A_H = \int \int_R \frac{dx dy}{y^2} \quad (2.17)$$

Assumindo então que esta integral é a forma correta de se calcular áreas no modelo de meio plano superior, apliquemos então esta equação para enfim obter a expressão da área do triângulo hiperbólico. Primeiramente, vamos calcular qual a área da região R na figura (2.13).

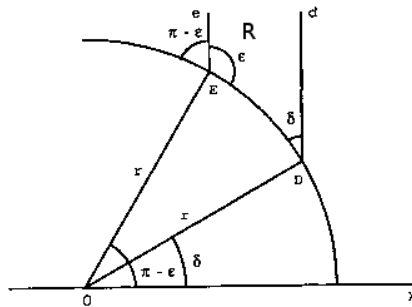


Figura 2.13: Desejamos calcular a área da região R em particular. Esta região é delimitada inferiormente pelo arco de geodésica DE , e não é delimitada superiormente [3].

Da figura, podemos perceber que a região R começa no ponto correspondente a $x = r \cos(\pi - \epsilon)$ e termina no ponto $x = r \cos(\delta)$, uma vez que a circunferência está centrada na origem. Podemos escrever então que a área hiperbólica da região R , denotada aqui por $AH(R)$, é dada por

$$AH(R) = \int \int_R \frac{dx dy}{y^2} = \int_{r \cos(\pi - \epsilon)}^{r \cos(\delta)} \int_{\sqrt{r^2 - x^2}}^{\infty} \frac{dx dy}{y^2} \quad (2.18)$$

Resolvendo primeiramente em y , e em seguida em x , obtemos:

$$\int_{-r \cos(\epsilon)}^{r \cos(\delta)} [(-y^{-1})|_{\sqrt{r^2 - x^2}}^{\infty}] dx = \int_{-r \cos(\epsilon)}^{r \cos(\delta)} = \arcsin(x/r)|_{-r \cos(\epsilon)}^{r \cos(\delta)} \quad (2.19)$$

Por meio de algumas manipulações, podemos mostrar que a integral acima finalmente é igual a:

$$\arcsin(x/r)|_{-r \cos(\epsilon)}^{r \cos(\delta)} = \arcsin(\cos(\delta)) - \arcsin(-\cos(\epsilon)) = \pi - \delta - \epsilon \quad (2.20)$$

Agora, vamos calcular qual o valor da área do triângulo da figura (2.14), que está na posição padrão.

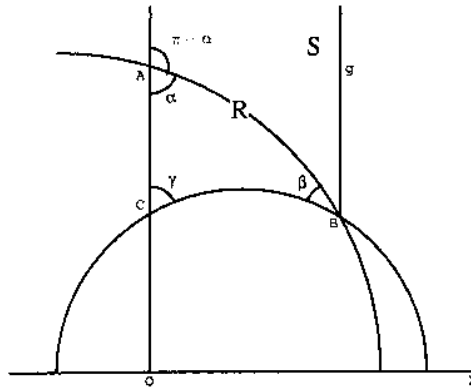


Figura 2.14: A área do triângulo nesta figura é dada pela diferença entre as áreas das regiões R e S . Agora já somos capazes de efetuar esses cálculos [3].

A área do triângulo será a área da região R menos a da região S . Desta forma, temos então, usando o resultado recém calculado:

$$\begin{aligned} AH(\text{triângulo}) &= AH(R) - AH(S) = \pi - \gamma - \angle(g, BC) - [\pi - (\pi - \alpha) - \angle(g, AB)] = \\ &= \pi - \gamma - \alpha - [\angle(g, BC) - \angle(g, AB)] = \pi - (\alpha + \beta + \gamma) \end{aligned} \quad (2.21)$$

Desta maneira, finalmente obtemos o fantástico resultado da área dos triângulos hiperbólicos, o fato de que a area dos mesmos só depende de seus ângulos! A equação (2.21) é a chamada fórmula de Gauss-Bonnet.

De posse deste resultado, tratemos agora do recobrimento regular.

2.8 Recobrimento regular

Estamos particularmente interessados em recobrir o espaço hiperbólico regularmente, quer dizer, utilizar polígonos regulares para compor toda a superfície hiperbólica. Um exemplo de recobrimento regular euclideano são os quadrados que compõem um tabuleiro de xadrez, que cobrem toda a superfície do tabuleiro sem deixar nenhuma "sobra" e que não haja polígonos sobrepostos. Na geometria euclideana, só há 3 modos de fazermos isso, ou usando quadrados, ou triângulos ou hexágonos, como bem sabem os fabricantes de azulejos de banheiro. Podemos entender isto através de uma observação um tanto quanto simples. Voltando a pensar no caso dos quadrados de um tabuleiro de xadrez, sabemos que em cada vértice (excetuando-se os quadrados das bordas) de cada quadrado, há quatro quadrados que se encontram. Como sabemos, os ângulos de um quadrado são todos retos, de modo que são exatamente quatro quadrados que podem se encontrar num determinado vértice (uma vez que uma volta completa constitui um ângulo de 2π). No caso dos triângulos, cada ângulo interno vale $\pi/3$, de modo que existe um número inteiro de triângulos (no caso, 6) que podem se encontrar num determinado vértice de tal maneira que não haverá nenhum espaço em branco, e nem sobreposição de triângulos. O mesmo pode ser feito com hexágonos (onde o número de hexágonos que se encontram em cada vértice vale 3). Mas para qualquer outro polígono euclideano, não há como dispor um número inteiro de um destes polígonos de forma a encaixá-los num vértice sem sobrar espaço ou um polígono sobrepor-se a outros.

Introduzimos agora, por questão de conveniência, uma notação que será bastante empregada a partir de agora, os chamados símbolos de Schläfli $\{m, n\}$ (ver [6]), onde m indica quantos lados tem o polígono em questão, e n indica quantos destes polígonos se encontram em cada vértice. Para os recobrimentos na geometria euclideana, os símbolos de Schläfli seriam $\{4, 4\}$, $\{3, 6\}$ e $\{6, 3\}$ para o quadrado, triângulo e hexágono, respectivamente, como ilustra a figura (2.15).

Embora não seja nosso objeto de estudo, citamos por completeza que na geometria esférica, há 5 modos distintos de se realizar o recobrimento regular (em [11], podemos visualizar os 5 tipos de recobrimento esférico).

Na geometria hiperbólica, por outro lado, existem infinitas maneiras diferentes de efetuar-

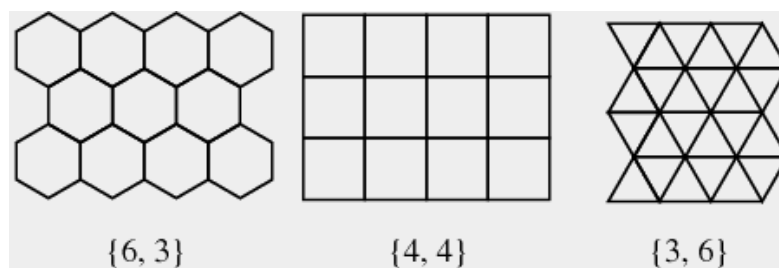


Figura 2.15: As três formas de recobrimento regular no plano euclídeo, com seus respectivos símbolos de Schläfli [34].

mos o recobrimento regular. Este fato bastante surpreendente pode ser entendido de algumas maneiras distintas. A primeira delas será uma explicação qualitativa. O espaço hiperbólico se deforma de tal maneira que nos é possível encaixar diferentes tipos de polígonos regulares sem que se deixe nenhum buraco. Outra maneira de entendermos este fenômeno no mínimo curioso é se pensarmos através de triângulos; como a figura (2.10) já nos adianta, a chave desta argumentação baseia-se no fato de que todo polígono regular pode ser decomposto em triângulos, e que no espaço hiperbólico, a soma dos ângulos de um triângulo é menor que π , mas pode ser qualquer número entre 0 e π . Vamos examinar um caso em específico para que possamos compreender um pouco mais a fundo isto.

Primeiro, vamos analisar a figura (2.16). Temos dois exemplos de um polígono regular de n lados, mas com ângulos internos diferentes. Como isto pode ser possível? Primeiro, observemos a decomposição dos polígonos em triângulos, de modo análogo ao que se vê na figura (2.10). Digamos que os ângulos do triângulo da direita sejam α , β e γ . Um destes ângulos vale $\pi/2$, por que um dos lados do triângulo intercepta perpendicularmente uma das geodésicas que o compõe. Se o polígono possui n lados, existem $2n$ triângulos deste tipo em cada um deles, visto que para cada lado do polígono, há dois triângulos. Agora, contanto que a soma dos outros dois ângulos seja menor que $\pi/2$, este triângulo existirá!

Suponhamos então que queremos efetuar um recobrimento do tipo $\{m, n\}$. Para que não haja espaço sobrando no meio deste polígono, temos que a relação $2m\beta = 2\pi$ (ver figura (2.10)) deve ser satisfeita. Ao mesmo tempo, pelo mesmo motivo, os vértices do polígono impõe que $2n\alpha = 2\pi$. Como já comentado, a soma destes dois ângulos deve ser menor que $\pi/2$, uma vez que o terceiro ângulo vale $\pi/2$. Isto implica então que:

$$\alpha + \beta < \pi/2$$

$$\frac{\pi}{n} + \frac{\pi}{m} < \frac{\pi}{2}$$

$$2n + 2m < mn$$

$$2n + 2m < mn \therefore mn - 2m - 2n > 0,$$

somando 4 dos dois lados, e reorganizando, finalmente obtemos

$$(m - 2)(n - 2) > 4. \tag{2.22}$$

Esta relação diz que podemos efetuar qualquer recobrimento regular no espaço hiperbólico, contanto que o símbolo de Schläfli referente a este recobrimento satisfaça a equação (2.22). A figura 2.17 mostra a obra de M. Escher "Anjos & Demônios", que equivale a um recobrimento do tipo $\{6, 4\}$ do plano hiperbólico (como podemos constatar comparando a obra com a figura 2.16).

A maneira de construir um recobrimento $\{m, n\}$ desejado depende de alguns conceitos que vimos neste capítulo. A escolha de m e n amarra quais serão os ângulos do polígono em questão. Vimos agora há pouco que podemos desmembrar um polígono de m lados em $2m$ triângulos hiperbólicos. Uma vez construído este primeiro polígono, o posicionamos no centro do disco de Poincaré. Para prosseguir com o processo de recobrimento, escolhemos um dos lados do polígono, e realizamos uma inversão de todos os outros lados com relação a este lado escolhido inicialmente. Repetindo este procedimento para todos os outros lados, teremos a segunda camada de polígonos de lado m criada. Devemos fazer isso infinitas vezes para recobrir todo o espaço hiperbólico. Em [17], há alguns exemplos em que os autores mostram que a quantidade de polígonos cresce exponencialmente a medida em que encaixamos novas camadas de "azulejos". Por fim, introduziremos o conceito de rede dual. Definimos a rede dual ao recobrimento $\{m, n\}$ como sendo a rede formada por $\{n, m\}$. Podemos ver os exemplos euclidianos de redes e suas contrapartes duais na figura (2.15). A rede dual a triangular é a rede hexagonal (e vice versa). A rede quadrada, por sua vez, é dual a si mesma. Para se obter

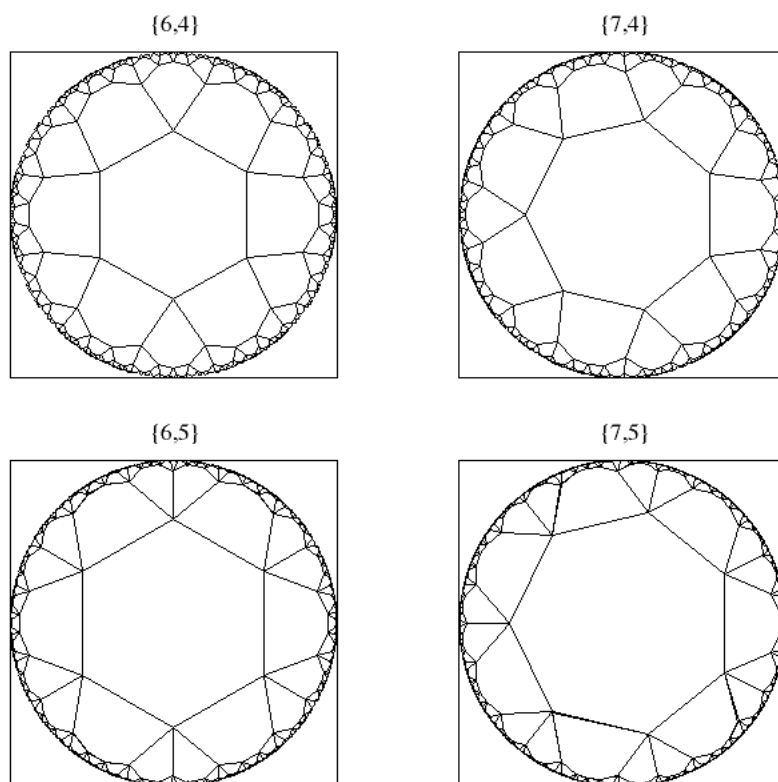


Figura 2.16: Alguns tipos diferentes de recobrimentos regulares no disco de Poincaré.

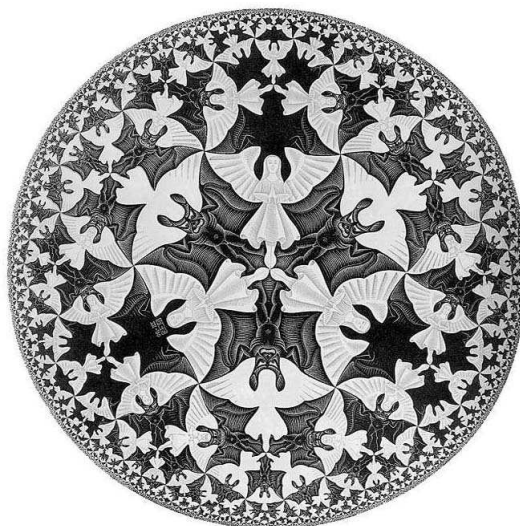


Figura 2.17: Obra "Anjos & Demônios", de M. Escher. O recobrimento associado a esta pintura é o $\{6, 4\}$.

a dual correspondente a uma determinada rede, substituímos cada polígono por um sítio que se localiza em seu centro geométrico e unimos todos os pontos cujos polígonos compartilham arestas. É simples verificar através deste procedimento que as redes duais às representadas na figura (2.15) de fato equivalem às descritas agora há pouco.

Capítulo 3

Percolação em redes hiperbólicas

"It is a capital mistake to theorize without data"
Sherlock Holmes

3.1 A árvore Binária Estendida

A fim de estudar problemas de dimensionalidade infinita, como as geradas pelo recobrimto regular no espaço hiperbólico, Nogawa e Hasegawa introduziram em [15] a árvore binária estendida (que abreviaremos por ABE. Em inglês, ela é conhecida como Enhanced Binary Tree). A motivação de introduzir esta estrutura deve-se ao fato de a ABE apresentar alguma simplicidade oferecida pela árvore binária convencional, mas possuir loops, o que a aproxima dos grafos hiperbólicos regulares. A figura (3.1) mostra lado a lado a árvore binária convencional e a ABE.

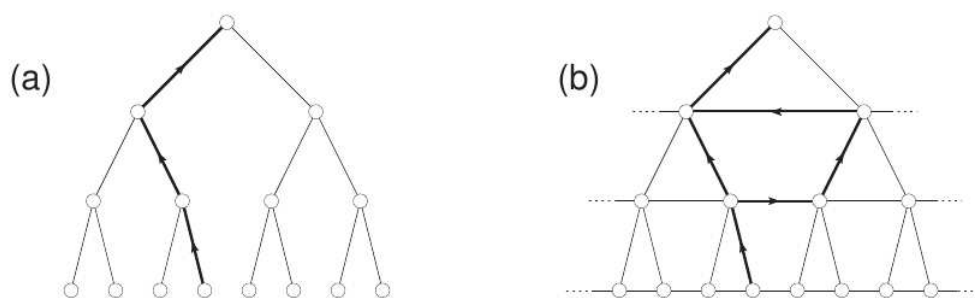


Figura 3.1: Em (a), temos a árvore binária convencional. Em (b) a ABE[14].

Na ABE conectamos em linha os elementos da árvore binária convencional que pertencem à mesma geração, utilizando condições de contorno periódicas. No capítulo 1, apresentamos uma maneira bastante simples de gerar uma árvore binária convencional, com os elementos numerados como na figura (1.13). Para gerar a ABE a partir da árvore binária, aumentamos a relação de vizinhança dos sítios da seguinte maneira: em uma dada geração l sempre conectamos um elemento com o seu sucessor. Assim, na geração l da árvore conectamos o elemento $i = 2^l$ com o sítio $i + 1 = 2^{l+1} + 1$, o elemento $i + 1 = 2^l + 1$ com o sítio $i + 2 = 2^{l+1} + 2$, e assim sucessivamente, até o último elemento da camada, o de rótulo $2^{l+1} - 1$. Este último elemento é conectado ao primeiro ($i = 2^l$), para obtermos a condição de contorno periódica. Este procedimento é repetido para todas as gerações da árvore binária.

3.2 Percolação na ABE

Embora o problema de percolação nas redes geradas pelo recobrimento hiperbólico não tenha solução analítica exata, uma série de resultados interessantes a respeito desses grafos foi desenvolvido por Benjamini e Schramm em [16]. Um dos resultados mais interessantes é o fato de surgir na geometria hiperbólica uma terceira fase, isto é, há uma segunda probabilidade crítica, que chamaremos de p_{c2} .

Para caracterizar efetivamente a primeira probabilidade crítica, associamos p_{c1} ao problema chamado "midpoint percolation". Para o caso de uma árvore binária finita de profundidade L , definiremos o parâmetro de ordem B como sendo a quantidade de elementos da última camada conectados ao elemento central (na figura (1.13), o elemento central é o de número 1). Dizemos então que em $p = p_{c1}$, B passará a ser maior que 0, o que equivale a dizer que para este valor de probabilidade, pela primeira vez algum elemento da última camada L estará conectado ao ponto central. Obviamente, estamos interessados no comportamento da árvore no limite de $L \rightarrow \infty$.

A fase correspondente ao intervalo que vai de p_{c1} a p_{c2} é, segundo os autores de [16], uma fase crítica, marcada pela presença de infinitos clusters de tamanho infinito. Antes de p_{c1} , não há nenhum cluster de tamanho infinito, e em p_{c1} , surgem infinitos clusters de tamanho infinito, que estão presentes até $p = p_{c2}$. Podemos associar qualitativamente este resultado à dimensionalidade infinita exibida por árvores e grafos hiperbólicos regulares (vimos que as árvores de

Cayley possuem dimensionalidade infinita no capítulo 1): devido ao fato de a "área" ser comparável ao "volume", há espaço para infinitos clusters de tamanho infinito na superfície (eles se localizariam nas bordas dos recobrimentos da figura (2.16)).

À medida que aumentamos o valor de p , esperamos que haja algum valor de probabilidade para o qual os infinitos clusters coalesçam, formando um único cluster infinito. Associamos p_{c2} à probabilidade em que isso acontece. Assim, podemos introduzir quantitativamente a probabilidade p_{c2} ao valor de p em que a razão

$$F \equiv \frac{S_2}{S_1}, \quad (3.1)$$

se anula pela primeira vez, onde S_2 é o tamanho do segundo maior cluster, e S_1 é o tamanho do maior cluster.

Minnhagen et al. realizaram, em [37], medidas de B contra p , de modo a obter p_{c1} . Os autores argumentam que a grandeza

$$b \equiv \frac{B}{2^L}, \quad (3.2)$$

que é a fração de elementos da última camada conectados ao ponto central, também estaria associada a p_{c2} . Segundo eles, a fração b tornar-se finita também constitui um critério para a obtenção de p_{c2} . Baseados nas grandezas b e B , os autores obtiveram

$$p_{c1} \cong 0.304 \quad (3.3)$$

$$p_{c2} \cong 0.48 \quad (3.4)$$

As simulações realizadas por Minnhagen et al. utilizam o algoritmo de Newman-Ziff (ver [38]), e os autores utilizam a técnica de Análise de Tamanho Finito em seus dados. Neste artigo, Minnhagen et al. indicam que a transição associada a p_{c1} pertence à mesma classe de universalidade que a árvore de Cayley convencional (e portanto, $\nu = 1/2$ e $\gamma = 1$. Ver [1] para referência destes expoentes).

Os autores sugerem para a transição referente a p_{c2} a lei de escala

$$b \propto N^{\phi-1} f[(p - p_{c2})N^{1/\nu}], \quad (3.5)$$

obtendo $\phi = 0.84$ e $1/\nu = 0.12$ de suas simulações

Os resultados obtidos por Nogawa e Hasegawa são contrastantes com os obtidos por Minnhagen et al.. Nogawa e Hasegawa utilizam o mesmo critério que Minnhagen et al. para a determinação de p_{c1} , no entanto, os autores definem p_{c2} como a probabilidade em que pela primeira vez o comprimento de correlação ξ diverge. Note que a massa do cluster divergir antes do comprimento de correlação só é possível aqui por que o número de sítios diverge exponencialmente com a profundidade do sistema.

Nogawa e Hasegawa também efetuam simulações numéricas utilizando o algoritmo de Newman-Ziff e também fazem uso de uma análise de tamanho finito.

Os resultados obtidos por eles foram

$$p_{c1} \cong 0.304 \quad (3.6)$$

$$p_{c2} \cong 0.56 \quad (3.7)$$

3.3 Resultados

Em nossas simulações, criamos uma ABE com L gerações e diluímos suas ligações com probabilidade p . Em seguida, com o auxílio do BFS identificamos os clusters existentes no sistema. Calculamos também a quantidade de elementos da última geração conectados ao sítio central, e chamamos este valor de parâmetro de ordem B . Identificamos os dois maiores clusters de todo esse conjunto, e medimos S_2/S_1 . Para um dado tamanho, repetimos este procedimento um grande número de vezes, para realizar médias amostrais.

Deste modo, medimos as seguintes grandezas: o número B de sítios da última camada L conectados ao sítio central (e sua fração $b = B/2^L$), χ_b (a variância associada a b), F e χ_F (a

variância associada a F)¹.

Podemos ver na figura (3.2) que as curvas para $B(L, p) \times p$ correspondentes a tamanhos distintos se cruzam, com boa aproximação, em um único ponto. Com base nesse cruzamento de curvas, podemos estimar o valor de p_{c1} , uma vez que esperamos que em p_c o sistema apresente invariância de escala.

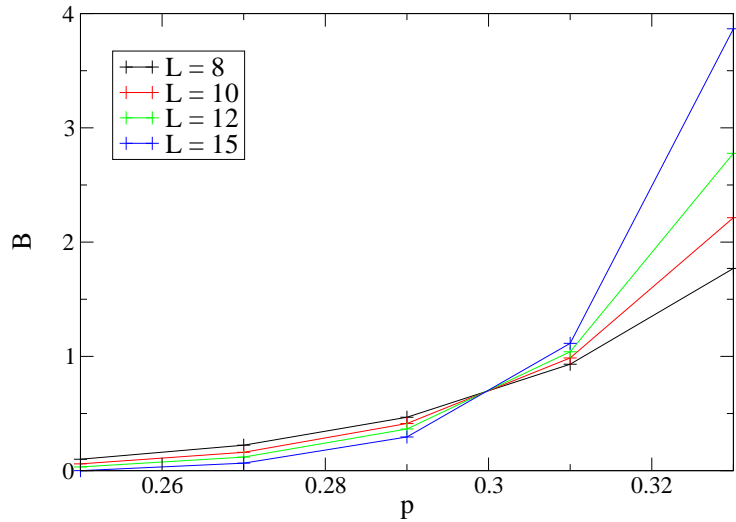


Figura 3.2: Gráfico que mostra o cruzamento de curvas para determinação de p_{c1} . Em y , temos B , e em x , p . Os tamanhos utilizados neste gráfico foram 8, 10, 12 e 15, com número respectivo de amostras de 9×10^6 , 9×10^6 , 4.5×10^6 e 5×10^5 .

Do cruzamento de curvas da figura (3.2), determinamos o valor de p_{c1} como sendo

$$p_{c1} \cong 0.30 \pm 0.01. \quad (3.8)$$

que é compatível com o resultado obtido por Minnhagen et al. e por Hasegawa et al.

Fazendo o colapso dos dados de acordo com a função

$$B \sim f((p - p_c)L^{1/\nu}), \quad (3.9)$$

e tomando $\nu = 0.5$, vemos que a primeira transição de percolação na ABE pertence à mesma classe de universalidade de percolação em redes hiperbólicas, conforme obtido por Minnhagen

¹Associamos a variância de um parâmetro de ordem à susceptibilidade, similarmente ao que fazemos em sistemas termodinâmicos no equilíbrio. Existe um teorema que justifica esta analogia chamado teorema Flutuação-Dissipação. Para mais detalhes, ver [21].

et al. em [17, 37].

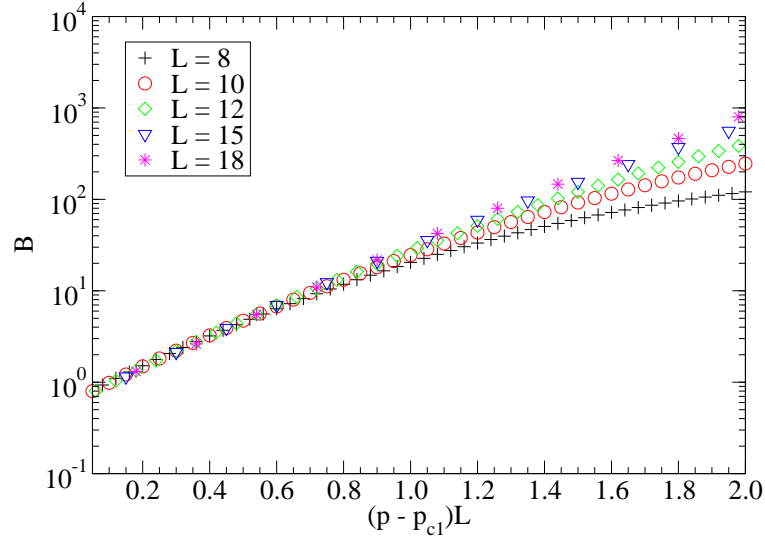


Figura 3.3: Colapso do parâmetro de ordem B contra p . Os tamanhos utilizados foram $L = 8, 10, 12, 15$ e 18 , e os respectivos números de amostra utilizados foram $4 \times 10^7, 9 \times 10^6, 3 \times 10^6, 1 \times 10^6$ e 1×10^6 . O valor $\nu = 0.5$ sugere que a primeira transição na ABE pertence à mesma classe de universalidade de percolação em recobrimentos hiperbólicos.

Nas figuras (3.4) e (3.5), temos, respectivamente, os resultados para $F \times p$ e $\chi_F \times p$. Estas quantidades estão relacionadas com a segunda transição de fase, quando os clusters infinitos coalescem em p_{c2} e enfim se tornam compactos em valores maiores de p . Mais uma vez, os detalhes são descritos nas legendas das figuras.

Novamente, observamos um cruzamento de curvas (ver ampliação do cruzamento em (3.6)), de onde estimamos p_{c2} como

$$p_{c2} \cong 0.48 \pm 0.005, \quad (3.10)$$

Supondo as relações de escala

$$\chi_F(L, p) = L^{\gamma/\nu} \widetilde{\chi}_F(L^{1/\nu}(p - p_{c2})) \quad \text{e} \quad (3.11)$$

$$F(L, p) = L^{\beta/\nu} \widetilde{F}(L^{1/\nu}(p - p_{c2})) \quad (3.12)$$

(ver o apêndice (B), para mais detalhes acerca do colapso de dados), conseguimos estimar os expoentes ν, β e γ .

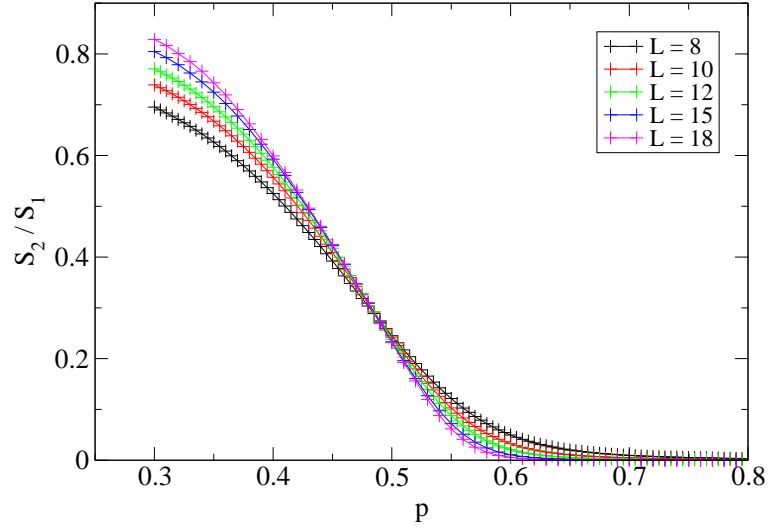


Figura 3.4: Gráfico do parâmetro de ordem $F = \frac{S_2}{S_1}$ contra p . Os tamanhos utilizados foram $L = 5, 8, 10, 12, 15$ e 18 , e os respectivos números de amostra utilizados foram $9 \times 10^6, 4 \times 10^7, 9 \times 10^6, 3 \times 10^6$,

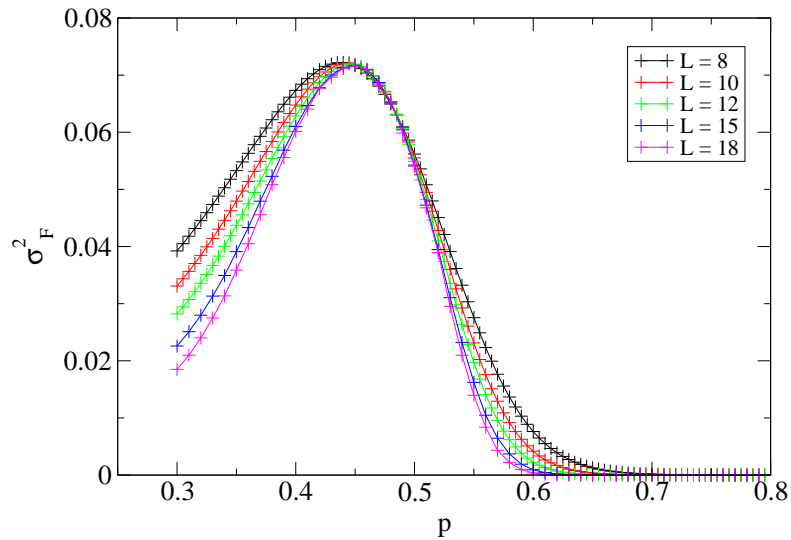


Figura 3.5: A susceptibilidade associada ao parâmetro de ordem F , χ_F , contra p . Os tamanhos utilizados foram $L = 8, 10, 12, 15$ e 18 , e os respectivos números de amostra utilizados foram $9 \times 10^7, 4 \times 10^7, 9 \times 10^6, 3 \times 10^6, 1 \times 10^6$ e 1×10^6 .

O colapso para a susceptibilidade χ_F para curvas de tamanhos distintos está disposto na figura (3.7), e o referente ao parâmetro de ordem F está na figura (3.8).

O valor obtido para o expoente ν foi compatível em ambos os casos, e foi de aproximadamente $\nu \approx 2.7$. Obtemos também que $\beta/\nu = 0$ e $\gamma/\nu = 0$, que nos fornece $\beta = 0$ e $\gamma = 0$. A descontinuidade do parâmetro de ordem, que segue de $\beta = 0$, já foi discutida anteriormente por Nogawa e Hasegawa em [15].

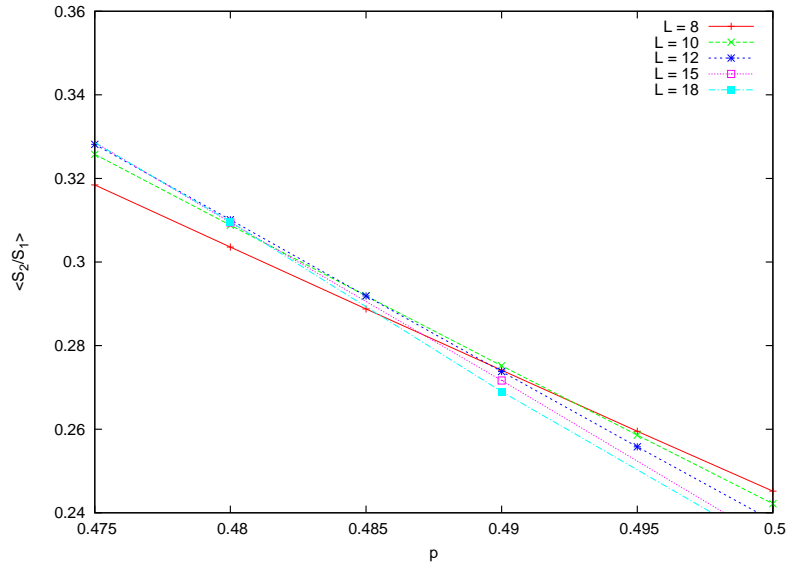


Figura 3.6: Este gráfico refere-se aos mesmos dados utilizados na figura (3.4), onde apenas aumentamos a definição nos entornos do cruzamento para determinar com maior precisão o valor do cruzamento (tiramos a curva referente ao tamanho 5). Podemos ver que a curva vermelha (referen: $\tau = 0.48$) ocorre em torno d

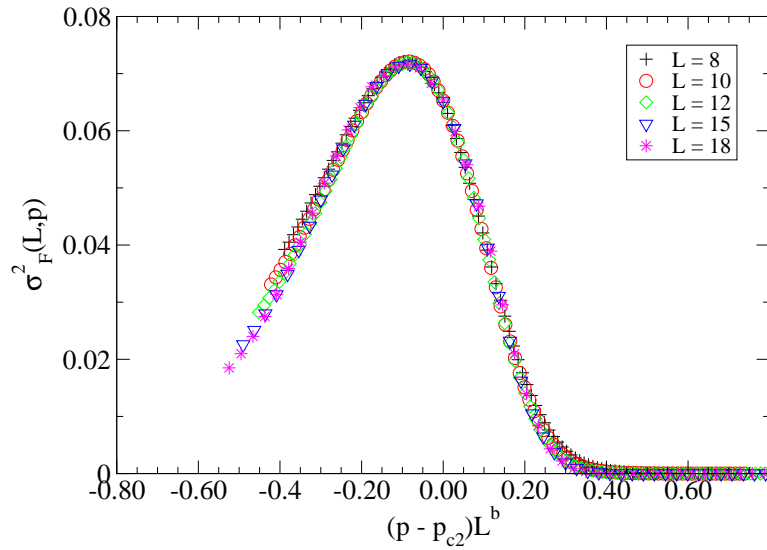


Figura 3.7: Colapso dos dados, realizado para os tamanhos $L = 8, 10, 12, 15$ e 18 . Utilizamos O valor de $p_{c2} = 0.48$, obtido do cruzamento de curvas (figura (3.6)). Não foi necessário reescalar o eixo y (que contém χ_L). No eixo x, temos $(p - p_c)L^b$, onde o valor de b obtido foi de 0.38 (isto significa que $\nu \cong 2.63$).

No entanto, estes colapsos ainda não são conclusivos, como mostramos abaixo. Formas de escala diferentes de (3.12) podem ser propostas, gerando colapsos igualmente satisfatórios.

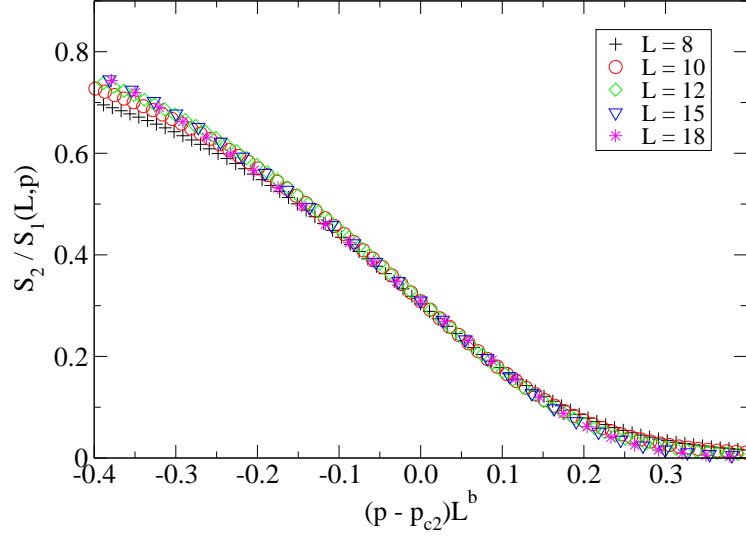


Figura 3.8: *Colapso dos dados, realizado para os tamanhos $L = 8, 10, 12, 15$ e 18 . Utilizamos O valor de $p_{c2} = 0.48$, obtido do cruzamento de curvas (figura (3.6)). Não foi necessário reescalar o eixo y (que contém F). No eixo x , temos $(p - p_c)L^b$, onde o valor de b obtido foi de 0.38 (isto significa que $\nu \cong 2.63$), o mesmo utilizado no colapso da figura (3.7).*

Supondo as funções de escala

$$\chi_F(N, p) = N^{\bar{\gamma}/\bar{\nu}} \widetilde{\chi}_F(N^{1/\bar{\nu}}(p - p_{c2})) \quad \text{e} \quad (3.13)$$

$$F(N, p) = N^{\bar{\beta}/\bar{\nu}} \widetilde{F}(N^{1/\bar{\nu}}(p - p_{c2})) \quad (3.14)$$

(onde $N = 2^L$ e os expoentes utilizados para os colapsos foram $1/\bar{\nu} = 0.05$, $\bar{\beta} = 0$ e $\bar{\gamma} = 0$), obtemos os colapsos mostrados nas figuras (3.9) e (3.10), mostrando que o poder computacional atual pode ser insuficiente para que possamos caracterizar a segunda transição de fase na ABE.

Todos concordamos com o valor de $p_{c1} \cong 0.3$. O método que nós utilizamos para a obtenção deste valor de p_{c1} é semelhante ao empregado por Minnhagen et al. Analisamos o cruzamento das curvas de B (o número de elementos da última camada conectados ao ponto central) contra p , para tamanhos de rede diferentes. Já Nogawa e Hasegawa encontram esse valor baseados em outro critério.

Para p_{c2} , nossos resultados são compatíveis com os obtidos por Minnhagen et al, embora tenhamos trilhado um caminho distinto. Ambos discordamos do valor de $p_{c2} \cong 0.56$ obtido por Nogawa e Hasegawa. No entanto, diferentes funções de escala levam a resultados semelhantes.

Devido a toda essa controvérsia e da dificuldade numérica em abordar este tipo de estrutura

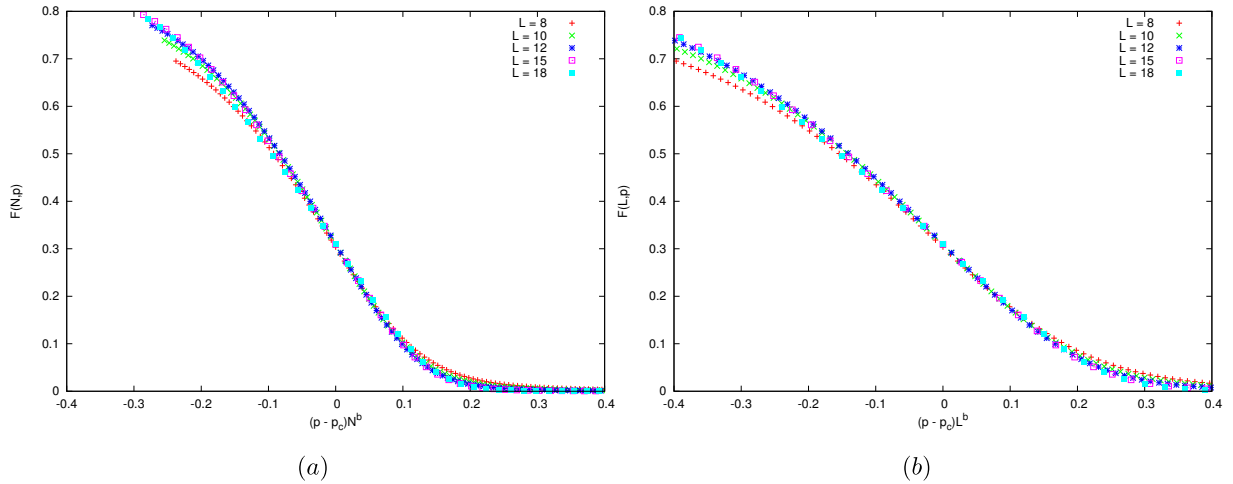


Figura 3.9: Comparação de colapsos do parâmetro de ordem obtidos com diferentes funções de escala. Observamos um colapso razoável tanto em (a) quanto em (b).

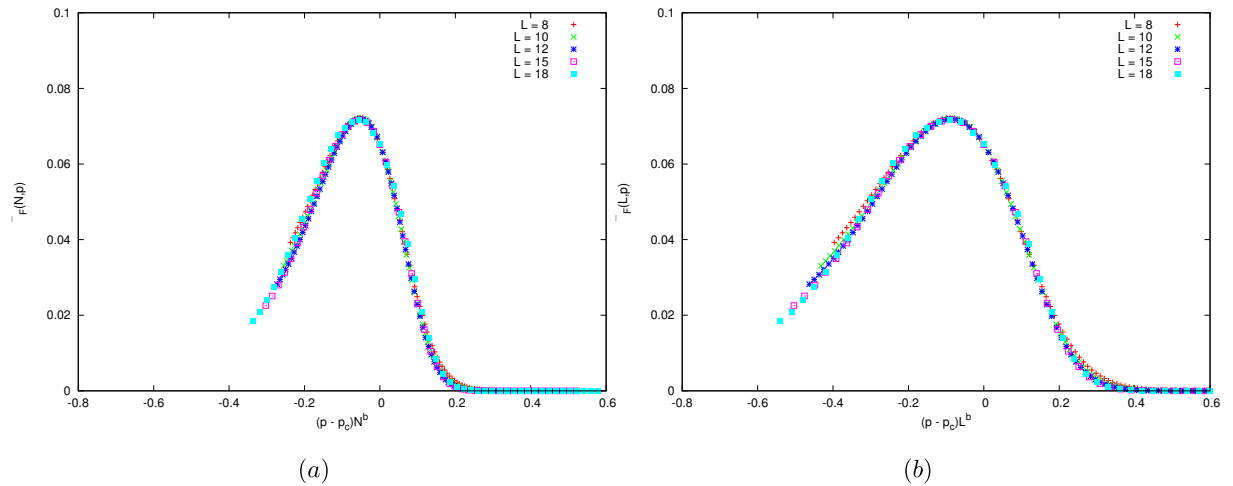


Figura 3.10: Comparação de colapsos da flutuação do parâmetro de ordem obtidos com diferentes funções de escala. Observamos um colapso razoável tanto em (a) quanto em (b).

(uma vez que o crescimento exponencial de sítios dificulta a simulação de sistemas maiores que os atuais), o estudo do problema de percolação em redes hiperbólicas permanece inconclusivo. Nosso trabalho segue na direção de maiores esforços computacionais e do uso de ferramentas sofisticadas de geração de recobrimentos hiperbólicos, utilizando teoria de grupos automáticos para a geração eficiente de clusters de percolação ([1])

Talvez seja necessário que realizemos mais testes para obter a confiabilidade necessária, ou quem sabe precisemos de alguma ferramenta nova para a descrição deste tipo de sistema.

Nossa análise de scaling, com os respectivos colapsos de dados, parecem confiáveis. Uma análise da geometria dos clusters é mandatória para uma melhor compreensão dessas inconsistências. Nosso trabalho segue nessa direção.

Apêndice A

Breadth First Search

A.1 Ideia do Algoritmo

Já vimos no capítulo 1 que grafos nada mais são do que um conjunto de N elementos que relacionam-se entre si através de M ligações. A informação a respeito de como os elementos se relacionam está na topologia do grafo em questão. Desejamos obter algumas informações acerca desta topologia, tais como saber a maneira com que os elementos se conectam, se há alguma receita na formação da rede, se os elementos se conectam aleatoriamente, etc..

Um mecanismo bastante útil de busca em grafos, que nos auxilia a obter informações da topologia da rede, e que inclusive é um dos algoritmos que costumamos utilizar com mais frequência, é o BFS (da sigla em inglês Breadth First Search, às vezes chamado em português como Busca em Largura). Existem diversos motivos para empregarmos este algoritmo, dos quais destacamos sua versatilidade e clareza (uma vez que se tenha entendido de fato o seu funcionamento).

Como funciona o BFS? Quem já estudou o problema de percolação já deve ter ouvido falar no algoritmo de "burning". O BFS essencialmente é um algoritmo "burning like". Imaginemos, mais uma vez, que temos uma rede quadrada e que em cada vértice desta rede existe uma árvore com uma determinada probabilidade p , de maneira análoga ao que já vimos no capítulo 1 (ver figura (A.1)).

Temos disposta na figura (A.1) a evolução de um incêndio. Suponhamos que alguém (que certamente não assistiu ao filme Avatar) incendeie a árvore A da figura. Suponhamos também

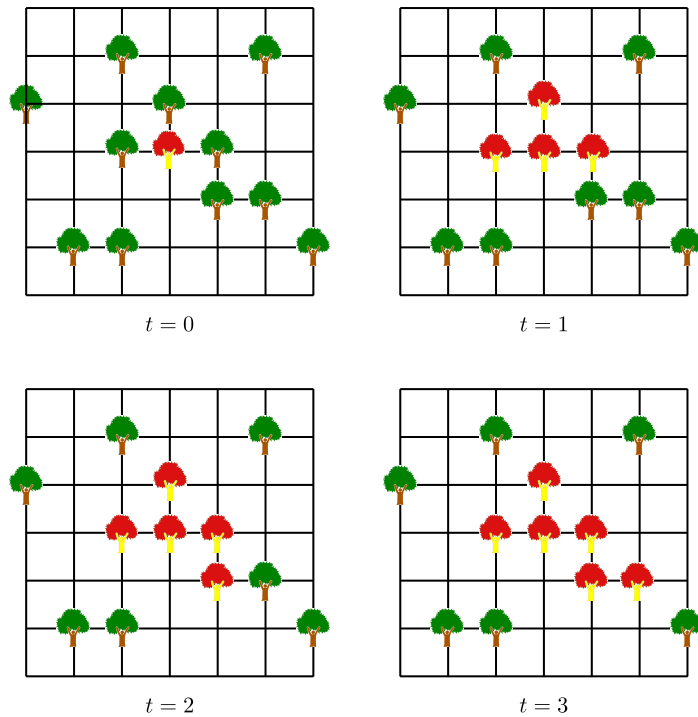


Figura A.1: Ilustração do algoritmo de "burning" na rede quadrada. Incendiamos a árvore central, e temos disposta a evolução temporal do incêndio.

que a dinâmica do incêndio siga a seguinte regra. Contanto que haja uma árvore vizinha a outra que esteja incandescente, o fogo se propagará de uma a outra. Uma árvore que já esteja em chamas não se incendeia novamente. Isto significa que o incêndio se progagará tal como representado passo a passo na figura (A.1). Por sorte, a floresta em questão era pouco densa, e desta forma o incêndio não conseguiu "percolar". O exemplo descrito neste parágrafo ilustra o funcionamento do BFS. O link [13] contém uma animação bastante interessante, e que também ilustra o funcionamento do algoritmo.

De uma maneira um pouco mais esquemática, poderíamos descrever o algoritmo da seguinte maneira:

1. Escolhemos um elemento para começar, e chamamos este elemento de "root node".
2. Em seguida, vasculhamos os vizinhos deste elemento. Se eles ainda não foram vasculhados, marcamos estes elementos para a "revista".
3. Para cada um dos elementos marcados para a "revista", vasculhamos todos os seus vizinhos que ainda não foram "revistados" e os encaminhamos para a "revista". Repetimos

este passo até que não haja mais elementos a serem "revistados".

4. Ao contrário do que costuma fazer a polícia do Rio, cada um dos elementos só é "revistado" uma única vez (senão, entraríamos num loop infinito: A é vizinho de B , que é vizinho de A , que é vizinho de B ,... indefinidamente).

A maneira padrão com que implementamos o BFS é fazendo uso de uma estrutura de dados do tipo fila (filas são estruturas de dados do tipo FIFO, do inglês First In, First Out. Esta sigla representa simplesmente a filosofia de uma fila convencional - excetuando-se as filas indianas - o primeiro a entrar na fila é o primeiro a sair). A conectividade de cada elemento i é guardada num vetor, que chamamos normalmente, por padrão, de $Z[i]$. Por exemplo, observando o caso da figura (1.11), teríamos para 1, $Z[1] = 3$, e para 6, $Z[6] = 1$. Para implementar uma fila, poderíamos usar um vetor¹. Na lógica da fila, podemos pensar neste vetor como uma pilha, em que colocamos elementos por cima (que vão pegar a senha do atendimento) e tiramos elementos por baixo. Em geral, utilizamos duas variáveis, que chamamos de *top* e *bottom*, que servem para indicar quem foi o último elemento a sair da fila, e quem será o próximo a entrar. A variável *bottom* aponta sempre para o último elemento da fila. Ela serve para indicar quem será o próximo a ser "revistado". Quando tiramos um elemento da fila, a variável *bottom* é incrementada de uma unidade, indicando agora o próximo elemento a ser verificado. A variável *top* aponta para o topo da fila. Sempre que acrescentamos um elemento na fila, este elemento é alocado na posição *top* da fila, e a variável *top* é incrementada de uma unidade. O número de elementos na fila é determinado pela diferença entre *top* e *bottom*. Se essa diferença for zero (se $bottom = top$), a fila está vazia. A figura A.2 ilustra o que descrevemos em palavras neste parágrafo.

A fim de implementar o algoritmo de maneira clara, separamos as seguintes ações em funções: inicializar a fila, tirar um elemento da fila e colocar um elemento na fila. Chamamos cada uma destas funções pelos sugestivos nomes *create_queue*, *get* e *put*. Na função *create_queue* podemos estipular o tamanho que o vetor fila terá (para evitar problemas de memória, como declarar um vetor de 10 elementos e tentar acessar o 13º e coisas do tipo, sugerimos, numa

¹Existem maneiras diferentes e um pouco mais sofisticadas para implementar uma fila, como por exemplo utilizando alocação dinâmica de memória. Mas numa abordagem introdutória, o vetor estático é a estrutura mais simples.

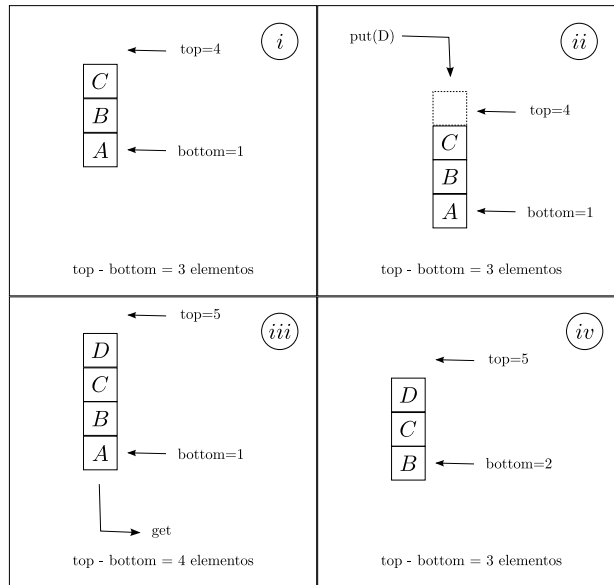


Figura A.2: Figura que ilustra o funcionamento da fila para um caso simples. Podemos ver que a variável top aponta para uma "casa" acima do elemento de cima da fila.

primeira implementação do algoritmo, que o vetor tenha o mesmo número de elementos do grafo em que iremos aplicar o algoritmo. Alertamos que esse conselho definitivamente não corresponde à implementação ótima do BFS). Também fazemos $top = bottom$, uma vez que a fila começa vazia. Se queremos que a função put coloque o elemento i no vetor fila, fazemos $fila[top] = i$, e em seguida, incrementamos top de uma unidade. Quando retiramos um elemento utilizando a função get , utilizamos para algum fim o elemento $fila[bottom]$ e incrementamos $bottom$ de uma unidade. Para mais detalhes da implementação destas funções, bem como consulta de códigos referentes às mesmas, sugerimos a leitura de [7].

Fazemos uso também de uma lista que contém todos os elementos conectados a um determinado sítio i (já sabemos que o sítio i possui $Z[i]$ vizinhos), para todos os elementos da rede, tal qual na tabela (1.1). Também por padrão, utilizamos a "matriz" $nbr[i][j]$ para guardar a informação referente a essa lista. Chamamos esta lista de lista de adjacência. Para o grafo da figura (1.11), por exemplo, e em específico, o elemento 1, teríamos $nbr[1][1] = 2$, $nbr[1][2] = 3$ e $nbr[1][3] = 4$. Para entender melhor o funcionamento desta lista, o leitor pode consultar o capítulo 1 e ver a parte referente a lista de adjacência.

Como falamos anteriormente, precisamos nos assegurar que cada elemento só seja verificado uma vez, de maneira a impedir o citado $loop$ infinito. Discutiremos aqui apenas a maneira

com que implementamos o BFS neste trabalho. Fazemos uso de um vetor, que nomearemos *state*, que guarda para cada elemento a informação se o dito cujo já foi vasculhado, se ainda não foi, ou se nunca será (por exemplo, no caso das árvores da figura (A.1), caso exista árvore num dado vértice, ela pode ter sido queimada, de modo que já teria sido verificada, pode estar "virgem", aguardando por ser explorada, ou pode ser que simplesmente não haja árvore neste vértice. Neste caso, o vértice em questão estaria impossibilitado de ser revistado). Percebemos então que o vetor *state* em questão pode assumir 3 estados possíveis (por isso o sugestivo nome "state"). Existem algumas variações que não discutiremos aqui.

Agora, faremos uma descrição mais precisa do funcionamento do BFS, utilizando um pseudocódigo que contém os detalhes descritos nos parágrafos anteriores, na forma de um algoritmo, que pode ser visto no algoritmo (1).

Algorithm 1 *Algoritmo do BFS. As frases entre chaves denotam comentários no pseudocódigo.*

```

create_queue() {Criamos a fila}
Nenhum elemento foi verificado ainda - "desmarcamos" todos os elementos
i ← root_node {Escolhemos i como root_node}
put(i) {Colocamos i na fila}
marcamos i {Marcamos i para que ele não volte para a fila}
while top ≠ bottom do {Enquanto a fila não estiver vazia}
  x ← get {Tiramos um elemento da fila, e associamos este elemento a x}
  for j = 1 to j = Z[x] do {Vasculhamos todos os vizinhos de i; Z[i] = número de vizinhos de i}
    if nbr[x][j] não verificado then {Se o vizinho nbr[x][j] não foi verificado}
      put(nbr[x][j]) {Colocamos nbr[x][j] na fila}
      marcamos nbr[x][j] {Marcamos nbr[x][j] para que ele não volte para a fila}
    end if
  end for
end while

```

Por experiência, sugerimos ao leitor que esteja interessado em entender e implementar por si mesmo o BFS da maneira que o descrevemos aqui, que faça o esforço de verificar, para algumas redes pequenas (tais como a da figura 1.11) e passo a passo, que o algoritmo descrito aqui funciona. O mesmo conselho se aplica as funções *put*, *get* e *init_queue*. Algumas implementações das mesmas podem ser obscuras para os olhos não treinados. Alertamos que numa primeira leitura (às vezes até mesmo em segundas ou terceiras leituras), o BFS pode parecer um tanto quanto misterioso, mas parece que não há maneira melhor de entendê-lo do que vendo por si mesmo, passo a passo que o mesmo funciona, até que se possa convencer disso. Se o leitor

for capaz de explicar o algoritmo em detalhes, é porque muito provavelmente atingiu este nível.

Uma série de outras funcionalidades do BFS poderia ser discutida. Por brevidade, entretanto, descreveremos o aspecto do algoritmo que mais utilizamos neste trabalho, que o fato de, numa realização, sermos capazes de dizer quantos elementos foram vasculhados de uma maneira simples. Por exemplo, no caso da figura (A.1), somos capazes de saber que o número de árvores que pegaram fogo vale 6^2 .

Deste modo, podemos guardar o tamanho de todos os clusters de um determinado grafo, para uso futuro. No problema da ABE, por exemplo, estamos interessados na razão entre os tamanhos do segundo e do primeiro maior cluster, que chamamos de S_2/S_1 . Então, tudo o que temos de fazer é aplicar o BFS de modo conveniente.

Finalizamos este apêndice dando uma informação bastante relevante a respeito do algoritmo BFS, que é a chamada ordem de complexidade de um algoritmo. Esta ordem representa, grosso modo, a quantidade de operações que um algoritmo demanda em seu funcionamento. A ordem de complexidade para o BFS é, na pior das hipóteses, $O(N)$, onde N é a quantidade de elementos a serem explorados numa realização do algoritmo. Para mais detalhes, recomendamos a leitura de [7].

²Por outro lado, se temos uma rede na qual implementamos o BFS adicionando elementos não verificados na fila com probabilidade p , marcando o mesmo como verificado mesmo se não o incluirmos na lista, recuperamos o algoritmo de Leath para a criação do cluster de percolação por sítios. Se apenas marcamos o sítio como verificado se ele for colocado na pilha obtemos o algoritmo de percolação por ligações. Para o algoritmo de Leath, ver [1] e [36].

Apêndice B

Análise de Tamanho Finito

B.1 Ideia e fundamentos do método

Como todo físico bem sabe, quando estudamos mecânica estatística, em geral não temos interesse em sistemas finitos. O que se costuma fazer é tomar o limite termodinâmico, isto é, o limite de sistema infinito. O motivo disto é simples. Mesmo um sistema pequeno do ponto de vista macroscópico, como por exemplo, um grão de areia, é constituído por uma quantidade de átomos da ordem do número de avogadro. Infelizmente, mesmo com os poderosos recursos que a computação oferece, os sistemas que podemos simular ainda estão boas ordens de grandeza abaixo desse número. A quantidade de memória que um computador pode armazenar (e processar) limita o tamanho dos sistemas que podemos estudar do ponto de vista computacional. É por conta deste tipo de limitação que métodos como a análise de tamanho finito (em inglês, Finite Size Scaling) existem.

Qualitativamente, a ideia por trás do método é simples. Descobrimos como as grandezas físicas de interesse variam a medida em que modificamos o tamanho do sistema que estamos simulando, e tentamos extrapolar o comportamento do mesmo para quando o seu tamanho vai ao infinito.

Quando um sistema físico passa por uma transição de fase contínua, esperamos que nas proximidades do ponto crítico, as grandezas termodinâmicas, tais como o calor específico, sigam leis de potência ¹. Além disso, a hipótese de escala diz que nas proximidades da criticalidade

¹Existem transições de fase onde o ponto crítico está associado a temperatura. Em outros sistemas, tais como

(nome dado à região em que ocorrem transições de fase contínuas ²), o sistema exibe uma única escala de comprimento característica, o comprimento de correlação ξ (uma definição de ξ pode ser vista no capítulo 1 desta dissertação, na parte referente ao problema de percolação unidimensional).

Embora estejamos falando apenas de hipóteses, o fato é que há como fundamentar de maneira um pouco mais rigorosa os fenômenos anteriormente descritos fazendo uso do Grupo de Renormalização (ver referência [8]). Neste contexto, entretanto, nos basta o seguinte: é um fato experimental que diversos sistemas sofrem transições de fase tais que suas grandezas termodinâmicas seguem simples leis de potência nas proximidades do ponto crítico (um exemplo que será discutido um pouco mais adiante é $\chi \sim (T - T_c)^{-\gamma}$). A análise de tamanho finito é um método sistemático que nos permite obter a temperatura crítica T_c , bem como os expoentes (γ , etc.) que caracterizam a transição.

A importância de obtermos os expoentes críticos deve-se à existência de classes de universalidade, conforme discutido no capítulo 1.

Uma vez justificada a importância e fundamentação qualitativa da análise de tamanho finito, a pergunta que se coloca é: como realizar esta análise? É o que a próxima seção dispõe-se a elucidar.

B.2 Análise de tamanho finito: prática

Mostraremos aqui, de maneira pragmática, a aplicação da análise de tamanho para sistemas magnéticos. Já que estamos sempre lidando com sistemas nas proximidades da transição de fase, é interessante introduzir a temperatura reduzida t definida como $t \equiv \frac{T-T_c}{T_c}$, que mede o quanto estamos perto da temperatura T_c onde ocorre a transição de fase. Como dito na última seção, esperamos que na vizinhança de $T = T_c$, as grandezas termodinâmicas sigam leis de potência como:

nos problemas de percolação, o ponto crítico está associado à probabilidade. De todo modo, chamamos este parâmetro, de maneira mais geral, de parâmetro de controle.

²Não é necessário que estejamos nas proximidades de uma transição de fase contínua para que o sistema exiba criticalidade. Como dito no capítulo 1, existem sistemas que exibem comportamento do tipo lei de potência mesmo numa transição de fase descontínua, como no problema de percolação explosiva.

$$\chi \sim |t|^{-\gamma} \quad (\text{B.1})$$

$$\xi \sim |t|^{-\nu} \quad (\text{B.2})$$

$$c \sim |t|^{-\alpha} \quad (\text{B.3})$$

$$m \sim |t|^\beta \quad (\text{B.4})$$

onde χ é a susceptibilidade magnética, ξ é o comprimento de correlação, c é o calor específico e m é a magnetização. γ, ν, α e β são os expoentes críticos (o símbolo \sim significa, neste contexto, que as grandezas acima assintoticamente se comportarão como as leis de potência escritas. Isto é importante, por que se estamos afastados da criticalidade, não há motivos para esperar que estas grandezas sigam estas leis). Isto implica que, exceto a magnetização, todas as grandezas descritas acima divergem quanto estamos exatamente em $T = T_c$ ³. A figura (B.1) ilustra o comportamento destas grandezas.

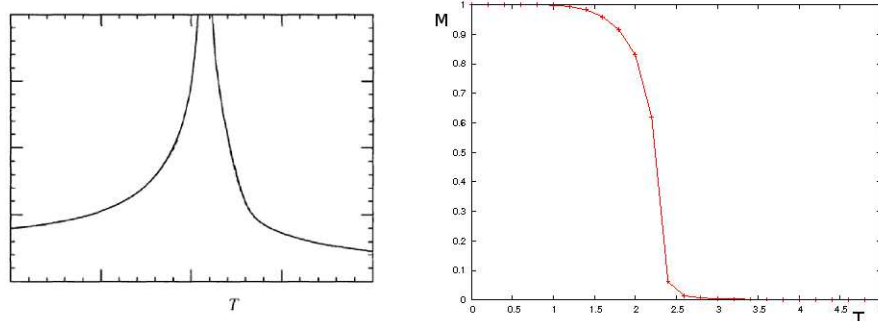


Figura B.1: Nesta figura, temos o comportamento típico das grandezas termodinâmicas para uma transição de fase contínua. À esquerda, temos o comportamento qualitativo de χ , ξ e c contra T , de onde percebemos o comportamento divergente destas grandezas no limite termodinâmico. À direita, temos m contra T . Este gráfico foi obtido através de uma simulação (não corresponde ao limite termodinâmico) [9].

Observamos este comportamento experimentalmente. O comprimento de correlação ξ , entretanto, não diverge em um sistema finito; ele cresce, mas a medida em que se aproxima do comprimento L do sistema (por exemplo, numa rede quadrada, L seria o comprimento da aresta do quadrado que compõe o sistema), ξ deixa de crescer. Um critério para saber se o sistema em

³Existem sistemas em que o calor específico não diverge em $T = T_c$, mas na verdade se anula.

questão é de fato infinito é medir o comprimento de correlação. Se ξ tem um limite superior, o sistema é finito (nos referimos aqui aos fenômenos críticos, onde ξ diverge. Para fenômenos não críticos, ξ não diverge, nem mesmo no limite termodinâmico). A figura (B.2) ilustra o que ocorre com ξ num sistema finito. Esta limitação que ξ sofre é o ponto central da discussão da análise do tamanho finito. Por conta disso, iremos explorar um pouco mais esta figura.

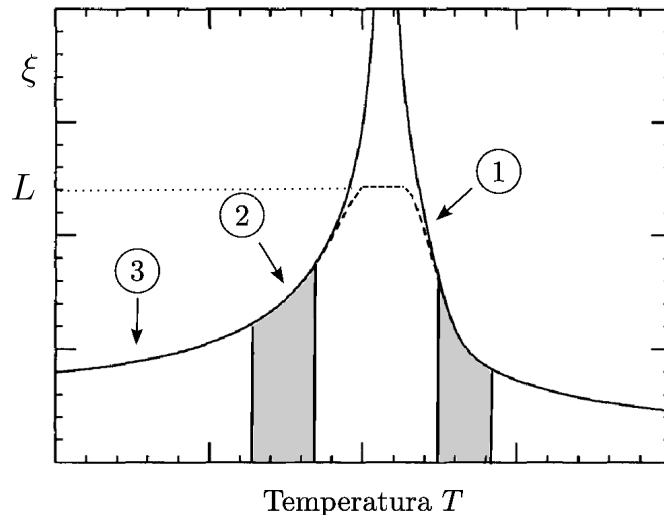


Figura B.2: A linha cheia representa ξ do sistema magnético infinito, enquanto que a pontilhada mostra a limitação que ξ sofre num sistema de tamanho finito. Na região 1 ξ já atingiu seu valor máximo devido a efeitos de tamanho finito (ξ não pode ser maior que L). Na região 2, percebemos a concordância entre os sistemas finito e infinito, e em 3 estamos afastados da criticidade[9].

Devido ao que foi discutido no parágrafo anterior, sabemos então que ξ deve satisfazer aos seguintes casos limite ⁴:

$$\xi \sim \begin{cases} |t|^{-\nu}, \xi \ll L \\ \text{constante}, \xi \gg L. \end{cases} \quad (\text{B.5})$$

O que observamos das equações (B.5) é que a comparação entre ξ e L é o que nos permite determinar em qual dos casos limite estamos. O leitor pode se perguntar como o comprimento de correlação ξ pode ser muito maior que L , uma vez que em princípio ξ é limitado pela dimensão L do sistema em questão. Quando escrevemos $\xi \gg L$, nos referimos ao comprimento de

⁴À primeira vista, a primeira igualdade pode parecer duvidosa, uma vez que se $\xi \ll L$, em princípio, estamos afastados da criticidade. O fato é que esperamos que exista uma região tal qual a correspondente a 2, na figura B.2, em que ξ ainda é consideravelmente menor que L , mas que ainda siga uma lei de potência, de modo que estamos na criticidade.

correlação do sistema infinito, que está representado pela linha cheia na figura (B.2). O comprimento de correlação do sistema de tamanho L está representado pelo plateau nesta figura, e de fato é limitado por L .

E as outras grandezas? Analisemos o caso da susceptibilidade χ (a derivação para as demais grandezas termodinâmicas segue de maneira análoga ao que faremos para χ). Como $\xi \sim |t|^{-\nu}$, podemos inverter esta relação, obtendo assim $|t| \sim \xi^{-1/\nu}$. Desta forma, temos então

$$\chi \sim |t|^{-\gamma} \sim \xi^{\gamma/\nu} \quad (\text{B.6})$$

Como ξ não diverge num sistema finito, vemos agora pela equação B.6 que a susceptibilidade χ também não divergirá. Da mesma maneira que as equações (B.5) nos mostram quais os comportamentos limite de ξ , somos capazes agora de escrever o mesmo para χ :

$$\chi \sim \begin{cases} \xi^{\gamma/\nu}, & \xi \ll L \\ \text{constante}, & \xi \gg L \end{cases} \quad (\text{B.7})$$

Agora, de uma maneira mais compacta, escrevemos que

$$\chi = \xi^{\gamma/\nu} \chi_0(L/\xi), \quad (\text{B.8})$$

contanto que χ_0 satisfaça $\chi_0(x) = cte$ quando $x \gg 1$, e $\chi_0 \sim x^{\gamma/\nu}$ quando $x \rightarrow 0$. Não conhecemos a forma exata da função χ_0 , sabemos apenas de seus comportamentos limite. Entretanto, a maneira precisa com que χ vai de um limite a outro está escondida na forma funcional de χ_0 .

Ainda há um problema. Não sabemos qual função governa ξ do sistema infinito, que é a grandeza que aparece em B.8. Introduzimos então a função $\tilde{\chi}$, definida como

$$\tilde{\chi}(x) = x^{-\gamma} \chi_0(x^\nu). \quad (\text{B.9})$$

Manipulando a equação B.9, vemos que $\chi_0(x) = \chi_0[(x^\nu)^{1/\nu}] = x^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(x^{1/\nu})$. Agora,

$$\chi = \xi^{\gamma/\nu} \chi_0(L/\xi) = L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(L^{1/\nu} \xi^{-1/\nu}), \quad (\text{B.10})$$

e obtemos finalmente

$$\chi = L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(L^{1/\nu} t) \quad (\text{B.11})$$

Trocamos uma função que não conhecíamos (χ_0) por outra que também não conhecemos ($\tilde{\chi}$), mas escolhemos uma em detrimento da outra por que agora não aparece mais a dependência em ξ . Outra vantagem de $\tilde{\chi}$ é que ela é a famosa função de escala, uma função que já não carrega mais dependência alguma em L . Isto pode ser entendido substituindo-se a relação $|t| \sim \xi^{-1/\nu}$ na equação anterior. Para ξ da ordem de L (quando percebemos que o sistema é finito), o argumento de $\tilde{\chi}$ torna-se uma constante independente de L ; para ξ menor que L , estamos na região 2 da figura (B.2), onde ainda não se sabe que o sistema é finito. Deste modo, neste limite, também não há dependência com o tamanho.

A equação (B.11) é a relação mais importante, do ponto de vista prático, na análise de tamanho finito. É ela que nos permite realizar o colapso dos dados e determinar T_c e os expoentes críticos.

B.3 Análise de tamanho finito: O colapso dos dados

Como discutimos no final da última seção, a função $\tilde{\chi}$ não depende de L . Isto significa que podemos reescrever a equação (B.11) como $\chi L^{-\gamma/\nu} = \tilde{\chi}(L^{1/\nu} t)$. Como o lado direito desta última equação não depende de L , o lado esquerdo também não depende. De um ponto de vista prático, isto significa que se recolhemos dados de simulações realizadas para diversos tamanhos L , somos capazes de fazer com que todas as curvas de tamanhos distintos caiam numa única curva, uma vez que manipulamos a equação (B.11) para que ela não exibisse mais nenhuma dependência com o tamanho L do sistema. Como fazer isto do ponto de vista prático? Realizamos simulações para tamanhos distintos, e salvamos os valores de $\chi_L(T)$ para um intervalo de temperaturas (que deve estar na região de criticalidade). Se multiplicamos cada um destes $\chi_L(T)$ por $L^{-\gamma/\nu}$, e dispomos isto contra $L^{1/\nu} t$ no eixo x, todas as curvas colapsarão! Entretanto, isto só ocorrerá se os expoentes γ e ν estiverem corretos, e se também estivermos utilizando o valor correto de T_c em t . Podemos observar um colapso de dados típico na figura (B.3).

Quando estamos estudando um novo tipo de sistema, e não conhecemos os valores dos

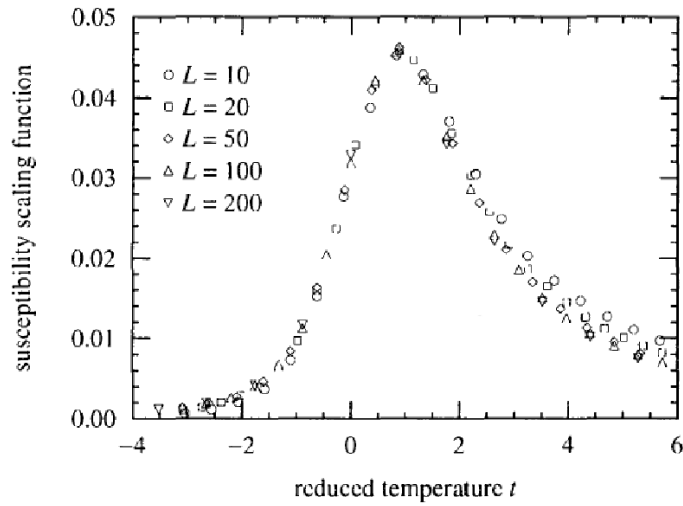


Figura B.3: *Colapso dos dados extraído de [9]. A simulação correspondente a este colapso foi realizada para o modelo de Ising na ausência de campo, na rede quadrada.*

expoentes, e nem o valor de T_c , devemos ajustar os valores dos expoentes até que todas as curvas colapsem. Deste modo, estimamos as grandezas desejadas (deve-se chamar atenção para o fato de que o critério que usamos para determinar o quão bom é o colapso dos dados é apenas visual, e dessa forma, não temos uma estimativa precisa do erro em nossas medições. Para uma discussão mais aprofundada a esse respeito, indicamos a leitura de [9].

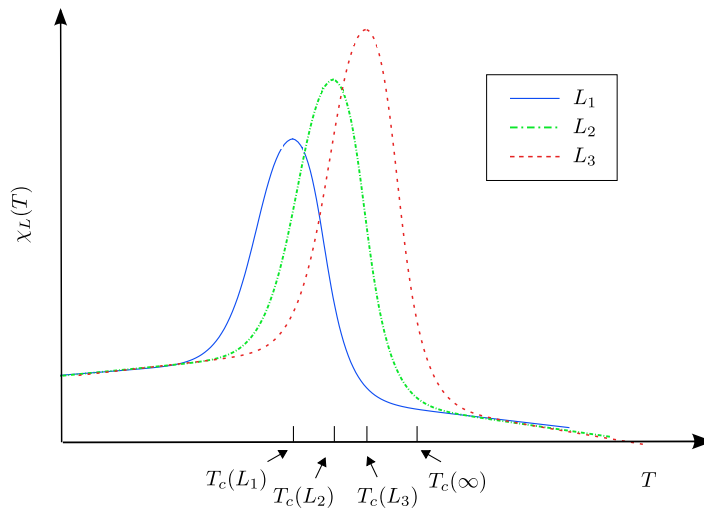


Figura B.4: $\chi_L(T)$ para três tamanhos distintos ($L_1 < L_2 < L_3$). Observe que o pico das curvas desloca-se em direção à temperatura crítica do sistema infinito.

Referências Bibliográficas

- [1] Stauffer D., Aharony A., *Introduction to Percolation Theory*, Taylor & Francis, 2003
- [2] Andersosn J.W., *Hyperbolic Geometry (Springer Undergraduate Mathematics Series)*, Springer, 2005
- [3] Stahl S., *A Gateway to Modern Geometry: The Poincare Half-Plane*, Jones & Bartlett Publishers, 2 ed., 2007.
- [4] Broadbent, S.; Hammersley, J. (1957), "Percolation processes I. Crystals and mazes", *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* 53: 629?641.
- [5] Jackson, J.D., *Classical Electrodynamics*, Willey, 3 ed., 1998.
- [6] Coxeter, H.S.M., *Regular Polytopes*, Dover Publucations, 1973.
- [7] Knuth, D.E., *The Art Of Computer Programming, Vol. 1*, 3 ed., Addison-Wesley, 1997.
- [8] Cardy, J., *Scaling and Renormalization in Statistical Physics*, Cambridge University Press, 1996.
- [9] Newman, M.E.J., Barkema, G.T., *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, Oxford University Press, 1999.
- [10] Colwell, K.M.M., <http://www.quantum-immortal.net/math/hyperbolic.php>
- [11] http://euler.slu.edu/escher/index.php/Spherical_Geometry
- [12] Yeomans, J.M., *Statistical Mechanics of Phase Transitions*, Oxford University Press, 1992.

- [13] http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/4/46/Animated_BFS.gif
- [14] Minnhagen, P., Baek, S.K. (2010), "Analytic results for the percolation transitions of the enhanced binary tree", Phys. Rev. E 82, 011113 (2010).
- [15] Nogawa, T., Hasegawa, T., "Monte Carlo simulation study of the two-stage percolation in enhanced binary trees", Journal of Physics A, Math. Theor. 42, 145001 (2009)
- [16] Benjamini, I., Schramm, O., "Percolation in the hyperbolic plane", Journal of American Mathematical Society, vol. 14, Number 2, Pages 487-507, 2000.
- [17] Baek, S. K., Minnhagen, P., Kim, B.J., "Percolation on hyperbolic lattices", Phys. Rev. E, vol. 79, (2009).
- [18] Flory, P.J. "Molecular Size Distribution in Three Dimensional Polymers. II. Trifunctional Branching Units", J. Am. Chem. Soc., 1941, 63 (11), pp 3091-3096.
- [19] <http://pajek.imfm.si/doku.php?id=start>
- [20] Nogawa, T., Hasegawa, T., "Reply to comment on 'Monte Carlo simulation study of the two-stage percolation in enhanced binary trees'", J. Phys. A: Math. Theor. 42 478002.
- [21] Kubo, R., "The Fluctuation-dissipation theorem", Rep. Prog. Phys. vol 29, pp 255, 1966.
- [22] Salinas, S. "Introdução à Física Estatística", Edusp.
- [23] R. J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*, Academic Press, 1982
- [24] Last B. J., Thouless D. J., "Percolation Theory and Electrical Conductivity" Phys. Rev. Lett. 27, 1719-1721 (1971)
- [25] Bender, E.A., Canfield E.R., "The asymptotic number of labeled graphs with given degree sequences", Journal of Combinatorial Theory A ,vol 24, pp 296-307, (1978).
- [26] Newman, M., "Random graphs as models of networks", arXiv:cond-mat/0202208, Handbook of Graphs and Networks, Willey, 2003.

- [27] Gould, H., Tobochnik, J., Christian, W., "Introduction to Computer simulation Methods", 3 ed., Addison-Wesley, (2006).
- [28] Barabasi A-L. Albert R., "Statistical mechanics of complex networks", *Reviews of Modern Physics* 74, 47 (2002).
- [29] http://www2.renesas.com/faq/en/f_yougo.html#0004
- [30] http://en.wikipedia.org/wiki/Seven_Bridges_of_Königsberg
- [31] <http://www.e6cvd.com/cv d/page.jsp?pageid=361>
- [32] <http://en.wikipedia.org/wiki/File:Breadth-first-tree.svg>
- [33] Griffiths, D.J., *Introduction to Electrodynamics*, Benjamin Cummings, 3 ed, 1999.
- [34] <http://mathworld.wolfram.com/RegularTessellation.html>
- [35] Landau, D.P, Binder, K. *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, Cambridge University Press, 3 ed., 2009.
- [36] Leath, P. L., "Cluster size and boundary distribution near percolation threshold", *Phys. Rev. B* 1(14), 5046-5055 (1976).
- [37] Minnhagen, P., Baek, S.K., Kim, B.J., "Comment on 'Monte Carlo simulation study of the two-stage percolation in enhanced binary trees'" *J. Phys. A: Math. Theor.* 42 478001.
- [38] Newman, M. E. J., Ziff, R. M., "Fast Monte Carlo algorithm for site or bond percolation", *Phys. Rev. E* 64, (2001)
- [39] Nienhuis, B., Nauenberg, M., "First-Order Phase Transitions in Renormalization-Group Theory", *Phys. Rev. Lett.* 35, 477-479 (1975)
- [40] Fisher, M. E., Berker, A. N., "Scaling for first-order phase transitions in thermodynamic and finite systems", *Phys. Rev. B* 26, 2507-2513 (1982)
- [41] Stanley, H.E.S., *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, Clarendon Press, Oxford (1971).

- [42] Levy, S., *Automatic Generation of Hyperbolic Tilings*, Leonardo, vol. 25 pp 349/354 (1992).
- [43] Epstein, D. B. A., Paterson, M. S., Camon, G. W., Holt, D. F., Levy, S. V., Thurston, W. P., *Word Processing in groups*, A. K. Peters, MA, (1992).