



UNIVERSIDADE FEDERAL DO PIAUÍ  
CENTRO DE CIÊNCIAS DA NATUREZA-CCN  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA-PPGF

MODELO DO VOTO DA MAIORIA EM REDE  
DIRECIONADA DE “SMALL-WORLD-VORONOI-  
DELAUNAY”

BRENDA RAFAELLA DA SILVA CALDAS

Dissertação de Mestrado

Teresina-PI  
Novembro de 2017

BRENDA RAFAELLA DA SILVA CALDAS

**MODELO DO VOTO DA MAIORIA EM REDE  
DIRECIONADA DE “SMALL-WORLD-VORONOI-  
DELAUNAY”**

Orientador: Prof. Dr. Francisco Welington de Sousa Lima-UFPI

Trabalho de Dissertação de Mestrado apresentado ao Programa de Pós-Graduação em Física (PPGF) da Universidade Federal do Piauí (UFPI) como requisito final para a obtenção do grau de Mestre em Física da Matéria Condensada.

Teresina-PI

Novembro de 2017

FICHA CATALOGRÁFICA  
Universidade Federal do Piauí  
Biblioteca Comunitária Jornalista Carlos Castello Branco  
Serviço de Processamento Técnico

C145m Caldas, Brenda Rafaella da Silva.

Modelo do Voto da Maioria em rede direcionada de “small-world-voronoi-delaunay” / Brenda Rafaella da Silva Caldas. -- 2017.  
45 f. : il.

Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal do Piauí, Centro de Ciências da Natureza, Programa de Pós-Graduação em Física, Teresina, 2017.

“Orientação: Prof. Dr. Francisco Welington de Sousa Lima.”

1. Redes. 2. Modelo do Voto da Maioria. 3. Método de Monte Carlo.  
4. Voronoi-Delaunay. 5. Expoente crítico. I. Título.

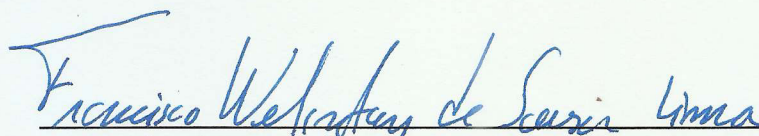
CDD 621.319 2

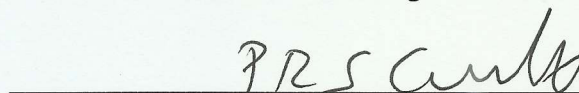
# “MODELO DO VOTO DA MAIORIA EM REDE DIRECIONADA “SMALL-WORLD-VORONOI-DELAUNAY”


Brenda Rafaella da Silva Caldas

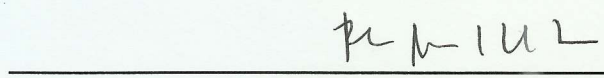
Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências da Natureza-CCN/UFPI.

Comissão Julgadora:

  
Prof. Dr. Francisco Wellington de Sousa Lima (Orientador)

  
Prof. Dr. Paulo Renato Silva de Carvalho/UFPI

  
Prof. Dr. Valdemiro da Paz Brito/UFPI

  
Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho/UFC

Aprovada em 24/11/2017

# Agradecimentos

- A Deus por ter permitido que tudo isso acontecesse, sempre me fortalecendo e me sustentando nos momentos mais difíceis desta longa jornada;
- Aos meus pais Antônio José e Edna Maria;
- Aos meus irmãos, pela amizade e incentivo, bem como aos demais familiares, que apoiaram e incentivaram nas horas mais difíceis durante o curso;
- Ao meu amado esposo Nerivan, pelo incentivo e apoio durante esta jornada;
- A toda a minha família por acreditarem no meu sucesso e continuarem me fortalecendo cada dia mais;
- A todos os Professores da Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Piauí-UFPI que contribuíram para minha formação neste mestrado;
- Ao meu orientador Prof. Dr. Francisco Wellington de Sousa Lima, pela excelente orientação e pela sua dedicação nas pesquisas.

## Resumo

O Modelo do Voto da Maioria é um modelo de não equilíbrio que apresenta transição de fase de segunda ordem que caracteriza o sistema na vizinhança da transição de fase. Neste trabalho, estudamos as propriedades críticas do modelo do voto da maioria em rede direcionada de “Small-World-Voronoi-Deulanay” onde a disordem do sistema é simulada utilizando o algoritmo de Monte Carlo. Com estas propriedades foram calculadas a temperatura crítica do sistema e os expoentes críticos  $\frac{\gamma}{\nu}$ ,  $\frac{\beta}{\nu}$  e  $\frac{1}{\nu}$  para diversos valores de probabilidade  $p$  (0.1, 0.3, 0.5, 0.7 e 0.9) em diferentes tamanhos de rede  $N=5000, 10000, 20000, 40000, 60000$  e  $80000$  sítios. Calculamos a magnetização, susceptibilidade e o cumulante de quarta ordem de Binder. Os resultados obtidos mostram que a susceptibilidade diverge para o infinito e apresenta uma transição de fase de segunda ordem. Os expoentes críticos encontrados são independentes dos valores das probabilidades  $p$  de reLigações e também são diferentes dos expoentes do modelo de Ising em duas dimensões.

Palavra-Chave: Modelo do voto da maioria, Voronoi-Delaunay, Monte Carlo, expoente crítico.

## Abstract

The Majority Vote Model (MVM) is a non-equilibrium model that presents In this work, we study the critical properties of the majority-voting model in the Voronoi-Deulanay Small-World network where the system disorder is simulated using the algorithm of Monte Carlo. With these properties the critical temperature of the system and the critical exponents  $\frac{\gamma}{\nu}$ ,  $\frac{\beta}{\nu}$  e  $\frac{1}{\nu}$  for several probability values  $p=(0.1, 0.3, 0.5, 0.7$  e  $0.9)$ , in different network sizes  $N = 5000, 10000, 20000, 40000, 60000$  and  $80000$  sites. We calculate the magnetization, susceptibility and the fourth-order accumulator of Binder. The results show that the susceptibility diverges to infinity and presents a second order phase transition. The critical exponents found are independent of the values of the probabilities  $p$  of religions and are also different from the exponents of the Ising model in two dimensions.

Keyword: Model of majority vote, Voronoi-Delaunay, Monte Carlo, critical exponent.

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Método de Monte Carlo</b>	<b>4</b>
2.1	Introdução . . . . .	4
2.2	Simulação de Monte Carlo . . . . .	5
2.2.1	Introdução . . . . .	5
2.2.2	Processo de Markov . . . . .	6
2.2.3	Ergodicidade . . . . .	7
2.2.4	Balanço Detalhado . . . . .	7
2.3	Algoritmos . . . . .	8
2.3.1	Introdução . . . . .	8
2.3.2	Metropolis . . . . .	9
2.3.3	Banho Térmico . . . . .	10
2.3.4	Equação Master . . . . .	11
<b>3</b>	<b>Transição de Fase e Fenômenos Críticos</b>	<b>12</b>
3.1	Introdução . . . . .	12
3.2	Modelo de Ising . . . . .	13
3.3	Expoentes Críticos . . . . .	15
<b>4</b>	<b>Redes</b>	<b>19</b>
4.1	Redes Complexas . . . . .	19
4.2	Rede “Small-World” . . . . .	20
4.3	Rede de Voronoi-Delaunay . . . . .	21
4.3.1	Introdução . . . . .	21



<b>5</b>	<b>Modelo do Voto da Maioria</b>	<b>23</b>
5.1	Introdução . . . . .	23
<b>6</b>	<b>Resultados e Discussões</b>	<b>26</b>
6.1	Modelo e Simulação . . . . .	26
6.2	Simulação em rede de Voronoi-Delaunay . . . . .	28
<b>7</b>	<b>Conclusão</b>	<b>41</b>
<b>8</b>	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>42</b>

# Lista de Figuras

3.1	Diagrama de fase. . . . .	13
3.2	Sítios de spins formando uma rede quadrada, onde o estado do sítio é a orientação do spin. Os sítios das bordas, representam as condições de contorno da rede. . . . .	14
4.1	Rede “Small-World” . . . . .	21
4.2	O lado esquerdo diagrama de Voronoi e o lado direito triangulação de Delaunay. . . . .	22
6.1	Curvas da magnetização para tamanho $N = 80000$ sítios com probabilidades diferentes. . . . .	29
6.2	Curvas da susceptibilidade para tamanho $N = 80000$ sítios com probabilidades diferentes. . . . .	30
6.3	Magnetização em função de $T$ para vários tamanhos de redes com $N = 5000$ , $N = 10000$ , $N = 20000$ , $N = 40000$ , $N = 60000$ e $N = 80000$ sítios e probabilidade de religação $p = 0.5$ . . . . .	31
6.4	Susceptibilidade em função de $T$ para vários tamanhos de redes com $N = 5000$ , $N = 10000$ , $N = 20000$ , $N = 40000$ , $N = 60000$ e $N = 80000$ sítios e probabilidade de religação $p=0.5$ . . . . .	32
6.5	Cumulante de quarta-ordem de Binder em função de $T$ para vários tamanhos de redes com $N = 5000$ , $N = 10000$ , $N = 20000$ , $N = 40000$ , $N = 60000$ e $N = 80000$ sítios e probabilidade de religação $p = 0.5$ . . . . .	33
6.6	$\ln [T_c(L) - T_c]$ em função de $L$ para vários valores de $p$ . As linhas contínuas são ajustes lineares. . . . .	34
6.7	Gráfico do logaritmo do módulo da magnetização versus o logaritmo de $L$ . As linhas contínuas são os melhores ajustes lineares. . . . .	35

6.8	Gráfico do logaritmo da susceptibilidade em $T_c$ em função do logaritmo de L. . . . .	36
6.9	Gráfico do logaritmo da susceptibilidade máxima em função do logaritmo de L. . . . .	38
6.10	Gráfico data colapso da magnetização. . . . .	39
6.11	Gráfico data colapso da susceptibilidade. . . . .	40

# Capítulo 1

## Introdução

A simulação computacional surgiu em 1940 com a construção do primeiro computador eletrônico, ENIAC (Electronic Numerical Integrator And Computer) criado por J.P. Eckert e J.W. Mauchly na Universidade da Pensilvânia, EUA. Este computador foi utilizado por Von Neumann, Ulam, Metropolis e Frankel para realizarem cálculos estocásticos. Em 1946, o matemático Stanislaw Ulam durante um jogo de paciência tentou calcular as propriedades de sucesso de uma determinada jogada utilizando o análise combinatória. Após realizar vários cálculos percebeu que uma alternativa mais prática seria realizar inúmeras jogadas e contar quantas vezes cada resultado ocorria. Ulam sabia que técnicas de amostragem estatística, como esta, não eram muito usadas por envolverem cálculos extremamente demorados, tediosos e sujeitos a erros.

Ulam, em uma conferência sugeriu que o computador eletrônico ENIAC tivesse potencialidade para realizar amostragem estatística para a resolução de problemas físicos. Posteriormente, esse método utilizado ficou conhecido como Método de Monte Carlo, nome inspirado em um tio de Ulam, que jogava constantemente no cassino de Monte Carlo, cujo aspectos de suas roletas estava ligado ao método.

O Método de Monte Carlo (MC) é um método estatístico utilizado para resolver problemas por meio de amostragem aleatória. Tem diversas aplicações em áreas como: física, biologia e matemática. O Método de Monte Carlo (MC), foi formalizado em 1949, por meio do artigo intitulado “Monte Carlo Method”, publicado por John Von Neumann e Stanislav Ulam [1].

Com a aplicação do Método MC podemos estudar o Modelo do Voto da Maioria em diversos tipos de redes. É um modelo de não equilíbrio definido pela dinâmica estocás-

tica com regras locais e simetria up-down, definido por uma rede regular quadrada que apresenta transição de fase de segunda ordem com expoentes críticos  $\beta$ ,  $\gamma$ , e  $\nu$  que caracterizam o sistema na vizinhança da transição de fase, idêntico aos expoentes críticos de equilíbrio do modelo Ising em duas dimensões.

Neste trabalho estudamos o modelo do Voto da Maioria em rede direcionada de “Small-World-Voronoi-Deulanay” com simulações para redes de tamanhos  $N = 5000, 10000, 20000, 40000, 60000$  e  $80000$  sítios e probabilidade de religações  $p=0.1, 0.3, 0.5, 0.7$  e  $0.9$ , onde cada sítio pode perder a ligação com seu primeiro sítio e se conectar com outro sítio mais distante, através de ligações de curto e longo alcance.

O presente trabalho está dividido em capítulos da seguinte forma: no Capítulo 2, fizemos uma breve apresentação sobre a simulação de Monte Carlo, com contexto e histórico em que o método surgiu. O Capítulo 3, traz um pouco sobre a transição de fase e fenômenos críticos, onde podemos ver a possibilidade de estudar o comportamento de sistemas complexos, utilizando os métodos numéricos.

No Capítulo 4, apresentamos as definições sobre redes, como conectividade, menor caminho médio e incluímos alguns dos principais modelos de redes estudados. O Capítulo 5, descreve o modelo do Voto da Maioria apresentando suas propriedades e aplicações.

O Capítulo 6 apresenta resultados obtidos nas simulações, descritos de forma detalhada. E por fim, no Capítulo 7 apresentamos as conclusões obtidas sobre os resultados discutindo sua consistência diante de outros trabalhos.

# Capítulo 2

## Método de Monte Carlo

### 2.1 Introdução

Em 1944, enquanto visitava a Universidade da Pensilvânia, John von Neumann teve a inspiração de projetar um computador eletrônico de propósito geral, que executasse cálculos para resolver os problemas mais diversos e difíceis. Este novo computador abriu um universo de possibilidades. Um dos primeiros cientistas a vislumbrar as capacidades do novo dispositivo, foi o matemático Stanislaw Ulam. Uma de suas primeiras idéias para o uso de computadores foi aplicá-los para a solução de problemas usando uma abordagem estatística que ficou conhecida como Método de Monte Carlo.

O método estatístico para solução de problemas já era conhecido desde o século XVIII. Um exemplo é o cálculo do número através das Agulhas de Buffon [2] e Ulam já tinha conhecimento deste método. A abordagem estatística necessitava de experimentos repetitivos e tediosos pois envolve muitos passos e um número excessivo de contas e números. Entretanto, aquilo que para ser feito necessitava de experimentos repetitivos e tediosos passou a ser mais fácil de resolver em pouco tempo com o auxílio dos computadores. O método de Monte Carlo passou a ser programado e o resultado final determinado com qualquer precisão desejada. O Método de Monte Carlo (MMC) é um método estatístico utilizado para resolver problemas por meio de amostragem aleatória. Pode ser aplicado em problemas determinísticos e em diversas áreas como física, biologia e matemática.

Os pesquisadores John von Neumann e Stanislaw Ulam [3] foram os primeiros a utilizarem o método de Monte Carlo para simularem o problema da difusão aleatória de nêutrons na fissão nuclear. O processo de fissão nuclear consiste na divisão do núcleo de

um átomo instável em dois átomos menores pelo bombardeamento de partículas como nêutrons. Este processo libera grande quantidade de energia. Durante o Projeto Manhattan um problema era estimar a quantidade de urânio enriquecido e as condições necessárias para iniciar uma reação em cadeia. A solução deste problema através da solução analítica de equações matemáticas que descrevem o fenômeno é impraticável. Assim, Ulam propôs o uso do método estatístico para obter boas estimativas para resposta do problema [4].

Em 1948, Nicolas Metrópolis e seus colaboradores [5] desenvolveram o algoritmo de Metrópolis. Este algoritmo é de grande importância para resolver problemas que utilizam o método de Monte Carlo e em soluções de problemas em diversas áreas. O Método de Monte Carlo foi formalizado em 1949, por meio do artigo intitulado “Monte Carlo Method”, publicado por John Von Neumann e Stanislaw Ulam [1]. Em 1949 Ulam e Metrópolis publicaram seu primeiro artigo utilizando o MMC [5].

O MMC exige que o sistema físico ou matemático seja descrito em termos de funções de distribuição de probabilidades. Para sua implementação, há uma fonte geradora de números aleatórios entre 0 e 1. Ao final, os resultados dessa amostragem aleatória são acumulados e manipulados para produzir resultados desejados.

## 2.2 Simulação de Monte Carlo

### 2.2.1 Introdução

Para realizar uma simulação computacional utilizando o MMC, inicialmente devem ser seguidas algumas regras para garantir os dados corretos. A simulação depende do tamanho da amostra e de sua qualidade. A amostra é obtida em termos de números aleatórios reais e distribuídos uniformemente em um intervalo de 0 a 1. Os passos de Monte Carlo se juntam com essa amostra. Para obter as medidas de grandezas termodinâmicas as componentes dessa amostra devem estar nos estados de um sistema termodinâmico. Para obter êxito na realização da simulação deve-se observar a influência do tempo de simulação na escolha da quantidade de passos a serem realizados, criando a necessidade do uso de computadores potentes para a realização de uma simulação consistente em tempo satisfatório.

### 2.2.2 Processo de Markov

A teoria dos processos estocásticos foi desenvolvida em conexão com o estudo de flutuações e ruído em sistemas físicos. O processo estocástico é um modelo matemático de um processo que é governado por leis de probabilidade. Uma variável aleatória é resultado de um experimento. Esta variável pode assumir qualquer valor dentre um conjunto de possíveis valores, mas não sabemos qual deles em princípio.

Se um sistema de natureza probabilística evolui com o tempo, as variáveis aleatórias associadas a este sistema sofrem mudanças. Para variáveis que dependem de um parâmetro  $t$ , que representa um dado instante de tempo, as variáveis aleatórias deste sistema são chamadas de variáveis estocásticas. Supondo que o sistema possa atingir um estado estacionário, a probabilidade de encontrar o sistema num dado estado varia até que o sistema esteja num estado final estacionário, onde as transições não causam mudanças na distribuição de probabilidade.

O Processo de Markov é um processo estocástico que consiste em gerar sucessivos estados independentes dos estados anteriores, de modo que, dado um sistema em um estado  $\alpha$ , gera-se um novo estado  $\nu$  desse sistema sendo  $\nu$  independente de  $\alpha$ . Esta independência incrementa o grau de aleatoriedade aos estados.

A probabilidade de gerar um estado  $\nu$  dado um estado  $\alpha$  é chamada de probabilidade de transição  $P(\alpha \rightarrow \nu)$ , e para acontecer um processo de Markov todas as probabilidades de transição deve satisfazer as seguintes condições:

- i) Não deve mudar em relação ao tempo;
- ii) Devem depender apenas das propriedades do estado atual  $\alpha$  e do novo estado  $\nu$ .

A probabilidade de transição  $P(\alpha \rightarrow \nu)$  deve satisfazer a seguinte condição

$$\sum_{\nu} P(\alpha \rightarrow \nu) = 1, \quad (2.1)$$

onde  $P(\alpha \rightarrow \nu)$  não varia com o tempo e depende apenas dos estados  $\alpha$  e  $\nu$ . A forma pela qual gera-se o novo estado, deve ser aleatória. A probabilidade de transição  $P(\alpha \rightarrow \alpha)$  do sistema permanecer no mesmo estado  $\alpha$ , tem que ser diferente de zero.

O processo de Markov é utilizado nas simulações de Monte Carlo para gerar a cadeia de Markov. Começando com o estado  $\alpha$  e usando o processo para gerar um novo estado  $\nu$  mantém-se este estado no processo para gerar o outro estado  $\beta$ . O processo de Markov, é escolhido de modo que, quando ele é realizado durante um certo período de tempo,



suficientemente longo a partir de qualquer estado do sistema, produzirá uma sucessão de estados que aparecem com probabilidade dada pela distribuição de Boltzmann. Portanto, partindo de um estado qualquer, o processo de Markov conduz o sistema para um estado de equilíbrio com probabilidades dada pela distribuição de Boltzmann.

### 2.2.3 Ergodicidade

Salinas [6], em uma discussão sobre o postulado fundamental da Mecânica Estatística apresenta uma hipótese ergódica que fundamenta o referido postulado usando um formalismo de espaço de fase clássico para microestados garantindo que a trajetória do sistema físico neste espaço deve visitar todos os pontos do ensemble. A ergodicidade é a garantia de que todos os estados do sistema sejam acessíveis.

A ergodicidade assegura que qualquer estado do sistema físico pode ser atingido a partir de qualquer outro estado via sequência de processos de Markov. A ergodicidade é uma propriedade referente à relação entre a média temporal de um processo estocástico calculada a partir de uma série temporal. No processo de Markov há a possibilidade de algumas probabilidades de transição entre dois estados serem nulas, porém a condição de ergodicidade garante que deve haver pelo menos um trajeto cuja probabilidade de transição entre dois estados escolhidos não seja nula. A condição de ergodicidade é que torna executável o processo de Markov, partindo de um dado estado do sistema é possível alcançar qualquer outro estado em um intervalo de tempo suficiente para isto.

### 2.2.4 Balanço Detalhado

Para garantir que haja sempre um caminho para a transição entre dois estados quaisquer do sistema é necessário o balanceamento das transições entre estados. A taxa de transição para um dado estado, e desse para um outro estado qualquer deve ser igual. O balanço detalhado é uma condição que consiste em garantir que o processo de Markov se realize satisfatoriamente fazendo com que no equilíbrio o sistema alcance a distribuição de Boltzmann. Consideremos que o sistema esteja em equilíbrio, a condição determinante é que a taxa de variação de probabilidade de o sistema ir para o estado  $\mu$  e sair deste devem ser igual. Matematicamente podemos expressar como

$$\sum_{\mu} p_{\mu} P(\mu \rightarrow \nu) = \sum_{\nu} p_{\nu} P(\nu \rightarrow \mu). \quad (2.2)$$

Usando a equação(2.1) podemos reduzir a equação (2.2) para

$$p_{\mu} = \sum_{\nu} p_{\nu} P(\nu \rightarrow \mu). \quad (2.3)$$

Para que a probabilidade de transição satisfaça esta equação é necessário que a probabilidade  $p_{\mu}$  esteja no equilíbrio da dinâmica do processo de Markov. O fato desta probabilidade de transição satisfazer esta equação não é suficiente para garantir que a distribuição de probabilidade de um estado qualquer do sistema tenda para  $p_{\mu}$ . Barkema [7] apresenta uma solução bem detalhada que satisfaz uma condição adicional

$$p_{\mu} P(\mu \rightarrow \nu) = p_{\nu} P(\nu \rightarrow \mu). \quad (2.4)$$

Essa é a chamada *condição de balanço detalhado*, que satisfaz a equação (2.2) e nos diz que na situação de equilíbrio, devemos ter o mesmo número de transições de  $\mu$  para  $\nu$  ou na direção contrária, de  $\nu$  para  $\mu$ .

Para que a distribuição no equilíbrio obedeça a distribuição de Boltzmann, devemos escolher  $p_{\mu}$  como sendo a probabilidade de transição, e esta deve obedecer a seguinte equação:

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{p_{\nu}}{p_{\mu}} = e^{-\beta(E_{\nu} - E_{\mu})}. \quad (2.5)$$

Satisfazendo as equações (2.1) e (2.5) a distribuição no equilíbrio acontecerá justamente em uma distribuição de Boltzmann.

## 2.3 Algoritmos

### 2.3.1 Introdução

Algoritmo é um procedimento que descreve uma sequência de passos a serem seguidos em ordem específica para resolver um problema. Existe um algoritmo computacional muito utilizado na área de física para realizar procedimentos que são executados por um computador, no qual estes procedimentos são fundados em uma determinada linguagem

que se comunica com o computador, determinando os cálculos a serem realizados na execução da simulação.

Para realizar uma simulação utilizando o MMC é necessário que o algoritmo complete todos os processos descritos nas seções anteriores fazendo com que a máquina calcule de maneira correta e colete as informações necessárias para o sistema estudado. Os algoritmos, na simulação de Monte Carlo, podem ser classificados como locais (onde a atualização dos estados ocorre sítio à sítio) ou globais (onde a atualização dos estados ocorre em aglomerados de sítios de uma só vez). Adiante serão apresentados dois algoritmos locais: Metrópolis e Banho Térmico, onde a atualização dos estados ocorre sítio à sítio.

### 2.3.2 Metrópolis

Um dos algoritmos usados no método de Monte Carlo é o Algoritmo de Metrópolis, que foi introduzido por Metrópolis e colaboradores em 1953 [8]. No algoritmo de Metrópolis, configurações são geradas de acordo com a distribuição de Boltzmann, efetuando uma sequência de sorteios aleatórios de transições entre estados, garantindo que a configuração final seja a de equilíbrio.

Para determinar a probabilidade de transição de uma dada configuração é necessário conhecer a chance de ocorrência de todas as outras configurações. Vamos considerar duas configurações  $\mu$  e  $\nu$  quaisquer, as probabilidades de transição são dadas por

$$P(\mu \rightarrow \nu) = e^{\beta(E_\nu - E_\mu)} \quad \text{se } E_\nu - E_\mu > 0, \quad (2.6)$$

$$1 \quad \text{se } E_\nu = E_\mu, \quad (2.7)$$

onde  $E_\nu$  e  $E_\mu$  denotam respectivamente a energia de configuração antiga e nova. Como  $P(\mu \rightarrow \nu)$  é uma grandeza diferente de zero para todos os estados  $\mu$  e  $\nu$ , a condição de ergodicidade é obedecida. Para  $\Delta E = E_\nu - E_\mu$  a nova configuração tem uma energia mais elevada e sua aceitação deve obedecer a distribuição de Boltzmann para  $\Delta E$ .

Utilizando o MMC para a construção do algoritmo de Metrópolis deve seguir as seguintes etapas:

- i) Escolher uma configuração inicial aleatória para os spins;
- ii) selecionar aleatoriamente um sítio da rede ;

- iii) computar a diferença de energia  $\Delta E = E_\nu - E_\mu$  resultante da mudança do valor do spin;
- iv) se  $\Delta E < 0$  a configuração é aceita, mas se  $\Delta E > 0$  a configuração deste estado é menos provável, segue-se para o próximo passo;
- v) calcular a probabilidade de transição  $z$ , onde  $z = e^{(-\beta\Delta E)}$ ;
- vi) gerar um número aleatório  $r$  escolhido entre 0 e 1;
- vii) mudar o sinal se  $r < z$ , caso contrário permanece do jeito que está;
- viii) guardar a configuração gerada, escolhe um novo sítio e repetir o item ii .

Depois de realizar todas essas etapas para um grande número de spins, pode-se calcular as grandezas físicas como: magnetização, calor específico, susceptibilidade, etc, para fazer uma média aritmética.

Para garantir a condição de ergodicidade e balanço detalhado, o tempo de simulação deve ser necessário e grande o suficiente para que a simulação percorra a rede inteira. Esse tempo é chamado de passo de Monte Carlo (MC), que realiza a visita em cada um dos sítios da rede. Se for realizado um número pequeno de passos de MC, este violará a condição de ergodicidade e não será possível calcular a média aritmética. Estas médias levarão a um grande erro na obtenção das grandezas de interesse.

### 2.3.3 Banho Térmico

O algoritmo Banho Térmico foi proposto em 1984 por S. German e D. German [9]. Este algoritmo se baseia em determinar uma probabilidade de orientação do spin de acordo com a orientação de seus vizinhos, independente do estado atual. Na simulação este algoritmo escolhe um sítio, e a probabilidade deste sítio transitar de um estado para outro é

$$P(\sigma_{i_\mu} \rightarrow \sigma_{i_\nu}) = \frac{e^{-\beta H \sigma_{i_\mu}}}{\sum_{\sigma_i} e^{-\beta H \sigma_{i_\nu}}}, \quad (2.8)$$

onde  $\sigma_i$  é o estado do sítio  $i$ ,  $H = -\sum_j \sigma_j - h$ , sendo  $h$  um campo externo e  $H$  é a soma da contribuição dos primeiros vizinhos do sítio  $i$ . Para que este algoritmo satisfaça o balanço detalhado é necessário que

$$e^{-\beta H \sigma_{i\mu}} \frac{e^{-\beta H \sigma_{i\nu}}}{\sum_{\sigma_i} e^{-\beta H \sigma_{i\nu}}} = e^{-\beta H \sigma_{i\nu}} \frac{e^{-\beta H \sigma_{i\mu}}}{\sum_{\sigma_i} e^{-\beta H \sigma_{i\mu}}}. \quad (2.9)$$

Este algoritmo Banho Térmico apresenta uma condição de ergodicidade, desde que seja possível chegar a qualquer configuração de spins alternando individualmente os spins.

### 2.3.4 Equação Master

A equação master governa a evolução temporal dos processos estocásticos markovianos. A probabilidade  $P(\alpha, t)$  de encontrar um sistema no estado  $\alpha$ , num determinado instante de tempo  $t$  deve satisfazer a seguinte condição

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\alpha, t) = T' - T'', \quad (2.10)$$

onde a taxa de variação da probabilidade  $T'$  do estado  $\alpha$  é dada por

$$T' = \sum_{\alpha'} P(\alpha', t) w(\alpha' \rightarrow \alpha), \quad (2.11)$$

onde  $w(\alpha' \rightarrow \alpha)$  é a probabilidade para que o sistema mude do estado  $\alpha'$  para o estado  $\alpha$ . A taxa de variação da probabilidade  $T''$  do estado  $\alpha$  deve satisfazer a condição

$$T'' = P(\alpha, t) \sum_{\alpha''} w(\alpha \rightarrow \alpha''). \quad (2.12)$$

Portanto, a equação mestra

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\alpha, t) = \sum_{\alpha'} [P(\alpha', t) w(\alpha' \rightarrow \alpha) - P(\alpha, t) w(\alpha \rightarrow \alpha')], \quad (2.13)$$

Esta equação nos fornece a taxa de mudança na probabilidade  $P(\alpha, t)$  devido às transições de um estado  $\alpha'$  para o estado  $\alpha$  (primeiro termo do somatório) e devido as transições do estado  $\alpha$  para outro  $\alpha'$  (segundo termo do somatório). Podemos verificar nesta equação uma propriedade básica de um processo markoviano: conhecendo completamente o sistema num instante, é possível determinar o comportamento futuro.

# Capítulo 3

## Transição de Fase e Fenômenos Críticos

### 3.1 Introdução

No universo, observamos que uma mesma substância pode se apresentar de formas diferentes na natureza. Existem materiais que apresenta mais de um dos estados, exemplo a água, que apresenta ponto de fusão e ebulição próximos. Os pontos de fusão e de ebulição são pontos críticos onde acontecem as mudanças entre estados, sendo esta mudança conhecida como transição de fase. A transição de fase acontece quando alterando as condições do sistema, ele passa de uma fase para outra com propriedades distintas.

Para entender os fenômenos críticos é necessário o estudo das transições de fases. Paul Ehrenfest [10] propôs que uma ordem de transição de fase seria dada pela ordem da derivada da energia livre, em relação aos parâmetros do sistema, que apresentasse descontinuidade. Ehrenfest, classificou as transições de fase como sendo descontínua ou contínua. Nas transições de fase descontínua as mudanças ocorrem de maneira rápida, como no caso da água que passa do estado líquido para o estado sólido, apresentam uma descontinuidade na derivada primeira. Nas transições de fase contínua as mudanças ocorrem de maneira suave, apresentam uma singularidade na derivada segunda. A Figura (3.1) mostra um gráfico da pressão em função da temperatura, em que no ponto crítico a segunda derivada é nula, e há uma transição de fase de segunda ordem.

O problema fundamental na teoria das transições de fase é estudar o comportamento do sistema nas vizinhanças do ponto crítico. Este comportamento é definido pela natureza das singularidades das funções termodinâmicas no ponto crítico. O estudo destas transições e fenômenos críticos tem aumentado ao longo dos últimos 50 anos, e neste período

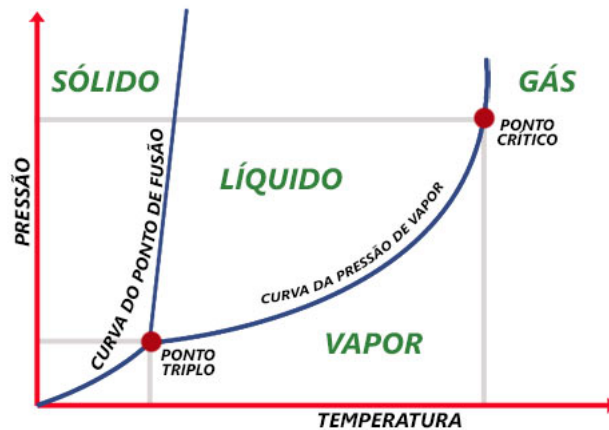


Figura 3.1: Diagrama de fase.

somente algumas poucas soluções exatas foram encontradas. Houve um aumento natural na necessidade de soluções aproximadas e investigações baseadas em técnicas numéricas [11-13]. As propriedades não analíticas de um sistema próximo a uma transição de fase de segunda ordem são conhecidas como fenômenos críticos, e o ponto de transição no diagrama de fases é chamado de ponto crítico.

## 3.2 Modelo de Ising

O modelo de Ising foi proposto em 1920 por Wilhelm Lenz com o objetivo de estudar os fenômenos magnéticos em certos materiais. Este modelo foi resolvido por seu estudante de doutorado Ernest Ising [14] em 1925 para o caso unidimensional, o qual chegou à conclusão que o modelo não apresentava uma transição de fase, equivocadamente ele sugeriu que em outras dimensões o sistema também não apresentava transição de fase. No entanto, resultados de campo médio sugeriam a possibilidade de existir pelo menos uma transição de fase em dimensões superiores. Mas em 1944 o norueguês Lars Onsager [15] resolveu analiticamente o modelo de Ising e observou que o sistema apresentava uma transição de fase para duas dimensões, desde então este tem se tornando base para o estudo de fenômenos críticos e transição de fase.

Através do modelo de Ising pode se obter as grandezas termodinâmicas para uma análise de criticalidade. Para realizar as simulações em redes quadradas utilizando o processo markoviano e o MMC, consideramos que os spins nos sítios interagem com seus vizinhos podendo se inverter ou não em uma dinâmica, ilustrada na figura (3.2). Após a reali-

zação de vários passos de Monte Carlo obtém-se as grandezas termodinâmicas: energia, magnetização e calor específico.

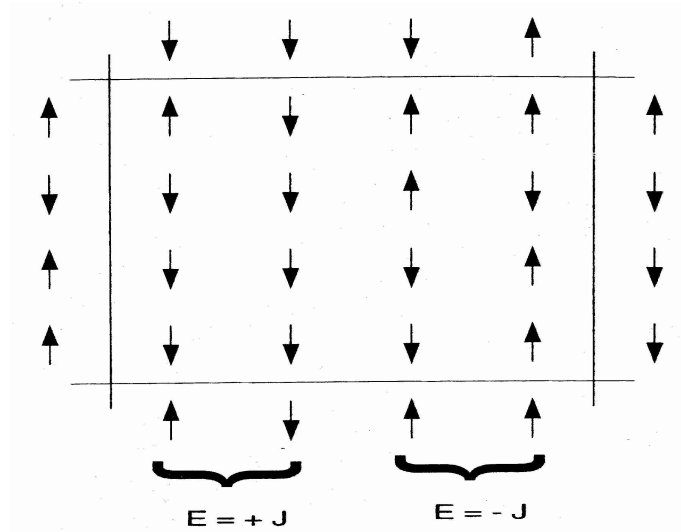


Figura 3.2: Sítios de spins formando uma rede quadrada, onde o estado do sítio é a orientação do spin. Os sítios das bordas, representam as condições de contorno da rede.

O modelo de Ising, é descrito pela seguinte Hamiltoniana

$$H = \sum_{i,j} -J\sigma_i\sigma_j, \quad (3.1)$$

onde  $J$  é a energia de interação entre os primeiros vizinhos. A soma é realizada sobre todos os pares de primeiros vizinhos  $i, j$ . A função de partição canônica é:

$$Z_N = \sum_{\sigma_i} e^{-(\beta H\sigma_i)}, \quad (3.2)$$

onde  $H$  é um campo externo e a soma é realizado sobre todas as variáveis de spin.

Na proximidade do ponto crítico as grandezas possuem comportamentos críticos. As grandezas termodinâmicas são obtidas através do estudo do fenômeno crítico próximo ao ponto crítico. O valor da magnetização para sistemas magnéticos se anulam para  $T > T_c$ , dando origem a fase desordenada e para  $T < T_c$  a fase ordenada.

A magnetização de spin é dada pela seguinte equação

$$M = \sum_i \sigma_i. \quad (3.3)$$

Para obter a magnetização por sítio temos a seguinte equação



$$m = \frac{M}{N}, \quad (3.4)$$

onde  $N$  é o número de sítios e  $M$  é a contribuição de todos os sítios do sistema.

A partir da magnetização obtém-se a susceptibilidade magnética

$$\chi(T) \equiv N(\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2). \quad (3.5)$$

A energia por sítio é obtida por

$$u = -\frac{\langle E \rangle}{N}, \quad (3.6)$$

onde  $E$  é a energia do sistema.

O cumulante de Binder de quarta ordem é utilizado para calcular a temperatura crítica do sistema. É expresso em função da energia ou da magnetização. A equação do cumulante de Binder

$$U(T) \equiv 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2}, \quad (3.7)$$

onde  $\langle m \rangle$ ,  $\langle m^2 \rangle$  e  $\langle m^4 \rangle$  são médias termodinâmicas.

Essas variáveis são funções da temperatura e obedecem as relações de escala de tamanho finito

$$M = L^{\frac{-\beta}{\nu}} g_m(t), \quad (3.8)$$

$$\chi = L^{\frac{-\gamma}{\nu}} g_\chi t, \quad (3.9)$$

$$\frac{dU}{dT} = L^{\frac{1}{\nu}} g_\nu(t). \quad (3.10)$$

onde  $\beta$ ,  $\nu$  e  $\gamma$  são os expoentes críticos e  $g_m$ ,  $g_\chi$ ,  $g_\nu$  são as funções de tamanho de escala finitas.

### 3.3 Expoentes Críticos

Nas proximidades do ponto crítico, diferentes sistemas comportam-se de modo semelhante obedecendo a lei de potência cujos expoentes não são inteiros, os conhecidos expoentes críticos[16,17]. Para um determinado conjunto de expoentes críticos associamos

uma classe de universalidade ao sistema, de forma que expoentes que apresentem o mesmo conjunto de valores partilham a mesma classe de universalidade. Esta característica dos modelos de sistemas físicos depende da dimensionalidade do espaço em que o sistema é tratado, do número de componentes do parâmetro de ordem do sistema e do alcance das interações microscópicas no sistema. Esta universalidade dos expoentes sugere que estamos lidando com uma classe de sistemas que apesar de diferenças estruturais, apresentam um mesmo comportamento pertinente ao de sua classe [18]. Os expoentes críticos foram definidos para estudar o comportamento singular das funções termodinâmicas. O expoente crítico associado a uma função termodinâmica é dado por

$$f\left(\frac{T - T_c}{T_c}\right) = f(\varepsilon), \quad (3.11)$$

onde  $\varepsilon = \frac{T - T_c}{T_c}$  é considerado a medida da distância de um ponto de temperatura  $T$  qualquer até o ponto crítico  $T_c$ , desde que  $T$  esteja na vizinhança de  $T_c$ , é definido como

$$\lambda \equiv \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\ln|f(\varepsilon)|}{\ln|\varepsilon|}, \quad (3.12)$$

assumindo que o limite existe. A forma mais explícita da relação da função com o expoente crítico é

$$f(\varepsilon) \sim |\varepsilon|^\lambda, \quad (3.13)$$

esta relação é válida no limite que  $|\varepsilon| \rightarrow 0$ , quando o sistema encontra-se próximo ao ponto crítico.

As simulações de sistemas físicos estão limitadas para um tamanho finito, fazendo com que as funções termodinâmicas apresentem uma dependência com o tamanho do sistema. Esta relação entre tamanho do sistema e o valor das grandezas físicas surge da divergência do comprimento de correlação limitada pelo tamanho finito do sistema. Então, para um sistema unidimensional na região crítica, temos que

$$\xi \sim L \sim |\varepsilon|^{-\nu}, \quad (3.14)$$

de forma que

$$|\xi| \sim L^{-1/\nu}, \quad (3.15)$$

Desta forma, obtemos as relações respectivamente da magnetização  $M$  e da susceptibilidade  $\chi$ , como função da temperatura e do tamanho da rede  $L$

$$M_L \sim L^{-\beta/\nu}, \quad (3.16)$$

$$\chi_L \sim L^{\gamma/\nu}, \quad (3.17)$$

Determinando o valor da magnetização e da susceptibilidade no ponto crítico para sistemas com diferentes tamanhos, calculamos os valores dos expoentes  $\beta/\nu$  e  $\gamma/\nu$ . Para alguns sistemas é possível definir o chamado cumulante de quarta ordem de Binder [19]. Esta grandeza é definida de forma a não depender do tamanho do sistema, ou seja, em  $|\varepsilon| = 0$ , e de maneira que o expoente crítico associado ao cumulante neste ponto seja nulo, desta forma

$$U \sim L^0, \quad (3.18)$$

$$U_L(\varepsilon = 0) = U(\varepsilon = 0) = U^*. \quad (3.19)$$

Esta propriedade do cumulante de quarta ordem de Binder é utilizada na obtenção do valor do parâmetro crítico no limite termodinâmico ( $N \rightarrow \infty$ ). Neste limite, é possível mostrar que nas proximidades do ponto crítico, as grandezas termodinâmicas podem ser reescritas em uma nova escala, ou seja, em termos de suas funções de escala

$$M_L(T) = L^{-\beta/\nu} \tilde{M}(L^{1/\nu} \varepsilon), \quad (3.20)$$

$$\chi_L(T) = L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(L^{1/\nu} \varepsilon), \quad (3.21)$$

$$U_L(T) = \tilde{U}(L^{1/\nu} \varepsilon). \quad (3.22)$$

Este procedimento é chamado de escalamento de tamanho finito e quando  $\varepsilon = 0$ ,  $U_L = U^*$  não depende de qualquer expoente. No ponto crítico, as curvas de  $U_L$  possuem o mesmo valor  $U^*$  de forma que elas coincidem neste ponto. Nesta escala, as grandezas dependem, do tamanho do sistema e das funções  $M(L^{1/\nu})$ ,  $\chi(L^{1/\nu})$  e  $U(L^{1/\nu})$  que são chamadas de funções universais de escala. Podemos escrever as funções universais de escala para magnetização, para susceptibilidade e para o cumulante de Binder na seguinte forma

$$\tilde{M}(L^{1/\nu}\varepsilon) = M_L(T)L^{-\beta/\nu}, \quad (3.23)$$

$$\tilde{\chi}(L^{1/\nu}\varepsilon) = \chi_L(T)L^{\gamma/\nu}, \quad (3.24)$$

$$\tilde{U}(L^{1/\nu}\varepsilon) = U_L(T). \quad (3.25)$$

Se os expoentes críticos referentes à transição de fase forem conhecidos, então nas proximidades da transição as curvas de magnetização e susceptibilidade apresentam um colapso em termos das suas funções universais de escala. Este procedimento é chamado de data collapse. É um método que possui alta sensibilidade ao valor dos expoentes críticos e ao valor da temperatura crítica, quanto melhor forem as estimativas para os valores dos expoentes críticos e da temperatura crítica, melhor será o colapso das curvas. Neste método, o cumulante de quarta ordem de Binder é definido de maneira a não depender do tamanho do sistema exatamente no ponto crítico, é uma maneira eficiente de determinar o valor do ponto crítico. Mais uma relação entre expoentes críticos pode ser obtida a partir das leis de escala [20]. O valor da temperatura crítica num sistema de tamanho finito depende do tamanho do sistema pela relação

$$T_c(L) = T_c + bL^{1/\nu}, \quad (3.26)$$

onde  $T_c$  é a temperatura crítica do sistema e  $b$  é uma constante.

# Capítulo 4

## Redes

### 4.1 Redes Complexas

As redes complexas começaram a surgir nos anos 60, com os trabalhos de Stanley Milgram [21]. Em 1967, Jeffrey e Stanley Milgram realizaram um experimento com o objetivo de fazer com que os moradores da cidade de Omaha enviassem cartas para os moradores da cidade de Boston, de forma diretamente ou através de conhecidos. Inicialmente ele acreditava que as cartas chegariam ao seu destino passando aproximadamente por 100 pessoas. Os resultados mostraram que das 160 cartas enviadas, 42 chegaram ao destino e que estas cartas passaram em média por cinco a seis pessoas intermediárias [21]. Com este experimento eles mostraram que as pessoas estariam vivendo em um "mundo pequeno". A partir do efeito de mundo pequeno surgiram os modelos, de redes aleatórias desenvolvidas em 1959 por Erdos e Renyi, as redes de mundo pequeno (small world) desenvolvida em 1998, por Watts e Strogatz e as redes de escala livre (scale-free) desenvolvida em 1999 por Albert e Barabási.

As redes complexas ou grafos são estruturas compostas por um conjunto de vértices (nós) interligados por arestas. As arestas são linhas que conectam dois vértices, e podem ser direcionada, quando as conexões entre os pares de vértices tem direção e sentido, e não-direcionada quando as conexões estão em várias direções. De acordo com [22-23] para caracterizar as redes complexas são necessários fazer uso de três medidas: a distribuição de grau, o menor caminho médio e o coeficiente de agregação.

- **Distribuição de grau:** é o número de arestas conectadas a um vértice;

- **Menor caminho médio:** é a média da menor distância entre dois vértices;
- **Coefficiente de agregação:** considere o nó  $i$ , conectado a  $k_i$  arestas e  $k_i$  conectado a outros nós. Se os primeiros vizinhos do nó  $i$  são vizinhos entre si então pode existir no máximo  $k_i \frac{(k_i-1)}{2}$  arestas entre eles. Então o coeficiente de agregação de  $C_i$  é razão entre o número de arestas  $E_i$  que existe entre os vizinhos do nó  $i$  e o total de arestas que existe entre eles. Assim  $C_i = \frac{2E_i}{k_i(k_i-1)}$ , e o coeficiente de agregação é a média dos valores  $C_i$  sobre todos os nós da rede [23-24].

## 4.2 Rede “Small-World”

Em 1967, Jeffrey e Stanley Milgram realizaram um experimento com o objetivo de fazer com que os moradores da cidade de Omaha enviassem cartas para os moradores da cidade de Boston, de forma diretamente ou através de conhecidos. Inicialmente eles acreditavam que as cartas chegariam ao seu destino passando aproximadamente por 100 pessoas. Os resultados mostraram que das 160 cartas enviadas, 42 chegaram ao destino e que estas cartas passaram em média por seis pessoas intermediárias [21]. Com este experimento eles mostraram que as pessoas estariam vivendo em um "mundo pequeno".

Em 2003 Duncan J. Watts e Steven propuseram um modelo de rede de mundo-pequeno com o objetivo de formar poucas conexões entre cada indivíduo. Neste modelo a população foi distribuída em redes regulares unidimensionais em que cada indivíduo entrava em contato com os outros indivíduos da rede através de re-conexões feitas a partir do valor da probabilidade  $p$ .

A rede “Small-World” é construída a partir de uma rede regular com quatro vizinhos, mais próximos, ligados a  $N$  nós e  $C$  vizinhos, sendo que a distribuição do grau de conectividade é igual  $P(K) \sim \frac{\bar{K}^k e^{-\bar{K}}}{k!}$ , o menor caminho médio é  $L \sim \frac{\log(N)}{\log(\bar{K})}$  e o coeficiente de agregação  $C_a \gg \bar{K}/N \sim 1$ . Nesta rede cada nó é reconectado aleatoriamente com  $n$  arestas com probabilidade  $p$ . Neste processo, o número de nós que são reconectados são iguais a  $\frac{pNC}{2}$ . Quando  $p=0$  a rede é regular (não recebeu nenhuma ligação de longo alcance), quando  $(0 < p < 1)$  a rede é de mundo pequeno (existem ligações de curto alcance) e quando  $p = 1$ , a rede é aleatória (existem ligações de longo alcance), como mostra a figura (4.1).

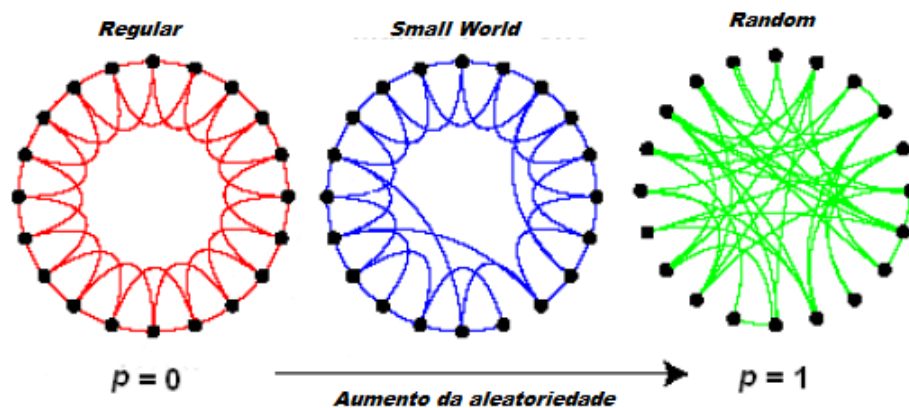


Figura 4.1: Rede “Small-World”

## 4.3 Rede de Voronoi-Delaunay

### 4.3.1 Introdução

Em 1908, George Feodosevich Voronoi definiu os diagramas de Voronoi, após estudos de Descartes e Dirichlet. O Diagrama de Voronoi tem sido muito utilizado em diversas disciplinas porque se constitui de uma lógica matemática útil e bastante similar a vários padrões orgânicos encontrados na natureza. Por esse processo a divisão do espaço segue uma regra simples: dado um conjunto de pontos quaisquer, devem ser feitas as divisões organizadas entre eles, de modo que haja uma região para cada ponto e cujo limite é a metade da distância entre seu vizinho, formando assim polígonos convexos. Esses pontos são ligados por meio de segmentos de reta (formando triângulos) e depois são feitas suas mediatrizes [25].

Dispostas em conjunto, essas mediatrizes delimitam a forma geométrica convexa conhecida como Diagrama de Voronoi. A Figura (4.2) mostra a tesselação de Voronoi que é uma estrutura geométrica da triangulação de Delaunay.

O algoritmo utilizado para construir uma rede de Delaunay é de Frieberge Ren. Para utilizar este algoritmo é necessário desenhar  $D$  pontos aleatórios, chamados de sítios da rede, são distribuídos aleatoriamente seguindo a distribuição de Poisson em uma rede de tamanho  $L \times L$ . Os pontos são conectados segundo a regra de Voronoi-Delaunay. A triangulação de Delaunay do espaço com  $N_p$  pontos,  $N_a$  arestas e  $N_t$  triângulos é descrita pela seguinte equação

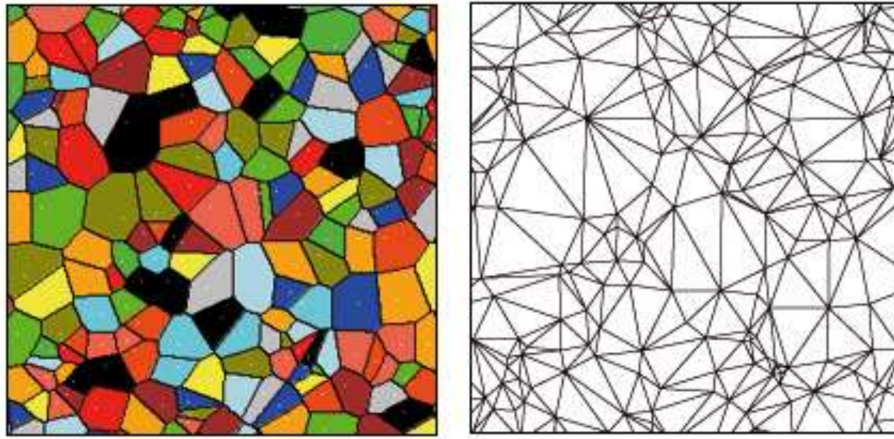


Figura 4.2: O lado esquerdo diagrama de Voronoi e o lado direito triangulação de Delaunay.

$$N_p - N_a + N_t = \chi. \quad (4.1)$$

Considerando  $\chi = 2$ , temos uma topologia de esfera, para  $\chi = 0$ , temos uma topologia de tórus, que obedece a seguinte regra  $2N_a = 3N_t$  para a triangulação, logo substituindo na equação acima temos  $N_t = 2N_p$  e  $N_a = 3N_p$ .



# Capítulo 5

## Modelo do Voto da Maioria

### 5.1 Introdução

O modelo do Voto da Maioria, é um modelo que simula a dinâmica da mudança de opinião de uma população. Este modelo baseia-se na hipótese que a opção de escolha que um indivíduo tem, num dado instante de tempo, depende da escolha que a maioria dos seus vizinhos possui neste instante.

O modelo do Voto da Maioria (MVM) é definido em uma rede onde cada sítio da rede está conectado a um spin que pode assumir valores  $\sigma_i = 1$  ou  $\sigma_i = -1$ . Considerando um grupo de indivíduos no qual cada indivíduo possui sua própria opinião sobre determinado assunto: favorável ou contrária. Com o passar do tempo devido à interação com os vizinhos próximos, os indivíduos vão mudando de opinião. Cada indivíduo passa a ser a favor ou contra se a maioria dos seus vizinhos, for favorável ou contrária ao assunto. Existem indivíduos que agem contrariamente à opinião da maioria dos indivíduos na sua vizinhança. No caso em que o indivíduo tem a opinião diferente da maioria dos seus vizinhos, foi introduzido [26] um parâmetro de ruído  $q$  que corresponde a probabilidade de um sítio assumir um estado contrário ao da maioria de seus vizinhos.

Este modelo é representado pela seguinte equação

$$P(\sigma) = \frac{1}{2} [1 - \sigma_i \cdot S(\sum_j \sigma_j) (1 - 2q)] \quad (5.1)$$

onde  $S(x)$  é uma função sinal para  $x \neq 0$  e é zero se  $x = 0$ ,  $j$  denota os vizinhos próximos do sítio  $i$  e  $q$  é o parâmetro de ruído. O parâmetro de ruído  $q$  atua no sistema como uma espécie de temperatura, sugerindo uma desordem. Não somente isto,  $q$  é o fator do

modelo do Voto da Maioria que induz a transição de fase do sistema. Partindo de um estado desordenado, permitimos que o sistema evoluísse no espaço de configurações, de acordo com a taxa de transição (5.1), até que o sistema atinja um estado estacionário, cuja natureza é caracterizada de acordo com o valor do ruído  $q$ . Obtemos:

- $q = 0$ , todos os sítios estarão no mesmo estado, seja ele  $+1$  ou  $-1$ . Todos tem a mesma opinião.
- $0 < q < q_c$ , a maioria dos sítios está num dos estados  $+1$  ou  $-1$ , o restante aponta na direção contrária.
- $q \geq q_c$ , metade dos sítios se encontra num estado enquanto a outra metade está no estado contrário, quer dizer metade é favorável e a outra metade é contrária.

O modelo do Voto da Maioria é um modelo de não equilíbrio definido pela dinâmica estocástica com regras locais e simetria de spin up e down, definido por uma rede regular quadrada que apresenta transição de fase de segunda ordem observada através dos expoentes críticos  $\beta$ ,  $\gamma$  e  $\nu$  que caracterizam o sistema na vizinhança da transição de fase, idêntico aos expoentes críticos de equilíbrio do modelo Ising. O MVM foi estudado em diversos tipos de redes dentre elas a rede de Barabási-Albert, “Small-World”, Voronoi-Delaunay, etc. O MVM estudado por Lima em rede de Barabasi-Albert direcionada e não direcionada apresenta expoentes críticos diferentes do modelo Ising, e estes dependem do valor médio de conectividade  $K$  das redes de Barabasi-Albert direcionadas (abd) e unidirecionada (abu) e a transição de fase é observada nesses sistemas.[27-28]

O MVM estudado por Campos et al.[29] em rede direcionada “Small-World” apresentam expoentes críticos que dependem da probabilidade de religação, possuem interações de longo alcance e grau de desordem. Lima et al.[30] estudaram o modelo do voto da maioria em rede aleatória de Voronoi-Delaunay com condição de contorno periódica, no qual estas redes possuem desordem natural em suas conexões. Grinstein argumentou que sistemas fora do equilíbrio com simetria up-down em uma rede regular quadrada caem na classe de universalidade do modelo de Ising no equilíbrio [31].

Com o objetivo de conhecer o comportamento do sistema, calculamos algumas quantidades que podem caracterizar o estado em que o mesmo se encontra. Estas quantidades dependem do estado do sistema, logo são funções do parâmetro  $q$ . Definimos a magnetização do modelo do voto da maioria como

$$m(q) \equiv \langle |m| \rangle, \quad (5.2)$$

Outra grandeza importante para a descrição completa do sistema é a variância do parâmetro de ordem do sistema. Para o modelo do voto da maioria, a variância é dada pela susceptibilidade

$$\chi(q) \equiv N \langle m^2 \rangle - \langle |m| \rangle^2, \quad (5.3)$$

E o cumulante de quarta ordem de Binder é definido como

$$U(q) \equiv 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3 \langle |m^2| \rangle^2}. \quad (5.4)$$

que é uma grandeza particularmente relevante na determinação do valor do ruído crítico  $q_c$ . Todas as quantidades anteriores são funções do parâmetro de ruído e satisfazem relações específicas de escalamento de tamanho finito.

# Capítulo 6

## Resultados e Discussões

### 6.1 Modelo e Simulação

Este trabalho tem o objetivo de estudar o modelo do Voto da Maioria em rede direcionada “Small-World-Voronoi-Delaunay” com probabilidade de religação direcionada  $p$ . Para uma boa avaliação da influência as probabilidades utilizadas foram  $p=0.1, 0.3, 0.5, 0.7$  e  $0.9$ .

O estudo foi feito por meio de simulação computacional usando o algoritmo de Monte Carlo, iniciando com a construção de Voronoi-Delaunay, criando a rede aleatória no qual indicará as posições dos sítios, que são ligadas por vizinhos mais próximos tanto por ligações de curto alcance quanto de longo alcance. Considerando um sítio  $i$ , retiramos as ligações que retornariam a ele e direcionamos com probabilidade  $p$  para um sítio qualquer. Este direcionamento é feito por acaso levando à possibilidade dos sítios, terem ligações de curto e longo alcance. Este procedimento é realizado em toda a rede deixando com a densidade  $p$  de ligações redirecionadas.

O MVM em rede direcionada Small-World-Voronoi-Delaunay (SWVD) definidas pela variável  $\sigma$  cujo os valores são  $-1$  ou  $+1$ , situada em cada sítio da rede com  $N = L \times L$  sítios onde  $L$  é o lado da rede. A evolução do sistema é governada pela dinâmica do spin girar com uma probabilidade de Glauber  $P_G$

$$P_G = \frac{1}{2} [1 - \sigma_i \cdot S(\sum_j \sigma_j) \tanh(\beta_T)], \quad (6.1)$$

onde  $\beta_T = \frac{1}{K_B T}$ , e o somatório é sobre todos os vizinhos  $j$  do sítio  $i$ ,  $S$  assume valores de  $-1$  e  $+1$ . Aqui,  $T$  representa a temperatura social ou ruído do modelo. Para cada rotação

do spin  $i$ , determinamos o sinal da maioria dos seus vizinhos.

Nós simulamos sobre 6 tamanhos diferentes de rede de acordo com o número total de sítios  $N = 5000, 10000, 20000, 40000, 60000$  e  $80000$ . Para cada tamanho de rede foram realizadas 20 simulações independentes, garantidas pelo uso de diferentes passos de Monte Carlo. Destas realizações foram retiradas as médias para a obtenção das grandezas: magnetização, susceptibilidade e cumulante de quarta ordem de Binder. Cada sítio da rede se conectava aleatoriamente com 3 a 17 vizinhos. Antes da termalização do sistema todos os spins estavam para cima, após 100000 passos de Monte Carlo e tempo de relaxação de 50000 MCS o sistema começou a evoluir.

No estudo do modelo do voto da maioria por simulação computacional, através do Método de Monte Carlo obtém-se médias para a obtenção das propriedades macroscópicas.

A magnetização por spin é dada pela seguinte equação

$$m = \frac{\sum_i \sigma_i}{N}, \quad (6.2)$$

onde  $N$  é o número de sítios e  $\sum_i \sigma_i$  é a contribuição de todos os sítios do sistema.

Para calcular a média da magnetização  $m$  por sítio

$$M(T) \equiv \langle |m| \rangle. \quad (6.3)$$

A partir da magnetização se obtém a susceptibilidade

$$\chi(T) \equiv N(\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2). \quad (6.4)$$

O cumulante de quarta ordem de Binder [32] é utilizado para calcular a temperatura crítica do sistema. A equação do cumulante de quarta ordem de Binder

$$U(T) \equiv 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2}, \quad (6.5)$$

onde  $\langle m \rangle, \langle m^2 \rangle$  e  $\langle m^4 \rangle$  são médias termodinâmicas.

Essas variáveis são funções da temperatura e obedece as relações de escala de tamanho finito

$$M = L^{-\frac{\beta}{\nu}} g_m(t), \quad (6.6)$$

$$\chi = L^{-\frac{\gamma}{\nu}} g_{\chi}(t), \quad (6.7)$$

$$\frac{dU}{dT} = L^{-\frac{1}{\nu}} g_{\nu}(t), \quad (6.8)$$

onde  $\beta$ ,  $\nu$  e  $\gamma$  são os expoentes críticos e  $g_m$ ,  $g_{\chi}$ ,  $g_{\nu}$  são as funções de tamanho de escala finitas.

## 6.2 Simulação em rede de Voronoi-Delaunay

As Figuras 6.1 e 6.2 mostram o comportamento da magnetização  $M$  versus a temperatura  $T$ , e da susceptibilidade  $\chi$  versus a temperatura  $T$ , respectivamente, onde simulamos com todos os tamanhos de rede escolhidos, porém mostramos apenas o tamanho  $N = 80000$  sítios. As curvas são para as probabilidades de religação  $p = 0.1, 0.3, 0.5, 0.7$  e  $0.9$ . O comportamento das curvas na Figura 6.1 mostra que podemos inferir que o valor da temperatura aumenta de acordo com o valor de  $p$ , quanto maior o valor de  $p$  maior é a temperatura que leva o sistema do estado ordenado para o estado desordenado.

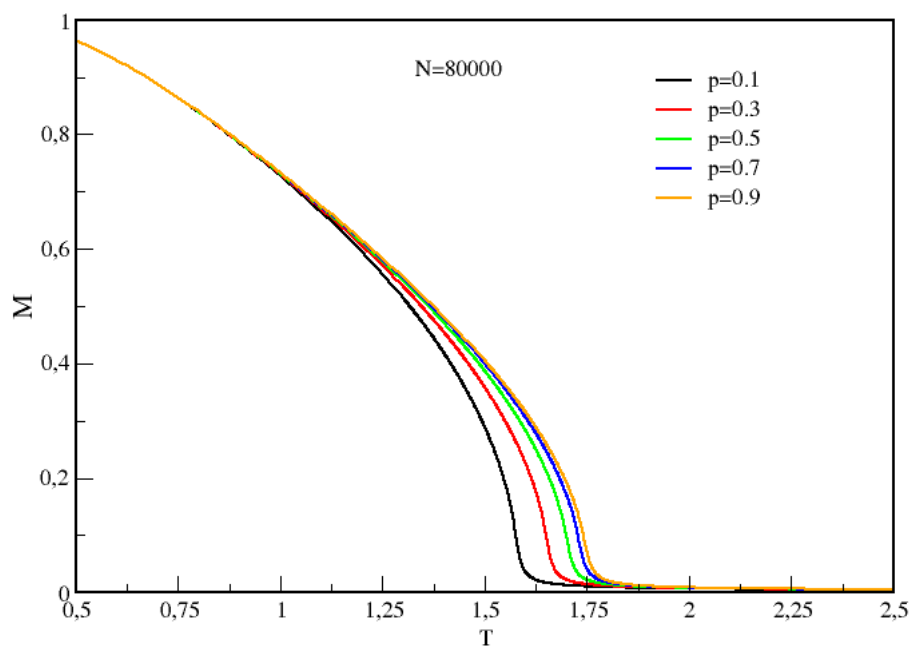


Figura 6.1: Curvas da magnetização para tamanho  $N = 80000$  sítios com probabilidades diferentes.

A Figura 6.2 mostra gráfico da susceptibilidade versus a temperatura, mostra que quanto maior o valor de  $p$ , maior é a temperatura.

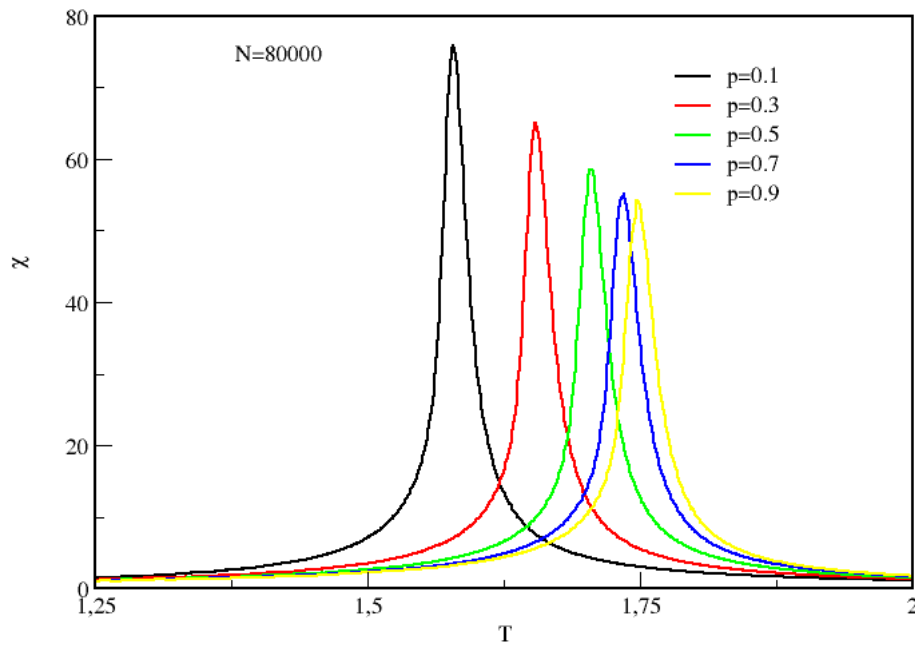


Figura 6.2: Curvas da susceptibilidade para tamanho  $N = 80000$  sítios com probabilidades diferentes.

A Figura 6.3 mostra o comportamento da magnetização  $M$  versus temperatura  $T$  para diferentes tamanhos de rede com probabilidade de religação  $p=0.5$ . Podemos concluir, em termos de opinião, que inicialmente há uma concordância geral (unanimidade), ou seja, para  $T \rightarrow 0$ ,  $M \rightarrow 1$ . Esta opinião é cada vez menos aceita à medida que aumentamos a temperatura  $T$ , pois é fácil perceber um decaimento aproximadamente linear para valores pequenos da temperatura  $T$ , onde não existe dependência com o valor do tamanho do sistema. Toda a região do gráfico que compreende as proximidades da transição de fase e após ela depende significativamente do tamanho do sistema. Uma vez que não há descontinuidade do parâmetro de ordem na transição, o sistema apresenta uma transição de fase de segunda ordem.



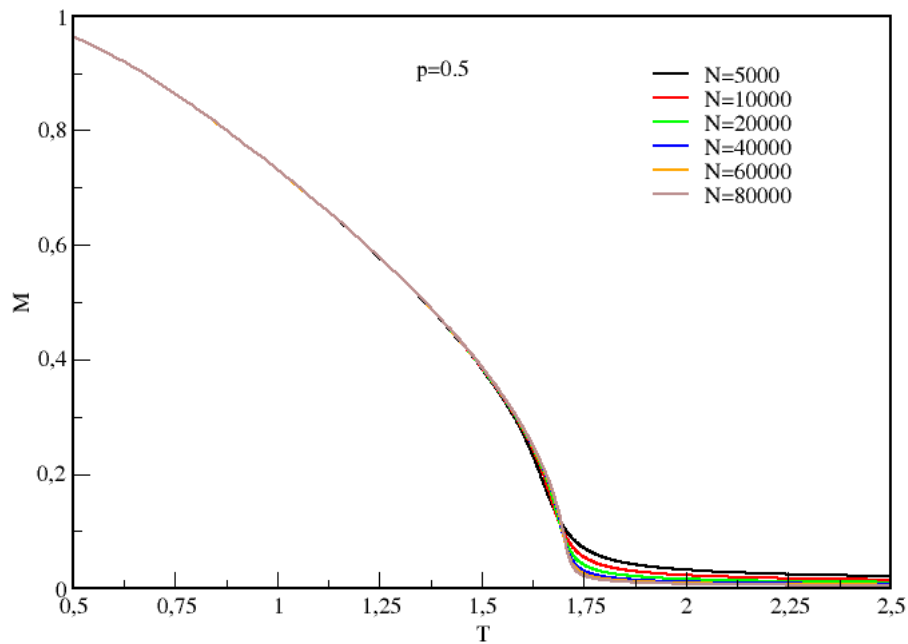


Figura 6.3: Magnetização em função de  $T$  para vários tamanhos de redes com  $N = 5000$ ,  $N = 10000$ ,  $N = 20000$ ,  $N = 40000$ ,  $N = 60000$  e  $N = 80000$  sítios e probabilidade de religação  $p = 0.5$ .

A Figura 6.4 mostra o comportamento da susceptibilidade versus temperatura para vários parâmetros usados na Fig 6.3. O gráfico mostra um comportamento típico de transição de fase de segunda ordem, exibindo um máximo na temperatura crítica. As curvas de susceptibilidade apresentam máximos nos valores críticos da temperatura  $T$  e são características de transições de fase de segunda ordem.

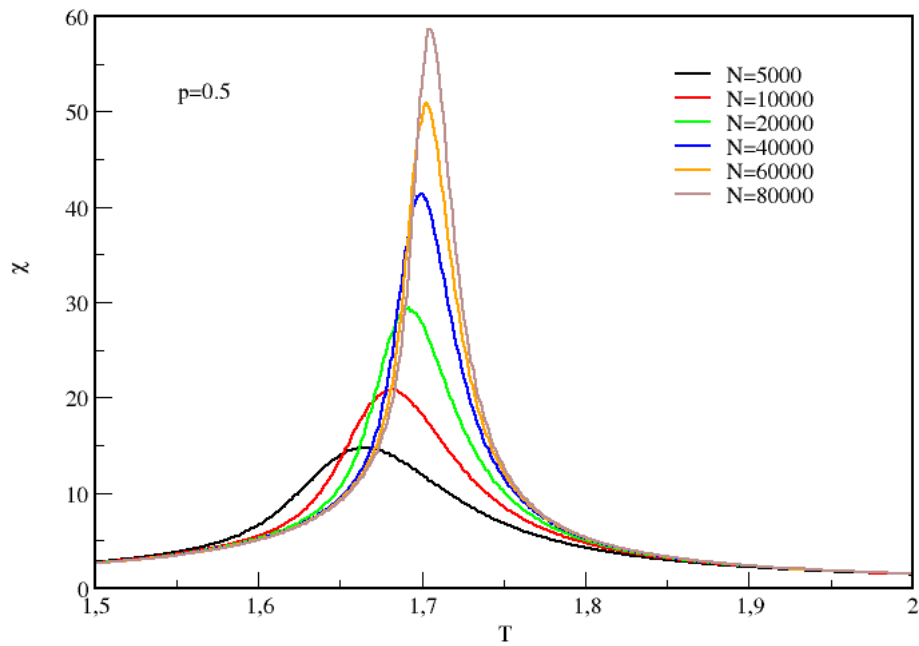


Figura 6.4: Susceptibilidade em função de  $T$  para vários tamanhos de redes com  $N = 5000$ ,  $N = 10000$ ,  $N = 20000$ ,  $N = 40000$ ,  $N = 60000$  e  $N = 80000$  sítios e probabilidade de religação  $p=0.5$ .

Para estimar a temperatura crítica, calculamos o cumulante de quarta ordem de Binder. Essas quantidades são independentes do tamanho do sistema e devem se interceptar à temperatura crítica. A Figura 6.5 mostra a função do cumulante de quarta ordem de Binder. Pela própria definição do cumulante, este é o único ponto onde o valor da temperatura crítica não depende do tamanho do sistema. Com a interceptação das linhas encontramos a temperatura crítica do sistema, e observamos também que neste ponto todos os tamanhos possuem a mesma temperatura.

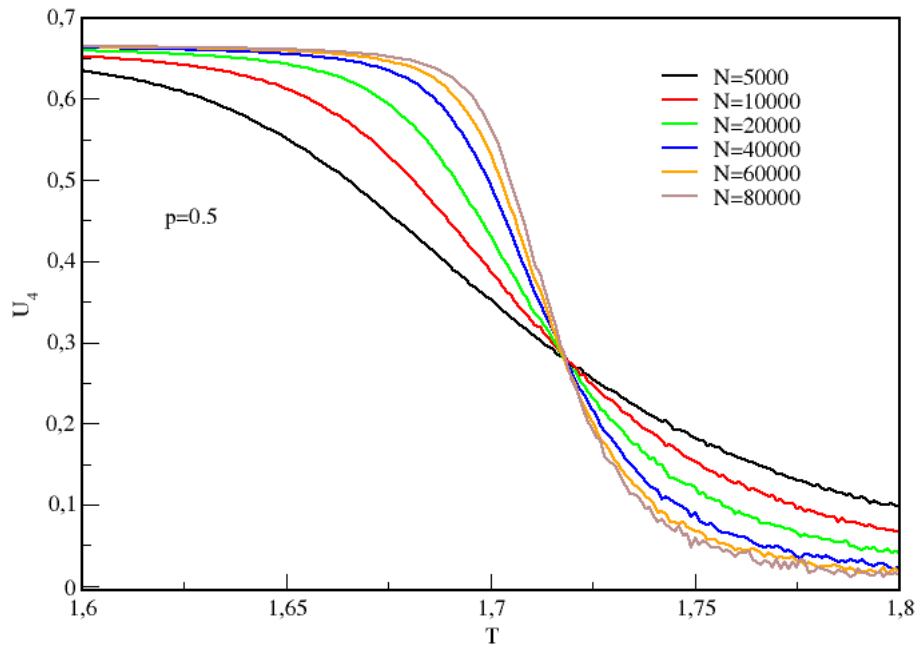


Figura 6.5: Cumulante de quarta-ordem de Binder em função de  $T$  para vários tamanhos de redes com  $N = 5000$ ,  $N = 10000$ ,  $N = 20000$ ,  $N = 40000$ ,  $N = 60000$  e  $N = 80000$  sítios e probabilidade de religação  $p = 0.5$ .

O expoente do comprimento de correlação pode ser estimado a partir de  $T_c(L) = T_c + bL^{-1/\nu}$  em que  $T_c(L)$  é a temperatura pseudo-crítica para o tamanho de rede  $L$ .  $T_c$  é a temperatura crítica no limite termodinâmico, e  $b$  é uma constante não-universal. Na Figura 6.6 mostramos o gráfico de  $\ln[T_c(L) - T_c]$  em função de  $L$  para vários valores de  $p$ . Este gráfico é uma lei de escala utilizados para determinar o expoente crítico  $1/\nu$ .

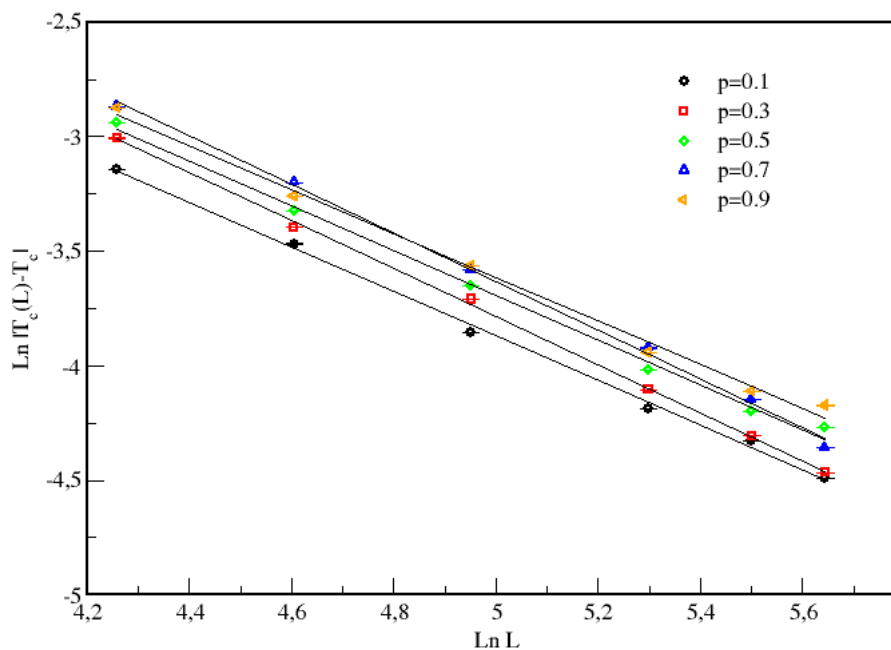


Figura 6.6:  $\ln [T_c(L) - T_c]$  em função de  $L$  para vários valores de  $p$ . As linhas contínuas são ajustes lineares.

Na figura 6.7 e 6.8, respectivamente, mostramos o logaritmo da magnetização e susceptibilidade do logaritmo de  $L$ , utilizados para calcular respectivamente os expoentes críticos  $\beta/\nu$  e  $\gamma/\nu$ . Observamos que os expoentes  $\beta/\nu$  e  $\gamma/\nu$  são independentes de  $p$ .

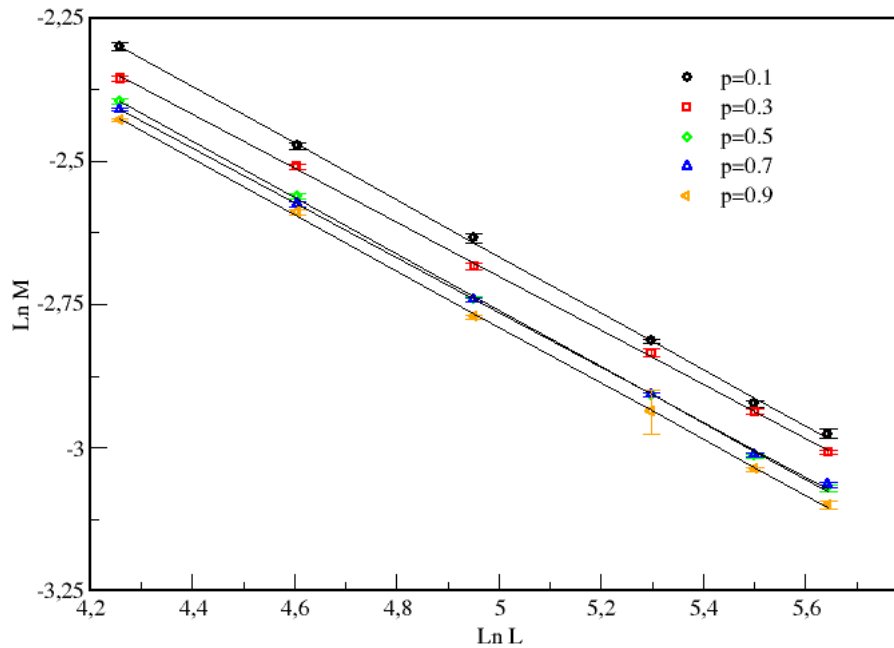


Figura 6.7: Gráfico do logaritmo do módulo da magnetização versus o logaritmo de  $L$ . As linhas contínuas são os melhores ajustes lineares.

Com base nos resultados das Figuras 6.7 e 6.8, construímos a Tabela 6.3 a partir das linearizações para o logaritmo da magnetização e para o logaritmo da susceptibilidade, quando mantemos a temperatura  $T$  fixa, enquanto variamos o valor  $p=0.1, 0.3, 0.5, 0.7$  e  $0.9$ .

Comparando os expoentes críticos encontrados nos trabalhos de Ediones et al [33] e Edina et al [34] (veja Tabelas 6.1 e 6.2) com os expoentes críticos encontrados no nosso trabalho (veja Tabela 6.3), podemos observar que os expoentes críticos encontrados em nosso trabalho não pertencem a mesma classe de universalidade do modelo de Ising.

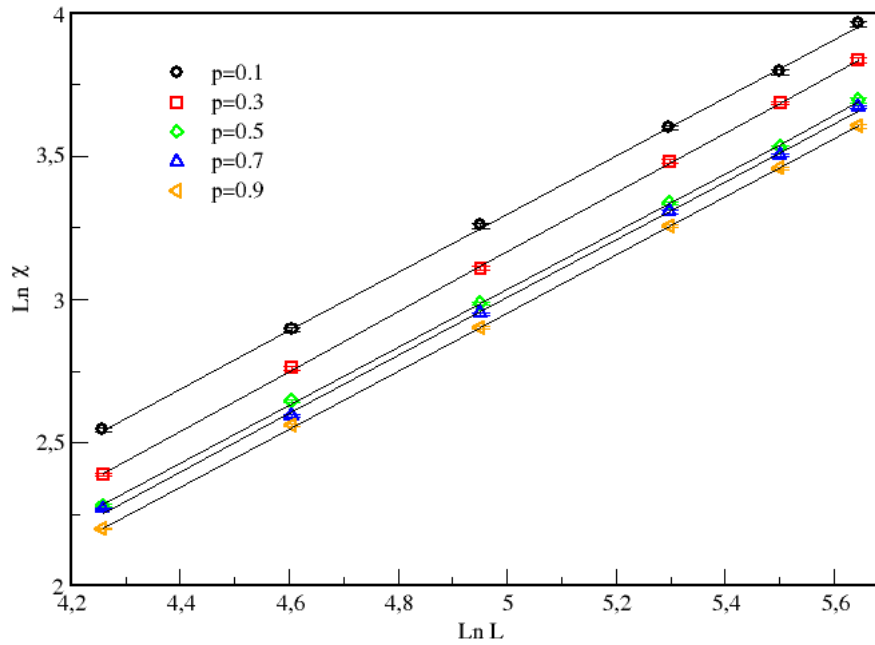


Figura 6.8: Gráfico do logaritmo da susceptibilidade em  $T_c$  em função do logaritmo de  $L$ .

Tabela 6.1: Os expoentes críticos para o modelo Ising em rede direcionada Small-World-Voronoi-Delaunay com probabilidade  $p$ ,  $\gamma/\nu^{max}$  são resultados para a susceptibilidade magnética máxima. As barras de erro são apenas estatísticas.

$p$	$1/\nu$	$\beta/\nu$	$\gamma/\nu$	$\gamma/\nu^{max}$
0.1	1.036(19)	0.489(8)	1.003(11)	1.001(13)
0.2	1.098(82)	0.538(68)	1.016(11)	1.016(5)
0.3	1.009(49)	0.463(4)	0.924(98)	1.012(3)
0.4	0.886(8)	0.491(9)	1.017(14)	1.012(8)
0.5	0.987(64)	0.494(10)	0.998(18)	1.005(66)
0.6	0.927(92)	0.486(10)	1.042(13)	1.004(7)
0.7	1.107(60)	0.486(10)	1.016(13)	1.003(10)
0.8	0.972(57)	0.493(16)	1.018(23)	1.021(7)
0.9	1.032(66)	0.471(12)	1.038(16)	0.994(69)

Tabela 6.2: Os expoentes críticos para o modelo do voto da maioria em rede direcionada Small-World com probabilidade  $p$ ,  $1/\nu$ ,  $\beta/\nu$ ,  $\gamma/\nu$  e  $\gamma/\nu^{max}$ . As barras de erro são apenas estatísticas.

$p$	$q_c$	$1/\nu$	$\beta/\nu$	$\gamma/\nu$	$\gamma/\nu^{max}$
0.1	0.122(3)	0.836(223)	0.423(17)	1.178(13)	1.214(39)
0.3	0.149(3)	1.059(208)	0.419(21)	1.148(5)	1.152(28)
0.5	0.160(2)	1.010(52)	0.441(12)	1.116(5)	1.120(25)
0.8	0.164(2)	1.248(158)	0.436(9)	1.149(5)	1.117(23)
1.0	0.165(2)	1.032(81)	0.415(18)	1.139(8)	1.122(25)

Tabela 6.3: Os expoentes críticos para o modelo do voto da maioria em rede direcionada Small-World-Voronoi-Delaunay com probabilidade  $p$ ,  $T_c$ ,  $1/\nu$ ,  $\beta/\nu$ ,  $\gamma/\nu$  e  $\gamma/\nu^{max}$ . As barras de erro são apenas estatísticas.

$p$	$T_c$	$1/\nu$	$\beta/\nu$	$\gamma/\nu$	$\gamma/\nu^{max}$
0.1	1.5902(4)	0.973(2)	0.492(6)	1.016(7)	1.006(1)
0.3	1.6665(4)	1.044(5)	0.470(4)	1.043(5)	1.001(2)
0.5	1.7180(4)	0.977(3)	0.492(5)	1.012(6)	0.992(2)
0.7	1.7478(4)	1.060(4)	0.477(5)	1.012(3)	0.992(2)
0.9	1.7624(4)	0.955(4)	0.490(4)	1.013(3)	0.996(2)

Na fig. 6.9 plotamos o gráfico do  $\ln \chi_{max}$  versus o  $\ln L$ . O ajuste linear desses dados dá  $\gamma/\nu^{max}$  da susceptibilidade máxima como função de  $\ln L$  para vários valores de  $p$ .

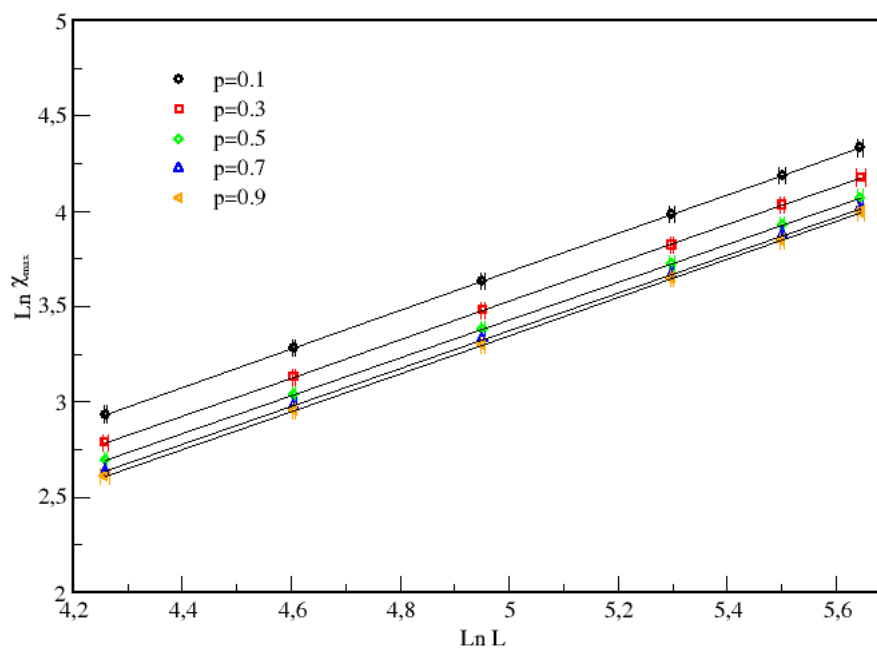


Figura 6.9: Gráfico do logaritmo da susceptibilidade máxima em função do logaritmo de  $L$ .

Valores mais precisos dos expoentes críticos para o nosso modelo foram obtidos a partir do colapso de dados para as curvas de magnetização e susceptibilidade, como mostra as Figuras 6.10 e 6.11 para probabilidade de ligação  $p=0.5$ . Neste caso, vemos que as estimativas dos índices dos expoentes críticos  $\beta/\nu$  e  $\gamma/\nu$  estão em boa concordância para todos os tamanhos de rede. Os mesmos resultados qualitativos são obtidos para outros valores de  $p$ .



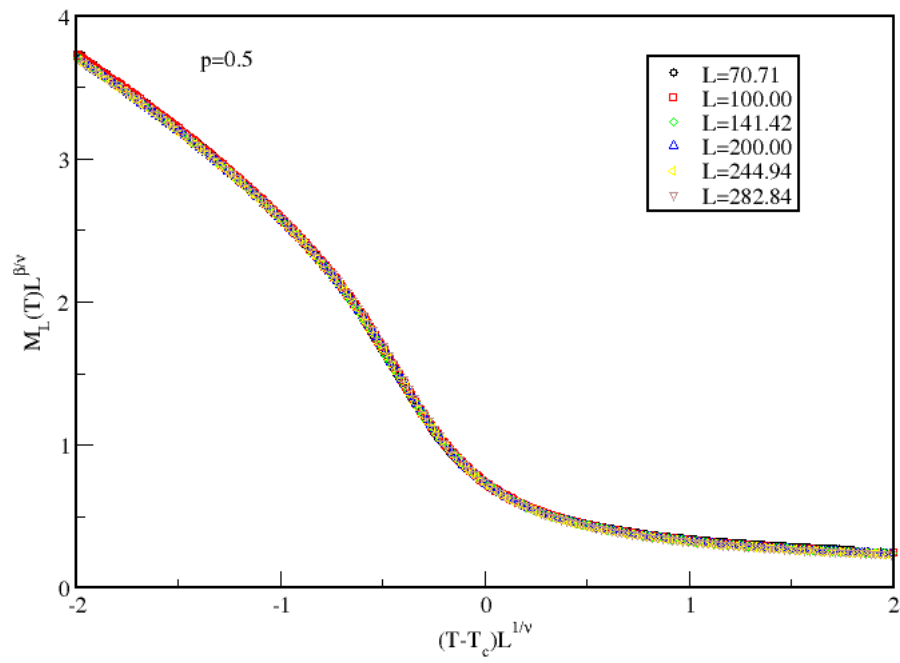


Figura 6.10: Gráfico data colapso da magnetização.

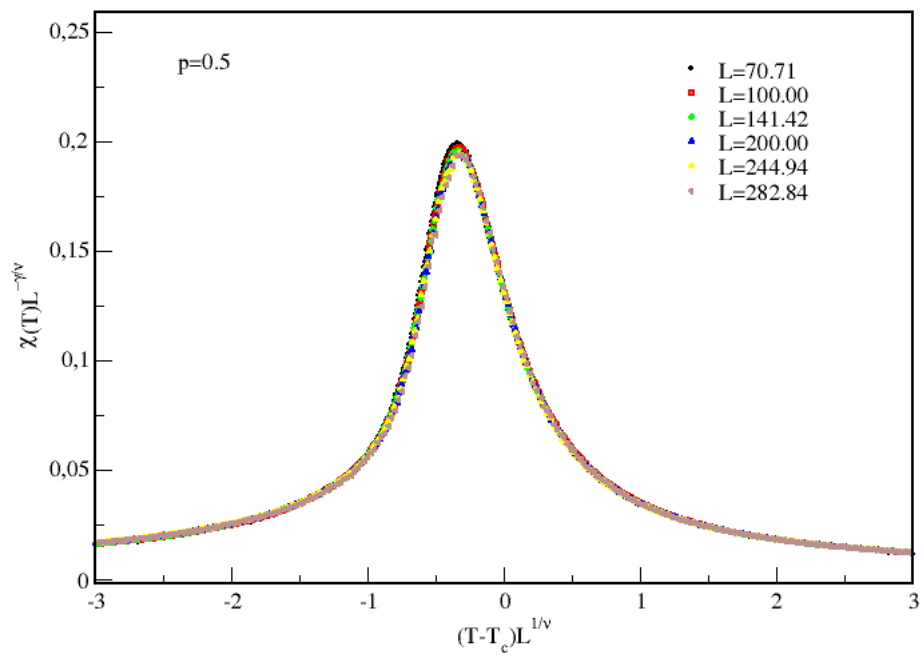


Figura 6.11: Gráfico data colapso da susceptibilidade.

# Capítulo 7

## Conclusão

Através das simulações realizadas utilizando o método de Monte Carlo para vários tamanhos de rede e probabilidades de religação  $p = 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9$ , observamos que para o modelo do voto da maioria em rede direcionada “Small-World-Voronoi-Delaunay” o sistema apresenta uma transição de fase de segunda ordem. Estudos anteriores nos mostram que no modelo do voto da maioria em rede small-world indicam que o valor da temperatura crítica, são funções crescentes da probabilidade de religação  $p$ .

Usando a análise de escala de tamanho finito, calculamos os expoentes críticos associados a magnetização, susceptibilidade e cumulante de quarta ordem de Binder para diversos valores de probabilidade  $p$ . Onde, observamos que os valores das razões dos expoentes  $\beta/\nu$ ,  $\gamma/\nu$  e  $1/\nu$  (veja Tab. 6.1) são independentes dos valores das probabilidades  $p$  de religações e também são diferentes dos expoentes do modelo de Ising em duas dimensões e não pertencem a mesma classe de universalidade do modelo de Ising. Nossos resultados, também estão de acordo com os resultados de Ediones et al [33] para o modelo de Ising nas redes direcionada “Small-World-Voronoi-Delaunay”.

# Capítulo 8

## Referências Bibliográficas

[1]N. Metropolis, The beginning of the Monte Carlo method. Los Alamos Science Special Issue. 1987, p. 125.

[2]PICKOVER, C. A. The Math Book: From pythagoras to the 57th dimension, 250 milestones in the history of mathematics. New York: Sterling, 2009.

[3]Hromkovic, J. "Algorithms for hard problems": introduction to combinatorial optimization, randomization, approximation, and heuristics. [S.l.]: Springer-Verlag, London - Berlin - Heidelberg - New York, 2001.

[4]HOLLAND, J. Hidden Order How Adaptation Builds Complexity. Reading, MA: Helix Books, 1995.

[5] ULMA, S. M.; METROPOLIS, N. The monte carlo method.Amen Statical. Assoc, v. 44, p. 335, 1949.

[6]Sílvio R.A. Salinas, Introdução à Física Estatística, EdUSP, 1997.

[7] NEWMAN, M. E. J.; BARKEMA, G. T.Monte Carlo Method in statistical Physics.[S.l.: s.n.], 1999.

[8] METROPOLIS, N. et al.J. Chem. Phys, v. 21, p. 1087, 1953.

- [9] Stuart Geman and Donald Geman. Stochastic Relaxation, Gibbs Distributions, and the Bayesian Restoration of Images. *Pattern Analysis and Machine Intelligence, IEEE Transactions on*, PAMI-6(6):721–741, November 1984.
- [10] EHRENFEST, P. *Prog. Amsterdam Acad*, v. 36, p. 153, 1933.
- [11] J. Adler, Critical temperatures of the  $d = 3$ ,  $s = 1/2$  effect of confluent corrections to scaling Ising model; the effect of confluent corrections to scaling. *Journal of Physics A: Mathematical and General*. 1983, Vol. 16, p. 3585.
- [12] A. Aharony and M. E. Fisher, Non linear scaling fields and corrections to scaling near criticality. *Physical Review B (Condensed Matter)*. 1983, Vol. 27, p. 4394.
- [13] N. A. Alves, B. A. Berg and R. Villanova, Ising-model Monte Carlo simulations: Density of states and mass gap. *Physical Review B (Condensed Matter)*. 1990, Vol. 41, p. 383.
- [14] ISING, E.Z. *Phys*, v. 31, p. 253, 1925.
- [15] Onsager, L. A two dimensional model with an order disorder transition. *Physical Review*, v. 65, p. 117, 1944.
- [16] H. E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*. Oxford : Oxford University Press, 1971.
- [17] J. M. Yeomans, *Statistical Mechanics of Phase Transitions*. Oxford: Claredon Press, 1992.
- [18] R. K. Pathria, *Statistical Mechanics*. 2a Edição. Oxford : Elsevier, 1996. p. 336.
- [19] K. Binder, Finite size scaling analysis of Ising model block distribution functions.

Zeitschrift für Physik B. 1981, Vol. 43, p. 119.

[20]H. E. Stanley, Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena. Oxford : Oxford University Press, 1971.

[21]Travers, T.,Milgram, S. An experimental study of the small world problem.Sociometry 32,425-443.1969.

[22] Monteiro,L.H.A. Sistemas Dinâmicos Complexos. 2010.

[23]Watts, D.J.Small Worlds: The Dynamics of Networks between Order and Randomness. Princeton University Press. 2003.

[24] RIEDBERG; REN, H. C.Nucl. Phys. B, v. 235, p. 310, 1984.

[25]TSAI, Victor J. D.Fast topological construction of delaunay triangulation sand voronoi diagrams. Elsevier: University of Wisconsin-Madison, Madison, USA, 1993.

[26] Mário José de Oliveira. Isotropic majority-vote model on a square lattice. Journal of Statistical Physics, 66, 273, 1992.

[27] F.W.S. Lima, Int. J. Mod. Phys. C 17, 9, 1257 (2006).

[28] F.W.S. Lima, Commun. Comput. Phys. 2, 358 (2007).

[29] P.R. Campos, V. M. Oliveira and F. G. B. Moreira, Phys. Rev. E67, 026104(2003).

[30] F.W.S. Lima, U. L. Fulco and R. N. Costa Filho, Phys. Rev. E71, 036105(2005).

[31]G.Grinstein, C. Jayaprakash, and Yu He. Phys. Rev. Lett. 55.2527(1987)

[32] Kurt Binder. Finite size scaling analysis of Ising model block distribution functions.Zeitschrift Physik B, 43, 119, 1981.

[33] Ediones M. Sousa and F.W.S. Lima, Eur. Phys. J. Plus 128, 150, (2013).

[34] EDINA M. S. LUZ, F. W. S. LIMA. (2007) MAJORITY-VOTE ON DIRECTED SMALL-WORLD NETWORKS. International Journal of Modern Physics C 18:08, 1251-1261.