



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

**Hélio Beserra Nascimento**

**Modelo Cinético de Dinâmica de Formação de Opinião  
em Rede Aleatória de Voronoi-Delaunay**

TERESINA/2019

**Hélio Beserra Nascimento**

Modelo Cinético de Dinâmica de Formação de Opinião em Rede  
Aleatória de Voronoi-Delaunay

Dissertação de Mestrado apresentado ao Programa de Pós-Graduação em Física, da Universidade Federal do Piauí, como parte dos requisitos necessários para obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador:

Francisco Welington de Sousa Lima

Teresina

Fevereiro de 2019

**FICHA CATALOGRÁFICA**  
Serviço de Processamento Técnico da Universidade Federal do Piauí  
Biblioteca Setorial de Ciências da Natureza - CCN

N245m Nascimento, Hélio Beserra.  
Modelo cinético de dinâmica de formação de opinião em rede aleatória de Voronoi-Delaunay / Hélio Beserra Nascimento. – Teresina: 2019.  
51 f.

Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal do Piauí, Centro de Ciências da Natureza, Pós-graduação em Física, 2019.

Orientador: Prof. Dr. Francisco Wellington de Sousa Lima.

1. Modelo Cinético de Formação de Opinião. 2. Voronoi-Delaunay. 3. Expoente Crítico. I. Título.

CDD 530.1595

Dissertação de Mestrado sob o título “*Modelo Cinético de Dinâmica de Formação de Opinião em Rede Aleatória de Voronoi-Delaunay*” defendido por Hélio Beserra Nascimento, em Fevereiro de 2019, em Teresina - Piauí, com Banca Examinadora constituída pelos professores:

---

Prof. Dr. Francisco Welington de Sousa Lima (Orientador)  
Universidade Federal do Piauí (UFPI)

---

Prof. Dr. Gladstone de Alencar Alves (externo a instituição)  
Universidade Estadual do Piauí (UESPI)

---

Prof. Dr. Tayroni Francisco de Alencar Alves (interno ao programa)  
Universidade Federal do Piauí (UFPI)

---

Prof. Dr. Valdemiro da Paz Brito (externo ao programa)  
Universidade Federal do Piauí (UFPI)

# Agradecimentos

A Deus em primeiro lugar, pois ele é o criador e responsável por tudo que existe na Terra e no Universo.

Ao meu orientador, Professor Francisco Wellington de Sousa Lima, pela orientação e ajuda na hora de sanar dúvidas, o que foi muito valioso para o desenvolvimento do trabalho.

Aos que foram meus professores, e que muito contribuíram para minha formação neste mestrado.

Ao meu amigo e colega de sala, Wj Jefferson, por me ajudar a suprimir algumas dúvidas de Fortran e Latex.

A minha mãe, Maria do Socorro e minhas irmãs, Luiza e Helena, que sempre me apoiaram.

Em especial à minha querida esposa, Lucinalva e meu amado filho Hugo, pelo carinho, atenção e apoio emocional para elaboração deste trabalho.

## Resumo

O modelo de dinâmica coletiva de formação de opinião é um modelo fora do equilíbrio, formado por um conjunto de agentes  $i$  e  $j$ , conectados. Os indivíduos mudam suas opiniões a partir de interações entre pares, que podem ser positivas e negativas. Foi definido um parâmetro de ruído  $p$ , que representa a fração de interações negativas. A variável estocástica que denota as interações entre os agentes é  $\mu_{ij}$ . Os resultados do cálculo numérico, obtidos a partir de simulações de Monte Carlo na rede de Voronoi-Delaunay, mostram a existência de uma transição de fase contínua em  $p = p_c$ , onde abaixo do ruído crítico  $p_c$  existe um consenso. Neste trabalho foi realizado um estudo das propriedades do sistema na região próxima do ponto crítico  $p_c$ . O valor do ponto crítico é obtido baseado na intersecção das curvas do cumulante de Binder de quarta ordem. A partir do ensemble foram construídos os gráficos da magnetização, susceptibilidade e cumulante de Binder, para diferentes tamanhos de rede ( $N = 250, 500, 1000, 2000, 5000, 10000, 15000$  e  $20000$  sítios), e para o parâmetro  $a = 0$  e  $a = 1$ , . Calculamos também os expoentes críticos:  $\frac{\beta}{\nu}$ ,  $\frac{\gamma}{\nu}$  e  $\frac{1}{\nu}$ . Para  $a = 0$  os expoentes críticos são os mesmos do modelo Ising 2D, e para o caso  $a = 1$  os expoentes críticos são diferentes do modelo Ising 2D, indicando uma nova classe de universalidade.

Palavras-chave: Modelo cinético de formação de opinião. Voronoi-Delaunay. Monte Carlo. Expoente crítico.

## Abstract

The collective dynamics model of opinion formation is an out of balance model, formed by a set of connected  $i$  and  $j$  agents. Individuals change their opinions from peer interactions, which can be both positive and negative. A noise parameter  $p$  was defined, which represents the fraction of negative interactions. The stochastic variable denoting the interactions between the agents is  $\mu_{ij}$ . The results of the numerical calculation, obtained from Monte Carlo simulations in the Voronoi-Delaunay network, show the existence of a continuous phase transition at  $p = p_c$ , below which a consensus is observed. In this work was carried out a study of the properties of the system in the region near the critical point  $p_c$ . The critical point value is obtained from the intersection of the curves of the fourth order Binder accumulator. From the averages of the results, the magnetization, susceptibility and Binder accumulator graphs were constructed for different network sizes ( $N = 250, 500, 1000, 2000, 5000, 10000, 15000$  and  $20000$  sites), and for parameter  $a = 0$  and  $a = 1$ . The ratios of the critical exponents were also calculated:  $\frac{\beta}{\nu}, \frac{\gamma}{\nu}$  e  $\frac{1}{\nu}$ . For  $a = 0$  the critical exponent ratios are the same as the Ising 2D model, and for case  $a = 1$  the critical exponents are different from the Ising 2D model, indicating that they belong to a new universality class.

Keyword: Kinetic model of opinion formation. Voronoi-Delaunay. Monte Carlo Method. Exponent critical.

# Sumário

|          |   |           |
|----------|---|-----------|
| <b>1</b> | <b>Introdução</b>                               | <b>6</b>  |
| <b>2</b> | <b>Método de Monte Carlo</b>                    | <b>9</b>  |
| 2.1      | Princípio do Método de Monte Carlo (MMC)        | 9         |
| 2.2      | Simulação de Monte Carlo                        | 10        |
| 2.2.1    | Processo de Markov                              | 10        |
| 2.2.2    | Ergodicidade                                    | 11        |
| 2.2.3    | Balanço Detalhado                               | 12        |
| 2.3      | Algoritmos                                      | 13        |
| 2.3.1    | Algoritmo de Metropolis                         | 14        |
| 2.3.2    | Banho Térmico                                   | 15        |
| 2.3.3    | Equação Mestra                                  | 16        |
| <b>3</b> | <b>Transições de Fases e Fenômenos Críticos</b> | <b>17</b> |
| 3.1      | Fases da Matéria                                | 17        |
| 3.2      | O Modelo de Ising                               | 18        |
| 3.3      | Expoentes críticos                              | 21        |
| <b>4</b> | <b>Redes Complexas</b>                          | <b>25</b> |
| 4.1      | Definição de redes                              | 26        |
| 4.2      | Propriedades de Redes                           | 27        |
| 4.2.1    | Distribuição de conectividade                   | 27        |
| 4.2.2    | Coefficiente de aglomeração                     | 28        |
| 4.2.3    | Menor caminho médio                             | 28        |
| 4.3      | Rede de Voronoi-Deulaunay                       | 29        |



---

|          |   |           |
|----------|---|-----------|
| 4.3.1    | Diagrama de Voronoi . . . . .                   | 29        |
| <b>5</b> | <b>Modelo Cinético de Formação de Opinião</b>   | <b>32</b> |
| 5.1      | Introdução . . . . .                            | 32        |
| 5.2      | O Modelo . . . . .                              | 33        |
| <b>6</b> | <b>Resultados e discussões</b>                  | <b>35</b> |
| 6.1      | Modelo e simulação . . . . .                    | 35        |
| 6.2      | Simulação na rede de Voronoi-Delaunay . . . . . | 36        |
| <b>7</b> | <b>Conclusão</b>                                | <b>48</b> |
|          | <b>Referências Bibliográficas</b>               | <b>51</b> |

# Lista de Figuras

|     |  |    |
|-----|--|----|
| 3.1 | Diagrama de transição de fase, pressão $P$ contra temperatura $T$ [10]. . . . .  | 18 |
| 3.2 | Esquema de uma rede regular quadrada formada por um conjunto de sítios com orientações (estados) de spin <i>up</i> ou <i>down</i> . A orientação da seta determina o estado do sítio. Os elementos das bordas representam os contornos da rede [12]. . . . . | 19 |
| 4.1 | Representação esquemática das pontes da cidade Königsberg sobre o rio Pregel. No quadro pequeno, o grafo que representa as pontes e as ilhas da cidade [18].   | 26 |
| 4.2 | Esquema de apenas dois sítios do plano contornados por uma região na forma de polígono de Voronoi. . . . .   | 29 |
| 4.3 | Representação geométrica do diagrama de Voronoi (lado esquerdo) e sua correspondente triangulação de Delaunay (lado direito) [12]. . . . .   | 31 |
| 6.1 | Gráfico da opinião média $O$ em função do parâmetro de ruído $p$ , Eq.(3.5). Na parte (a) temos $a = 0$ e na parte (b) $a = 1$ . . . . .   | 37 |
| 6.2 | Gráfico de $V$ em função do parâmetro de ruído $p$ , Eq.(3.6). Na parte (a) temos $a = 0$ e na parte (b) $a = 1$ . . . . .   | 38 |
| 6.3 | Gráfico do cumulante de Binder de quarta ordem $U$ em função do parâmetro $p$ , Eq.(3.8). Na parte (a) temos $a = 0$ e na parte (b) $a = 1$ . . . . .  | 39 |
| 6.4 | $\ln p_c(L) - p_c $ em função do $\ln(L)$ . A linha contínua é a regressão linear. Na parte (a) temos $a = 0$ e na parte (b) $a = 1$ . . . . .   | 40 |
| 6.5 | $\ln(O)$ em função do $\ln(L)$ . A linha contínua é a melhor regressão linear. Na parte (a) temos $a = 0$ e na parte (b) $a = 1$ . . . . .   | 41 |
| 6.6 | Logaritmo da susceptibilidade em função do $\ln(L)$ . A linha contínua é a melhor regressão linear. Na parte (a) temos $a = 0$ e na parte (b) $a = 1$ . . . . .  | 42 |

|      |   |    |
|------|---|----|
| 6.7  | Logaritmo da susceptibilidade máxima em função do logaritmo de $L$ . A linha contínua é a melhor regressão linear. Na parte (a) temos $a = 0$ e na parte (b) $a = 1$ . . . . .  | 43 |
| 6.8  | Nestes gráficos do colapso de dados para $a = 0$ , utilizamos os valores dos expoentes críticos do modelo Ising 2D, Tab. 6.1. Na parte (a) temos o colapso de dados da magnetização Eq.(3.25), em (b) temos o colapso de dados da susceptibilidade Eq.(3.26), e na parte (c) o colapso de dados do cumulante de Binder de quarta ordem Eq.(3.27). . . . . | 45 |
| 6.9  | Gráficos do colapso de dados obtidos a partir dos valores encontrados para os expoentes críticos pra o caso $a = 1$ , Tab. 6.1. Na parte (a) não temos o colapso das curvas para a magnetização, em (b) não ocorre o colapso de dados pra susceptibilidade e na parte (c) também não temos o colapso do cumulante de Binder de quarta ordem. . . . .      | 46 |
| 6.10 | Gráficos do colapso de dados obtidos a partir dos valores dos expoentes críticos do modelo Ising 2D para $a = 1$ , Tab. 6.1. Na parte (a) não temos o colapso das curvas para a magnetização e em (b) também não ocorre o colapso da susceptibilidade. . . . .  | 47 |

# Lista de Tabelas

6.1 Valores do ruído crítico  $p_c$  e das razões dos expoentes críticos  $\beta/\nu, \gamma/\nu, 1/\nu$  e  $\gamma/\nu^{max}$ , para o modelo de formação de opinião na rede aleatória de Voronoi-Delaunay. Para  $a = 0$  os valores dos expoentes críticos pertencem a mesma classe de universalidade do modelo Ising 2D, e para  $a = 1$  os valores dos expoentes críticos pertencem a uma nova classe de universalidade. . . . . 44

# Capítulo 1

## Introdução

A simulação computacional surgiu em 1946, a partir da construção do primeiro computador eletrônico ENIAC (Electronic Numerical Integrator And Computer). O (ENIAC) começou a ser desenvolvido em 1943, durante a segunda Guerra Mundial, por J. P. Eckert e J. W. Mauchly na Universidade da Pensilvânia nos Estados Unidos da América. Os primeiros pesquisadores a utilizarem este computador, foram Von Neumann, Ulam, Metropolis e Frankel. Em 1946, durante um jogo de paciência, Ulam tentou calcular as probabilidades de sucesso de uma determinada jogada a partir da análise combinatória. Após realizar vários cálculos percebeu que a maneira mais prática seria realizar inúmeras jogadas e fazer a contagem da ocorrência dos resultados. Nessa época técnicas de amostragem aleatórias como esta não eram muito utilizadas por envolver cálculos extremamente demorados, tediosos e sujeitos a erros. Durante uma conferência, Ulam propôs que era possível usar o (ENIAC) para gerar amostragens estatísticas na solução de problemas físicos. A ideia de Ulam foi usar o computador para solucionar problemas que envolviam uma obordagem estatística, o que conhecemos hoje como *Método de Monte Carlo*, nome inspirado em um tio de Ulam, que costumava frequentar o famoso cassino de Monte Carlo, cujo o aspecto de sua roletas está intimamente ligado ao método.

O Método de Monte Carlo (MMC) é um método estatístico baseado em amostragem aleatória para obtenção de resultados numéricos. A formalização do MMC ocorreu em 1949, com a publicação do artigo nomeado "*Monte Carlo Method*" dos pesquisadores John Von Neumann e Stanislaw Ulam [1]. As áreas de aplicação do MMC são diversas, por exemplo: Física, Matemática, Biologia, Engenharia, Química, Medicina, Finanças, etc.

Neste trabalho utilizamos o Método de Monte Carlo para analisar as principais propriedades do modelo de formação de opinião na rede de Voronoi-Delaunay, que modela a dinâmica de interação entre indivíduos de uma mesma sociedade. A formação de opinião é uma das características mais importante de uma sociedade, é um fenômeno dinâmico coletivo. Trata-se de uma resposta mensurável da sociedade para, por exemplo, questões políticas, aceitação de inovações, etc. Vários modelos de escolha de opinião foram introduzidos para estudar esse fenômeno, por exemplo o modelo de eleitor [2], que apresenta uma variável de opinião binária, e o modelo discreto de formação de opinião de (Sznajd-Weron)[3], onde a tomada de decisão está associada apenas a um par de spin. Surgiram outros estudos de sistemas com mais de dois possíveis valores para a opinião, ou onde a opinião dos indivíduos é representada por uma variável contínua que assume valores reais [4].

A justificativa para este trabalho, foi elaborar um Modelo Cinético de Formação de Opinião inspirado no modelo da Ref. [5] (Transição de Fase Induzida por Desordem em Modelos Cinéticos de Formação de Opinião), na rede de Voronoi-Delaunay.

Este modelo é fora do equilíbrio, formado por  $N$  agentes (sociedade) que interagem estocasticamente aos pares. As interações entre os agentes podem assumir valores positivos e negativos, dados pelo parâmetro de interação  $\mu_{ij}$ , (Eq. (5.2)), que para  $a = 0$  assume os valores discretos  $+1$  e  $-1$ , e para  $a = 1$  valores reais contidos no intervalo  $-1 \leq \mu_{ij} \leq +1$ .

A simulação de Monte Carlo foi realizada na rede aleatória de Voronoi-Delaunay, considerando diferentes tamanhos de rede contidos em um número ( $N=250, 500, 1000, 2000, 5000, 10000, 15000$  e  $20000$ ) sítios. Os resultados mostram a existência de uma transição de fase de segunda ordem em  $p_c$ , onde o sistema passa de um estado ordenado com parâmetro de ordem diferente de zero Eq.(5.3), para um estado desordenado onde o parâmetro de ordem é igual a zero, com expoentes críticos  $\beta/\nu, \gamma/\nu$  e  $1/\nu$ , que caracterizam o sistema na vizinhança do ponto crítico.

O trabalho está organizado da seguinte forma: no Capítulo 2 apresentamos uma pequena introdução do contexto histórico do Método de Monte Carlo. O Capítulo 3 trata um pouco das transições de fases e dos fenômenos críticos. Uma abordagem sobre o modelo de Ising também é apresentada nesse mesmo Capítulo. No Capítulo 4 mostramos as definições de redes e algumas de suas propriedades. O Modelo Cinético de Formação de Opinião e suas propriedades são apresentados no Capítulo 5. No Capítulo 6 apresentamos os resultados

obtidos a partir das simulações. Para finalizar, no Capítulo 7 fizemos a conclusão baseada nos resultados obtidos.

# Capítulo 2

## Método de Monte Carlo

### 2.1 Princípio do Método de Monte Carlo (MMC)

O primeiro computador eletrônico (ENIAC), criado em 1946, foi usado por Stanislaw Ulam para solucionar problemas de abordagem estatística. Ele percebeu que era possível gerar amostragens aleatórias a partir do (ENIAC), e executar cálculos estatísticos variados e difíceis. O método empregado por Ulam, a partir do (ENIAC), foi batizado de método de Monte Carlo. O (MMC) é um método numérico eficiente que resolve problemas por meio de simulações com variáveis aleatórias.

Este método foi utilizado pelos pesquisadores John Von Neumann e Stanislaw Marcin Ulam [6], na simulação do problema da difusão aleatória de nêutrons na fissão nuclear no projeto Manhattan. A solução analítica deste problema baseada em equações matemáticas é impraticável. Com base no (MMC) foi obtida uma resposta para o problema com boa aproximação [7].

O físico estadunidense Nicholas Constantine Metropolis, junto com seus colaboradores, no ano de 1948, desenvolveram um algoritmo que ficou conhecido como algoritmo de Metropolis [8]. Este algoritmo é de grande importância na solução de problemas que usam o Método de Monte Carlo e também para resolver problemas de outras áreas. Em 1949, o Método de Monte Carlo foi oficializado, através do artigo nomeado "Monte Carlo Method", publicado por John Von Neumann e Stanislaw Ulam, logo em seguida, Ulam e Metropolis publicaram seu primeiro artigo utilizando o Método de Monte Carlo [8].



## 2.2 Simulação de Monte Carlo

A utilização da simulação de Monte Carlo torna desnecessário conhecer a equação diferencial que modela um determinado sistema complexo. Porém, o sistema físico ou matemático precisa ser modelado por uma função de distribuição de probabilidade. Feito isso, a simulação de Monte Carlo pode ser executada fazendo a amostragem aleatória a partir da função de distribuição. Este processo é reproduzido várias vezes e o resultado desejado é obtido por meio de técnicas estatísticas (média, desvio padrão, dispersão, etc) sobre um determinado número de realizações (amostras) que podem chegar a milhões.

Um gerador de números aleatórios uniformemente distribuídos no intervalo de 0 a 1 também é utilizado. No final, os resultados desta amostragem são guardados para serem manipulados na obtenção dos resultados desejados. Na prática, para a realização de uma simulação computacional utilizando o (MMC) é preciso seguir algumas etapas para garantir os resultados corretos. A simulação depende do tamanho da amostra e de sua qualidade. A amostra é obtida em termos dos números aleatórios gerados. Os passos de Monte Carlo se juntam com essas amostras. As componentes dessa amostra devem estar nos estados de um sistema termodinâmico, para a obtenção das grandezas termodinâmicas. 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.

### 2.2.1 Processo de Markov

Um processo estocástico é definido como um conjunto de variáveis aleatórias  $\alpha(t)$  (estados) que dependem de um parâmetro  $t$  pertencente a um conjunto  $\tau$ . Na maioria das vezes  $\tau$  assume valores inteiros não-negativos e  $\alpha(t)$  representa uma propriedade mensurável no tempo  $t$ . Um sistema operando sobre um período de tempo, pode ser descrito por um processo estocástico, sendo assim, em termos formais a variável randômica  $\alpha(t)$  representa o estado do sistema no tempo  $t$ , logo podemos afirmar que  $\alpha(t)$  é definido num espaço denominado **espaço de estados**.

Um processo estocástico diz-se Markoviano ou de Markov quando for capaz de gerar sucessivos estados independentes dos estados anteriores, ou seja, quando gozar da propriedade

de Markov (perda de memória). Considerando um sistema em um estado  $\mu$ , então, é gerado um estado novo  $\nu$  desse sistema que é independente de  $\mu$ . Esta independência contribui para a aleatoriedade dos estados.

Estando o sistema num determinado estado  $\mu$  a probabilidade de gerar um novo estado  $\nu$  é conhecida como probabilidade de transição  $P(\mu \rightarrow \nu)$ , e para que aconteça um verdadeiro processo de Markov todas as probabilidades de transição devem obedecer duas condições:

1. Elas não devem variar com o tempo;
2. Devem depender apenas das propriedades dos estados atuais  $\mu$  e  $\nu$ , e não de quaisquer outros estados pelos quais o sistema tenha passado.

As probabilidades de transição  $P(\mu \rightarrow \nu)$  devem satisfazer a propriedade

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

uma vez que o processo de Markov deve gerar algum estado quando o sistema estiver no estado  $\mu$ . A Eq. (2.1) fornece a condição de normalização da distribuição. A geração de um novo estado deve ser aleatório, e a probabilidade de transição  $P(\mu \rightarrow \mu)$  do sistema permanecer no mesmo estado tem que ser diferente de zero.

Nas simulações de Monte Carlo, o processo de Markov é usado para gerar uma cadeia de estados de Markov. Iniciando com um estado  $\mu$  utilizamos o processo para gerar outro estado  $\nu$ , e este estado é mantido no processo para gerar outro estado  $\sigma$ , e assim por diante. O processo de Markov é escolhido especialmente para que, quando for executado por um tempo suficientemente grande, a partir de qualquer estado do sistema, produza uma sequência de estados que aparecem com probabilidades dadas pela distribuição de Boltzmann. O processo de alcançar a distribuição de Boltzmann é chamado de "**chegando ao equilíbrio**". Para alcançar este objetivo é preciso mais duas condições (que discutiremos nas duas seções seguintes) em nosso processo de Markov, além das especificadas acima, as condições de "ergodicidade de balanço detalhado"[9].

### 2.2.2 Ergodicidade

Podemos atingir qualquer estado do sistema usando o processo de Markov, a partir de qualquer outro estado, se rodarmos o programa por um tempo suficientemente grande, isto é

possível devido a exigência da condição de ergodicidade. Essa condição é necessária para que possamos atingir nosso objetivo de gerar estados com suas probabilidades de Boltzmann corretas. Qualquer estado  $\nu$  aparece com alguma probabilidade  $p_\nu$  diferente de zero na distribuição de Boltzmann, e caso esse estado seja inacessível a partir de outro estado  $\mu$ , não importa quanto tempo continuemos nosso processo, então nosso objetivo é frustrado se iniciarmos do estado  $\mu$ . Logo, a probabilidade de encontrarmos  $\nu$  na cadeia de estados de Markov não será  $p_\nu$ , mas sim zero.

A condição de ergodicidade nos permite fazermos algumas probabilidades de transição do processo de Markov iguais a zero, no entanto, deve existir pelo menos um caminho de probabilidade de transição diferente de zero, entre quaisquer dois estados que escolhermos. Quase todas as probabilidades de transição são levadas a zero, segundo a definição da maioria dos algoritmos de Monte Carlo, e alguns cuidados devem ser tomados ao fazê-lo, pois não podemos criar um algoritmo que viole a ergodicidade [9].

### 2.2.3 Balanço Detalhado

O balanço detalhado é a outra condição para o processo de Markov. Esta condição garante que a distribuição de probabilidade de Boltzmann será alcançada a partir do processo markoviano, quando o sistema atingir o equilíbrio. A derivação da distribuição de Boltzmann é muito sutil. Na condição de equilíbrio do sistema, a probabilidade de transição para dentro e para fora de qualquer estado  $\mu$  deve ser a mesma. Isto é expresso matematicamente como

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

Aplicando a Eq. (2.1) na Eq. (2.2), obtemos

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

onde  $p_{\mu}$  é a probabilidade do sistema estar num estado  $\mu$ .

Para um conjunto qualquer de probabilidades de transição que satisfaçam a equação (2.3), a distribuição de probabilidade  $p_{\mu}$  estará no equilíbrio da dinâmica do processo de Markov. No entanto, satisfazer essa equação não é o suficiente para garantir que a distribuição de probabilidade de transição tenderá para  $p_{\mu}$  a partir de qualquer estado do sistema, quando

executamos o processo por um tempo suficientemente grande. Aqui, não vamos demonstrar isso, caso o leitor esteja interessado verifique [9], onde é apresentada uma solução bem detalhada que satisfaz uma condição adicional às nossas probabilidades de transição, assim:

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

Esta equação fornece o que chamamos de **condição de balanço detalhado**. De fato, qualquer conjunto de probabilidade de transição que satisfaz essa equação, também é capaz de satisfazer a Eq. (2.2). Analisando, temos do lado esquerdo da equação a probabilidade do sistema estar num estado  $\mu$ , multiplicada pela probabilidade de transição desse estado para outro estado  $\nu$ . Resumindo, é a taxa global de ocorrer a transição de  $\mu$  para  $\nu$ , e no lado direito, temos a taxa global de ocorrer a transição inversa  $\nu \rightarrow \mu$ . A condição de balanço detalhado mostra na média, o sistema vai de um estado  $\mu$  para um estado  $\nu$  com a mesma frequência que vai de um estado  $\nu$  para  $\mu$ .

No equilíbrio, a probabilidade de transição  $p_\mu$  só pode obedecer a distribuição de Boltzmann se ela obedecer também a seguinte equação

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{p_\nu}{p_\mu} = \exp[-\beta(E_\nu - E_\mu)], \quad (2.5)$$

onde  $\beta = 1/k_B T$ .

Se a probabilidade de transição  $P(\mu \rightarrow \nu)$  satisfazer as restrições impostas pelas Equações (2.1) e (2.5), assim como a condição de ergodicidade (exigência de que deve ser possível para os processos de Markov alcançar qualquer estado do sistema a partir de qualquer outro estado, se executado em um tempo suficientemente longo), então a distribuição de equilíbrio dos estados no nosso processo de Markov será a distribuição de Boltzmann [9].

## 2.3 Algoritmos

Um algoritmo é uma sequência de instruções (passos) bem definidas e não ambíguas, a serem seguidas em ordem específica, e são executadas em um intervalo de tempo finito. Na área de Física existe um algoritmo computacional muito utilizado para realizar tarefas que são executadas por computador, onde essas tarefas são montadas com uma linguagem que se comunica com o computador que executa os cálculos da simulação.

Numa simulação de Monte Carlo é indispensável que o algoritmo complete todos os processos escritos nas seções anteriores, para que o computador calcule de forma correta e guarde as informações essenciais do sistema em estudo. Existem dois tipos de classificação para os algoritmos na simulação de Monte Carlo, sendo *locais*, quando a atualização dos estados acontece sítio à sítio, ou *globais*, onde a atualização dos estados acontece em aglomerados de sítios de uma vez só. A seguir são apresentados dois algoritmos que são classificados como locais: Metropolis e Banho Térmico.

### 2.3.1 Algoritmo de Metropolis

O algoritmo mais famoso e amplamente utilizado na simulação de Monte Carlo é o algoritmo de Metropolis. Foi introduzido por Nicolas Metropolis e seus colaboradores num artigo de 1953, onde tratava de simulações de gás rígidos [9]. O algoritmo de Metropolis gera configurações que estão de acordo com a distribuição de Boltzmann, onde ocorre uma sequência de sorteios aleatórios de transições entre estados, garantindo que a configuração final seja a de equilíbrio.

É indispensável conhecer a ocorrência de todas as configurações para calcular a probabilidade de transição de determinada configuração. Considerando as configurações  $\mu$  e  $\nu$ , temos que a probabilidade de transição será dada pela equação

$$P(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} \exp[-\beta(E_\nu - E_\mu)] & \text{se } E_\mu < E_\nu, \\ 1 & \text{se } E_\mu > E_\nu, \end{cases} \quad (2.6)$$

onde  $E_\mu$  e  $E_\nu$  são as energias dos estados de configurações  $\mu$  (antiga) e  $\nu$  (nova), respectivamente. A condição de ergodicidade é respeitada, uma vez que a probabilidade de transição  $P(\mu \rightarrow \nu)$  é diferente de zero para todas as configurações  $\mu$  e  $\nu$ . Quando a diferença na energia  $\Delta E = E_\nu - E_\mu$  é negativa, automaticamente a nova configuração é aceita, no entanto, se a diferença na energia for positiva, a nova configuração é aceita com probabilidade  $e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}$  (distribuição de Boltzmann).

Na construção do algoritmo de Metropolis usando o método de Monte Carlo seguimos as seguintes instruções:

1. Seleciona-se aleatoriamente um sítio  $i$  da rede, no qual consideremos a inversão do seu spin, de  $(\sigma_i \rightarrow -\sigma_i)$ .

2. Calcular a diferença entre as energias  $\Delta E = E_\mu - E_\nu$  que resulta da inversão do spin;
3. Calcular a probabilidade de transição  $p_i$  para essa inversão, usando a equação (2.6).
4. Obter um número aleatório  $r$  uniformemente distribuído no intervalo de 0 a 1.
5. Caso  $r < p_i$  invertemos o spin, do contrário não o fazemos.

Após realizar todo esse processo para um grande número de spins, podemos calcular as grandezas: magnetização, susceptibilidade, calor específico, etc.

Para que a condição de ergodicidade e balanço detalhado sejam garantidas, o tempo de simulação deve ser suficientemente grande para que a simulação percorra todos os sítios da rede. Esse tempo é o que chamamos de *passo de Monte Carlo*, para fazer a visita em todos os sítios da rede. O número de passos Monte Carlo não pode ser pequeno, pois se isto acontecer, a condição de ergodicidade é violada, e não será possível calcular as médias aritméticas.

### 2.3.2 Banho Térmico

Em 1984, S. German e D. German criaram um algoritmo que ficou conhecido como banho térmico. Este algoritmo calcula a probabilidade de orientação do spin, baseado na orientação de seus vizinhos sem depender do estado atual. No processo de simulação o algoritmo escolhe um sítio  $i$ , onde a probabilidade deste sítio transitar de um estado para outro é dada pela equação

$$P(\sigma_{i_\mu} \rightarrow \sigma_{i_\nu}) = \frac{\exp[-\beta H \sigma_{i_\mu}]}{\sum_{\sigma_i} \exp[-\beta H \sigma_{i_\nu}]}, \quad (2.7)$$

onde  $\sigma_i$  é o estado do sítio  $i$ ,  $H = \sum_j \sigma_j - h$  é soma da contribuição de todos os vizinhos mais próximo do sítio  $i$  e o  $h$  é um campo externo ao sistema. Este algoritmo deve satisfazer a condição de balanço detalhado, e de fato, a seguinte igualdade seja verdadeira. Ou seja,

$$\exp[-\beta H \sigma_{i_\mu}] \frac{\exp[-\beta H \sigma_{i_\nu}]}{\sum_{\sigma_i} \exp[-\beta H \sigma_{i_\nu}]} = \exp[-\beta H \sigma_{i_\nu}] \frac{\exp[-\beta H \sigma_{i_\mu}]}{\sum_{\sigma_i} \exp[-\beta H \sigma_{i_\mu}]}. \quad (2.8)$$

Uma vez sendo possível chegar a qualquer configuração de spins intercalando unitariamente os spins, o algoritmo de banho térmico apresenta uma condição de ergodicidade.

### 2.3.3 Equação Mestra

Agora, vamos introduzir uma equação que governa a evolução temporal dos processos estocásticos markovianos. Seja  $P(\alpha, t)$  a probabilidade de encontrar um sistema num micro-estado  $\alpha$  no tempo  $t$  [13]. Então, de tal forma que temos a seguinte condição

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\alpha, t) = T_{dentro} - T_{fora}, \quad (2.9)$$

onde a taxa de variação da probabilidade "para dentro" do estado  $\alpha$  é dada por

$$T_{dentro} = \sum_{\alpha'} P(\alpha', t) w(\alpha' \rightarrow \alpha), \quad (2.10)$$

com  $w(\alpha' \rightarrow \alpha)$  sendo interpretada como a probabilidade de transição, de que o sistema mude do estado  $\alpha'$  para o estado  $\alpha$ . Seguindo o mesmo raciocínio, a probabilidade "para fora" do estado  $\alpha$  é dada por

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

Temos, conseqüentemente, a *equação mestra*

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\alpha, t) = \sum_{\alpha'} [P(\alpha', t) w(\alpha' \rightarrow \alpha) - P(\alpha, t) w(\alpha \rightarrow \alpha')]. \quad (2.12)$$

A interpretação desta equação, mostra que o lado esquerdo da igualdade fornece a taxa de variação da probabilidade  $P(\alpha, t)$  no tempo  $t$ , e o lado direito fornece a transição do estado  $\alpha'$  para o estado  $\alpha$  e a transição do estado  $\alpha$  para  $\alpha'$ , respectivamente. Quando o sistema atinge o estado estacionário, a probabilidade  $P(\alpha, t)$  não deve depender do tempo, ou seja,

$$\frac{\partial P}{\partial t} = 0. \quad (2.13)$$

Uma propriedade básica do processo markoviano é observada na equação (2.12): uma vez conhecendo o comportamento do sistema num determinado instante, é possível determinar seu comportamento futuro.

# Capítulo 3

## Transições de Fases e Fenômenos Críticos

### 3.1 Fases da Matéria

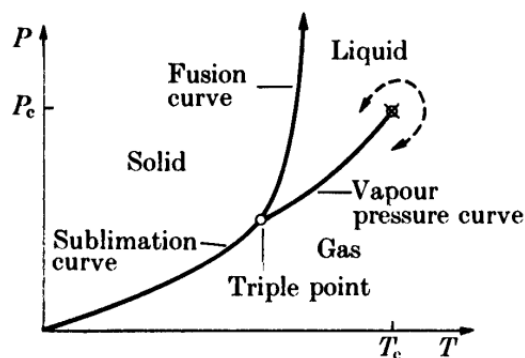
Existe uma enorme variedade de substâncias na natureza que se apresentam em estados diferentes. A água é um exemplo disso, que apresenta pontos de fusão e ebulição próximos um do outro. A mudança de estado ou transição de fase ocorre nos pontos de fusão e ebulição, os chamados pontos críticos. A transição de fase é caracterizada quando alterando as condições do sistema, ele muda de uma fase para outra modificando também suas propriedades.

O estudo das transições de fase é importante para compreender os fenômenos críticos. Paul Ehrenfest, físico e matemático austriaco, classificava a ordem das transições de fases baseado na derivada da energia livre em relação às variáveis termodinâmicas. Transições de fases de primeira ordem apresentam uma descontinuidade na primeira derivada e transições de fase de segunda ordem apresentam uma descontinuidade na segunda derivada. As transições de fases podem ser contínuas ou descontínuas. A descontínua é quando ocorre uma mudança de estado abrupta, como as mudanças (para sólido, líquido e gasoso), que apresentam descontinuidade na primeira derivada. Nas transições de fase contínuas as mudanças de estado ocorrem de maneira mais lenta, e apresentam descontinuidade na segunda derivada.

Para ajudar na compreensão da transição de fase e do pontos crítico, apresentamos o gráfico da pressão contra a temperatura na Figura 3.1. Visualizamos na Figura 3.1 três regiões no plano  $PT$  separadas, que correspondem a três fases da matéria bem conhecidas: sólida, líquida e gasosa. As fases sólida e gasosa estão em equilíbrio ao longo da curva de sublimação, as fases líquida e sólida estão em equilíbrio ao longo da curva de fusão e as



fases líquida e gasosa estão em equilíbrio ao longo da curva da pressão de vapor. Os pontos



**Figura 3.1:** Diagrama de transição de fase, pressão  $P$  contra temperatura  $T$  [10].

sobre as linhas contínuas representam estados de equilíbrio de fase, onde duas ou mais fases coexistem. O ponto triplo representa um estado de equilíbrio, onde coexistem três fases. No entanto, observamos que a curva da pressão de vapor não se estende para sempre, como por exemplo a curva de fusão, mas termina em um ponto que chamamos de *ponto crítico*, que tem coordenadas  $(P_c, T_c)$ , onde  $P_c$  e  $T_c$  são pressão crítica e temperatura crítica, respectivamente [10]. A partir do ponto crítico não há diferença entre as fases líquida e gasosa.

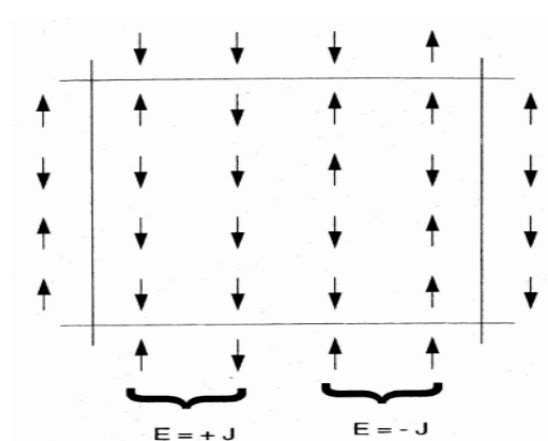
A partir da década de 1960, várias técnicas foram desenvolvidas para realizar experiências nas proximidades dos chamados pontos críticos. Grandezas termodinâmicas como compressibilidade, susceptibilidade magnética, calor específico, apresentam um comportamento característico nessa região, uma divergência que é caracterizada por um conjunto de *expoentes críticos*. Os fenômenos críticos são caracterizados pelas propriedades não analíticas de um sistema nas vizinhanças de uma transição de fase de segunda ordem, e o ponto onde acontece a transição de um estado para outro é o ponto crítico.

## 3.2 O Modelo de Ising

O modelo de Ising estuda o comportamento de elementos individuais tais como spins. Estes elementos têm suas propriedades alteradas devido a seus vizinhos, e também por causa de influências externas ao sistema, como temperatura e campo magnético externo. O modelo foi sugerido em 1920, pelo físico alemão Wilhelm Lenz (1888-1957), para estudar as propriedades magnéticas dos materiais, e em 1925, o estudante de doutorado Ernest Ising [11] e colaborador de Wilhelm obteve a solução exata do modelo para o caso unidimensional. Para sua

frustração, o caso unidimensional não apresentou uma transição de fase e nem magnetização espontânea. Em 1936, o físico teuto-britânico Rudolph Ernst Peierls (1907-1995) publicou um artigo com o título "*On Ising's Model of Ferromagnetism*", que originou o nome "*Modelo de Ising*", no qual demonstra que uma transição de fase pode existir no caso bidimensional. Então, no ano de 1944, o físico-químico norueguês Lars Onsager (1903-1976) resolveu o modelo em duas dimensões analiticamente com campo magnético nulo, e mostrou a existência de uma transição de fase, motivo que torna o modelo de Ising bastante importante para o estudo dos fenômenos críticos.

A partir da solução do modelo de Ising pode se obter parâmetros termodinâmicos, que são usados na análise do comportamento do sistema na região próxima do ponto crítico. Considerando uma rede regular quadrada, Figura 3.2, numa simulação que usa o processo de Markov e o método de Monte Carlo, os spins dos sítios interagem uns com os outros podendo assumir os estados *up* ou *down* numa dinâmica coletiva de interações entre eles. A energia, a magnetização e o calor específico são obtidos na simulação, depois da realização de um número suficientemente grande de passos de Monte Carlo.



**Figura 3.2:** Esquema de uma rede regular quadrada formada por um conjunto de sítios com orientações (estados) de spin *up* ou *down*. A orientação da seta determina o estado do sítio. Os elementos das bordas representam os contornos da rede [12].

No desenvolvimento de uma teoria microscópica da transição ferromagnética é interessante considerar um modelo (o modelo de Ising) simples mas não trivial, que apresenta interações de curto alcance entre seus componentes numa rede d-dimensional [13]. O hamiltoniano do

modelo de Ising é

$$H = \sum_{i,j} -J\sigma_i\sigma_j - B \sum_{i=1}^N \sigma_i, \quad (3.1)$$

onde  $(\sigma_i, \sigma_j)$  são variáveis de spin dos sítios  $i$  e  $j$ , e podem assumir os valores  $(\pm 1)$ . O campo magnético externo aplicado é simbolizado por  $B$ , e  $J$  é a energia de interação entre os sítios mais próximos (primeiros vizinhos). Resolver o modelo de Ising é encontrar a função de partição canônica

$$Z_N = Z(T, B, N) = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp(-\beta H), \quad (3.2)$$

onde a soma é realizada sobre todas as configurações das variáveis de spin. A energia livre magnética por sítio, é dada por

$$g = g(T, B) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[ -\frac{1}{\beta N} \ln Z_N \right]. \quad (3.3)$$

O comportamento crítico das grandezas termodinâmicas acontece na região próxima ao ponto crítico. A magnetização (ou parâmetro de ordem) de um sistema magnético é zero para  $T > T_c$ , onde  $T$  é temperatura e  $T_c$  é a temperatura no ponto crítico. Assim, o sistema está num estado desorganizado, e quando  $T < T_c$ , o sistema se encontra num estado organizado.

A magnetização de spin  $M$  é definida da seguinte forma

$$M = \sum_i \sigma_i. \quad (3.4)$$

Já a densidade de magnetização (ou magnetização por spins)  $m$  é dada por

$$m = \frac{M}{N}, \quad (3.5)$$

onde  $N$  é o número de sítios do sistema e  $M$  a magnetização total.

A susceptibilidade magnética  $\chi$  é obtida a partir da magnetização por spin

$$\chi = N(\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2). \quad (3.6)$$

A densidade de energia  $u$  (ou energia por spin) é fornecida pela equação

$$u = \frac{\langle E \rangle}{N}. \quad (3.7)$$

Podemos obter também o cumulante de Binder de quarta ordem em função da magnetização ou da energia. O cumulante Binder permite localizar o ponto crítico e o respectivo

valor de temperatura crítica  $T_c$ . Para um sistema magnético com  $B = 0$ , o modelo de Ising tem cumulante de Binder dado por

$$U(T) = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2}, \quad (3.8)$$

onde  $m$  é o parâmetro de ordem, isto é, magnetização por spin.

Estas grandezas são funções da temperatura  $T$  e obedecem as relações de escala de tamanho finito

$$M(T) = L^{-\beta/\nu} f_m(x)[1 + \dots] \quad (3.9)$$

$$\chi(T) = L^{\gamma/\nu} f_\chi(x)[1 + \dots] \quad (3.10)$$

$$\frac{dU(T)}{dT} = L^{1/\nu} f_U(x)[1 + \dots], \quad (3.11)$$

onde  $\beta$ ,  $\gamma$  e  $\nu$  são os expoentes críticos,  $f_i(x)$  são funções de escala de tamanho finito com

$$x = (T - T_c)L^{1/\nu} \quad (3.12)$$

sendo a variável de escala, e os colchetes  $[1 + \dots]$  indicam correções nos termos [14].

### 3.3 Expoentes críticos

As grandezas termodinâmicas como, calor específico, compressibilidade e a susceptibilidade magnética, apresentam um comportamento característico na região próxima ao ponto crítico com divergência assintótica dada por uma *lei de potência* cujos expoentes são fracionários, chamados *expoentes críticos*. As experiências mostram que o comportamento crítico de grandezas termodinâmicas análogas, tais como (compressibilidade de um fluido e susceptibilidade de um ferromagneto) tem caráter universal, caracterizado pelo mesmo valor de expoente crítico. Portanto, resultados experimentais e teóricos apontam para a existência de classes de universalidade que dependem da dimensionalidade do espaço em que o sistema é tratado, do número de componetes, do parâmetro de ordem e do alcance das interações microscópicas no sistema. Uma classe de universalidade é definida por uma coleção de valores de expoentes críticos, de forma que sistemas que apresentam os mesmos valores de expoentes críticos pertencem a uma mesma classe de universalidade.

A definição de expoente crítico foi motivada devido ao estudo do comportamento das funções termodinâmicas próximo ao ponto crítico. Para obter o expoente crítico de uma função termodinâmica  $f(\varepsilon)$ , é definido

$$\varepsilon = \frac{T - T_c}{T_c}, \quad (3.13)$$

onde  $\varepsilon$  é um parâmetro adimensional, do qual a função depende, sendo a medida da distância de um ponto  $T$  qualquer até o ponto crítico  $T_c$ . Assim, o expoente crítico associado a  $f(\varepsilon)$  é definido como

$$\lambda = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\ln |f(\varepsilon)|}{\ln |\varepsilon|}, \quad (3.14)$$

assumindo que o limite exista. Na forma de lei de potência, temos que

$$f(\varepsilon) \sim |\varepsilon|^\lambda, \quad (3.15)$$

no limite  $|\varepsilon| \rightarrow 0$ , onde o sistema está próximo do ponto crítico. Sendo assim, temos

$$M \sim |\varepsilon|^\beta, \quad (3.16)$$

onde  $M$  é a magnetização e  $\beta$  seu expoente crítico. A susceptibilidade diverge no ponto crítico de acordo com

$$\chi \sim |\varepsilon|^{-\gamma}, \quad (3.17)$$

onde  $\gamma$  é o expoente crítico. Na transição de fase o comprimento de correlação  $\xi$  também diverge de acordo com a equação

$$\xi \sim |\varepsilon|^{-\nu}, \quad (3.18)$$

onde  $\nu$  é o expoente crítico.

Só é possível fazer simulações para sistemas físicos de tamanho finito, o que torna as funções termodinâmicas dependentes do tamanho do sistema, e essa dependência é devida a divergência do comprimento de correlação na transição de fase, que está limitada pelo tamanho finito do sistema. Logo, na região crítica, para um sistema unidimensional, temos

$$\xi \sim L \sim |\varepsilon|^{-\nu}, \quad (3.19)$$

onde  $L$  é o tamanho do lado da rede, sendo dado por  $L = \sqrt{N}$ . Manipulando esta equação, obtemos

$$|\varepsilon| \sim L^{-1/\nu}. \quad (3.20)$$

Então, substituindo Eq. (3.20) nas Equações (3.16) e (3.17), obtemos respectivamente, a magnetização e a susceptibilidade

$$M_L \sim L^{-\beta/\nu}, \quad (3.21)$$

$$\chi_L \sim L^{\gamma/\nu}. \quad (3.22)$$

A dependência da magnetização e da susceptibilidade em relação ao tamanho do sistema, nas proximidades do ponto crítico é dada pelas razões  $\beta/\nu$  e  $\gamma/\nu$ . Calculando os valores da magnetização e susceptibilidade no ponto crítico, para sistemas de tamanhos diferentes, obtemos a partir das Equações (3.21) e (3.22) os expoentes críticos.

O cumulante de Binder é definido para alguns sistemas de forma a não depender do tamanho do sistema no ponto crítico, isto é,  $|\varepsilon| = 0$ , de maneira que seu expoente crítico neste ponto seja nulo, logo

$$U \sim L^0, \quad (3.23)$$

$$U_L(\varepsilon = 0) = U(\varepsilon = 0) = U^*. \quad (3.24)$$

Para obter o valor do parâmetro crítico no limite termodinâmico ( $N \rightarrow \infty$ ), usa-se a propriedade Eq. (3.24) do cumulante de Binder de quarta ordem. Neste limite, e próximo ao ponto crítico é possível mostrar que as grandezas termodinâmicas, podem ser reescritas numa nova escala, isto é, em termos de suas funções de escala

$$M_L(T) = L^{-\beta/\nu} M'(x), \quad (3.25)$$

$$\chi_L(T) = L^{\gamma/\nu} \chi'(x), \quad (3.26)$$

$$U_L(T) = U'(x), \quad (3.27)$$

onde  $M'(x)$ ,  $\chi'(x)$  e  $U'(x)$  são as funções de escala e  $x = (T - T_c)L^{1/\nu}$  a variável de escala. Este processo tem o nome de escalamento de tamanho finito e quando  $\varepsilon = 0$ ,  $U_L = U^*$  não

depende de qualquer expoente. No ponto crítico, as curvas de  $U_L$  e  $U^*$  têm o mesmo valor, ou seja, se cruzam. Ainda podemos escrever as funções universais de escala para a magnetização, susceptibilidade e cumulante de Binder na seguinte forma

$$M'(x) = M_L(T)L^{\beta/\nu}, \quad (3.28)$$

$$\chi'(x) = \chi_N L(T)L^{-\gamma/\nu}, \quad (3.29)$$

$$U'(x) = U_L(T). \quad (3.30)$$

Conhecendo os expoentes críticos referentes à transição de fase, na região próxima ao ponto crítico, a magnetização e a susceptibilidade magnética apresentam um colapso em termos das suas funções universais de escala. Este procedimento é chamado de colapso de dados, e possui alta sensibilidade com relação aos valores dos expoentes críticos e temperatura crítica, isto é, quanto mais preciso forem os valores dos expoentes críticos e da temperatura crítica, melhor será o colapso das curvas. Nesta abordagem, o cumulante de Binder de quarta ordem não depende do tamanho do sistema no ponto crítico, isso torna eficiente a determinação do ponto crítico. Também é possível obter a temperatura crítica para um sistema de tamanho finito, onde a temperatura crítica depende do tamanho do sistema, isto é,

$$T_c(L) = T_c + bL^{-1/\nu}, \quad (3.31)$$

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

# Capítulo 4

## Redes Complexas

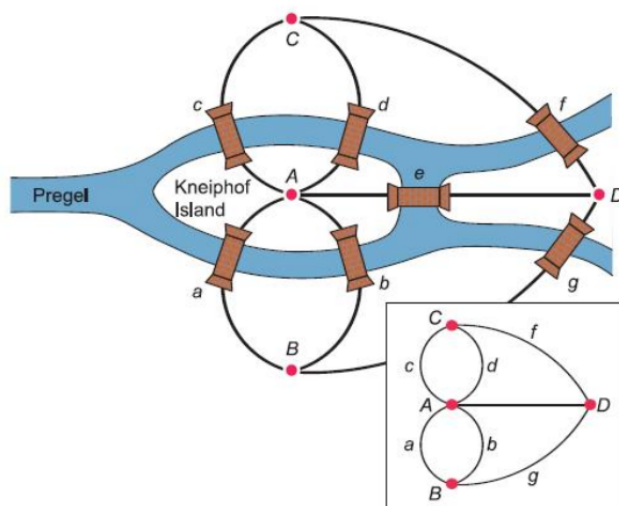
No mundo real temos vários tipos de redes, redes de computadores, redes de telefones, redes sociais, redes econômicas, etc. Uma rede é um conjunto de unidades que estão ligadas entre si, essas unidades são chamados de sítios e as respectivas ligações entre elas chamadas de arestas. As redes complexas podem ser classificadas como uma pequena área dentro da seara dos sistemas complexos. A grande dificuldade de estudar esses sistemas é devido sua modelagem matemática apresentar equações diferenciais com soluções não-lineares, o que torna difícil a solução numérica ou analítica de tal sistema [15].

As redes complexas são sub-áreas de estudo dos sistemas complexos, que usam o formalismo matemático de teoria dos grafos e as ferramentas padrão da Mecânica Estatística para estudar as propriedades de sistemas que podem ser representados por grafos (ou redes). O estudo de sistemas complexos tem sido bastante explorado nos últimos anos. Com o avanço computacional é possível fazer simulações de sistemas com um número cada vez maior de componentes interligados. O conceito matemático de redes é descrito pela teoria dos grafos. A teoria dos grafos tem suas raízes no século XVIII, com o famoso problema das pontes de Königsberg, iniciando com o físico e matemático Leonhard Euler. Os grafos apresentam as propriedades topológicas de uma rede, tratando a rede como uma coleção de nós e arestas [16]. Neste Capítulo apresentaremos os conceitos básicos desses sistemas, algumas propriedades das redes aleatórias, e também faremos o estudo da rede de Voronoi-Delaunay ou rede Dual.



## 4.1 Definição de redes

No século XVIII, o físico e matemático suíço de língua alemã Leonhard Paul Euler, se deparou com um problema clássico que ficou conhecido como as pontes de Königsberg [17]. O problema consistia em saber se era possível atravessar todas as sete pontes do rio Pregel que corta a cidade de Königsberg, uma única vez e voltar ao ponto de partida (veja a Figura 4.1). Na tentativa de resolver o problema, Euler criou uma topologia para descrever a situação, onde as pontes foram representadas por segmentos e as ilhas da cidade por pontos (nós). Ele chegou a conclusão que para resolver o problema, os nós no grafo, exceto o primeiro e o último nó visitado, deveriam ser conectados por um número par de pontes. Este fato foi o propulsor para o início da teoria dos grafos.



**Figura 4.1:** Representação esquemática das pontes da cidade Königsberg sobre o rio Pregel. No quadro pequeno, o grafo que representa as pontes e as ilhas da cidade [18].

A teoria dos grafos possibilita um tratamento matemático para os conceitos da teoria de redes [19]. Portanto, os grafos são estruturas matemáticas compostas por um conjunto de nós, que podem representar os indivíduos de um sistema social, ligados por arestas. A nomenclatura empregada pelos físicos, em geral é: sítios para os vértices e ligações para as arestas. As ligações são linhas que conectam os vértices, e podem ser direcionadas ou não. No caso em que a ligação entre os pares de vértices têm direção e sentido, a ligação é dita direcionada, e quando as ligações não têm uma direção específica é dita não-direcionada. Para fazer a caracterização das redes complexas é necessário a utilização de algumas propriedades

(ou parâmetros) que apresentamos resumidamente na seção a seguir.

## 4.2 Propriedades de Redes

Os vários tipos de redes que foram publicadas, apresentam alguns parâmetros (ou propriedades) que são responsáveis por sua caracterização, esses parâmetros proporcionam a obtenção dos valores de outras grandezas.

### 4.2.1 Distribuição de conectividade

A conectividade (ou grau)  $k_i$  de um sítio  $i$  é o número de ligações conectadas a ele. Em redes direcionadas, temos conectividade de entrada  $k_i^{in}$  e conectividade de saída  $k_i^{out}$ , logo a conectividade total de  $i$  é a soma  $k = k_i^{in} + k_i^{out}$ . E para uma rede não direcionada, falamos apenas em conectividade do sítio. A conectividade dos vértices é distribuída estatisticamente, então podemos introduzir uma função de distribuição de conectividade  $p(k, i, N)$  para uma rede, sendo assim, definimos a distribuição total

$$P(k, N) = \sum_{i=1}^N p(k, i, N), \quad (4.1)$$

onde  $N$  é o tamanho da rede. A distribuição de conectividade nos mostra como estão distribuídas as ligações entre os sítios da rede.

Apresentamos a seguir, alguns exemplos de distribuições de conectividade, que são bastante utilizadas no estudo de redes complexas.

- Distribuição de Poisson: para  $\langle k \rangle$  fixo e  $(N \rightarrow \infty)$ , a distribuição de conectividade toma a forma de uma distribuição de Poisson

$$P(k) = e^{-\langle k \rangle} \frac{\langle k \rangle^k}{k!}. \quad (4.2)$$

- Distribuição de conectividade do tipo Lei de Potência: a partir de experiências, temos

$$P(k) \propto k^{-\lambda}, \quad (4.3)$$

onde  $\lambda$  é o expoente característico da distribuição. As redes com comportamento de distribuição de grau em lei de potência, são ditas redes livres de escala. O expoente característico pode assumir valores entre 2 e 3 para o modelo Barabasi-Albert.

### 4.2.2 Coeficiente de aglomeração

A grandeza que determina o quanto os primeiros vizinhos de um determinado sítio estão conectados entre si, é o coeficiente de aglomeração. Esta característica local de um dado sítio foi introduzida por Watts e Strogatz. Assim como a distribuição de conectividade, o coeficiente de aglomeração é um dos parâmetros mais importante no estudo de redes complexas [20]. Imagine a situação, onde um sítio A está conectado com um sítio B, e o sítio B conectado com um sítio C, então existe uma grande probabilidade do sítio A está conectado com C. De maneira mais formal, o coeficiente de aglomeração é a probabilidade que dois vizinhos mais próximos de um sítio estejam conectados entre si, ou seja, se um sítio  $i$  está conectado a  $k_i$  aresta e conectado a outros sítios, então os primeiros vizinhos do sítio  $i$  são vizinhos entre si, existindo no máximo  $k_i \frac{(k_i-1)}{2}$  arestas entre eles. Sendo assim, o coeficiente de aglomeração é dado por

$$C_i = \frac{2E_i}{k_i(k_i - 1)}, \quad (4.4)$$

onde  $E_i$  é o número de arestas existentes entre os vizinhos do nó  $i$ .

### 4.2.3 Menor caminho médio

O menor caminho médio é a média da menor distância entre dois vértices. É possível definir um caminho entre dois sítios quaisquer de uma rede complexa, onde o comprimento desse caminho é dado pelo número de ligações existentes entre esses sítios. Na maioria dos casos, não existe apenas um caminho entre eles, no entanto, o caminho de maior interesse físico é o que chamamos de menor caminho médio. O menor caminho médio é definido como sendo

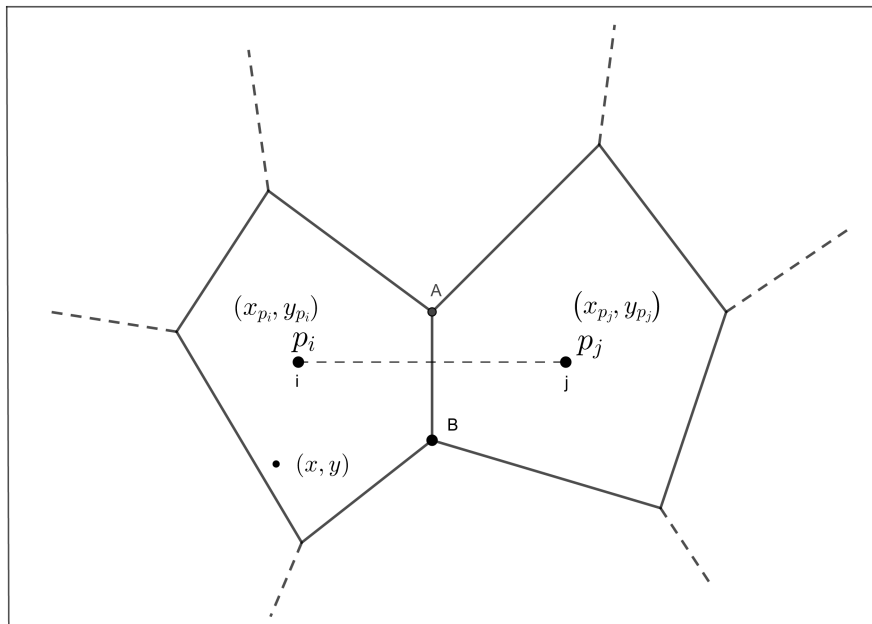
$$\bar{l} = \frac{2}{(N)(N-1)} \sum_{i < j} d_{ij}, \quad (4.5)$$

onde  $d_{ij}$  é a distância entre os vértices,  $(i,j)$  são os pares de vértices e  $N$  é o tamanho do sistema.

## 4.3 Rede de Voronoi-Deulaunay

### 4.3.1 Diagrama de Voronoi

Considere um conjunto finito de pontos  $P = \{p_1, p_2, \dots, p_N\}$  num plano no espaço euclidiano, em que cada ponto representa um sítio. Este plano é dividido em polígonos convexos associados a cada um dos  $N_p$  sítios. Assumindo que dentro do polígono contenha um sítio  $i$ , todos os outros pontos do mesmo polígono estão mais próximo do sítio  $i$ , no ponto  $p_i$ , do que de qualquer outro sítio  $j$  no ponto  $p_j$ . Para facilitar a compreensão do diagrama de Voronoi, utilizamos apenas dois polígonos do plano, onde estão situados os sítios  $i$  e  $j$ , como indica a Figura 4.2 abaixo.



**Figura 4.2:** Esquema de apenas dois sítios do plano contornados por uma região na forma de polígono de Voronoi.

As coordenadas  $(x, y)$  representam pontos dentro do polígono que contém o sítio  $i$ , e a relação  $\sqrt{(x - x_{p_i})^2 + (y - y_{p_i})^2} < \sqrt{(x - x_{p_j})^2 + (y - y_{p_j})^2}$  é válida, isto é, a distância de  $(x, y)$  para qualquer outro sítio é maior do que para o sítio no ponto  $p_i$  [21]. Esses diagramas

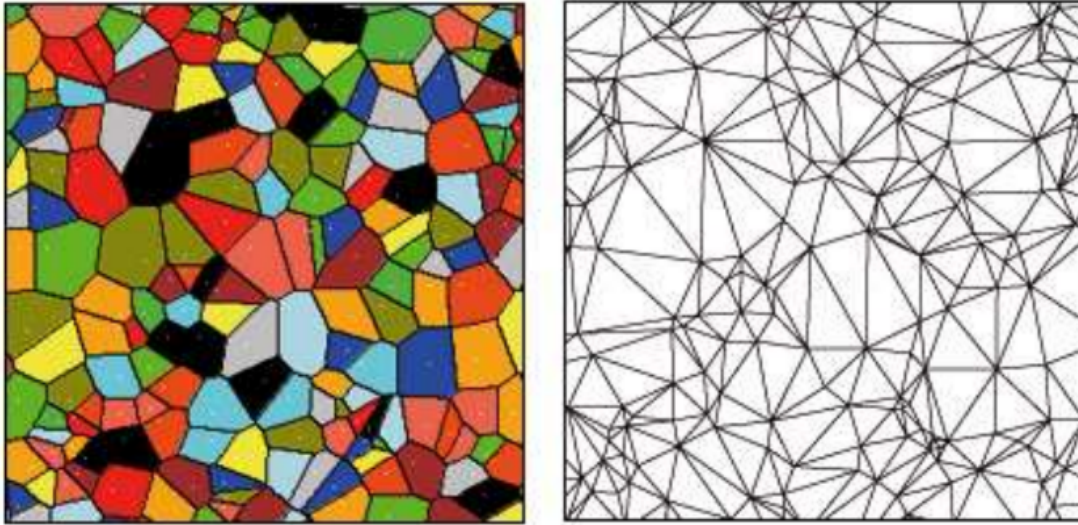
possuem algumas propriedades importantes:

- o diagrama de Voronoi de um conjunto de pontos  $P$  é único;
- Dois pontos  $p_i$  e  $p_j$  são vizinhos quando dividem a mesma aresta do polígono de Voronoi;
- o número de arestas de Voronoi  $N_a$  é dado por ( $N_a \leq 3N_p - 6$ ), uma vez que o vértice do polígono é representado pela intersecção de três arestas que são equidistantes a três pontos;
- a partir da propriedade anterior e o fato de que cada aresta do polígono de Voronoi é dividida por dois sítios, nota-se que o número médio de arestas por polígono é de aproximadamente seis, ou seja,  $\frac{2(3N-6)}{N} = 6 - \frac{12}{N} \leq 6$ , o que significa que na média cada sítio possui seis ligações.

Essas propriedades são válidas para todos os polígonos contidos no plano. Apesar de estarmos lidando com diagrama de Voronoi em duas dimensões e com métrica de distância euclidiana, deve-se notar que o conceito de diagrama de Voronoi pode ser generalizado para  $n$  dimensões [23].

Os diagramas de Voronoi datam do século XVII. Uma das primeiras referências com relação ao assunto foi o trabalho do físico, filósofo e matemático francês René Descartes (1596-1650), sobre a divisão do universo em vórtices. O conceito moderno para o diagrama de Voronoi foi creditado aos matemáticos alemães, Johann Peter Gustav Lejeune Dirichlet (1805-1859) e M. G. Voronoi. Dirichlet em seu trabalho em formas quadráticas fez algumas das primeiras contribuições significativas para o campo dos diagramas de Voronoi, por causa dele os diagramas de Voronoi também são conhecidos como tesselações de Dirichlet. Dirichlet formalizou o conceito do diagrama de Voronoi nos casos bidimensionais e tridimensionais. E, no ano de 1908, M. G. Voronoi formalizou o diagrama para  $n$  dimensões, e deu o nome de diagrama de Voronoi, usado até hoje [21].

O diagrama de Voronoi pode ser usado na construção da Rede Dual, também conhecida como triangulação de Delaunay. Em 1872, o matemático francês Charles Delaunay, fez um trabalho sobre as triangulações de Delaunay (ou mosaicos de Delaunay), daí o nome. A tesselação de Voronoi e a triangulação de Delaunay estão representados esquematicamente na Figura 4.3.



**Figura 4.3:** Representação geométrica do diagrama de Voronoi (lado esquerdo) e sua correspondente triangulação de Delaunay (lado direito) [12].

Em uma triangulação de Delaunay, dois sítios quaisquer estão conectados se eles dividem um limite do polígono de Voronoi. O diagrama de Voronoi tem inúmeras aplicações em várias áreas da ciência, como na Física, Matemática, Biologia, Química, etc. Na construção da rede de Delaunay é utilizado o algoritmo de Frieberge Ren. Na utilização deste algoritmo é necessário considerar  $N$  pontos, chamados de sítios da rede, distribuídos aleatoriamente seguindo a distribuição de *Poisson* em uma rede de tamanho  $(L \times L)$ . A conexão dos pontos é feita de acordo com a regra de Voronoi-Delaunay. Num espaço com  $N_p$  pontos,  $N_a$  arestas e  $N_t$  triângulos, a triangulação de Delaunay é descrita pela seguinte equação

$$N_p + N_a - N_t = \chi. \quad (4.6)$$

De acordo com a Eq. (4.6), para  $\chi = 2$ , temos uma topologia de esfera, e para  $\chi = 0$ , temos uma topologia de tórus que tem a seguinte regra para a triangulação

$$2N_a = 3N_t. \quad (4.7)$$

Agora, substituindo a Eq. (4.7) na Eq. (4.6), obtemos

$$N_t = 2N_p \quad (4.8)$$

e

$$N_a = 3N_p. \quad (4.9)$$

# Capítulo 5

## Modelo Cinético de Formação de Opinião

### 5.1 Introdução

Modelos de formação de opinião em uma sociedade tem sido bastante estudados nos últimos anos [22, 24, 25], levando ao crescimento interdisciplinar da sociofísica. Esses modelos servem para mensurar, por exemplo, uma resposta da sociedade com relação a questões políticas, aceitação de inovações, etc. A partir desses estudos foram obtidos resultados quantitativos de grande importância para a compreensão de sistemas sociais. Os sistemas sociais são sistemas dinâmicos complexos ricos em informações, e podem ser estudados usando como ferramenta a Física Estatística. A dinâmica implícita desses sistemas é explicada usando modelos microscópicos para imitá-los. Outro ponto importante, é que alguns modelos sociais apresentam comportamento crítico diferente, e isso destaca a importância do aspecto teórico desses modelos.

O formalismo matemático da dinâmica social nos ajudou a compreender como o consenso global, isto é, uma fração maior de opiniões semelhantes é atingida a partir de opiniões individuais dos agentes. As opiniões podem ser representadas por variáveis discretas ou contínuas [26]. Essas variáveis podem sofrer mudanças espontâneas ou mudanças devido aos parâmetros externos. Por se tratar de um sistema fora de equilíbrio, estamos interessados nas diferentes propriedades de estado *estacionário*, ou seja: o modelo apresenta uma fase onde os indivíduos têm opiniões amplamente diferentes, e outra fase com a maioria dos indivíduos com mesma opinião. É importante salientar, que as transições de fases também acontecem devido a algum parâmetro específico do modelo.

Aqui também estudamos um modelo de dinâmica coletiva de formação de opinião, considerando interações apenas entre pares de sítios. A dinâmica coletiva de formação de opinião tem sido estudada a bastante tempo [27, 28], com os modelos projetados de tal forma que as opiniões podem assumir os valores em torno de um (consenso), dois (polarizada) e muitos valores (fragmentação). O parâmetro de ordem ou comportamento macroscópico do sistema foi introduzido apenas em trabalhos recentes [29, 30], onde uma transição de fase, da fase desordenada para a fase ordenada foi observada. No entanto, em contraste com esses modelos, obtemos aqui uma fase ordenada, onde mesmo na presença de uma opinião dominante (simetria de fase quebrada), opiniões contrárias sobrevivem e uma fase desordenada, onde os valores das opiniões coexistem sem qualquer preferência (fase simétrica). Nesse contexto a transição de fase é do tipo ordem-desordem, análoga a do Modelo Ising e modelos correlacionados. Também comparamos nossos resultados com os do modelo [5], que considera interações negativas e apresenta transição de fase semelhante a que obtemos aqui.

## 5.2 O Modelo

Apresentamos um modelo de dinâmica coletiva de formação de opinião para analisar o *consensu* de um sistema social, onde as opiniões dos agentes  $i$  e  $j$  são respectivamente,  $o_i(t)$  e  $o_j(t)$  num tempo  $t$ . O sistema é composto por  $N$  agentes, que chamaremos de sociedade. A mudança nas opiniões das pessoas acontece a partir de interações entre os pares de agentes  $i$  e  $j$ , e a dinâmica do sistema é dada pela equação:

$$o_i(t+1) = o_i(t) + \mu_{ij}o_j(t), \quad (5.1)$$

onde  $o_i(t+1)$  é a opinião do agente  $i$  após a interação com o agente  $j$  no tempo  $(t+1)$ , com  $t$  discreto. O  $\mu_{ij}$  [31, 32, 33] é a influência de um indivíduo  $j$  sobre um indivíduo  $i$ , por exemplo. A definição do parâmetro de interação  $\mu_{ij}$  é da forma

$$\mu_{ij} = \mu_0 e^{-ar_{ij}}, \quad (5.2)$$

onde  $\mu_0$  é uma constante igual a 1,  $a \geq 0$  é um parâmetro e  $r_{ij}$  é a distância relativa entre os agentes  $i$  e  $j$ . Aqui,  $\mu_{ij}$  são reais e mantemos seus valores no intervalo,  $-1 \leq \mu_{ij} \leq +1$ , por simplicidade. Quanto maior o valor de  $r_{ij}$ , menor é o valor do parâmetro de interação. As



opiniões dos indivíduos têm seus valores no intervalo  $-1 \leq o_i(t) \leq +1$ , e seguindo a equação (5.1) o valor máximo de  $o_i(t+1)$  é imposto como sendo  $+1$  e o valor mínimo como sendo  $-1$ . A organização do sistema é medida pelo parâmetro de ordem (ou opinião média), uma grandeza definida de forma análoga a magnetização de sistemas magnéticos,

$$O = \frac{1}{N} \left| \sum_{i=1}^N o_i(t) \right|. \quad (5.3)$$

Este modelo foi inspirado na Ref.[5], proposto recentemente e similar a uma classe de modelos cinéticos de formação de opinião [29, 34, 4], que por sua vez foram inspirados nos modelos de troca de riqueza [35, 36]. Foi observado nesses modelos uma *transição de fase espontânea*, onde o parâmetro de ordem  $O$  é diferente de zero na fase assimétrica e igual a zero  $O = 0$  na fase simétrica, onde as opiniões de todos os indivíduos é igual a zero, indicando um estado neutro.

Os parâmetros de convicção e influência foram considerados uniformes nos modelos cinéticos de formação de opinião precedentes. Aqui em nosso modelo, o parâmetro de convicção é igual a 1, o que leva o indivíduo a permanecer com a mesma opinião, ou seja,  $o_i(t+1) = o_i(t)$ , quando  $\mu_{ij} = 0$ . Numa interação social entre dois agentes pode ocorrer concordância ou discordância de opiniões, este fato justifica a inclusão de interações positivas e negativas. Sendo assim,  $\mu_{ij}$  assume uma distribuição de valores positivos e negativos que podem ser contínuos ou discretos e obtidos aleatoriamente. Definimos a fração de valores negativos de  $\mu_{ij}$  como um parâmetro  $p$  (temperatura social, semelhante a temperatura em transições de fases conduzidas termicamente).

Além de [5], foram consideradas interações negativas num modelo de dinâmica de opinião denominado Galam Contrarian [37]. Esse modelo é discreto e de opinião binária. Como em nosso modelo, o Galam Contrarian apresenta um estado ordenado, onde a maioria das opiniões tem o mesmo valor e um estado desordenado, onde nenhuma maioria é observada, dependendo do agrupamento dos indivíduos que se opõe a opinião popular (contrarians). Em um grafo de longo alcance o seu comportamento crítico é similar ao do nosso modelo. Um fato interessante é que a opinião dos contrarians sempre diverge com relação a da maioria.

# Capítulo 6

## Resultados e discussões

### 6.1 Modelo e simulação

Nosso objetivo é estudar as propriedades críticas de um modelo simples de formação de opinião numa sociedade conectada, na rede aleatória de Voronoi-Delaunay. A dinâmica de interação é definida por uma equação de evolução temporal (5.1), onde um agente modifica sua opinião sob a influência de outro. A evolução da dinâmica do sistema ocorre quando as opiniões são modificadas a partir de debates (ou discussões) entre os indivíduos. A inclusão de interações negativas com probabilidade  $p$  é a principal característica do nosso modelo. Apesar da equação (5.1) não incluir todas as complexidades envolvidas em tais interações, no entanto, mesmo com essa forma simples, apresenta algumas características intrigantes.

A cada interação entre um sítio  $i$  e um sítio  $j$ , o valor de  $\mu_{ij}$  é escolhido aleatoriamente com probabilidade  $p$  de ser negativo [5]. Com a introdução do parâmetro  $p$ , definido de maneira simples, o modelo proposto apresenta uma transição de fase contínua e também algumas características desejáveis adicionais representando uma sociedade real. O parâmetro  $p$  tem a função de desordenar o sistema (analogamente a temperatura nas transições de fases conduzidas termicamente).

As regras do processo estocástico de nosso modelo, são:

1. O sistema é composto por  $N$  agentes conectados, e a cada um deles é associado um estado de opinião  $o_i(t)$ , no intervalo  $[-1, +1]$ , de forma aleatória.
2. Um dos sítios  $i$  é escolhido aleatoriamente, assim como um de seus primeiros vizinhos

$j$ .

- (a) A interação  $\mu_{ij}$  entre os sítios  $i$  e seu vizinho  $j$ , é dada pela Eq.(5.2) com uma probabilidade  $p$  de ser negativa.
- (b) A opinião do sítio  $i$  é atualizada de acordo com a Eq.(5.1).

3. Repete-se o passo 2, e a cada  $n$  repetições, o relógio é acrescido de 1 unidade, ou seja, a unidade de tempo corresponde a  $n$  atualizações dos sítios.

O estudo foi realizado através de simulação de Monte Carlo, começando com a criação da rede aleatória de Voronoi-Delaunay, no qual é indicado as posições dos sítios que são ligados aos seus primeiros vizinhos. O número de ligações associada a cada sítio da rede pode variar de 3 a 17 ligações.

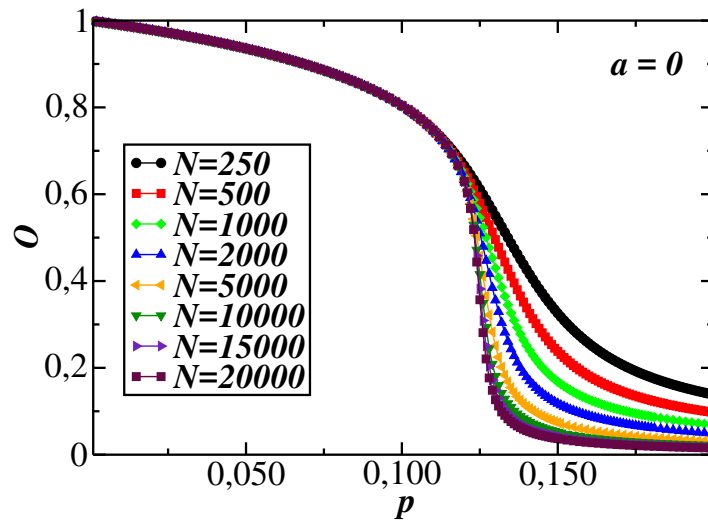
A transição de fase é do tipo ordem-desordem, ou seja, análoga a transição de fase do modelo Ising 2D, com desordem conduzida termicamente. Portanto, para calcular as grandezas idênticas as do Ising, em nosso modelo, como parâmetro de ordem, susceptibilidade e cumulante de Binder, utilizamos as Equações (3.5), (3.6) e (3.8).

Para cada tamanho  $N$  do sistema utilizamos 200 redes aleatórias pra calcular as médias das grandezas macroscópicas: magnetização, susceptibilidade e cumulante de Binder. Como se trata de um sistema fora do equilíbrio, isto é, não contém energia, estamos interessados nos valores das grandezas no estado estacionário (onde a configuração do sistema não muda mais com o tempo). Antes do sistema atingir o estado estacionário, foi considerado que todos os indivíduos compartilhavam da mesma opinião (por exemplo: todos os spins apontando no mesmo sentido), mas após 150000 passos de Monte Carlo e um tempo de relaxação de 50000 MC o sistema evoluiu. Um passo de Monte Carlo é a atualização simultânea dos valores de opinião de  $N$  agentes. Alcançamos as médias para obter as propriedades macroscópicas a partir da simulação computacional, usada no estudo do modelo de formação de opinião através do MMC.

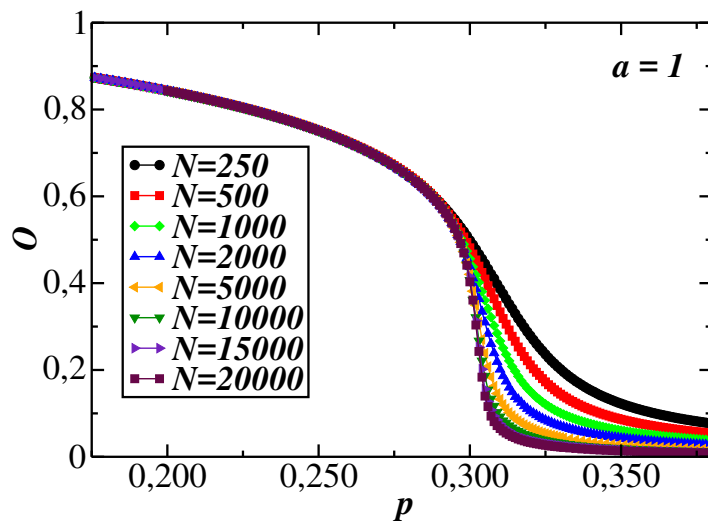
## 6.2 Simulação na rede de Voronoi-Delaunay

A Figura 6.1 mostra a dependência da opinião média em função do parâmetro  $p$  (temperatura social), obtidas a partir da simulação na rede de Voronoi-Delaunay para vários

tamanhos  $N$  de rede e para os valores  $a = 0$  e  $a = 1$ . Cada curva do parâmetro de ordem  $O$ , para um dado valor de  $N$ , aponta para a existência de uma transição de fase do tipo ordem-desordem que ocorre quando  $p \geq p_c$ . Ou seja, o sistema passa de um estado ordenado (com a maioria dos indivíduos tendo opiniões de mesmo sinal) para um estado desordenado (onde os sinais das opiniões são diferentes e somam zero). Quanto maior o  $N$  mais próximo o sistema se encontra do ponto crítico  $p_c$ . O parâmetro  $p$  é quem causa a desordem no sistema, analogamente a temperatura nas transições de fases conduzidas termicamente. Um estado desordenado é aquele onde existe muita discordância entre os indivíduos.



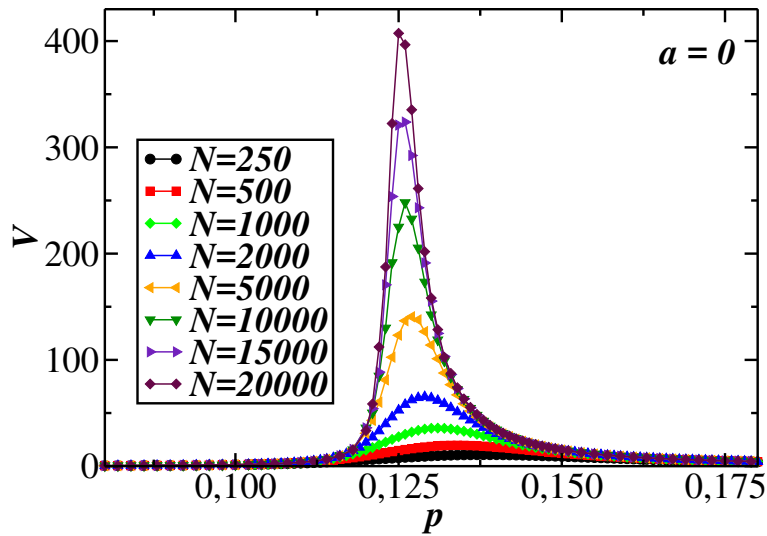
(a)



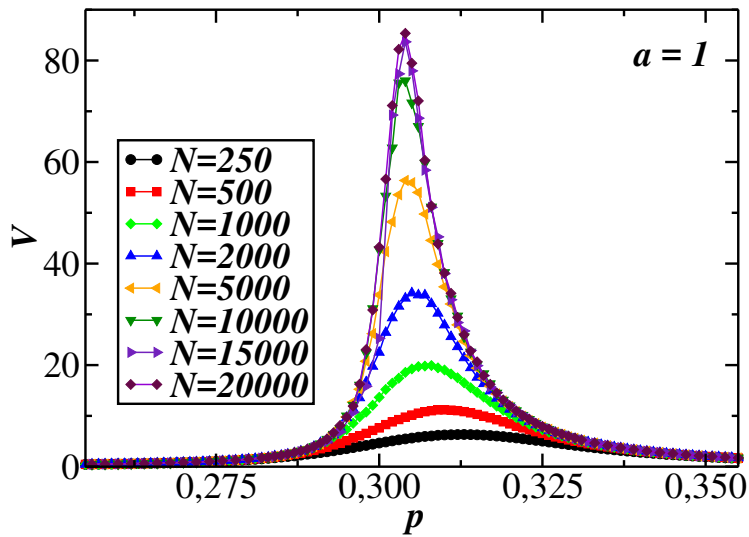
(b)

**Figura 6.1:** Gráfico da opinião média  $O$  em função do parâmetro de ruído  $p$ , Eq.(3.5). Na parte (a) temos  $a = 0$  e na parte (b)  $a = 1$ .

A Figura 6.2 mostra a variação da susceptibilidade  $V$  em função de  $p$  para vários tamanhos  $N$  de rede e para os valores  $a = 0$  e  $a = 1$ . As curvas apresentam um máximo na região do ponto pseudo crítico  $p_c(L)$ , para um dado valor de  $L$ , o tamanho do lado da rede, e quanto maior o valor de  $N$ , mais  $p_c(L)$  se aproxima de  $p_c$ .



(a)

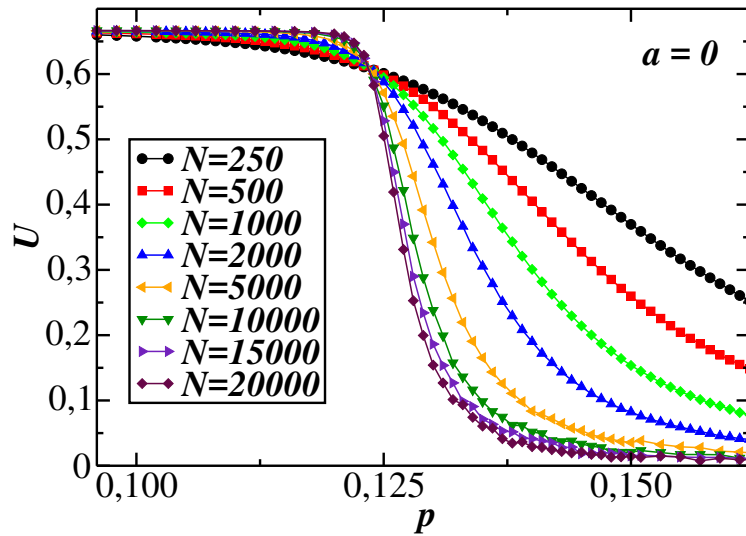


(b)

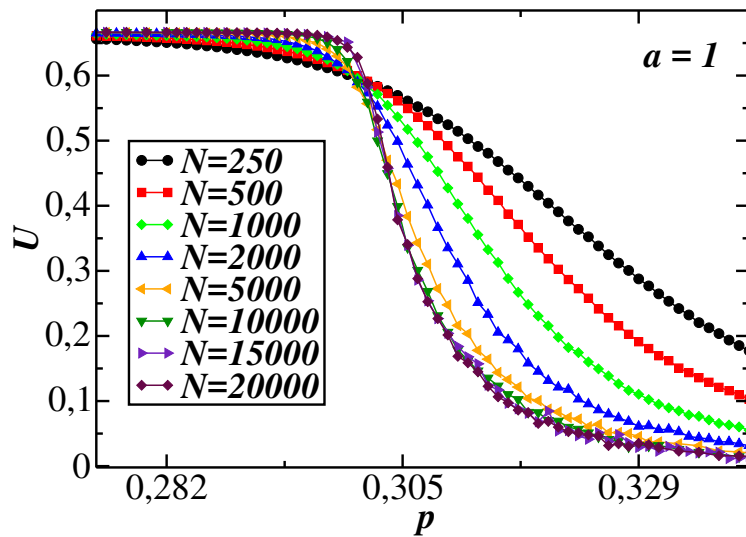
**Figura 6.2:** Gráfico de  $V$  em função do parâmetro de ruído  $p$ , Eq.(3.6). Na parte (a) temos  $a = 0$  e na parte (b)  $a = 1$ .

Na Figura 6.3 apresentamos os gráficos do cumulante de Binder de quarta ordem em função de  $p$  para diferentes tamanhos de rede, com  $a = 0$  e  $a = 1$ . O parâmetro de ruído

crítico  $p_c$  é estimado a partir do cálculo do cumulante de Binder. A intersecção das curvas do cumulante de Binder ocorre na região do ponto crítico  $p_c$ , nos permitindo estimar seu valor. De acordo com a definição do cumulante de Binder, o ponto crítico é o único local onde a temperatura tem o mesmo valor independentemente do tamanho do sistema.



(a)

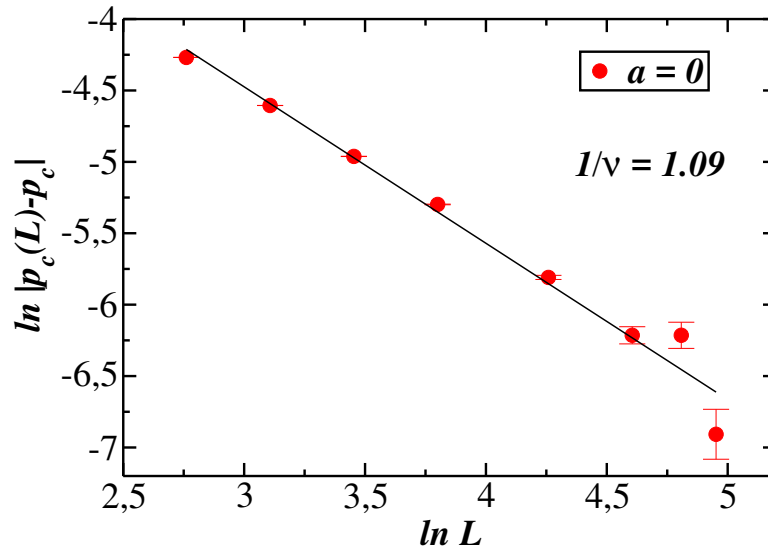


(b)

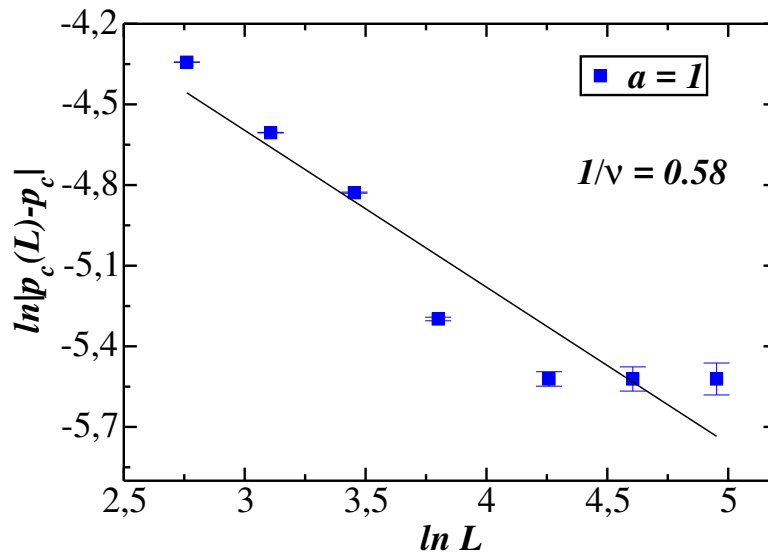
**Figura 6.3:** Gráfico do cumulante de Binder de quarta ordem  $U$  em função do parâmetro  $p$ , Eq.(3.8). Na parte (a) temos  $a = 0$  e na parte (b)  $a = 1$ .

A partir da Eq.(3.31) é possível calcular o valor do expoente crítico do comprimento de correlação, onde  $p_c(L)$  é o ponto pseudo crítico para um dado  $L$ . No limite termodinâmico

o parâmetro de ruído crítico é  $p_c$ . Na Figura 6.4 mostramos os gráficos de uma lei de escala para vários tamanhos  $L$ , utilizados para calcular o expoente do comprimento de correlação  $1/\nu$ .



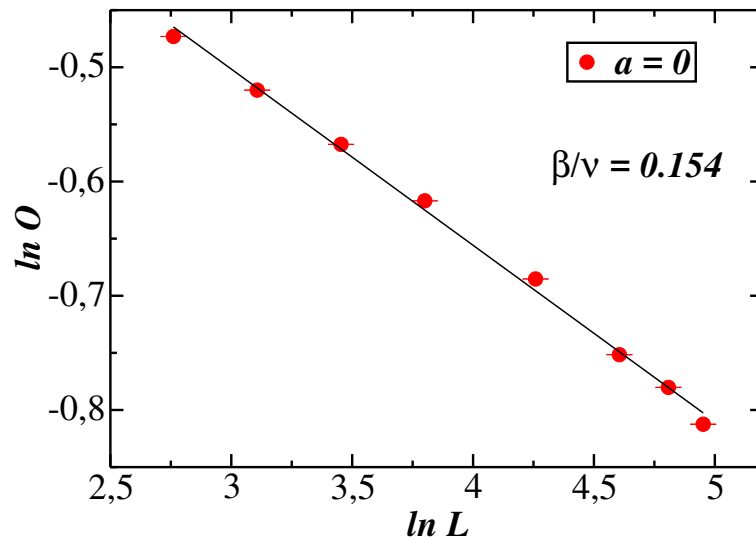
(a)



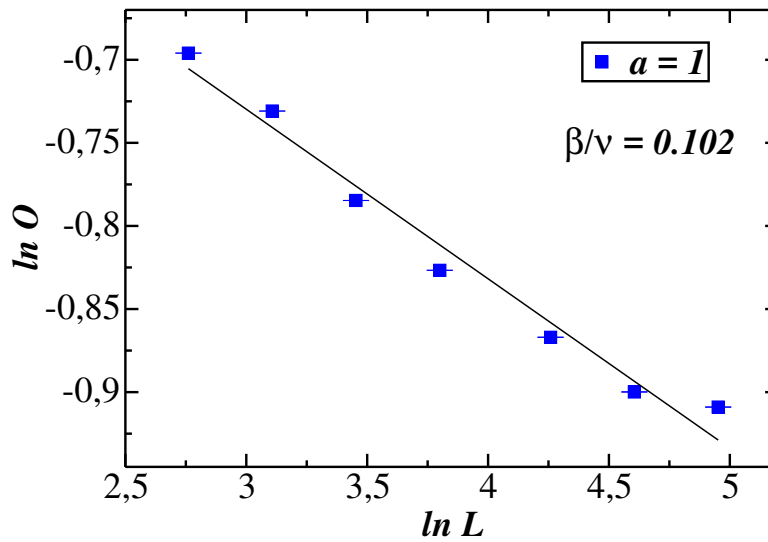
(b)

**Figura 6.4:**  $\ln|p_c(L) - p_c|$  em função do  $\ln(L)$ . A linha contínua é a regressão linear. Na parte (a) temos  $a = 0$  e na parte (b)  $a = 1$ .

Na Figura 6.5 plotamos os gráficos do logaritmo do parâmetro de ordem em função do logaritmo de  $L$ , para  $a = 0$  e  $a = 1$ . A inclinação da reta corresponde ao valor do expoente crítico do parâmetro de ordem  $\beta/\nu$ , de acordo com a Eq.(3.21).



(a)



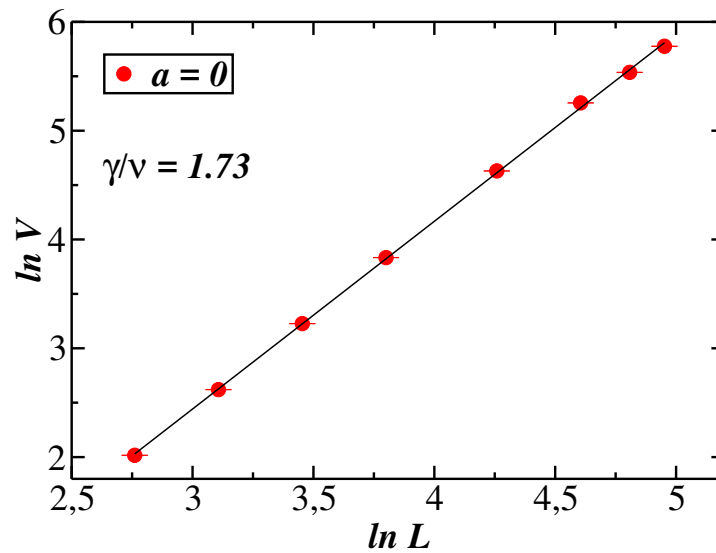
(b)

**Figura 6.5:**  $\ln(O)$  em função do  $\ln(L)$ . A linha contínua é a melhor regressão linear. Na parte (a) temos  $a = 0$  e na parte (b)  $a = 1$ .

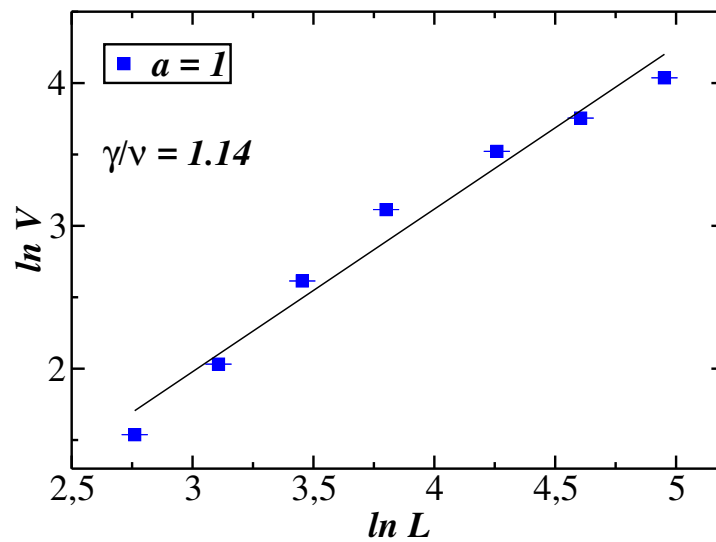
A Figura 6.6 mostra o comportamento do logaritmo da susceptibilidade em função do logaritmo de  $L$ , para os casos com  $a = 0$  e  $a = 1$ . O valor do expoente crítico da susceptibilidade  $\gamma/\nu$  é obtido a partir da inclinação da reta, de acordo com a Eq.(3.22).

Na Figura 6.7 construímos os gráficos do logaritmo da susceptibilidade máxima em função do logaritmo de  $L$ , respectivamente para  $a = 0$  e  $a = 1$ . O valor do expoente crítico da susceptibilidade máxima  $\gamma/\nu^{max}$  é obtido a partir do ajuste linear, e corresponde ao valor





(a)



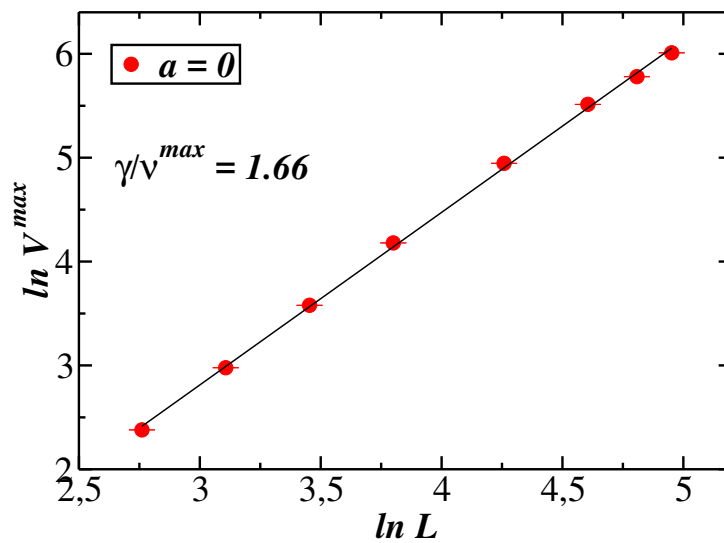
(b)

**Figura 6.6:** Logaritmo da susceptibilidade em função do  $\ln(L)$ . A linha contínua é a melhor regressão linear. Na parte (a) temos  $a = 0$  e na parte (b)  $a = 1$ .

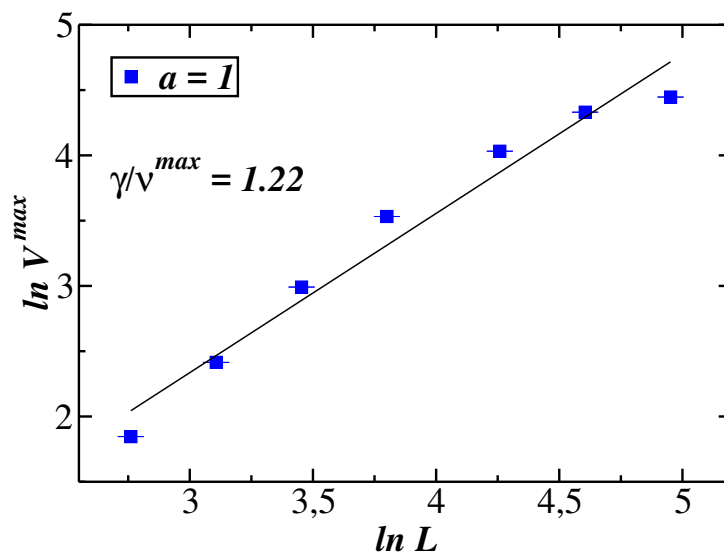
do coeficiente de inclinação da reta. Usamos também a Eq.(3.22) para calcular o valor de  $\gamma/\nu^{max}$ .

Baseado nos resultados obtidos a partir das Figuras 6.3, 6.4, 6.5, 6.6 e 6.7, escrevemos a Tabela 6.1 com os valores encontrados para o parâmetro de ruído crítico  $p_c$  e para os expoentes críticos, nos casos  $a = 0$  e  $a = 1$ .

Com base no comportamento das curvas do colapso de dados da magnetização, suscepti-



(a)



(b)

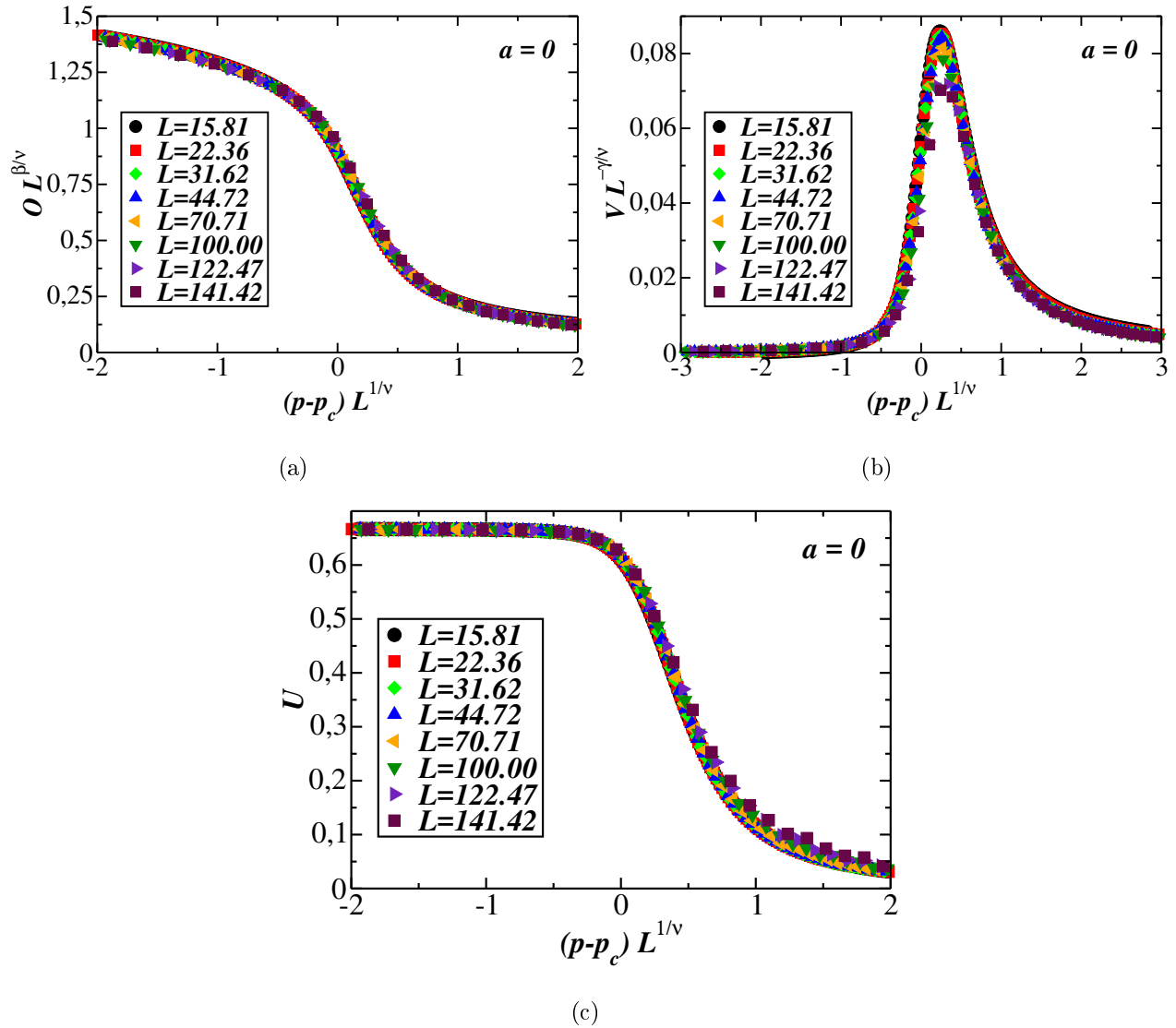
**Figura 6.7:** Logaritmo da susceptibilidade máxima em função do logaritmo de  $L$ . A linha contínua é a melhor regressão linear. Na parte (a) temos  $a = 0$  e na parte (b)  $a = 1$ .

|         | $p_c$     | $1/\nu$ | $\beta/\nu$ | $\gamma/\nu$ | $\gamma/\nu^{max}$ |
|---------|-----------|---------|-------------|--------------|--------------------|
| Ising   | –         | 1.00    | 0.125       | 1.75         | –                  |
| $a = 0$ | 0.1235(7) | 1.09(7) | 0.154(4)    | 1.73(3)      | 1.66(2)            |
| $a = 1$ | 0.300(2)  | 0.58(9) | 0.102(7)    | 1.14(9)      | 1.22(10)           |

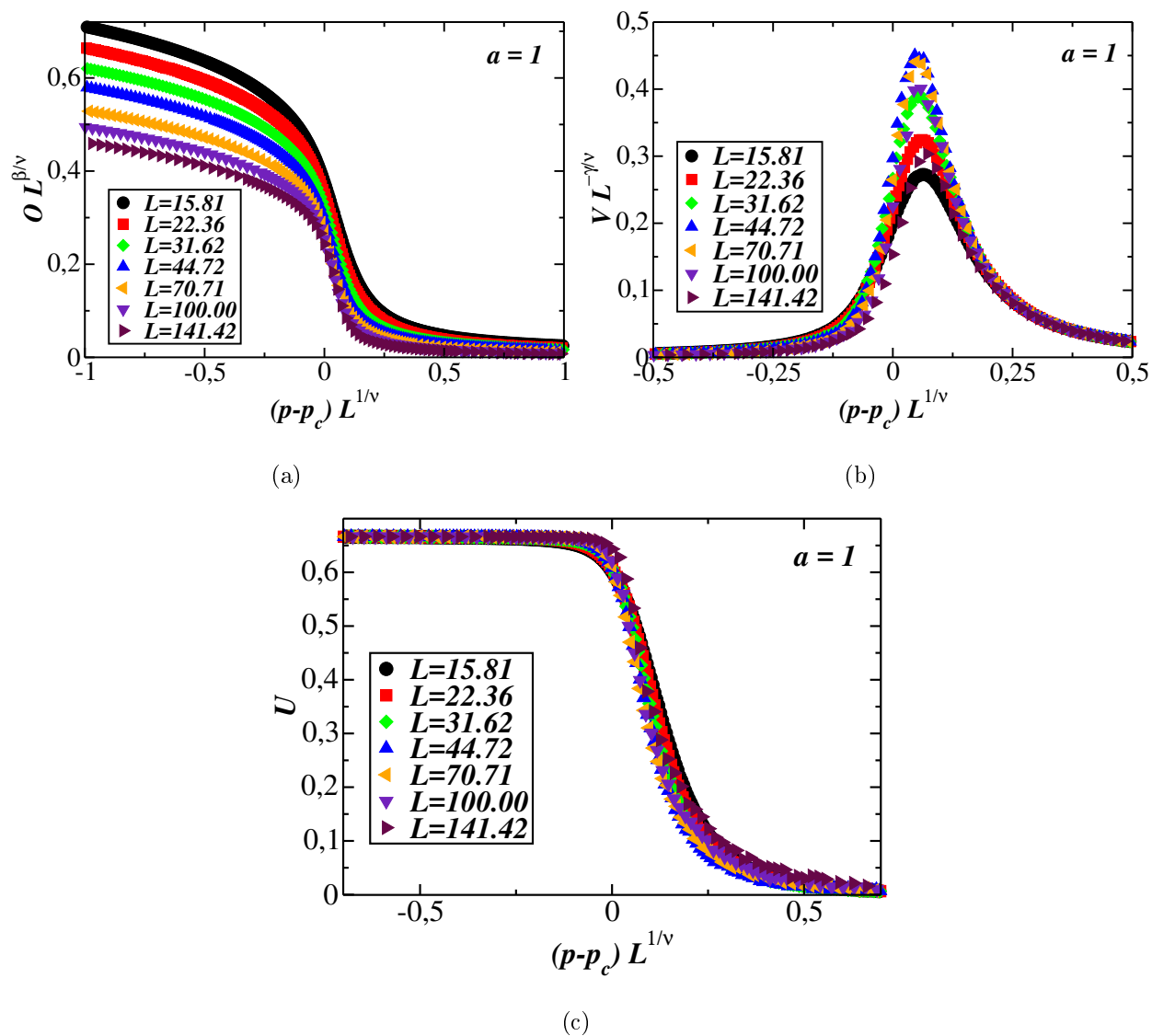
**Tabela 6.1:** Valores do ruído crítico  $p_c$  e das razões dos expoentes críticos  $\beta/\nu, \gamma/\nu, 1/\nu$  e  $\gamma/\nu^{max}$ , para o modelo de formação de opinião na rede aleatória de Voronoi-Delaunay. Para  $a = 0$  os valores dos expoentes críticos pertencem a mesma classe de universalidade do modelo Ising 2D, e para  $a = 1$  os valores dos expoentes críticos pertencem a uma nova classe de universalidade.

bilidade e cumulante de Binder, mostradas na Figura 6.8, para o caso  $a = 0$ , podemos inferir que os valores do parâmetro de ruído crítico  $p_c$  e dos expoentes críticos  $\gamma/\nu, 1/\nu$  e  $\beta/\nu$ , são de boa precisão. No entanto, na Fig. 6.9 os gráficos do colapso de dados, para o caso  $a = 1$ , da magnetização, susceptibilidade e cumulante de Binder não colapsaram, mostrando que os valores encontrados para os expoentes críticos não estão corretos.

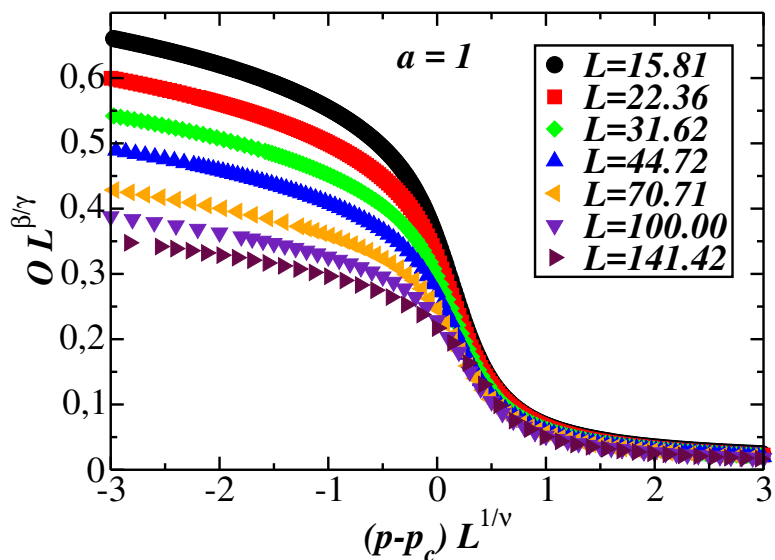
Na Fig.(6.10), construímos também os gráficos do colapso de dados da magnetização e susceptibilidade para  $a = 1$ , utilizando os valores dos expoentes críticos do modelo Ising 2D. Novamente verificamos que não acontece o colapso das curvas, indicando que os valores dos expoentes críticos encontrados não pertencem a mesma classe de universalidade do modelo Ising.



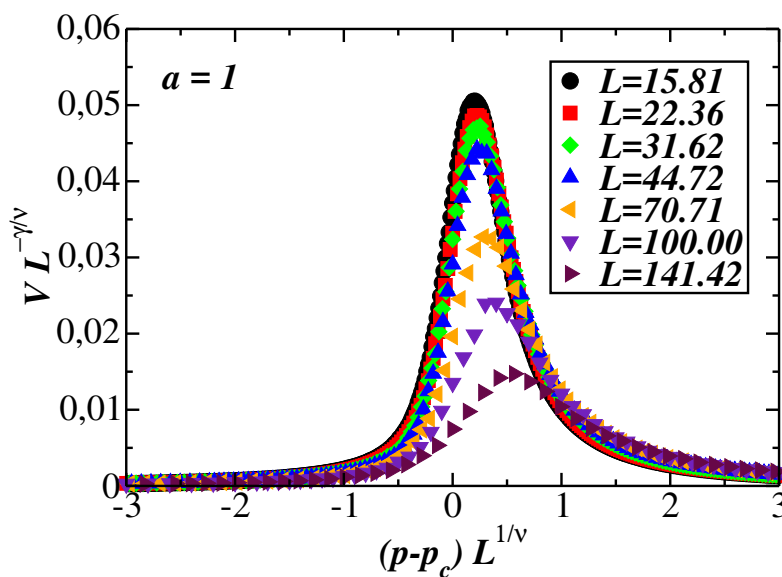
**Figura 6.8:** Nestes gráficos do colapso de dados para  $a = 0$ , utilizamos os valores dos expoentes críticos do modelo Ising 2D, Tab. 6.1. Na parte (a) temos o colapso de dados da magnetização Eq.(3.25), em (b) temos o colapso de dados da susceptibilidade Eq.(3.26), e na parte (c) o colapso de dados do cumulante de Binder de quarta ordem Eq.(3.27).



**Figura 6.9:** Gráficos do colapso de dados obtidos a partir dos valores encontrados para os expoentes críticos pra o caso  $a = 1$ , Tab. 6.1. Na parte (a) não temos o colapso das curvas para a magnetização, em (b) não ocorre o colapso de dados pra susceptibilidade e na parte (c) também não temos o colapso do cumulante de Binder de quarta ordem.



(a)



(b)

**Figura 6.10:** Gráficos do colapso de dados obtidos a partir dos valores dos expoentes críticos do modelo Ising 2D para  $a = 1$ , Tab. 6.1. Na parte (a) não temos o colapso das curvas para a magnetização e em (b) também não ocorre o colapso da susceptibilidade.

# Capítulo 7

## Conclusão

Por meio das simulações realizadas aplicando o método de Monte Carlo para os tamanhos de rede ( $N = 250, 500, 1000, 2000, 5000, 10000$  e  $20000$ ), com  $a = 0$  e  $a = 1$ , o modelo de formação de opinião na rede aleatória de Voronoi-Delaunay apresenta uma transição de fase de segunda ordem. O modelo de Ref. [5] (Transição de Fase Induzida por Desordem em Modelos Cinéticos de Formação de Opinião), em que este trabalho foi inspirado, também apresenta uma transição de fase de segunda ordem, com os valores dos expoentes críticos  $\beta, \gamma$  e  $\nu$  idênticos aos expoentes de campo médio do modelo de Ising.

Com base no valor de  $p_c$ , obtido a partir do cruzamento das curvas do cumulante de Binder, utilizamos as relações de escala de tamanho finito para calcularmos as razões dos expoentes críticos  $\beta/\nu, \gamma/\nu$  e  $1/\nu$ , relacionados ao parâmetro de ordem, susceptibilidade e comprimento de correlação, para os casos em que  $a = 0$  e  $a = 1$ .

De acordo com a Tab. 6.1 obtemos para  $a = 0$  os expoentes críticos correspondentes aos do modelo Ising 2D. E, para  $a = 1$  encontramos fortes flutuações na previsão dos expoentes críticos, por que as regressões de escala de tamanho finito não são precisas e será necessário fazer mais simulações para obter os expoentes corretos. Mesmo assim, podemos inferir que os valores destes expoentes são diferentes dos valores dos expoentes críticos do modelo Ising 2D.

# Referências Bibliográficas

- [1] N. Metropolis, The beginning of the Monte Carlo method. Los Alamos Science Special Issue. 1987, p. 125.
- [2] R. A. Holley and T. M. Liggett, Ann. Probab. 3, 643 (1975).
- [3] K. Sznajd-Weron and J. Sznajd, Int. J. Mod. Phys. C 11, 1157 (2000).
- [4] S. Biswas, Phys. Rev. E 84 (2011) 056106.
- [5] Biswas, Soumyajyoti.; Chatterjee, Arnab.; Sen, Parongama. "Disorder induced phase transition in kinetic models of opinion dynamics"Amsterdã, Países Baixos: Elsevier, 2012.
- [6] Hromkovic, J. "Algorithms for hard problems": introduction to combinatorial optimization, randomization, approximation, and heuristics. [S.l.]: Springer-Verlag, London Berlin - Heidelberg - New York, 2001.
- [7] HOLLAND, J. Hidden Order How Adaptation Builds Complexity. Reading, MA: Helix Books, 1995.
- [8] ULMA, S. M.; METROPOLIS, N. The monte carlo method.Amen Statical. Assoc, v. 44, p. 335, 1949.
- [9] NEWMAN, M. E. J.; BARKEMA, G. T.Monte Carlo Method in statiscal Physics.[S.l.: s.n.], 1999.
- [10] H. E. Stanley, Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena. Oxford: Oxford University Press, 1971.
- [11] ISING, E.Z. Phys, v. 31, p. 253, 1925.



- [12] R.S.C. Brenda e Lima, F.W.S., "Modelo do Voto da Maioria em Rede Direcionada de Small-World-Voronoi-Delaunay", (Dissertação de Mestrado) UFPI, Teresina-PI, Brasil, 2017.
- [13] Sílvio, R.A. Salinas, Introdução à Física Estatística, EdUSP, 1997.
- [14] Lima, F.W.S., Majority-Vote on Directed Barabasi-Albert Networks. Vol. 17, Number 9. Singapura: World Scientific, 2006.
- [15] Dilão, R. A ciência dos sistemas complexos. Departamento de Física do IST, v. 1, p.
- [16] Cohen, R.; Havlin, S. Complex networks: Structure, robustness and function. Cambridge University Press, 2010.
- [17] Dorogovtsev, S. N. "Lectures on Complex Networks" New York: Oxford University Press, 2010.
- [18] Samuráí Gomes de Aguiar e Luciano Rodrigues da Silva, "Contribuição ao Estudo de Redes Complexas: Modelo de Afinidade com Métrica", (Dissertação de Mestrado) UFRN, Natal-RN, Brasil, 2012.
- [19] Harary, Frank. "Graph Theory. " MA: Addison-Wesley, 1994.
- [20] BOLLOBAS, B.; JANSON, S.; RIORDAN, O. Sparse random graphs with clustering. Random Structures & Algorithms, v. 38, p. 269–323, 2011.
- [21] Mumm, Michael (2004) "Voronoi Diagrams,"The Mathematics Enthusiast: Vol. 1 : No. 2 , Article 4. 1–14, 1995.
- [22] Alves,T.F.A., Lima, F.W.S., Macedo Filho, A. and Alves, G. A., (Critical Behavior of Majority Vote Model on Two-Dimensional Quasiperiodic Tilings), J. Stat. Mech. (2019) 013208.
- [23] Silva, R.R. e Bacha, C.J.C., (Polígonos de Voronoi como Alternativa aos Problemas das Áreas Mínimas Comparáveis: uma análise das mudanças populacionais na Região Norte do Brasil), R. bras. Est. Pop., Rio de Janeiro, v. 28, n. 1, p. 133-151, jan./jun. 2011
- [24] B.K. Chakrabarti, A. Chakraborti, A. Chatterjee (Eds.), Econophysics and Sociophysics, Wiley-VCH, Berlin, 2006.

- [25] S. Galam, Y. Gefen, Y. Shapir, *J. Math. Socio.* 9 (1982) 1.
- [26] P. Holme, M.E.J. Newman, *Phys. Rev. E* 74 (2006) 056108.
- [27] M. Stone, *Ann. Math. Stat.* 32 (1961) 1339.
- [28] S. Chatterjee, E. Seneta, *J. Appl. Probab.* 14 (1977) 89.
- [29] M. Lallouache, A.S. Chakrabarti, A. Chakraborti, B.K. Chakrabarti, *Phys. Rev. E* 82 (2010) 056112.
- [30] P. Sen, *Phys. Rev. E* 83 (2011) 016108.
- [31] Lima, F.W.S., Costa, U.M.S., Almeida, M.P., Andrade Jr, J.S. Critical behavior of a three-state Potts model on a Voronoi lattice. Les Ulis, França: EDP Sciences, 2000.
- [32] Lima, F.W.S., Moreira, J.E., Andrade Jr, J.S. Costa, U.M.S. The ferromagnetic Ising model on a Voronoi–Delaunay lattice. Amsterdã, Países Baixos: Elsevier, 2000.
- [33] Lima, F.W.S., Potts model with  $q = 4, 6,$  and 8 states on Voronoi–Delaunay random lattice. Amsterdã, Países Baixos: Elsevier, 2010.
- [34] Biswas, Soumyajyoti, Chandra, A. K., Chatterjee, Arnab., Chakrabarti, B. K., Phase transitions and non-equilibrium relaxation in kinetic models of opinion formation. Bristol, England: IOP Publishing, 2011.
- [35] A. Chakraborti, B.K. Chakrabarti, *Eur. Phys. J. B* 17 (2000) 167; A. Chatterjee, B.K. Chakrabarti, S.S. Manna, *Physica A* 335 (2004) 155; A. Chatterjee, B.K. Chakrabarti, *Eur. Phys. J. B* 60 (2007) 135
- [36] A. Chatterjee, *Eur. Phys. J. B* 67 (2009) 593.
- [37] S. Galam, *Physica A* 333 (2003) 453.
- [38] K. Binder, A.P. Young, *Rev. Modern Phys.* 58 (1986) 801.