

UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO DEPARTAMENTO DE FÍSICA – CCEN PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

MODELO DO VOTO DA MAIORIA COM TRÊS ESTADOS EM GRAFOS ALEATÓRIOS

por

Diogo Felipe Felix de Melo

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Departamento de Física da Universidade Federal de Pernambuco como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Física.

Banca Examinadora: Prof. Francisco George Brady Moreira (Orientador-UFPE) Prof. Renê Rodrigues Montenegro Filho (DF - UFPE) Prof. Raimundo Nogueira da Costa Filho (DF - UFC)

> Recife - PE, Brasil Abril - 2010

Livros Grátis

http://www.livrosgratis.com.br

Milhares de livros grátis para download.

Melo, Diogo Felipe Felix de. Modelo do voto da maioria com três estados em grafos aleatórios / Diogo Felipe Felix de Melo. -Recife: O Autor, 2010. xvii, 77 folhas. il. fig. tab.

Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal de Pernambuco. CCEN. Física, 2010.

Inclui bibliografia.

1. Mecânica estatística. 2. Transformações de fase (física estatística. 3. Método de Monte Carlo.I. Título.

530.13 (22.ed.) FQ 2010-037



Universidade Federal de Pernambuco Departamento de Física - CCEN Programa de Pós-Graduação em Física Cidade Universitária - 50670-901 Recife PE Brasil Fone (++ 55 81) 2126-8449/2126-8450 - Fax (++ 55 81) 3271-0359 http://www.df.ufpe.br/pg e-mail: posgrad@df.ufpe.br

Parecer da Banca Examinadora de Defesa de Dissertação de Mestrado

Diogo Felipe Felix de Melo

MODELO DO VOTO DA MAIORIA COM TRÊS ESTADOS **EM GRAFOS ALEATÓRIOS**

A Banca Examinadora composta pelos Professores Francisco George Brady Moreira (Presidente e Orientador), Renê Rodrigues Montenegro Filho, ambos do Departamento de Física da Universidade Federal de Pernambuco e Raimundo Nogueira da Costa Filho, do Departamento de Física da Universidade Federal do Ceará, consideram o candidato:

(X Aprovado

() Reprovado

() Em exigência

Secretaria do Programa de Pós-Graduação em Física do Departamento de Física do Centro de Ciências Exatas e da Natureza da Universidade Federal de Pernambuco em vinte e dois de abril de dois mil e dez.

Presidente e Orientador

Prof. Francisco George Brady Moreira Ron R. Montengor Lillor Prof. Renê Rodrigues Montenegro Filho

FILL

Prof. Raimundo Nogueira da Costa Filho

Agradecimentos

Apesar da relutância inicial, acabei por ser convencido de escrever esta seção de agradecimentos. O motivo da relutância reside, de forma simples, no meu atual conhecimento de certos fenômenos naturais, que me levariam a uma lista interminável de pessoas e acontecimentos a agradecer.

Em uma primeira análise de causa e consequência, eu me sinto impelido a agradecer por todo e qualquer evento que tenha ocorrido em um tempo pretérito à realização deste trabalho. Esta visão é reforçada pela teoria do caos, onde em sua mais famosa máxima, o bater de asa de uma borboleta na California pode gerar um furacão na China. Assim, devo ser grato inclusive as borboletas por não terem batido suas asas no sentido de criar riscos a minha vida e a este projeto de pesquisa. Segundo a condição de causa e consequência da relatividade, qualquer evento que possa ter sido causa deste trabalho teria de estar dentro do hipercone $r^2 \ge c^2 t^2$, onde r, c e t é a distância entre mim e o evento, a velocidade da luz e o tempo entre mim e o evento. Deste modo, eu poderia restringir meus agradecimentos da forma: Agradeço a todos os eventos $r^2 \ge c^2 t^2$. Esta forma de agradecimento é típicamente matemática, no sentido que, é simples, limpo, preciso e compacto porém, por si só não serve pra nada.

Este tipo de agradecimento pode gerar um certo desconforto social dado a sua generalidade. Apesar de ser muito preciso, poderia ser confundido, a depender do contexto, com falta de reconhecimento de minha parte, que o diga o CNPQ. Faz-se necessário a explicitação de algumas contribuições seguidas, quando possível, de comentários elucidativos ou complementares, exceto é claro no inevitável agradecimento ao CNPQ.

Um fato interessante a ser notado é o de que esta não é a forma mais eficiente de agrade-

AGRADECIMENTOS

cimento. Nem todas as pessoas aqui citadas terão a oportunidade de ler este trabalho. Assim, mesmo na tentativa de se maximizar os agradecimentos, ainda se corre o risco de parecer ingrato por falta de reconhecimento. Uma maneira muito mais eficiente nesse caso seria agradecer pessoalmente a um grupo entre seis e dez pessoas e pedir que estas agradeçam por mim a outro grupo de mesmo tamanho de pessoas que ainda não foram agradecidas e assim por diante. Se as conecções sociais realmente tiverem uma estrutura de *small-world* como se acredita, em pouco menos de uma mês todas as pessoas do mundo seriam agradecidas por sua colaboração com este trabalho. Apesar de mais eficiente, como se pode ver, optei pela forma tradicional. Sendo assim, segue a minha pequena lista de agradecimentos. Aproveito para me desculpar por eventuais lapsos.

Agradeço a meu pai, Valmir Rodrigues de Melo, por todo o esforço de compreensão e apoio as minhas escolhas ao longo dessas duas décadas de convivência. A minha namorada, Áurea Freire da Luz Melo, por me proporcionar todo o bem estar que tem sido o nosso relacionamento. A toda a minha família por apoio e compreensão.

Um parágrafo especial de agradecimentos a minha mãe, Maria José Felix de Melo, por dar os passos em minha longa caminhada de aprendizagem, por tentar me ensinar a ler e escrever e as operações aritiméticas fundamentais. Tentar, pois confesso ainda hoje não dominar muito bem esses conceitos fundamentais. Obrigado por me mostrar que existem várias maneiras de se ver o mundo, por me ensinar a não desistir, a ser uma pessoa melhor, a defender e lutar pelo o que eu acredito e obrigado por ser a pessoa mais maravilhosa com a qual a já tive contato em toda a minha vida. Dona Nena, te amo.

Agradeço a todo o departamento, colegas, funcionários e professores. Um agadecimento especial ao professor Brady, por acreditar que era possível, por me dar um voto de confiança, por certas vezes acreditar mais em mim do que eu mesmo. Sem seu apoio nada disso seria possível. Obrigado Brady.

Agradeço por fim aos orgãos de fomento à pesquisa: CNPQ e CAPES.

Resumo

Investigamos o modelo do voto da maioria com três estados em grafos aleatórios de Erdös-Rényi através de simulações de Monte Carlo. Um grafo aleatório de Erdös-Réni é um conjunto de N vértices conectados entre si com probabilidade p. Um parâmetro importante em é a conectividade média, z, definida como o número médio de sítios que interagem com cada componente da rede: z = p(N-1). De uma forma geral, no modelo do voto da maioria, um dado sítio concorda com a opinião da maioria de seus vizinhos com probabilidade 1-q e discorda com probabilidade q, onde q é o parâmetro de ruído. Para o modelo com três estados, existem possibilidades de empate onde a maioria não está explicitamente definida. Devido a isto, propusemos regras que generalizam o modelo para qualquer caso possível. Obtivemos expressões analíticas para o comportameno do modelo nos casos limites de ordem $(q \rightarrow 0)$ e desordem $(q \rightarrow 2/3)$. Mostramos também que, na região crítica, o *ansatz* $\xi \sim N$, onde ξ é o comprimento de correlação, nos conduz a $d_{eff} = 1$, onde d_{eff} é calculado pela relação de hiperescala. Realizamos simulações para diferentes tamanhos de redes N e conectividades z e determinamos o comportamento da magnetização, susceptibidade e do cumulante de quarta ordem de Binder em função do parâmetro de ruído. Caracterizamos que no valor $q = q_c(z)$ ocorre uma transição ordem-desordem de segunda ordem no modelo. A partir da teoria de escala de tamanho finito construímos o diagrama de fases no plano z versus q_c e calculamos as razões entre os expoentes críticos β/ν , γ/ν e $1/\nu$. Por fim concluímos que o modelo do voto da maioria com três estados em grafos aleatórios de Erdös-Reni pertence a uma nova classe de universalidade.

Palavras-chave: Modelo do voto da maioria, Transições de fase e Monte Carlo

Abstract

We investigate the majority-vote model with three possible states on Erdös-Rényi random graphs using Monte Carlo simulations. An Erdös-Rényi random graph is a set of N nodes connected with each other with probability p. An important parameter is the mean connectivity, defined as the mean number of sites that each component of the network interact, z = p(N-1). In a general way, in the majority-vote model a given site agrees with the opinion of the majority of its neighbors with probability 1 - q and disagrees with probability q, where q is the noise parameter. In the three-state model, there is a chance of a tie between two majority states, then we propose new rules that generalize the model for every possible case. We find analytical expressions for quantities of interest in the limiting cases of order $(q \rightarrow 0)$ and disorder $(q \rightarrow 2/3)$. We also show that, in the critical region, the *ansatz* for the correlation length $\xi \sim N$ lead us to $d_{eff} = 1$, where d_{eff} is calculated through the *hiperscaling* relation. We performed simulations for different sizes of the network N and connectivities z. From the behavior of the magnetization, susceptibility and the fourth order Binder's cumulant we obtain the critical value $q = q_c(z)$ at which occurs a second order phase transition between the order and disorder states of the model. Within the finite-size scale theory, we build the phase diagram z versus q_c and calculate the exponent rations β/ν , γ/ν , and $1/\nu$. Finally we conclude that the three-state majority-vote model on Erdös-Rényi random graphs belongs to a new universality class.

Keywords: Majority-vote model, Phase transitions and Monte Carlo.

Sumário

In	trodu	ção		1	
1	O aparato teórico			6	
	1.1	Variáv	6		
	1.2	Variáv	7		
		1.2.1	A matriz estocástica	10	
		1.2.2	A Equação Mestra	12	
	1.3	Estado	16		
		1.3.1	Entropia	20	
		1.3.2	Reversibilidade e irreversibilidade	21	
	1.4	O mét	23		
2	O M	25			
	2.1	O Moo	25		
	2.2	Uma r	roupagem mais matemática	28	
		2.2.1	MVM com 2 estados	28	
		2.2.2	Outros objetos com simetria S_2	29	
		2.2.3	MVM com 3 estados	31	
		2.2.4	Outros objetos com simetria S_3	33	
3	Prev	visões te	eóricas para o MVM	36	
	3.1	Irreversibilidade e Ergodicidade			
	3.2	Grand	lezas de interesse	38	

	/	
CINI	A D	IN
SUN	AK	11.7
00111		

viii

		3.2.1	Limite de ruído nulo: $q \rightarrow 0$	40
		3.2.2	Limite de desordem: $q \rightarrow 2/3$	41
	3.3	Compo	ortamento crítico	43
		3.3.1	Criticalidade e expoentes críticos	43
		3.3.2	Efeito de tamanho finito	45
4	Resu	ultados	Numéricos	50
	4.1	Algori	tmos usados	50
		4.1.1	Grafos Aleatórios	50
		4.1.2	Simulações Monte Carlo	53
	4.2	Grand	ezas de interesse	55
		4.2.1	Magnetização	55
		4.2.2	Susceptibilidade	57
		4.2.3	O cumulante de Binder	59
	4.3	Diagra	ma de fases	62
	4.4	Expoe	ntes críticos	63
	4.5	Colaps	so de dados	67
5	Con	clusões		71

Lista de Figuras

- 1.1 Representação para o ciclo de Calvin. A moléculas de NADPH e ATP são derivados da fase luminosa da fotossíntese. O CO2 e o H2O são oriundos do exterior da planta. Técnicas modernas de microscopia são capazes de acompanhar os átomos de carbono dentro do ciclo.
 18
- 2.1 Rede social do indivíudo Marcos: (a) a rede onde este indivíduo está localizado em sua totalidade. Em (b) apenas os componentes da rede que participam do processo de formação de opinião deste elemento.
 25
- 2.2 Representação esquemática das operações de semetria do triangulo equilátero. 33
- 3.1 Recorte de uma rede fictícia. Os círculos representam os sítios e as retas as conecções entre estes. O estado de cada sítio está representado no centro de cada círculo.

37

52

4.1 Distribuição de ligações para (a) z = 50 e (b) z = 2 geradas a partir de redes de tamanho N = 2000. Em (c) o número de sítios com conectividade k para redes com z = 10 e tamanhos 1000, 4000 e 10000, de baixo para cima. Os resultados das simulações são comparados com as distribuições de Poisson e Binomial com mesmo valor de z. Em (d) a fração de sítios no grafo principal gerados com N = 2000. Todos os gráficos foram gerados tomando médias sobre 100 redes.

- 4.2 Parâmetro de ordem do sistema em função do parâmetro de ruído para z = 8 e N = 1000, 2000, 4000 e 6000 sítios de baixo para cima. No detalhe da figura acompanhamos $M_N(q = 2/3)$ em função dos tamanhos das redes com a mesma conectividade e N = 1000, 2000, 4000, 6000 e 10000. A linha sólida é o melhor ajuste linear e a tracejada ilustra a extrapolação para o limite termodinâmico. 56
- 4.3 Parâmetro de ordem do sistema em função do parâmetro de ruído para N =4000 e z = 2, 4, 6, 8, 10, 20, 30 e 50, da esquerda para a direita. 57
- 4.4 Susceptibilidade em função do parâmetro de ruído para z = 8 e N = 1000, 2000,4000 e 6000 sítios.
- 4.5 Susceptibilidade em função do parametro de ruído para N = 4000 e z = 2, 4, 6,8, 10, 20, 30 e 50, da esquerda para a direita. 59
- 4.6 Cumulante de quarta ordem de Binder em função do parametro de ruído para z = 8 e N = 1000, 2000, 4000 e 6000 sítios (do menor para o maior valor de U_{min}). No detalhe da figura podemos ver mais claramente o cruzamento das curvas.
- 4.7 Cumulante de quarta ordem de Binder para os tamanhos N = 1000, 2000, 4000,e 6000 (do menor para o maior valor de $|U_{min}|$) e conectividades z = 8, 10, 20 e 30 da (esquerda para a direita). A linha tracejada indica o valor $U^* = U(q_c) =$ 0.41.
- 4.8 Diagrama de fases para o 3-MVM comparado com os resultados para o 2-MVM reproduzido de [34]. Para os pontos (z,q) abaixo da linha o sistema se encontra em um estado ordenado, para pontos acima temos a fase desordenada. As retas são apenas guias para os olhos.

58

61

62

60

4.9	Acompanhamento de derivada do cumulante de Binder em função do tamanho	
	de rede para um z fixo. De baixo para cima $z = 2, 4, 6, 8, 10, 20, 30, 50.$	
	Adicionamos o valor de z ao eixo das coordenadas das respectivas curvas. Os	
	pontos são os valores numéricos e as linhas os melhores ajustes lineares obtidos.	64
4.10	Dependência da função Φ_{N_1,N_2} com o ruído, para $z = 8$ e tamanhos de redes	
	indicados. As linhas são os melhores ajustes polinomiais de terceira ordem.	66
4.11	Dependência da funcção Ψ_{N_1,N_2} com o parâmetro de ruído, para $z = 8$ e ta-	
	manhos de redes indicados. As linhas são os melhores ajustes polinomiais de	
	terceira ordem.	66
4.12	Colapso de dados para o parâmetro de ordem com $z = 8$ e $N = 1000$, 2000,	
	4000, 6000 e 10000.	67
4.13	Colapso de dados para o cumulante de quarta ordem de Binder com $z = 8$ e N	
	= 1000, 2000, 4000, 6000 e 10000.	68
4.14	Colapso de dados para o cumulante de quarta ordem de Binder com $N = 4000$	
	fixo e <i>z</i> = 4, 6, 8, 10, 20, 30, 50.	70

Lista de Tabelas

1.1	Evolução temporal da fdp do experimento de dar ignição no Chevett 86 movido	
	a álcool.	8
1.2	Evolução temporal da fdp do experimento dar a iguinição no Chevett ano 86	
	movido a álcool com depreciação.	8
3.1	Resumo das informações contidas no capítulo 3.	49
4.1	Valores críticos do parâmetro de ruído e do cumulante de Binder para vários	
	valores da conectividade média z.	63
4.2	Valores dos quocientes entre os expoentes: β/ν , γ/ν e $1/\nu$ para os valores	
	da conectividade média estudados. Na última coluna calculamos a dimensão	
	efetiva através da relação de hiperescala	65

Introdução

Nos anos recentes temos presenciado um crescente interesse na modelagem computacional de sistemas sociais [1, 2, 3], em particular na dinâmica da formação de opinião. Boa parte desse interesse tem origem no aumento da capacidade de processamento e armazenagem de dados fornecida pelos avanços computacionais vivenciados desde a década de 50. Sistemas com muitas variáveis e parâmetros, antes de difícil implementação computacional, têm se tornado cada vez mais realizáveis computacionalmente. Por outro lado, a informatização dos processos de aquisição e armazenamento de dados têm facilitado substancialmente o acesso, a análise e o tratamento das informações contidas nesses dados. Hoje em dia, é possível em poucas horas ter acesso à evolução temporal de um dado índice econômico ao longo de décadas, contida em um arquivo de poucos *megabytes*, e em poucos segundos extrair importantes informações sobre suas variações ao longo dos anos.

De uma forma geral, as idéias por trás da modelagem computacional de sistemas sociais estão intimamente ligadas aos tratamentos usuais da mecânica estatística. Em física, por exemplo, a mecânica estatística nos permite que o conhecimento qualitativo das interações entre um pequeno número de partículas possa nos levar à elucidação do comportamento de todo um conjunto dessas partículas. De modo análogo, em sistemas sociais normalmente estamos interessados em descrever como pequenos grupos isolados de indivíduos interagem entre si, e a partir desse ponto estudar o comportamento de populações inteiras. Para descrever como ocorrem as interações entre indivíduos temos que responder duas perguntas principais, que levam a uma infinidade de outras perguntas:

- Como interagem? Quais são as particularidades das interações e quais as suas consequências? Esta pergunta está associada ao modo como as pessoas formam suas opiniões. Quais os fatores que mais influenciam um indivíduo na hora de escolher entre uma marca ou outra? Existe uma predisposição genética que leve as pessoas a votarem em partidos de esquerda ou de direita? Qual a infuência da TV? Pessoas diferentes influenciam nossas opiniões de forma diferente, mas como?
- 2. Com quem interagem? De todo o conjunto de indivíduos quais são os elementos que afetam diretamente o estado de um dado componente da sociedade. Podemos desprezar os demais indivíduos? Esta pergunta está ligada ao que chamamos de vizinhos de um indivíduo e qual a organização formada por um conjunto de elementos e por seus vizinhos, denominada rede de interações. Qual a topologia da rede de interações entre professores, alunos e funcionários do departamento de física da UFPE? É uma rede estática ou dinâmica?

Mesmo nos detendo a estudar processos de formação de opinião, responder à pergunta "*Como interagem*?" nos leva a um variado conjunto de modelos, seguidos de outro conjunto de variações (veja, por exemplo [1]). Um problema em particular reside em como descrever as interações entre os indivíduos. Na física, o ponto de partida usual são as leis da mecânica clássica ou da mecânica quântica que, em última instância, nos fornecem uma descrição fenomenológica (ou pelo menos uma intuição) do comportamento das partículas. Pessoas não obedecem teorias ou regras, não há uma descrição matemática de como um dado indivíduo deve se vestir ou votar. As propostas para modelagem de interações entre indivíduos são tipicamente baseadas em observações, e posteriormente na descrição de um mecanismo que reproduza os principais aspectos observados.

No modelo do votante, cada indivíduo assume a opinião de um de seus vizinhos escolhidos ao acaso [4, 5]. No modelo da regra da maioria, um conjunto de indivíduos é escolhido ao acaso e a opinião majoritària desse grupo é imposta a todos os indivíduos desse conjunto, simulando

um debate [6]. No modelo do voto da maioria, um indivívuo sempre concorda com a opinião da maioria de seus vizinhos e, em sua variante com ruído, um indivíduo tem probabilidade q de discordar da maioria de seus vizinhos, onde q é denominado parâmetro de ruído [7]. No modelo de Axelrod cada indivíduo pode ter n opiniões diferentes para F assuntos diferentes. Dois indivíduos são escolhidos aleatoriamente e suas opiniões sobre cada assunto é comparada, quanto maior o número de assuntos em que eles concordam, maior é a chance de que passem a concordar em um assunto que antes discordavam [8, 9, 10].

Para responder à pergunta "*Com quem interagem*?" temos variadas possibilidades, desde as redes regulares até redes complexas e aleatórias. Matematicamente, a representação usual para uma rede é o grafo. Um grafo é um conjunto de vértices, que representam indivíduos, ligados por um conjunto de arestas, que representam as interações entre os indivíduos. É importante frisar que o formato da rede desempenha um forte papel na dinâmica dos modelos. No modelo do votante, por exemplo, estudos numéricos e analíticos em redes regulares [5] concluíram que para dimensões $d \le 2$ sempre haverá um grupo de opinião dominante para tempos de observação suficientemente longos, enquanto que para d > 2, estados de desordem podem perdurar por um tempo infinito. Em alguns tipos de redes complexas, por outro lado, meta-estados de desordem podem perdurar por um tempo infinito [11, 12, 13], o tempo de sobrevivência desses estados apresenta forte dependência com a topologia da rede. Recentemente foram encontradas oscilações coletivas de opinião em redes complexas [14].

As redes regulares são de fácil implementação e por isso são usualmente as mais usadas nas primeiras implementações. Entretanto, o estudo de organizações sociais tem mostrado que a estrutura das redes reais não apresenta natureza regular [2, 15]. Nesse âmbito, o estudo de redes complexas tem recebido crescente atenção no meio científico [2, 16, 17, 18, 19]. Tipicamente, as propriedades usadas para caracterizar redes complexas são a conectividade média, o coeficiente de agrupamento e a menor distância média entre sítios.

A conectividade média é definida como o número médio de vizinhos que cada sítio possui.

Em redes com alta conectividade cada elemento possui um grande número de vizinhos. O coeficiente de agrupamento de um dado sítio *i*, é definido como a razão entre o número de ligações existentes entre os vizinhos de *i* e o número máximo de ligações que poderiam existir. Em redes com um alto coeficiente de agrupamento existem muitas ligações entre os vizinhos de cada elemento, ou seja, os vizinhos de um dado sítio interagem não só com ele, mas também entre si, formando as "panelinhas". A menor distância média entre dois sítios d_{ij} é definida como o menor número de sítios pelos quais, saindo do sítio *i* e percorrendo apenas os vértices conectados da rede, é necessário visitar até chegarmos ao sítio *j*. Em redes com pequenos valores deste parâmetro existem "atalhos" entre os sítios da rede, de modo que a distância entre dois sítios quaisquer é sempre muito menor que o número total de vértices no grafo.

Existe uma vasta diversidade de métodos para a geração de grafos com as cracterísticas desejadas. As redes small-world são geradas a partir de redes regulares, escolhendo um sítio ao acaso e substituindo uma de suas ligações por outra [20] ou adicionando-se novas ligações entre dois vizinhos [21, 22], com probabilidade p. O parâmetro p é denominado probabilidade de religação. Sua maior característica é a presença de ligações de longo alcance. Redes livres de escala [19, 23] são redes em que alguns sítios tem preferência de realizar ligações, isto é, são mais conectados que os demais na rede. Nos grafos aleatórios de Erdös-Rényi [24, 25, 26] dois sítios quaisquer encontram-se ligados com probabilidade p e o número de ligações que um dado sítio realiza obedece uma distribuição do tipo binomial.

Neste trabalho iremos estudar o modelo do voto da maioria com três estados (3-MVM) em grafos aleatórios de Erdös-Rényi (ER) através de simulações Monte Carlo e de teoria de escala de tamanho finito. O modelo do voto da maioria com dois estados (2-MVM) foi estudado em trabalhos anteriores em redes regulares [7, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33], em grafos ER [34, 35] e em outros tipos de redes complexas [36, 37, 38, 39, 40, 41, 42]. Nesses trabalhos foi detectada a presença de uma transição do tipo ordem-desordem de segunda ordem no valor de ruído crítico q_c .

Os resultados para os expoentes na rede quadrada, mostraram que este modelo pertence à mesma classe de universalidade que o modelo de Ising definido na mesma rede, confirmando a conjectura de Grinstein *et al.* [43] de que modelos com simetria do tipo up - down, definidos na mesma rede, se encontram na mesma classe de universalidade. Por outro lado, para dimensões $d \ge 3$, estudos em redes hipercúbicas mostraram que o modelo 2-MVM não pertence a mesma universalidade do modelo de Ising nestas redes [32, 33]. Em redes complexas o valor crítico do parâmetro de ruído é uma função crescente da conectividade em grafos ER [34, 35] e da probabilidade de religação redes small-world [36, 39]. Em geral, o modelo do voto da maioria definido em redes complexas pertence a uma classe de universalidade diferente da do modelo de Ising.

O modelo 3-MVM foi recentemente estudado em redes quadradas [44, 45]. Os autores também encontraram uma transição de segunda ordem em $q = q_c$. Os expoentes encontrados para o 3-MVM concordam com os expoentes do modelo de Potts na rede quadrada [46], o que parece ser uma extensão à conjectura de Grinstein *et al*.

Nosso principal objetivo neste trabalho é caracterizar o diagrama de fases, e calcular os expoentes críticos para o 3 - MVM em grafos aleatórios ER. No capítulo 1 fornecemos uma revisão geral sobre variáveis aleatórias e estocásticas, processos reversíveis e irreversíveis e a equação mestra, coroando o capítulo com uma breve discussão a respeito da aplicação do método Monte Carlo a processos estocásticos. No capítulo 2 provemos uma análise sobre o 2-MVM e o 3-MVM, estudamos suas propriedades de simetria e construímos relações com os modelos reversíveis análogos, a saber, o modelo de Ising e o modelo de Potts. No capítulo 3 estudamos a ergodicidade e irreversibilidade do modelo, definimos as grandezas de interesse e fornecemos uma análise do comportamento do modelo em alguns casos limites. No capítulo 4 descrevemos os procedimentos computacionais e apresentamos os resultados das simulações. No último capítulo apresentamos nossas conclusões e perspectivas.

CAPÍTULO 1 O aparato teórico

O objetivo deste capítulo é discutir os principais conceitos teóricos envolvidos neste trabalho, em particular a definição de processos estocásticos e o funcionamento do método Monte Carlo. Não temos a preocupação de fazer uma apresentação formal dos objetos descritos neste capítulo e, portanto, não daremos ênfase ao rigor matemático necessário, bem como iremos suprimir algumas demonstrações e/ou limites de validade das idéias expostas. Trataremos então este capítulo como uma revisão de teorias já consolidadas. Algumas fontes bibliográficas são indicadas ao longo do texto caso o leitor se interesse por uma pesquisa mais aprofundada.

1.1 Variáveis aleatórias

Considere um experimento *E* não determinístico [47, 48] e o evento $s \in S$, onde *S* é o conjunto de todos os possíveis acontecimentos decorridos da realização do experimento *E*, denominado espaço amostral. Dizemos que a função X(s), que associa um número real a cada evento *s* é uma variável aleatória (VA). Por muitas vezes é comum fazermos uma relação direta e chamarmos de variável aleatória o próprio evento *s*.

Se X for uma VA discreta, definimos por P(X = x) ou simplesmente P(x) a probabilidade de que a variável aleatória X assuma o valor x. P(x) é conhecida como a função distribuição de probabilidade (fdp). Para uma VA contínua, P(X = x)dx é a probabilidade de X assumir valores no intervalo entre x e x + dx, com dx suficientemente pequeno. Neste caso P(x) é conhecida como a função densidade de probabilidade.

Para exemplificar, suponha a realização do experimento de (tentar) dar a ignição em um

Chevett ano 86 movido a álcool. As chances de que tenhamos o evento ´Â´sucesso" ou o evento ´Â´fracasso" podem ser obitidas a partir de uma repetição exaustiva (infinita) do experimento. Vamos definir a VA discreta *X* da forma: X(sucesso) = 1 e X(fracasso) = 0. Após inúmeras repetições do evento poderíamos ter identificado as probabilidades P(1) = 1/5 e P(0) = 4/5, por exemplo. Considere o experimento de medir a quantidade de café que tomamos durante os intervalos do trabalho. Como, a princípio, podemos tomar uma quantidade arbitrária de café, temos que X = volume ingerido é uma VA contínua. Suponha que a fdp da variável *x* seja:

$$P(x) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} exp\left\{ \left(\frac{x-20}{2}\right)^2 \right\},\tag{1.1}$$

onde $x \in [0, \infty)$ é a quantidade de café tomada em ml. Se quisermos saber a probabilidade de ter sido tomado uma quantidade de café entre 20 ml e 22 ml, realizamos a integral:

$$P(20 \le x \le 22) = \int_{20}^{22} \frac{1}{2\sqrt{\pi}} exp\left\{\left(\frac{x-20}{2}\right)^2\right\} dx = 0,4207.$$
(1.2)

Uma imposição importante sobre qualquer variável aleatória contaínua ou discreta é a da normalização da fdp, respectivamente:

$$\int_{x \in X(S)} P(x)dx = 1 \quad \text{ou} \quad \sum_{x \in X(S)} P(x) = 1,$$
(1.3)

onde X(S) é o conjunto de todos os valores de *x* correspondentes a todos os eventos possíveis *S*.

1.2 Variáveis estocásticas

Dizemos que uma VA X que apresenta dependência com um parâmetro t, X = X(t), é uma variável estocástica. Apesar de matematicamente o parâmetro t representar uma variável qual-

1.2 VARIÁVEIS ESTOCÁSTICAS

<i>t</i> (dia)	1	2	3	4	•••	8
P(0)	0.8	0.8	0.8	0.8	•••	0.8
P(1)	0.2	0.2	0.2	0.2		0.2

Tabela 1.1 Evolução temporal da fdp do experimento de dar ignição no Chevett 86 movido a álcool.

<i>t</i> (dia)	1	2	3	4	•••	∞
P(0)	0.8	0.81	0.8195	0.8285		1
P(1)	0.2	0.19	0.1805	0.1715		0

Tabela 1.2 Evolução temporal da fdp do experimento dar a iguinição no Chevett ano 86 movido a álcool com depreciação.

quer, normalmente é interpretado como o tempo. Assim como *X*, a fdp pode também depender do tempo. A evolução temporal da VA X(t) é chamado processo estocástico. Denotaremos então por $P(X = x_{t'}, t')$ a probabilidade da VA X(t) assumir o valor $x_{t'}$ em t = t'. Para exemplificar, voltemos ao caso do Chevett 86. Considerando que tentamos ligar o carro todos os dias durante a manhã. Nossa variável estocástica é definida da mesma maneira que anteriormente, com o parâmetro *t* nos indicando o dia da tentativa. Seguindo a descrição anterior, a fdp, neste caso, não varia com o passar dos dias. Sua evolução temporal é apresentada na tabela (1.1).

É claro que podemos sugerir um exemplo mais interessante. Suponha agora que a cada vez que tentamos ligar o carro de alguma forma danificamos um pouco a ignição, de modo que a probabilidade de o carro funcionar amanhã é um pouco menor que a de hoje. Vamos considerar um fator de depreciação tal que P(1,t+1) = 0,95P(1,t). Para este exemplo, podemos construir uma relação de recorrência para a fdp nos instantes t e t + 1. Usando a conservação da normalização da probabilidade obtemos P(0,t+1) = P(0,t) + 0,05P(1,t), ou, na forma matricial

$$\begin{bmatrix} P(1,t+1) \\ P(0,t+1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,95 & 0 \\ 0,05 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P(1,t) \\ P(0,t) \end{bmatrix}.$$
 (1.4)

Construímos assim a tabela (1.2). Note que agora a fdp evolue com o passar dos dias.

Definimos como caminhada ou cadeia até o instante de tempo *t* a sequência de valores assumidos pela VA em cada instante de tempo, desde a primeira até a última repetição do

experimento, formando a série $(x_0, x_1, x_2, ..., x_{t-1}, x_t)$, ou resumidanente $\{x_{t'}\}$, com $0 \le t' \le t$. Voltando ao exemplo do Chevett, ao tentarmos usar o carro durante uma sequência de 7 dias, poderíamos ter a sequência de eventos: sucesso, sucesso, fracasso, fracasso, fracasso, fracasso e sucesso. Isso corresponde à caminhada $(x_0, x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6) = (1, 1, 0, 0, 0, 0, 1)$.

A probabilidade condicional de que *X* assuma o valor x_{t+1} no instante t + 1, dada a caminhada $\{x_{t'}\}$, é expressa por:

$$P(x_{t+1}, t+1|\{x_{t'}\}), (1.5)$$

e apresenta dependência com o caminho percorrido, a probabilidade com que esse caminho ocorre e com o tempo. Se esta probabilidade (eq. (1.5)) não depender de toda a caminhada, mas apenas do último valor da variável x no instante t' = t, isto é,

$$P(x_{t+1}, t+1|\{x_{t'}\}) = P(x_{t+1}, t+1|x_t, t),$$
(1.6)

então dizemos que o processo é markoviano. Para estes processos, a probabilidade de X(t) assumir o valor x_{t+1} no instante t + 1 considerando-se todas as possibilidades no instante anterior fica

$$P(x_{t+1}, t+1) = \sum_{x_t \in X(S)} P(x_{t+1}, t+1|x_t, t) P(x_t, t)$$
(1.7)

Nesta última equação usamos o fato do conjunto $\{x(s)\}$ formar uma partição para X(S) [47]. Se adicionalmente supormos que as probabilidades condicionais (eq. (1.5)) não dependem explicitamente do tempo, podemos simplificar ainda mais esta relação, escrevendo

$$P(x_{t+1}, t+1) = \sum_{x_t \in X(S)} P(x_{t+1}|x_t) P(x_t, t).$$
(1.8)

1.2 VARIÁVEIS ESTOCÁSTICAS

1.2.1 A matriz estocástica

Considere um espaço vetorial V com produto interno $(VxV \rightarrow \Re)$ definido. Considere também uma base ortonormal para esse espaço onde fazemos uma correspondência biunívoca entre seus elementos e os elementos do espaço amostral S. Denominaremos essa base por $\{|x\rangle\}$. Considere o vetor $|P(t)\rangle$, contido em V, com suas componentes dadas por:

$$\langle x|P(t)\rangle = P(x,t)$$
 (1.9)

Nesta notação a eq. (1.8) é escrita em uma forma bem mais compacta,

$$|P(t+1)\rangle = T|P(t)\rangle, \qquad (1.10)$$

onde a matriz *T*, cujas componentes são $\langle x|T|x'\rangle = P(x|x')$, é denominada matriz estocástica. Comumente, é usada a representação $T(x' \to x)$ no sentido de explicitar a interpretação de P(x|x') como a probabilidade de transição do estado (evento) $|x'\rangle$ para o estado $|x\rangle$. É pertinente fazermos algumas considerações sobre esta matriz.

Como supomos que não há uma dependência explícita com o tempo, podemos, por indução, relacionar a fdp da VA X(t) em dois instantes de tempo t e $t + \Delta t$ quaisquer,

$$|P(t+\Delta t)\rangle = T^{\Delta t}|P(t)\rangle, \qquad (1.11)$$

em particular, $|P(t)\rangle = T^t |P(0)\rangle$, onde $|P(0)\rangle$ é a fdp no instante t = 0. Essa última relação motiva a denominação ��matriz de translação temporal" para *T*. Uma relação deste tipo foi feita para o exemplo do Chevett com depreciação (eq. (1.4)).

A probabilidade condicional P(x|x') também é uma fdp, associada ao evento acontecer $|x\rangle$, sabendo que o evento $|x'\rangle$ ocorreu, assim, está restrita ao intervalo [0, 1] e sujeita ao critério de

11

normalização:

$$\sum_{x} \langle x|T|x' \rangle = 1 \quad \text{e} \quad 0 \le \langle x|T|x' \rangle \le 1 \tag{1.12}$$

Aceitaremos, sem demonstração, que a matriz estocástica é inversível e representaremos sua inversa por T^{-1} . Assim o conjunto de todas as matrizes de translação temporal e o produto matricial usual formam um grupo comutativo de dimensão infinita. De fato,

a) A associatividade é garantida pelo produto matricial usual.

b) Existe um elemento neutro, *I*, tal que $T^{t'}I = IT^{t'} = T^{t'}$, e este elemento é T^0 :

$$T^{0}|P(t)\rangle = I|P(t)\rangle = |P(t)\rangle,$$

$$T^{t'}T^{0}|P(t)\rangle = |P(t+t')\rangle = T^{0}T^{t'}|P(t)\rangle.$$

c) Para todo elemento $T^{t'}$ existe um elemento inverso $T^{-t'}$:

$$T^{-t'}T^{t'}|P(t)\rangle = T^{-t'}|P(t+t')\rangle = |P(t)\rangle.$$

d) A comutatividade surge da aplicação sucessiva de *T*:

$$T^{t''}T^{t'}|P(t)\rangle = |P(t+t'+t'')\rangle = |P(t+t''+t')\rangle = T^{t'}T^{t''}|P(t)\rangle.$$

As propriedades acima demonstradas sugerem que a matriz estocástica pode ser escrita na forma

$$T = e^{W} \tag{1.13}$$

onde W é uma matriz cujas propriedades serão exploradas na sequência.

1.2 VARIÁVEIS ESTOCÁSTICAS

1.2.2 A Equação Mestra

Até aqui assumimos implicitamente que o parâmetro t, interpretado como o tempo, assume apenas valores discretos. Tal fato fica mais evidente sob uma análise criteriosa nas deduções das equações (1.10) e (1.11), onde nesta última Δt assume valores inteiros. Vamos supor agora que as fdp variem de forma contínua no tempo, ou pelo menos que apresentem uma dependência suave no parâmetro $t = n\tau$, onde n é um número inteiro e τ um número suficientemente pequeno. τ é denominado tempo (médio) de transição ou, em física atômica, tempo médio de decaimento. Vamos começar exigindo que P(x,t) seja continuamente diferenciável em t. Isso significa que é possível fazer uma expansão em série de Taylor nesta variável:

$$P(x,t+\tau) = P(x,t) + \tau P'(x,t) + \frac{\tau^2}{2!} P''(x,t) + \frac{\tau^3}{3!} P'''(x,t) \dots$$
(1.14)

ou, na forma matricial,

$$|P(t+\tau)\rangle = |P(t)\rangle + \tau \frac{\partial}{\partial t}|P(t)\rangle + \frac{\tau^2}{2!}\frac{\partial^2}{\partial t^2}|P(t)\rangle + \frac{\tau^3}{3!}\frac{\partial^3}{\partial t^3}|P(t)\rangle...$$
 (1.15)

Por outro lado, vamos supor que as equações (1.11) e (1.13) ainda sejam válidas e que possamos fazer uma expansão similar:

$$|P(t+\tau)\rangle = T^{\tau}|P(t)\rangle$$

= $e^{\tau W}|P(t)\rangle$ (1.16)
= $I|P(t)\rangle + \tau W|P(t)\rangle + \frac{\tau^2}{2!}W^2|P(t)\rangle + \frac{\tau^3}{3!}W^3|P(t)\rangle$

onde as expansões são válidas no limite $\tau \to 0$. Se compararmos as equações (1.15) e (1.16) concluiremos que o operador W atua da seguinte forma:

$$W|P(t)\rangle = \frac{\partial}{\partial t}|P(t)\rangle.$$
 (1.17)

esta equação é denominada Equação Mestra. Assim como T, W está sujeita a algumas imposições para que seja fisicamente aceitável. Vamos então explorar as propriedades desta matriz.

Desprezando os termos de ordem $O(\tau^2)$ na equação (1.14) e usando a equação (1.17) podemos escrever a relação

$$P(x,t+\tau) - P(x,t) = \Delta P(x,t) = \tau \sum_{x'} \langle x|W|x' \rangle P(x',t)$$
(1.18)

que é bastante similar à equação usada para modelar decaimento radioativo em física atômica, conhecida como equação de taxa,

$$\Delta N_i(t) = -\frac{\Delta t}{T_i} N_i(t) + \sum_{j \neq i} \frac{\Delta t}{T_{ij}} N_j(t), \qquad (1.19)$$

onde N_i é o número de núcleos instáveis do tipo *i* no tempo *t*, T_i é o tempo médio de estabilidade no núcleo *i* e T_{ij} é o tempo característico (médio) de decaimento dos núcleos do tipo *j* para *i*. Esta última comparação motiva a terminologia usada para τ e *W*.

Podemos retornar à discretização do tempo partindo da eq (1.17) que tem solução formal

$$|P(t)\rangle = e^{tW}|P(0)\rangle, \qquad (1.20)$$

escolher a escala de tempo $t = n\tau$, com *n* inteiro.

Desprezando os termos de ordem $O(\tau^2)$ na equação (1.16) teremos

$$|P(t+\tau)\rangle = I|P(t)\rangle + \tau W|P(t)\rangle = (I+\tau W)|P(t)\rangle, \qquad (1.21)$$

o que nos leva a reconhecer W como o gerador das translações infinitesimais no tempo.

A normalização da probabilidade (eq. (1.3)) deve ser satisfeita em qualquer instante de

tempo, ou seja,

$$\sum_{x} P(x,t) = 1.$$
 (1.22)

14

Tomando a derivada desta equação com relação ao tempo temos

$$\frac{\partial}{\partial t}\sum_{x}P(x,t) = 0.$$
(1.23)

Por outro lado,

$$\frac{\partial}{\partial t}\sum_{x}P(x,t) = \sum_{x}\frac{\partial}{\partial t}P(x,t) = \sum_{x}\sum_{x'}\langle x|W|x'\rangle P(x',t),$$
(1.24)

rearrumando a soma e comparando com (1.23) obtemos

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_{x} P(x,t) = \sum_{x} \sum_{x'} \langle x | W | x' \rangle P(x',t)$$

$$= \sum_{x'} \sum_{x} \langle x | W | x' \rangle P(x',t) \quad . \quad (1.25)$$

$$= \sum_{x'} P(x',t) \left(\sum_{x} \langle x | W | x' \rangle \right) = 0$$

Como cada um dos P(x',t) é independente, concluímos que

$$\sum_{x} \langle x|W|x' \rangle = 0, \tag{1.26}$$

que pode ser reescrita como

$$\langle x|W|x\rangle = -\sum_{x'} \langle x'|W|x\rangle.$$
(1.27)

Substituindo agora na eq. (1.17) e fazendo alguma manipulação algébrica

$$\frac{\partial}{\partial t}P(x,t) = \sum_{x'} \left(\langle x|W|x' \rangle P(x',t) - \langle x'|W|x \rangle P(x,t) \right)$$
(1.28)

esta é a forma mais usual de apresentação da equação mestra.

Podemos traçar um forte paralelo entre a equação mestra escrita dessa forma e a equação da

continuidade para um fluido. Suponha que um dado fuido de volume V se encontra no interior de uma tubulação com condições de contorno periódicas (uma mangeira onde começo e fim são o mesmo ponto). Divida essa tubulação em L subintervalos de tamanho Δx , onde cada subintervalo é identificado pelo índice x. Vamos definir a função densidade, $P(x,t)\Delta x$ como sendo a quantidade de fluído contida no subintervalo x de tamanho Δx no tempo t dividido pelo volume total V. É claro que $0 \le P(x,t) \le 1$. Vamos definir $\langle x|W|x' \rangle$ como a fração do fluído que escorre de x' para x em um intervalo de tempo Δt . A variação temporal da densidade de fluído em x vai ser

$$\Delta P(x,t) = \left[\langle x|W|x-1 \rangle P(x-1,t) - \langle x-1|W|x \rangle P(x,t) + \langle x|W|x+1 \rangle P(x+1,t) - \langle x+1|W|x \rangle P(x,t) \right] \Delta t$$
(1.29)

isto é, a fração de fluído que migrou dos intervalos vizinhos para x menos a fração que migrou de x para seus vizinhos. Se imaginarmos agora a nossa escala de de observação tempo muito pequena, porém suficiente maior que o tempo característico para que uma partícula possa migrar entre dois pontos quaisquer da encanação, teremos que estender a soma sobre todos os intervalos x':

$$\Delta P(x,t) = \left[\sum_{x'} \left(\langle x | W | x' \rangle P(x',t) - \langle x' | W | x \rangle P(x,t) \right) \right] \Delta t.$$
(1.30)

que é a própria equação mestra. A imposição da nomalização implica em

$$\sum_{x,x'} \langle x|W|x' \rangle P(x',t) = \dot{V}, \qquad (1.31)$$

isto é, na variação do volume total. Como não há fluido entrando ou saindo do encanamento $\dot{V} = 0$. A restrição expressa pela eq. (1.26) é traduzida como: Dado que uma partícula se encontra na posição x' ela obrigatoriamente deve mover-se para outra posição x no encanamento, pois não há fluxo para dentro ou para fora do sistema.

1.3 Estados estacionários

Como visto até aqui a fdp P(x,t) evolui no tempo segundo a equação (1.11) ou, na forma diferencial, de acordo com (1.17). Vamos dar uma interpretação mais geométrica para a evolução temporal de P(x,t). Como definido anteriormente, a base $\{|x\rangle\}$ forma um espaço N dimensional, onde N é o número de eventos possíveis na realização do experimento E. Assim sendo, qualquer vetor $|v\rangle$ contido em V pode ser escrito como

$$|v\rangle = \sum_{x} a_{x} |x\rangle. \tag{1.32}$$

A restrição $\sum_{x} a_x = 1$, com todos os a_x reais, forma um hiperplano de dimensão N - 1 neste espaço. Adicionalmente, a condição $0 < a_x < 1$ forma um subconjunto convexo F contido no hiperplano [50]. Essas são as mesmas condições impostas aos coeficientes P(x,t), o que nos leva a $|P(t)\rangle \in F$. Definimos por trajetória partindo de $|P(0)\rangle$ como sendo o caminho traçado por $\phi : \Re \to F$ onde $\phi(t) = |P(t)\rangle$ e $0 \le t < \infty$, isto é, o conjunto de todos os pontos por onde P(x,t) passa durante sua evolução temporal. Neste contexto vemos que as imposições (1.12) (ou (1.26)) garantem que uma trajetória contida em F em t = 0 esteja contida em F para todo $t \ne 0$.

Definimos o estado estacionário, $P(x,\infty)$, como sendo o estado que obedece as três condições equivalentes

$$\phi(t) = \phi(t + \Delta t)$$

$$|P(\infty)\rangle = T^{\Delta t}|P(\infty)\rangle$$
(1.33)

$$W|P(\infty)\rangle = \frac{\partial}{\partial t}|P(\infty)\rangle = 0.$$

ou seja, a distribuição do estado estacionário não depende mais do tempo. A fdp $P(x,\infty)$ é chamada de distribuição estacionária. Teoricamente esta distribuição só pode ser atingida a partir de (1.11) ou (1.17) no limite $t \rightarrow \infty$.

Aceitaremos sem demonstração [49] que, devido ás restrições impostas, W possui N auto-

valores λ_i que de forma mais geral são complexos. A cada autovalor corresponde um autovetor $|v_i\rangle$. Os autovalores λ_i não são necessariamente todos distintos. Dizemos que um sistema é ergódico se a probabilidade de, partindo de estado *x* no tempo *t* atingir o estado *x'* no tempo t + dt seja não nulo. Para sistemas ergódicos a parte real de todos os autovetores é negativa, exceto para um único autovalor não degenerado $\lambda_1 = 0$. Podemos expressar o vetor $|P(0)\rangle$ em função dos autovetores de *W*:

$$|P(0)\rangle = \sum_{i} a_{i} |v_{i}\rangle. \tag{1.34}$$

É importante notar que para obtermos uma situação de real equilíbrio é necessário que a escolha de $|P(0)\rangle$ seja tal que os coeficientes a_i sejam não nulos ou pelo menos o termo a_1 seja diferente de zero, como ficará claro adiante. Substituindo esta última expressão na equação (1.20) e usando $W|v_i\rangle = \lambda_i |v_i\rangle$

$$|P(t)\rangle = e^{tW}|P(0)\rangle = \sum_{i} a_{i}e^{tW}|v_{i}\rangle = \sum_{i} a_{i}e^{t\lambda_{i}}|v_{i}\rangle.$$
(1.35)

Como a parte real dos λ_i são todas negativas, exceto para i = 1, em um tempo suficientemente longo todas as contribuições se anularão, exceto a do autovetor $|v_1\rangle$. A fdp estacionária é dada então por

$$P(x,\infty) = a_1 \langle x | v_1 \rangle. \tag{1.36}$$

Como exemplo, vamos tomar uma modelagem para o ciclo de Calvin que ocorre em plantas clorofiladas, constituindo uma das etapas da produção de energia dos vegetais (produção de sacarose) [51]. De uma maneira simples, o cilco começa com a união de uma molécula de CO_2 ao composto *rubulose-1,5-bifosfato*, formando um composto inermediário instável, que se quebra em dois *3-fosfoglicerato*. Ao reagir com os compostos *NADP* e *ATP*, derivados da fase luminosa da fotossíntese, cada *3-fosfoglicerato* gera um *gliceraldeido-3-fosfato*. Um destes aldeídos formados é encaminhado para os processos de formação de sacarose e amido, enquanto que o outro, por um complicado processo de regeneração, culminando com a rege-



Figura 1.1 Representação para o ciclo de Calvin. A moléculas de *NADPH* e *ATP* são derivados da fase luminosa da fotossíntese. O CO_2 e o H_2O são oriundos do exterior da planta. Técnicas modernas de microscopia são capazes de acompanhar os átomos de carbono dentro do ciclo.

neração do composto *rubulose-1,5-bifosfato*. Um esquema para o ciclo se encontra na figura (1.1). Os compostos *rubulose-1,5-bifosfato* (*r*), *3-fosfoglicerato* (*f*) e o *gliceraldeido-3-fosfato* (*g*) são estáveis, tem em comum o radical fosfato $(PO)^{-3}$ e podem ser rastreados dentro do cloroplasto.

Vamos definir as densidades P(x,t), onde x = r, f ou g, como a quantidade do composto x dividido pela quantidade total de compostos com o radical fosfato dentro do cloroplasto (supondo que só hajam estes). Definida dessa maneira podemos interpretar estas densidades como a probabilidade de, ao encontrarmos um composto fosforado, ele seja do tipo x. Vamos propor uma modelagem matemática simples (linear) para a evolução do ciclo. Suponha que cada transição ocorra com as seguintes taxas temporais

$$a: r \Rightarrow f \quad b: f \Rightarrow g \quad c: g \Rightarrow r.$$
 (1.37)

Cada umas das constantes a, b e c são positivas não nulas e refletem os tempos característicos

de carboxilação, redução e regeneração, respectivamente. São diretamente influenciadas pela concentração dos compostos envolvidos, como CO_2 , *NADP* e *ATP*, por exemplo, e indiretamente por fatores como temperatura e incidência solar. Adicionalmente, espécies diferentes de plantas podem possuir constantes diferentes.

As equações para a evolução da fdp são

$$P(r,t+\tau) = P(r,t) - \tau a P(r,t) + \tau c P(g,t)$$

$$P(f,t+\tau) = P(f,t) - \tau b P(f,t) + \tau a P(r,t)$$

$$P(g,t+\tau) = P(g,t) - \tau c P(g,t) + \tau b P(f,t),$$
(1.38)

onde τ é uma constante de tempo característica de todo o ciclo. Interpretendo as constantes de tempo *a*, *b* e *c* como sendo a fração do tempo de ciclo total que se gasta em cada etapa do ciclo, temos a restrição a+b+c=1. As equações (1.38) nos levam á seguinte matriz estocástica:

$$W = \begin{pmatrix} -a & 0 & c \\ a & -b & 0 \\ 0 & b & -c \end{pmatrix}.$$
 (1.39)

O polinômio característico dessa matriz é dado por

$$det(W - \lambda I) = \lambda(\lambda^2 + \lambda + S) = 0, \qquad (1.40)$$

cujas soluções são $\lambda_1 = 0$ e $\lambda_{2(3)} = \frac{1}{2}(-1 \pm \sqrt{\Delta})$, onde $\Delta = 1 - 4S$ e S = (ab + bc + ca).

Com alguma manipulação algébrica é possível mostrar que apenas o primeiro autovalor de *W* é nulo, e os demais tem parte real negativa e são diferentes entre si. Os autovalores (não normalizados) são da forma

$$|v_i\rangle = \left(\frac{c}{a+\lambda_i}, \frac{c+\lambda_i}{b}, 1\right),$$
 (1.41)

desde que $-\lambda_i \neq a, b$ ou *c*. Como cada uma das taxas temporais dependem de outros fatores

como a temperatura, por exemplo, a fdp estacionária também apresenta dependência com os demais parâmetros do problema. Mesmo em um exemplo simples como este é importante notar que a dinâmica da fdp apresenta um rico conjunto de possibilidades [57].

No caso mais geral temos três pontos fixos diferentes entre si, sendo um estável e dois instáveis. No caso limite em que duas das constantes de tempo são próximas de zero, um dos pontos fixos instáveis vai aproximar-se arbitrariamente do ponto fixo estável, gerando uma zona onde a convergência para o estado estacionário é extremamente lenta. Esta situação pode corresponder a uma baixa concentração de CO_2 e *NATP*, por exemplo. Quando $\Delta = 0$ os dois pontos fixos instáveis possuem o mesmo autovalor (degenerado), podendo gerar uma zona de instabilidade onde fdps com condições iniciais dentro desta zona permaneceriam nela indefinidamente. Para todos esses casos, porém, a distribuição de equilíbrio é dada por:

$$P(r,\infty) = \frac{bc}{ab+bc+ca}$$

$$P(f,\infty) = \frac{ca}{ab+bc+ca}$$

$$P(g,\infty) = \frac{ab}{ab+bc+ca}.$$
(1.42)

1.3.1 Entropia

Existe ainda uma outra forma de caracterizar o estado estacionário do sistema. Considere a entropia de Gibbs, dada por

$$S(t) = -k \sum_{x} P(x,t) ln(P(x,t)),$$
(1.43)

onde K é a constante de Boltzmann. Escrita dessa maneira podemos interpretar a entropia como uma medida da desorganização do sistema, dado o macroestado em que este se encontra. A taxa de variação temporal da entropia pode ser escrita, com o auxílio da equação mestra e alguma manipulação algébrica, como

$$\frac{d}{dt}S(t) = \Pi - \Phi, \qquad (1.44)$$

onde

$$\Pi = k \sum_{xx'} ln\left(\langle x|W|x'\rangle P(x',t)\right)\left(\langle x|W|x'\rangle P(x',t) - \langle x'|W|x\rangle P(x,t)\right)$$
(1.45)

é a produção de entropia devido a processos intrínsecos do sistema, sempre positiva, e

$$\Phi = k \sum_{xx'} ln\left(\langle x|W|x'\rangle\right) \langle x|W|x'\rangle P(x',t)$$
(1.46)

é o fluxo de entropia entre o meio externo e o sistema, podendo ser positivo ou negativo.

É possível mostrar [52] que partindo de uma configuração inicial que seja uma combinação de todos ou autovetores de *W* e após um certo tempo característico do sistema a entropia é uma função crescente no tempo e no estado estacionário assume um valor máximo. Partindo de configurações que não contemplem todos os autovetores a entropia ainda é crescente, porém pode assumir um máximo local de valor menor que no primeiro caso. Assim, uma caracterização adicional para o estado estacionário é aquele cuja fdp maximiza a entropia, ou $\frac{d}{dt}S(t) = 0$ para *t* suficientemente grande.

1.3.2 Reversibilidade e irreversibilidade

A evolução dinâmica de um sistema pode ser dividida em duas grandes classes caracterizadas pelo comportamento do sistema no estado estacionário. A condição de equlíbrio (1.33), quando substituída na equação (1.17), nos conduz a

$$\sum_{x'} \langle x|W|x' \rangle P(x') = \sum_{x'} \langle x'|W|x \rangle P(x)$$
(1.47)
onde a dependência em t foi suprimida por simplicidade. A maneira como esta relação é satisfeita define as duas classes.

Processos microscopicamente reversíveis são aqueles em que na distribuição de equilíbrio a probabilidade do sistema percorrer uma caminha $(x_0, x_1, ..., x_n)$ nessa ordem é igual à probabilidade de percorrê-la na ordem inversa $(x_n, x_{n-1}, ..., x_0)$. Em particular, para a transição $x \rightleftharpoons x'$,

$$\langle x|T|x'\rangle P(x') = \langle x'|T|x\rangle P(x), \qquad (1.48)$$

ou, equivalentemente,

$$\langle x|W|x'\rangle P(x') = \langle x'|W|x\rangle P(x). \tag{1.49}$$

Esta última equação é conhecida como condição de balanceamento detalhado. Isto significa que a eq. (1.47) é satisfeita termo a termo. Esta condição baseia-se no fato de que as leis da mecânica, clássica ou quântica, são temporalmente reversíveis. Se o sistema de interesse for descrito em termos destas leis a dinâmica deles também deve ser temporalmente reversível, o que é garantido pela condição de balanceamento detalhado. A substituição nas equações para a variação temporal da entropia implica que $\Pi = \Phi = 0$, isto é, as transições entre estados no equilíbrio não produzem entropia.

Se a distribuição de equilibrio desses sistemas for a fdp de equilibrio termodinâmico [53], onde a probabilidade de cada estado é proporcional ao peso de Boltzmann $exp\{-\beta E(x)\}$, onde E(x) é a energia do estado x e $\beta^{-1} = KT$ e T a temperatura, as taxas de transição devem obedecer

$$\frac{\langle x|W|x'\rangle}{\langle x'|W|x\rangle} = \frac{P(x)}{P(x')} = exp\{-\beta[E(x) - E(x')]\}$$
(1.50)

Processos microscopicamente irreversíveis são aqueles que não obedecem a condição de balanceamento detalhado. O que significa que a eq (1.47) é satisfeita somente com a contribuição de todos os estados. A probabilidade de o sistema percorrer um dado caminho em uma direção é diferente da de percorrê-lo no sentido inverso. Adicionalmente a condição de máximo para entropia é satisfeita quando $\Pi = \Phi \neq 0$, isto é, a produção intrínseca de entropia se iguala ao fluxo de entropia no sistema.

1.4 O método Monte Carlo

O funcionamento do Monte Carlo [54, 55, 56] está fortemente associado à evolução de processos estocásticos, brevemente explorados neste capítulo. De uma forma geral, o método consiste no uso de variáveis aleatórias para a simulação de um dado sistema de interesse. As aplicações do método se estendem por problemas de naturezas diversas. Em particular estamos interessados na aplicação do método para simulações de sistemas dinâmicos.

A evolução temporal de uma variável estocástica é definida a partir de um conjunto de regras probabilísticas, que podem estar resumidas na matriz estocástica, por exemplo. Partindo de uma configuração inicial arbitrária, realizamos atualizações no sistema de acordo com tais regras. Devido à natureza estatística das regras, a dinâmica do sistema pode percorrer os mais diferentes caminhos possíveis. Tipicamente, escolhemos um dos caminhos a partir da comparação das probabilidades de evolução com um número gerado aleatoriamente. É importante notar que estamos implicitamente definindo um tempo próprio da simulação do sistema, segundo o qual medimos a evolução temporal deste durante as simulações. Este tempo próprio é chamado de *passo de Monte Carlo* ou, do inglês, *Monde Carlo step* (MCS).

Para exemplificar, suponha uma situação em que um sistema encontra-se no estado $|x\rangle$ e que as probabilidades de permanecer neste estado e de migrar para um estado $|x'\rangle$ sejam, respectivamente,

$$\langle x|T|x\rangle = 0.3 \ \mathrm{e} \tag{1.51}$$

$$\langle x'|T|x\rangle = 0.7 \quad . \tag{1.52}$$

Para escolher se permanecemos ou não em $|x\rangle$, geramos computacionalmente um número ale-

atório η no intervalo [0, 1] e comparamos com as probabilidades. Se $\eta < 0.3$ o sistema permanece em $|x\rangle$, caso contrário o sistema migra para $|x'\rangle$.

Assim, segundo a discussão feita anteriormente, o sistema irá evoluir no tempo, e, após um tempo característico de relaxação t_r , irá atingir uma distribuição de equilíbrio, no sentio que, para $t > t_r$, a frequência relativa com que o estado $|x\rangle$ ocorre ao longo do tempo é igual à probabilidade de equilíbrio P(x). Teoricamente falando, o tempo de relaxação do sistema é infinito, porém, na prática, podemos analisar a evolução dinâmica de alguma grandeza de interesse do sistema e determinar empiricamente o tempo necessário para que não ocorram mudanças significativas neste. Para sistemas magnéticos, por exemplo, duas escolhas usuais são a energia e a magnetização do sistema.

Assim, se desejarmos calcular a média da grandeza f(x), esperamos que o sistema evolua durante o tempo característico de relaxação t_r e realizamos uma média temporal durante um tempo T suficientemente grande, após o sistema atingir o equilíbrio:

$$\sum_{x} P(x)f(x) \simeq \langle f(x) \rangle_t = \frac{1}{T} \sum_{t>t_r}^{t_r+T} f(x(t)).$$
(1.53)

Capítulo 2 O Modelo do voto da maioria

2.1 O Modelo do voto da maioria

O modelo do Voto da Maioria (MVM) é um modelo fenomenológico que trata do processo de formação de opinião dos indivíduos de uma determinada rede de interações sociais. Neste modelo simples a descrição do comportamento de um elemento está diretamente ligada ao comportamento de seus parceiros sociais ou vizinhos mais diretos. De uma forma didática, iremos usar neste capítulo a rede social dos conhecidos de um indivíduo chamado Marcos mostrada na figura (2.1). Apesar de estar inserido em uma rede social bem maior, apenas os elementos Amigo1, Amigo2, Amigo3 e Mãe participam diretamente da formação de suas escolhas. Este tipo de interação é conhecida como interação entre primeiros vizinhos.



Figura 2.1 Rede social do indivíudo Marcos: (a) a rede onde este indivíduo está localizado em sua totalidade. Em (b) apenas os componentes da rede que participam do processo de formação de opinião deste elemento.

Segundo o MVM sem ruído, Marcos sempre concordará com a opinião da maioria de seus vizinhos. Em uma situação onde, por exemplo, Amigo1, Amigo2 e Amigo3 decidem pular de um precipício, Marcos os seguirá, independentemente da Mãe ser a favor ou contra tal opinião. É importante frisar que no MVM sem ruído um elemento não tem opinião própria, no sentido que, sempre que houver uma opinião majoritária formada na sua vizinhança, independentemente de sua opinião atual ou da opinião da minoria, um dado elemento entrará em consenso com o grupo dominante. É fácil ver que em uma sociedade descrita dessa maneira bastaria que um pequeno grupo optasse por um caminho que todos os demais acabariam por segui-los (ocasionando assim um suicídio coletivo no precipício). Tal descrição é simplista demais e acaba por ocasionar uma uniformidade de idéias como consequência trivial do modelo.

No MVM com ruído, damos a cada elemento da rede uma chance de rebelar-se, de posicionar-se de forma contrária às opiniões majoritárias de sua vizinhaça. Isso significa que no exemplo do parágrafo anterior, Marcos passaria a ter uma probabilidade de concordar com Mãe e salvar sua vida, apesar de perder os amigos. Note entretanto que a inserção do ruído não significa que os componentes da sociedade passaram a ter opinião própria; primeiro porque a chance de concordar ou discordar é estatística, segundo porque a escolha tomada continua sem levar em consideração a opinião atual do indivíduo ou a quantidade de elementos de opinião minoritária, por exemplo. De forma resumida, com o ruído a descrição da personalidade muda aleatoriamente entre duas: Maria-vai-com-as-outras ou rebelde sem causa, sendo o ruído uma medida do grau de rebeldia média de um elemento. Assim, podemos ter uma sociedade onde sempre haverá uma parcela de pessoas com opinião contrária á da maioria, podendo, inclusive, dependendo do grau de rebeldia dos indivíduos, sequer haver uma opinião dominante.

A interpretação para o ruído pode ser das mais variadas: pura rebeldia, influências não contempladas na descrição da rede de interações, corrupção da informação ou até mesmo elementos essenciais na descrição do processo de formação de opinião nas sociedades humanas como boatos e fofocas, o que justificaria o termo ruído. É interessante apresentarmos uma interpretação física para o MVM. Suponha uma amostra de um material ferromagnético. Os momentos magnéticos atômicos desse material tendem a orientar-se de acordo com um campo local efetivo, cuja direção é determinada pela orientação majoritária dos momentos vizinhos mais próximos, criando um acoplamento entre eles. No regime de temperatura e campo magnético externo nulos temos o MVM sem ruído: os momentos encontram-se todos alinhados em uma mesma direção arbitrária (resultando em uma magnetização espontânea diferente de zero). Se agora levarmos em consideração os efeitos da temperatura veremos que há uma chance de um momento magnético preferir um estado de energia mais alta (contrário á maioria) do que o de energia mais baixa (a favor da maioria). Temos o MVM com ruído. Essa interpretação em sistemas magnéticos sugere uma forte relação entre a temperatura e o ruído, mais precisamente entre o fator de Boltzmann e o ruído. Esta relação será melhor explorada ainda neste capítulo.

Entender o comportamento da sociedade é uma tarefa árdua e está longe de ser uma realidade científica. A complexidade necessária para uma descrição satisfatória do comportamento social de um único indivíduo, mesmo que de forma ideal e aproximada, é o suficiente para tornar qualquer modelo matemático discrepante com a realidade. Porém, por mais intrigante que pareça, e a despeito da complexidade, a história da ciência mostra que modelos simples conseguem por muitas vezes capturar a essência dos fenômenos da natureza, abrindo caminho para a implementação de tratamentos mais sofisticados. Existem, ainda, variantes e similares do MVM, que podem considerar a inclusão de elementos formadores de opinião, infuências externas, como a TV por exemplo, elementos com uma dinâmica própria diferente da dos demais indivíduos, entre outras extensões.

2.2 Uma roupagem mais matemática

2.2.1 MVM com 2 estados

Considere um indivíduo (vértice) ambientado em uma rede. Desejamos saber a opinião (estado) deste com relação a uma pergunta de resposta simples como ´Â´sim ou não", por exemplo. É claro que a situação pode ser facilmente adaptada a outras realidades. Em um circuito eletrônico podemos falar de ligado ou desligado, em um sistema de spins atribuiríamos ´Â´up" e ´Â´down", no mercado financeiro ´Â´comprar" e ´Â´vender" e assim por diante. Quando um indivíduo pretende definir sua resposta, primeiro ele confere as opiniões de seus vizinhos, ficando de acordo com a maioria com probabilidade 1 - q, com a minoria com q e, em caso de empate, escolhe um dos dois lados com probabilidade 1/2.

Matematicamente, atribuímos a cada sítio *i* uma variável σ_i que pode assumir os valores ± 1 onde, arbitrariamente +1 traduz sim e -1 não. Considere também que o sítio i possua $k_i^{(+)}$ e $k_i^{(-)}$ vizinhos no estado +1 e -1, respectivamente. Escrevemos então as probabilidades condicionais de escolha de opinião:

$$P(\sigma_{i} = 1 | k_{i}^{(+)} > k_{i}^{(-)}) = 1 - q$$

$$P(\sigma_{i} = 1 | k_{i}^{(+)} < k_{i}^{(-)}) = q$$

$$P(\sigma_{i} = 1 | k_{i}^{(+)} = k_{i}^{(-)}) = 1/2$$
(2.1)

Imagine agora que exista um universo paralelo com exatamente a mesma rede de interações sociais do exemplo acima, porém com a opinião de cada elemento oposta à do nosso universo.

Esta nova realidade pode ser construída pela transformação simultânea:

Universo

nossoparalelo $\sigma_i \rightarrow -\sigma_i$ $k_i^{(+)} \rightarrow k_i^{(-)}$ $k_i^{(-)} \rightarrow k_i^{(+)}$

Neste novo universo é fácil ver que

$$P(\sigma_{i} = -1|k_{i}^{(\cdot)} > k_{i}^{(+)}) = 1 - q$$

$$P(\sigma_{i} = -1|k_{i}^{(\cdot)} < k_{i}^{(+)}) = q$$

$$P(\sigma_{i} = -1|k_{i}^{(\cdot)} = k_{i}^{(+)}) = 1/2$$

$$(2.2)$$

ou seja, a operação de troca de um universo, definida dessa maneira, nos leva a um novo sistema onde, porém, as probabilidades de mudança de opinião permanecem inalteradas. E mais, perceba que o conjunto das regras escritas nesses dois mundos, eq.(2.1) e eq.(2.2), descrevem todas as possibilidades de combinações entre o indivíduo e sua vizinhaça. Esta operação de troca é conhecida como operação de reflexão. O conjunto formado por esta operação e pela operação identidade (que não altera o sistema) é conhecido como grupo S_2 . Dizemos então que o MVM com dois estados é invariante sob as operações de simetria do grupo S_2 .

2.2.2 Outros objetos com simetria S₂

Na natureza, e consequentemente na física e na matemática, existem vários outros objetos que possuem a mesma invariância sob as operações de S_2 . Considere, por exemplo, um haltere de academia com duas esferas $A \in B$ exatamente iguais. A troca de esferas $A \rightleftharpoons B$ não altera a descrição física do haltere. Considere a interação elétrica entre duas cargas, dada pela Lei de

Coulomb

$$F_{el} = \frac{1}{4\pi\varepsilon} \frac{q_1 q_2}{r_{12}^2} , \qquad (2.3)$$

onde q_1 e q_2 são os valores das cargas elétricas, ε é a permissividade elétrica do meio e r_{12} é a distância entre as cargas. Uma rápida inspeção mostra que a força elétrica também parmenece inalterada pela troca $1 \rightleftharpoons 2$, bem como pela troca simultânea nos sinais das cargas $q_1 \rightarrow -q_1$ e $q_2 \rightarrow -q_2$.

Um sistema com as mesmas propriedades de simetria do 2-MVM de particular interesse, é o modelo de Ising. Considere uma rede de interações onde em cada um dos sítios temos um átomo localizado, isto é, os átomos não têm liberdade de locomoção ao longo da rede. Cada átomo pode ter sua componente de spin na direção *z* nos estados *up* ou *down*. O hamiltoniano de Ising, com campo externo nulo, é dado por

$$H = -\sum_{ij} J_{ij} \sigma_i \sigma_j , \qquad (2.4)$$

onde J_{ij} é a energia de troca (exchange) e σ_i é a variável de spin do sítio *i*. σ_i pode assumir os valores 1/2(up) e -1/2(down). Note que a troca $up \rightleftharpoons down$ não altera o hamiltoniano do sistema. O peso estatístico de uma dada configuração da rede, isto é, a probabilidade de ao realizarmos uma medida o sistema se encontre naquele estado, é dado pelo peso de Boltzmman: $exp[-\beta H]$, onde $\beta = (KT)^{-1}$ e *T* é a temperatura.

Temperaturas baixas favorecem estados emparelhados, de mais baixa energia. Em particular, no limite $T \rightarrow 0$, apenas o estado fundamental, o estado de energia mais baixa, deve ocorrer. Neste estado o sistema encontra-se completamentemente emparelhado. Assim, seguindo esta comparação, concluímos que $T \rightarrow 0$ corresponde, no MVM de 2 estados, a $q \rightarrow 0$.

Com o aumento da temperatura (aumento do ruído) estados com spins desemparelhados passam a ter probabilidade cada vez maior de ocorrerem. No limite $T \rightarrow \infty$ todos os estados devem ocorrer com igual probabilidade, porém estados desemparelhados tem uma multiplici-

dade muito maior. Em uma rede de tamanho N uma configuração completamente ordenada tem multiplicidade $\frac{N!}{N!0!} = 1$, enquanto que uma completamente desordenada (metade dos sítios em cada direção) tem $\frac{N!}{(\frac{N}{2})!(\frac{N}{2})!}$ que é uma função crescente de N. Sendo assim, na grande maioria das medidas realizadas encontraremos o sistema em um estado desordenado, com cada sítio tendo probabilidade 1/2 de ser encontrado no estado *up* ou *down*. No MVM de 2 estados esta situação ocorre quando $q \rightarrow 1/2$, onde as probabilidades condicionais de um elemento da rede concordar ou discordar da maioria são iguais. De fato, substituindo esse valor nas equações (2.1) e (2.2) temos 1 - q = q = 1/2. Em ambos os modelos deve existir um valor para o parâmetro externo, T_c ou q_c , onde ocorre a transição ordem-desordem. Devido as similaridades, dizemos que o MVM com dois estados é o análogo irreversível do modelo de Ising.

2.2.3 MVM com 3 estados

Como sabemos, nem todas as escolhas que fazemos podem ser resumidas a um "sim ou não". Numa pesquisa eleitoral, por exemplo, poderíamos escolher votar entre Dilma Rousseff, José Serra ou Marina Silva, em um mercado de ações poderíamos comprar, vender ou esperar, em uma reunião de condomínio, sermos à favor, contra ou nos abster e assim por diante. Como extensão ao modelo de dois estados, considere agora que cada elemento da rede pode responder a uma pergunta de três maneiras diferentes. Assim como no modelo descrito anteriormente, as principais idéias do MVM são as mesmas: seguir a maioria com probabilidade 1 - q e discordar com q. Porém, dado que agora temos mais opções de escolha, temos também mais maneiras de não saber como nos decidir. Vamos considerar os possíveis casos:

- Se houver um número igual de vizinhos em cada estado, o indivíduo escolhe um deles com igual probabilidade de 1/3.
- Se houver um grupo menor com uma opinião e em cada uma das outras duas possibilidades dois grupos iguais, o indivíduo segue o primeiro com probabilidade *q* ou escolhe

2.2 UMA ROUPAGEM MAIS MATEMÁTICA

por cada uma das duas "maiorias" com probabilidade $\frac{1}{2}(1-q)$.

• Havendo um grupo maior, não importando o tamanho dos outros dois grupos, este é escolhido com probabilidade 1 - q e cada um dos demais com $\frac{1}{2}q$.

Matematicamente, atribuímos a cada sítio *i* a variável σ_i que agora pode assumir os valores 1, 2 ou 3. Este sítio possui $k_i^{(1)}$, $k_i^{(2)}$ e $k_i^{(3)}$ vizinhos nos estados 1, 2 e 3, respectivamente. As probabilidades condicionais de escolha de opinião ficam:

$$P(\sigma_{i} = 1 | k_{i}^{(1)} = k_{i}^{(2)} = k_{i}^{(3)}) = 1/3$$

$$P(\sigma_{i} = 1 | k_{i}^{(1)} = k_{i}^{(2)} > k_{i}^{(3)}) = (1 - q)/2$$

$$P(\sigma_{i} = 1 | k_{i}^{(1)} < k_{i}^{(2)} = k_{i}^{(3)}) = q$$

$$P(\sigma_{i} = 1 | k_{i}^{(1)} > k_{i}^{(2)}, k_{i}^{(3)}) = 1 - q$$

$$P(\sigma_{i} = 1 | k_{i}^{(1)}, k_{i}^{(2)} < k_{i}^{(3)}) = q/2$$

$$(2.5)$$

onde (a, b < c) significa que não importa a relação entre *a* e *b* desde que ambos sejam menores do que *c*.

Assim como no MVM com 2 estados, existe um conjunto de operações sob as quais as probabilidades condicionais acima são invariantes. Considere, por exemplo, a troca $2 \rightleftharpoons 3$ deixando os spins no estado 1 inalterados. A equação (2.5) se torna:

$$P(\sigma_{i} = 1 | k_{i}^{(1)} = k_{i}^{(3)} = k_{i}^{(2)}) = 1/3$$

$$P(\sigma_{i} = 1 | k_{i}^{(1)} = k_{i}^{(3)} > k_{i}^{(2)}) = (1-q)/2$$

$$P(\sigma_{i} = 1 | k_{i}^{(1)} < k_{i}^{(3)} = k_{i}^{(2)}) = q$$

$$P(\sigma_{i} = 1 | k_{i}^{(1)} > k_{i}^{(3)}, k_{i}^{(2)}) = 1-q$$

$$P(\sigma_{i} = 1 | k_{i}^{(1)}, k_{i}^{(3)} < k_{i}^{(2)}) = q/2$$

$$(2.6)$$

O conjunto de todas as operações de simetria sob as quais as probabilidades acima são invariantes formam o grupo S_3 , a saber, todas as permutações do terno (1,2,3).

2.2.4 Outros objetos com simetria S₃

Considere um triângulo equilátero cujos vértices foram numerados na sequência 1, 2 e 3 (vide figura 2.2). Vamos definir a operação v_i , como a rotação de 180° em torno do eixo definido pela reta que liga os pontos *i* e *i*' também conhecida como reflexão, e a operação $C_3^{(+)}$ ($C_3^{(-)}$) como a operação de rotação de 120° (240°) em torno do eixo que passa pelo ponto *O* e é perpendicular ao plano da figura. O conjunto das cinco operações definidas acima mais a operação identidade formam o grupo C_{3v} que é isomorfo ao grupo S_3 . Podemos ver que o triângulo é invariante sob estas operações, exceto pela troca das posições dos índices 1, 2 e 3.



Figura 2.2 Representação esquemática das operações de semetria do triangulo equilátero.

O determinante de uma matriz quadrada $A = \{a_{ij}\}$ de ordem 3 dado por:

$$det(A) = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} =$$
(2.7)

$$(a_{11}a_{22}a_{33} + a_{12}a_{23}a_{31} + a_{13}a_{32}a_{21}) - (a_{32}a_{23}a_{11} + a_{21}a_{12}a_{33} + a_{13}a_{31}a_{22})$$

também é invariante sob a troca dos índices i e j segundo as operações do grupo S_3 .

Assim como no caso do grupo S_2 , um sistema com simetria S_3 que merece uma atenção especial é o modelo de Potts com 3 estados [46]. Este modelo é definido como uma extensão ao modelo de Ising, porém o spin na direção *z* de cada elétron pode agora encontrar-se em três estados diferentes. O hamiltoniano do modelo de Potts é dado por:

$$H = -\sum_{ij} J_{ij} \delta(\sigma_i, \sigma_j), \qquad (2.8)$$

onde J_{ij} é a energia de troca (exchange), $\delta(\alpha, \beta)$ é a função delta de Kronecker e σ_i é a variável de spin do sítio *i* que pode assumir os valores 1, 2 ou 3.

Seguindo a mesma analogia usada para o modelo de Ising e o MVM com 2 estados, e usando a mesma linha de raciocínio, dizemos que o MVM com três estados é o análogo irreversível do modelo de Potts com três estados. Podemos construir as equivalências entre os casos limites para temperatura e ruído: $T \rightarrow 0 \Rightarrow q \rightarrow 0$ e $T \rightarrow \infty \Rightarrow q \rightarrow 2/3$. Assim, também existe um valor crítico para a temperatura (ruído) onde ocorre a transição de fase.

Vamos fornecer uma justificativa para o valor limite q = 2/3. Para tal, é interessante reescrevermos as equações para as probabilidades condicionais (2.6) em uma aproximação similar à de campo médio, utilizando as densidades médias:

$$P(\sigma_i = 1 | n_1 = n_3 = n_2) = 1/3$$
(2.9)

$$P(\sigma_i = 1 | n_1 = n_3 > n_2) = (1 - q)/2$$
(2.10)

$$P(\sigma_i = 1 | n_1 < n_3 = n_2) = q \tag{2.11}$$

$$P(\sigma_i = 1 | n_1 > n_3, n_2) = 1 - q$$
(2.12)

$$P(\sigma_i = 1 | n_1, n_3 < n_2) = q/2, \qquad (2.13)$$

onde n_{α} é a densidade de indivídios de opinião α .

Procurarmos por valores de q onde uma dada situação tende a ser favorecida, perpetuando-

se em detrimento das outras. Primeiro note que a situação expressa na equação (2.9) ocorre apenas em estados completamente desordenados e perpetua a desordem. De fato, como em média ocorrem mudanças de opinião para cada estado com a mesma probabilidade, cada vez que houver uma transição para o estado 1, haverá uma para o estado 2 e outra para 3, mantendo as densidades constantes.

Para valores do ruído no intervalo 0 < q < 1/3, estabelecemos as desigualdades

$$(1-q)/2 > q$$
 e $1-q > q/2.$ (2.14)

Então, em situações onde haja uma ou duas maiorias formadas, o sítio tende, em média, a mudar sua opinião a favor da escolha dessas maiorias, favorecendo os estados ordenados. Isto não garante a ocorrência de maiorias, pois a dinâmica é influenciada pela geometria da rede.

Para valores de ruído $1/3 < q \le 2/3$ temos

$$(1-q)/2 < q$$
 e $1-q > q/2$, (2.15)

ou seja, as relações (2.10) e (2.11) favorecem estados minoritários e as relações (2.12) e (2.13) estados majoritários, levando a um equilíbrio que depende da geometria da rede.

Em q = 2/3 as relações (2.9), (2.12) e (2.13) expressam uma situação onde as transições ocorrem com igual probabilidade para cada um dos estados e nas demais relações estados minoritários são favorecidos. Por se tratarem de igualdades estritas, estas duas últimas, (2.10) e (2.11), devem ocorrer em um número ínfimo das vezes em comparação com as demais. Ou seja, para este valor do ruído, cada sítio tem a mesma probabilidade de escolher cada uma das três opiniões, o que ocorre em sistemas magnéticos para $T \rightarrow \infty$. Para q > 2/3 estados minoritários são sempre favorecidos, correspondendo a uma situação possível para o modelo, porém sem análogo físico. É importante ressaltar que o limite de desordem q = 2/3 é uma propriedade do MVM com 3 estados, independendo da estrutura da rede.

Capítulo 3 Previsões teóricas para o MVM

3.1 Irreversibilidade e Ergodicidade

Para mostrarmos que o modelo do voto da maioria com 3 estados (3-MVM) é irreversível basta considerar uma sequência particular de estados e verificar que as probabilidades de ocorrência desta sequência nos sentidos direto e inverso são diferentes. Para tal, vamos supor que uma porção de uma rede fictícia esteja na configuração indicada na figura 3.1. Considerando uma sequência em especial onde os dois sítios centrais da figura, $\alpha \in \beta$, percorrem os estados: $(\alpha, \beta) : (1,2) \rightarrow (2,2) \rightarrow (2,3) \rightarrow (1,3) \rightarrow (1,2)$, devemos agora calcular as probabilidades envolvidas.

Visando melhor clareza e entendimento da demonstração, vamos reescrever as regras de transição para o 3-MVM definidas no capítulo anterior:

$$P(\sigma_{i} = 1|k_{i}^{(1)} = k_{i}^{(2)} = k_{i}^{(3)}) = 1/3$$

$$P(\sigma_{i} = 1|k_{i}^{(1)} = k_{i}^{(2)} > k_{i}^{(3)}) = (1-q)/2$$

$$P(\sigma_{i} = 1|k_{i}^{(1)} < k_{i}^{(2)} = k_{i}^{(3)}) = q$$

$$P(\sigma_{i} = 1|k_{i}^{(1)} > k_{i}^{(2)}, k_{i}^{(3)}) = 1-q$$

$$P(\sigma_{i} = 1|k_{i}^{(1)}, k_{i}^{(2)} < k_{i}^{(3)}) = q/2$$
(3.1)

Adicionalmente, vamos supor que só ocorra a atualização da opinião de um indivíduo por vez, deixando os demais inalterados. A partir das regras de transição e utilizando atualizações desta forma, obtemos para as probabilidades de que essa sequência de transições ocorra na



Figura 3.1 Recorte de uma rede fictícia. Os círculos representam os sítios e as retas as conecções entre estes. O estado de cada sítio está representado no centro de cada círculo.

ordem direta e inversa, as seguintes expressões:

$$P(direta) = (1-q)\left(\frac{q}{2}\right)^3 \tag{3.2}$$

e

$$P(inversa) = \left(\frac{q}{2}\right)^4. \tag{3.3}$$

Como $P(direta) \neq P(inversa)$ o modelo é irreversível.

A demonstração da ergodicidade para o modelo decorre diretamente das regras (3.1). Para tal, basta vermos que, exceto em q = 0, as probabilidades condicionais $P(\sigma_i | \sigma)$ são todas não nulas. Isto implica que, após a atualização de sua opinião, o sítio *i* pode assumir qualquer um dos três estados possíveis, qualquer que seja a sua opinião antes disso. Como o estado total do sistema é o produto direto dos estados de cada sítio, $|\sigma\rangle = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, ... \sigma_N)$, qualquer estado $|\sigma'\rangle$ pode ser obtido a partir de qualquer outro estado $|\sigma\rangle$.

Em q = 0, a probabilidade de um indivíduo ir de encontro à opinião da maioria é sempre nula (vide (3.1)). Assim o sistema evolue no tempo até que se forme uma opinião unânime entre todos os indivíduos, podendo ser, de forma arbitrária, 1, 2 ou 3 o estado dominante. Uma vez nesse estado nenhum dos indivíduos poderá mais mudar de opinião. Dizemos então que, na ausência de ruído, temos estados absorventes, o que destrói a ergodicidade do modelo.

3.2 Grandezas de interesse

No sentido de descrever o macro comportamento do modelo faz-se necessário definirmos grandezas que nos transmitam informações sobre os microestados do sistema. Usaremos a forte analogia entre sistemas magnéticos e o MVM para tal fim. Nosso primeiro anseio é caracterizar o sistema quanto a seu estado de ordem ou desordem. Uma possível grandeza seria a densidade de sítios na direção α , definida como

$$n_{\alpha} = \left(\frac{1}{N}\sum_{i}\delta(\sigma_{i},\alpha)\right),\tag{3.4}$$

onde N é o número de sítios na rede. Cada uma das densidades n_{α} está compreendida no intervalo [0,1], sendo, $n_{\alpha} = 0$ a situação onde não há sítios de opinião α , $n_{\alpha} = 1$ a completa uniformidade desta opinião e $n_1 = n_2 = n_3 = 1/3$ correspondente a uma completa equivalência da quantidade de indivíduos em cada opção de escolha.

Entretanto, em sistemas magnéticos, uma grandeza mais comumente usada é a magnetização do sistema. No modelo de Potts com 3 estados e campo magnético não nulo na direção α é usual definirmos a magnetização por sítio na direção α como:

$$m_{\alpha}^{(Potts)} = \frac{3n_{\alpha} - 1}{2}.$$
(3.5)

De modo que, se o sistema estiver parcialmente alinhado na direção α , completamente desordenado ou alinhado em outra direção, a magnetização na direção α será positiva, nula ou negativa respectivamente. Os fatores são escolhidos de modo que $m_{\alpha}^{(Potts)} = 1$ no caso de completo alinhamento com o campo externo.

Como no MVM não há direção privilegiada, todas as grandezas definidas precisam levar em consideração as equivalências entre determinados estados ocorrerem no sistema. Em particular, para o 3-MVM, vimos no capítulo anterior que as probabilidades de troca de opinião são invariantes sob as operações de simetria do grupo S_3 . Motivados por isto, faz-se mais interessante trabalharmos com o vetor magnetização ou, em uma nomenclatura mais apropriada para o MVM, vetor opinião:

$$\vec{m} = (m_1, m_2, m_3),$$
 (3.6)

onde suas componentes são definidas como

$$m_{\alpha} = \sqrt{\frac{3}{2}} \left(\frac{3n_{\alpha} - 1}{3}\right). \tag{3.7}$$

Aqui a escolha dos fatores também segue um critério de normalização que ficará claro mais adiante. Definido desta maneira o módulo do vetor opinião, m, é invariante sob todas as operações de simetria do grupo S_3 , assim como desejamos. Note também que existem apenas duas coordenadas independentes devido ao vínculo

$$m_1 + m_2 + m_3 = 0. (3.8)$$

A partir do módulo do vetor opinião, definimos o parâmetro de ordem do sistema, uma medida do ordenamento do sistema, em analogia com a magnetização como

$$M = \langle m \rangle = \left\langle \sqrt{m_1^2 + m_2^2 + m_3^2} \right\rangle, \tag{3.9}$$

onde $\langle ... \rangle$ denota a média em um *emsenble* de estados do sistema. A variância do parâmetro de ordem, uma medida da flutuação do ordenamento do sistema, é definida em analogia com a susceptibilidade

$$\chi = N \langle (m - \langle m \rangle)^2 \rangle = N \left(\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2 \right).$$
(3.10)

Definimos também o cumulante de quarta ordem de Binder, na forma:

$$U = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3 \langle m^2 \rangle^2} \,. \tag{3.11}$$

Este último é largamente utilizado no estudo de transições do tipo ordem-desordem em sistemas magnéticos.

É importante notar que as grandezas acima definidas dependem apenas do módulo do vetor opinião, sendo também invariantes sob as operações de S_3 . Como *m* é uma função do estado do sistema, $m = m(\sigma)$, as médias acima definidas dependem da distribuição estacionária de probabilidades dos estados, $P(\sigma)$, e esta, por sua vez, depende do tamanho do sistema tratado, da geometria da rede e do valor do parâmetro de ruído. Se conhecermos esta distribuição, seremos capazes de calcular analiticamente cada uma delas. Na verdade, precisamos apenas conhecer a distribuição estacionária para o módulo do vetor magnetização, P(m), e calcularmos as médias

$$\langle f(m) \rangle = \int P(m)f(m)dm,$$
 (3.12)

onde f(m) é uma função de *m*. Até o fim do corrente capítulo vamos nos concentrar em estudar o comportamento do modelo, e em particular das grandezas de interesse, em casos limites para o parâmetro de ruído.

3.2.1 Limite de ruído nulo: $q \rightarrow 0$

Como discutido até este ponto, no limite $q \rightarrow 0$ o sistema encontra-se em um estado completamente ordenado, onde todos os sítios encontram-se simultaneamente em um dos estados possíveis. Como nenhum deles é predileto, em um *ensemble* de estados cada um dos três ordenamentos (1, 2 ou 3) deve ocorrer com igual probabilidade. Sem perda de generalidade suponha que o estado 1 seja o estado majoritário. Para este ordenamento, as componentes do vetor opinião assumem os valores

$$m_1 = \sqrt{\frac{2}{3}}$$
 e $m_2 = m_3 = \frac{-1}{\sqrt{6}}$, (3.13)

o que nos leva a m = 1. Como não existem flutuações no sistema, concluímos que a distribuição de probabilidades estacionária para m é da forma

$$P(m) = \delta(m-1), \tag{3.14}$$

onde $\delta(x)$ é a função delta de Dirac. Neste limite $\langle f(m) \rangle = f(\langle m \rangle) = f(m = 1)$. Substituindo este resultado nas definições para a magnetização, susceptibilidade e o cumulante de Binder, encontramos os seguintes valores limites:

$$M = 1, \ \chi = 0 \ e \ U = \frac{2}{3}.$$
 (3.15)

3.2.2 Limite de desordem: $q \rightarrow 2/3$

Assim como explorado no capítulo anterior, $(q \rightarrow 2/3)$ é o limite de desordem para o 3-MVM. Neste limite, um dado sítio pode escolher cada uma dos três estados possíveis com igual probabilidade 1/3. Assim, a opinião de um sítio na rede não está relacionada com a opinião dos demais.

Seja N_{α} o número total de sítios no estado α . A componente do vetor opinião m_{α} se relaciona com N_{α} através da relação

$$m_{\alpha} = \sqrt{\frac{3}{2}} \left(\frac{3N_{\alpha} - N}{3N}\right). \tag{3.16}$$

Como neste limite a opinião de cada indivíduo é independente, a probabilidade de termos N_{α}

sítios de opinião α na rede é dada pela distribuição binomial

$$P(N_{\alpha}) = \frac{N!}{N_{\alpha}!(N-N_{\alpha})!} \left(\frac{1}{3}\right)^{N_{\alpha}} \left(\frac{2}{3}\right)^{N-N_{\alpha}}.$$
(3.17)

Fazendo a aproximação normal para esta distribuição e utilizando a relação (3.16) podemos construir a função densidade de probabilidade para m_{α} :

$$P(m_{\alpha}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\rho^2}} \exp\left\{\frac{-m_{\alpha}^2}{2\rho^2}\right\},\tag{3.18}$$

onde $\rho = \sqrt{\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2} \sim 1/\sqrt{N}$ é o desvio padrão em relação á média da distribuição.

Para variáveis m_{α} independentes, a distribuição para *m* seria da forma

$$P(m) \sim exp\left\{\frac{-m_1^2}{2\rho^2}\right\} exp\left\{\frac{-m_2^2}{2\rho^2}\right\} exp\left\{\frac{-m_3^2}{2\rho^2}\right\}.$$
(3.19)

Impondo a condição $m_1 + m_2 + m_3 = 0$ e normalizando a fdp, a distribuição para *m* fica

$$P(m) = \frac{1}{2\pi\sigma^2} exp\left\{\frac{-r^2}{2\sigma^2}\right\},\tag{3.20}$$

onde $r^2 = 2(m_1^2 + m_2^2 + m_1m_2)$ e $\sigma \sim 1/\sqrt{N}$. Com essa distribuição, obtemos para o momento de ordem *n*

$$\langle m^n \rangle = \int r^n P(r) d^2 r = \left(\frac{n}{2}\right)! \left(2\sigma^2\right)^{n/2}, \qquad (3.21)$$

onde $d^2r = rdrd\theta$.

Usando (3.21) nas definições das grandezas de interesse, podemos escrever

$$M_N = \sqrt{\frac{\pi}{2}}\sigma \tag{3.22}$$

$$\chi_N = N\left(\frac{4-\pi}{4}\right)(2\sigma^2) \tag{3.23}$$

$$\chi_N = N\left(\frac{4-\pi}{\pi}\right) M_N^2 \tag{3.24}$$

$$U_N = 1/3.$$
 (3.25)

É interessante provermos uma análise dos resultados recém obtidos.

- No limite termodinâmico $(N \to \infty)$, $\sigma \sim 1/\sqrt{N} \to 0$, assim, neste limite, $M_N \to 0$;
- Como σ² ~ 1/N, a susceptibilidade assume um valor constante que independe do tamanho e do tipo de rede em que o modelo está ambientado;
- O cumulante de Binder também possui um valor constante e bem determinado (1/3) neste limite, independente da estrutura da rede.

3.3 Comportamento crítico

3.3.1 Criticalidade e expoentes críticos

Na região crítica, o sistema encontra-se próximo à transição ordem-desordem. A dependência entre os estados dos sítios na rede é tão forte que a alteração no estado de um único indivíduo pode afetar o estado dos demais componentes da rede. Considere o comprimento de correlação ξ , uma estimativa da região de infuência média de um indivíduo. Dizemos então que ξ cresce à medida que nos aproximamos do ponto crítico, divergindo, no limite termodinâmico $(N \rightarrow \infty)$, em $q = q_c$. Neste âmbito, seria possível, a princípio, organizar os indivíduos em blocos de influência, onde todos os entes de um mesmo bloco estão tão acoplados que definem suas opiniões e se comportam como se fossem um único indivíduo. O tamanho máximo de cada bloco é ajustado pelo comprimento de correlação, como este diverge, o tamanho de cada grupo é arbitrário, podendo ser inclusive do tamanho de todo o sistema. É neste sentido que dizemos que suficientemente próximo ao ponto crítico o sistema é invariante por uma mudança de escala. As operações de alteração de escala formam um conjunto de equações denominado grupo de renormalização de escala, que é o ponto de partida para a teoria de escala de tamanho finito [55, 58, 59].

Na criticalidade, esperamos que o comprimento de correlação do sistema no limite termodinâmico deva divergir segundo

$$\xi \sim \varepsilon^{-\nu}, \tag{3.26}$$

onde $\varepsilon = q - q_c$ é a distância ao ponto crítico e o expoente v é um número real positivo. De modo análogo, a magnetização e a susceptibilidade se comportam da forma

$$M \sim \varepsilon^{\beta} \tag{3.27}$$

$$\chi \sim \varepsilon^{-\gamma},$$
 (3.28)

onde os sinais foram escolhidos por conveniência de modo que os expoentes β e γ são reais e positivos.

Estas relações definem os expoentes v, $\beta e \gamma$ que governam, na região crítica, o comportamento do comprimento de correlação, da magnetização e da susceptibidade, respectivamente. Estes expoentes são conhecidos na literatura como expoentes críticos. Sistemas diferentes com o mesmo conjunto de expoentes críticos pertencem à mesma classe de universalidade, no sentido que, próximo ao ponto crítico apresentam o mesmo tipo de comportamento geral independentemente das suas particularidades, podendo inclusive estender-se a sistemas com naturezas completamente distintas em regiões longe da criticalidade. Para cada função resposta podemos definir um expoente crítico associado, porém apenas dois expoentes são independentes.

3.3.2 Efeito de tamanho finito

Vimos que o comprimento de correlação diverge no ponto crítico. Por outro lado, para sistemas de tamanho finito, o comprimento de correlação é limitado pelas dimensões da rede. Sendo assim, suficientemente próximo do ponto crítico, ξ deve ser do tamanho de algum comprimento característico da rede, denominado por *l*, que se relaciona com o número máximo de sítios na rede dependendo da geometria desta, isto é, $\xi \sim l$. Para uma rede regular quadrada, por exemplo $l = \sqrt{N}$, para uma rede cúbica $l = \sqrt[3]{N}$ e assim por diante. A teoria de escala de tamanho finito nos permite escrever as relações

. . . .

$$M_N = l^{-\beta/\nu} \widetilde{M}(x) \tag{3.29}$$

$$\chi_N = l^{\gamma/\nu} \widetilde{\chi}(x) \tag{3.30}$$

$$U_N = U(x), \tag{3.31}$$

onde o subíndice denota explicitamenete a dependência com o tamanho da rede e $x = l^{1/v}\varepsilon$ é denominada variável de escala. As funções $\widetilde{M}(x)$, $\widetilde{\chi}(x)$ e $\widetilde{U}(x)$ são chamadas de funções universais, no sentido que, toda a dependência com o tamanho do sistema, *N*,ocorre apenas atraves da variável *x* nestas funções.

É possível demonstrarmos que os momentos da distribuição P(m) obedecem à relação

$$\langle m^n \rangle = l^{-n\beta/\nu} \widetilde{M}_n(x).$$
 (3.32)

Partindo das definições (3.9) - (3.11) e da equação (3.32) é possível obtermos importantes relações para os expoentes críticos e para o comportamento das funções universais. Por exemplo, a relação (3.31) para o cumulante de Binder pode ser obtida a partir de sua definição e usando

$$U_{N} = 1 - \frac{\langle m^{4} \rangle}{3 \langle m^{2} \rangle^{2}}$$

$$= 1 - \frac{l^{-4\beta/\nu} \widetilde{M}_{4}(x)}{\left(l^{-2\beta/\nu} \widetilde{M}_{2}(x)\right)^{2}}$$

$$= 1 - \frac{\widetilde{M}_{4}(x)}{\left(\widetilde{M}_{2}(x)\right)^{2}}$$

$$= \widetilde{U}(x),$$
(3.33)

que é uma função apenas da variável x. Sendo assim, no ponto crítico, o cumulante de Binder não depende do tamanho da rede. Esta relação, em particular, será usada para a determinação do ponto crítico. Se construirmos um gráfico U(q) versus q para vários tamanhos de rede, mantendo fixos os demais parâmetros do sistema, teremos um cruzamento destas curvas no valor $q = q_c$, que corresponde a $\varepsilon = 0$. No entanto, o valor do cumulante neste ponto depende do sistema em estudo.

Uma estimativa para o expoente 1/v pode ser obtida a partir da derivada do cumulante de Binder. Tomando a derivada com respeito a ε ,

$$U'_{N} = \frac{\partial U(x)}{\partial \varepsilon} = \frac{\partial U(x)}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \varepsilon} = l^{1/\nu} \widetilde{U'}(x).$$
(3.34)

Se tomarmos o módulo e o logarítimo de ambos os lados, obteremos

$$ln(|U'_N(\varepsilon)|) = \frac{1}{\nu} ln(l) + ln(|\widetilde{U'}(x)|).$$
(3.35)

Assim, o gráfico de $ln(|U'_N(\varepsilon = 0)|)$ versus ln(l) é linear e o coeficiante angular dessa reta é igual ao expoente 1/v.

Para estimarmos $\beta/\nu e \gamma/\nu$ vamos considerar as funções auxiliares $\Phi e \Psi$ que relacionam, respectivamente, á magnetização e á susceptibilidade para dois tamanhos de rede diferentes N_1 e N_2 , definidas por

$$\Phi_{N_1,N_2} = -b^{-1} ln \left(\frac{M_{N_2}}{M_{N_1}}\right)$$
(3.36)

$$\Psi_{N_1,N_2} = b^{-1} ln\left(\frac{\chi_{N_2}}{\chi_{N_1}}\right),\tag{3.37}$$

onde $b = ln(l_2/l_1)$ é conhecido na teoria de renormalização como fator de escala. A dependência com o parâmetro de ruído foi omitida por simplicidade.

Suficientemente próximo ao ponto crítico, podemos substituir a equação (3.29) em (3.36), obtendo

$$\Phi_{N_2,N_1} = \frac{\beta}{\nu} - b^{-1} ln \left(\frac{\widetilde{M}(x_1)}{\widetilde{M}(x_2)} \right), \qquad (3.38)$$

onde $x_i = l_i^{1/\nu} \varepsilon$. No ponto crítico, $x_1 = x_2 = 0$, o que nos leva a $\Phi_{N_1,N_2} = \beta/\nu$. De forma análoga,

$$\Psi_{N_2,N_1} = \frac{\gamma}{\nu} + b^{-1} ln\left(\frac{\widetilde{\chi}(x_1)}{\widetilde{\chi}(x_2)}\right), \qquad (3.39)$$

portanto, $\Psi_{N_1,N_2} = \gamma/\nu \text{ em } q = q_c$. Assim, se construirmos um gráfico para $\Phi e \Psi \text{ em função do}$ ruído, usando diferentes valores para $N_1 e N_2$, estas curvas irão se interceptar em $q = q_c$, fornecendo estimativas independentes para o valor crítico do ruído e para o quociente dos expoentes $\beta/\nu e \gamma/\nu$.

Podemos ainda derivar a relação de *hiperescala* a partir da definição da susceptibilidade, de (3.30) e usando (3.32) obtemos a relação

$$\chi_{N} = N \left(\langle m^{2} \rangle - \langle m \rangle^{2} \right)$$

= $N l^{-2\beta/\nu} \left[(\widetilde{M}_{2}(x) - \widetilde{M}(x))^{2} \right] .$ (3.40)
= $l^{\gamma/\nu} \widetilde{\chi}(x)$

Adicionalmente vamos supor que a relação entre $l \in N$ seja da forma $N = l^d$, onde d é um número real positivo. Assim, em $\varepsilon = 0$, teremos a relação

$$2\beta/\nu + \gamma/\nu = d. \tag{3.41}$$

Esta úlima relação é denominada relação de hiperescala. Para redes regulares, o fator d é igual

á própria dimensão do espaço onde o sistema está embebido. Este último fato motiva a interpretação de d como sendo a dimensão efetiva para sistemas ambientados em redes complexas.

Próximo da transição iremos usar o seguinte ansatz para redes aleatórias

$$\xi_{finito} \sim l \sim N. \tag{3.42}$$

Utilizando (3.42) reescrevemos as relações de escala de tamanho finito e a relação de *hiperscala* em termos do tamanho do sistema *N*:

$$M_N = N^{-\beta/\nu} \widetilde{M}(x) \tag{3.43}$$

$$\chi_N = N^{\gamma/\nu} \widetilde{\chi}(x) \tag{3.44}$$

$$U_N = \widetilde{U}(x), \tag{3.45}$$

onde agora $x = N^{1/\nu} \varepsilon$ é a nossa variável de escala. Além disso a relação de *hiperescala* assume a forma

$$2\beta/\nu + \gamma/\nu = 1. \tag{3.46}$$

Aqui faz-se necessário uma breve refexão a respeito do *ansatz*. A dependência entre $l \, e \, N$ pode ser a mais geral possível, dependendo do sistema em consideração. Todas as conclusões prévias ao *ansatz* 3.42 independem da relação específica entre o número total de sítios e o comprimento característico do sistema. Portanto, não há conflitos entre esta suposição e os métodos demonstrados para a estimativa dos expoentes. A consistência desta hipótese será validada de acordo com a comparação com os resultados numéricos.

A tabela (3.1) resume as informações deste capítulo que, adicionalmente com a relação de *hiperscala* 3.46, serão testadas numericamente no próximo capítulo.

q	M_N	XN	U_N
$\rightarrow 1$	0	0	2/3
$\rightarrow q_c$	$\sim N^{-eta/ u}$	$\sim N^{\gamma/ u}$	$\sim N^0$
$\rightarrow 2/3$	$N^{-1/2}$	N^0 cte	1/3

Tabela 3.1 Resumo das informações contidas no capítulo 3.

CAPÍTULO 4 Resultados Numéricos

4.1 Algoritmos usados

4.1.1 Grafos Aleatórios

Um grafo aleatório de Erdös-Rényi [24, 25, 26] é definido como um conjunto de N vértices conectados por L ligações escolhidas ao acaso ou, de modo análogo, se um par de sítios escolhidos aleatoriamente do grafo está ligado com probabilidade $p = L/(N^2 - N)$. Uma outra definição mais usual é usarmos a conectividade média, z, que é o número médio de vizinhos que cada sítio possui. Seja k_i o número de vizinhos que um dado sítio i possui, então

$$z = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} k_i = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} p(N-1) = p(N-1).$$
(4.1)

A vizinhança do sítio *i* é definida como o conjunto de k_i vértices que se conectam diretamente com ele. Para gerarmos um grafo aleatório de tamanho *N* e conectividade média *z*, utilizamos o seguinte algoritmo:

- Sorteamos um par de sítios ij dos N(N-1) possíveis pares do grafo.
- Caso este par já esteja ligado, realizamos um novo sorteio. Caso contrário, estabelecemos uma ligação entre *i* e *j*.
- Repetimos o processo até que se obtenha um número total de zN/2 ligações.

Como cada ligação é feita de forma independente para cada par de sítios, a distribuição de ligações P(k), isto é, a probabilidade de que um dado sítio da rede se conecte com *k* vizinhos é

da foma binomial:

$$P(k) = \begin{pmatrix} N-1 \\ k \end{pmatrix} p^{k} (1-p)^{N-1-k}.$$
 (4.2)

As redes geradas em nossas simulações encontram-se no limite em que o número de vizinhos de um dado sítio é muito menor que o número total de elementos na rede, isto é, $z \ll N$. Assim, a probabilidade de dois vértices distintos *i j* estarem ligados é muito pequena, no sentido que, $p = z/(N-1) \ll 1$. Neste limite a distribuição Binomial (4.2) pode ser aproximada por uma distribuição de Poisson, dada por

$$P(k) \approx \frac{z^k}{k!} e^{-z}.$$
(4.3)

No intuito de comparar as distribuições de ligações dadas por (4.2) e (4.3) com a frequência relativa de ligações obtidas nos grafos gerados pelo algoritmo, construímos os gráficos contidos na figura 4.1 (a), (b) e (c). A concordância entre os valores previstos e os resultados do algoritmo é notória para todos os valores de *N* e *z* usados.

Devido à estrutura aleatória dos grafos, existe uma probabilidade não nula de que alguns sítios estejam desconectados entre si, isto é, não há um Â'Â'caminho" entre eles. Conjuntos de vertices ligados apenas entre si formam ilhas isoladas. Para $N \rightarrow \infty$ a fração de sítios que pertencem a alguma ilha de tamanho *n* é dada por

$$F_n(z) = \frac{n^{(n-1)}}{z \, n!} (z e^{-z})^n. \tag{4.4}$$

À maior destas ilhas damos o nome de ilha gigante ou grafo principal. As ilhas menores, uma vez que são desconectadas do maior aglomerado, não contribuem para a dinâmica do grafo principal e devem ser excluídas do sistema. Ainda no limite termodinâmico, a fração de sítios na ilha gigante é dada por

$$G(z) = 1 - \sum_{n=1}^{\infty} F_n(z).$$
(4.5)



Figura 4.1 Distribuição de ligações para (a) z = 50 e (b) z = 2 geradas a partir de redes de tamanho N = 2000. Em (c) o número de sítios com conectividade k para redes com z = 10 e tamanhos 1000, 4000 e 10000, de baixo para cima. Os resultados das simulações são comparados com as distribuições de Poisson e Binomial com mesmo valor de z. Em (d) a fração de sítios no grafo principal gerados com N = 2000. Todos os gráficos foram gerados tomando médias sobre 100 redes.

No intuito de eliminar as ilhas menores do sistema usamos um algoritmo de marcação de caminho:

- Escolhemos um sítio e deixamos uma marcação neste, indicando que ele já foi visitado.
- Visitamos todos os seus vizinhos, trilhando todos os caminhos possíveis, deixando a mesma marca de visita em cada sítio.
- Escolhemos um sítio que ainda não tenha sido visitado, e com uma marca diferente repetimos o processo até que não hajam sítios sem identificações.
- A marca que contiver mais sítios é o grafo principal.

Para comparação, construimos o gráfico G(z) versus z que relaciona a fração de sítios no grafo principal com a conectividade média do grafo (figura 4.1 (d)). Comparamos os valores obtidos a partir da equação (4.5) com os resultados do nosso algoritmo. Observe que o valor mínimo da conectividade média para a ocorrência de um aglomerado gigante, e portanto para a existência de ordem, é z = 1. Novamente a concordância é notável.

4.1.2 Simulações Monte Carlo

Assim como descrito no capítulo 1, partindo de uma configuração inicial arbitrária, o sistema evolui no tempo e, após um transiente de relaxação t_r , atinge o estado de equilíbrio. No estado de equilíbrio, calculamos as médias das gandezas de interesse sobre um tempo suficientemente grande, onde a frequência relativa com que o valor de uma dada grandeza ocorre é igual a probabilidade de equilíbrio deste valor ocorrer.

O primeiro passo então é definirmos o algoritmo usado para implementar a dinâmica do modelo.

 Após gerarmos a rede, escolhemos uma opinião para cada indivíduo, sendo este o nosso estado inicial.

- Escolhemos aleatoriamente um sítio *i* na rede e um estado alvo α. Dado a vizinhaça deste sítio, σ, calculamos as probabilidades condicionais P(α|σ), P(α+1|σ) e P(α+2|σ), onde α + n ≡ (α + n) mod 3.
- Geramos um número aleatório η ∈ [0,1] e comparamos com as probabilidades condicionais calculadas, realizando as atualizações:
 - Se η < P(α|σ), σ_i = α.
 Se P(α|σ) < η < 1 P(α+2|σ), σ_i = α + 1.
 Caso contrário σ_i = α + 2.

Definimos um passo de Monte Carlo (de sigla em inglês *MCS*) como o sorteio de *N* sítios. Esta é a escala de tempo própria do algoritmo. Assim, uma unidade de tempo é definida como o tempo necessário para que, em média, todos os sítios da rede sejam atualizados.

No sentido de determinar o tempo de relaxação do sistema, analisamos o comportamento temporal do módulo do vetor opinião e de suas componentes, partindo de configurações diferentes e caracterizando o tempo de relaxação como o tempo necessário para que os valores destas grandezas no tempo $t > t_r$ estejam distribuídas em torno de um valor médio.

Após o tempo de relaxação, repetimos a dinâmica por um tempo T e realizamos as médias das funções de interesse

$$\langle f(\boldsymbol{\sigma}) \rangle_t = \frac{1}{T} \sum_{t>t_r}^{t_r+T} f(\boldsymbol{\sigma}(t)).$$
 (4.6)

Assim como o tempo de relaxação, t_r , o período de tempo T também é determinado de forma empírica. Acompanhamos a evolução das médias em função de T, isto é, tomando médias em intervalos de tempo cada vez maiores, e determinamos T como o tempo a partir do qual a inclusão de novos valores às médias não apresenta contribuições significativas a esta.

Como a estrutura dos grafos tem natureza aleatória, precisamos tomar médias das grandezas calculadas sobre diferentes amostras de redes, de modo a evitar flutuações estatísticas. O algoritmo total usado é descrito em sequência.

- Para N, z e q fixos, geramos um grafo e realizamos a dinâmica durante T + t_r MCS.
 Descartamos os primeiros t_r passos e calculamos as médias, e suas flutuações, nos T
 MCS seguintes.
- Para o mesmo conjunto de parâmetros repetimos o processo para *M* amostras, gerando uma nova rede em cada amostra.
- Tomamos médias das (médias) grandezas de interesse sobre as *M* redes geradas. A flutuação nas médias amostrais das flutuações no tempo são uma estimativa para o erro cometido.

Em nossas simulações geramos redes de tamanhos *N* entre 1000 e 10000 sítios, com conectividade média *z* entre 2 e 50. Como a determinação para o tempo de relaxação e o tempo sobre o qual tomamos as médias é empírica, foram usados diferentes valores para cada tríade N, z, qa depender da convergência, visando uma economia de tempo computacional. Tipicamente usamos $t_r > T > 5000 MCS$. Para conectividades z > 5 usamos 100 amostras de grafos distintos e 150 amostras para $z \le 5$. Para todas as simulações que realizamos, o estado inicial de cada sítio foi escolhido aleatoriamente dentre as três possibilidades com igual probabilidade.

4.2 Grandezas de interesse

4.2.1 Magnetização

Na figura 4.2 mostramos o comportamento do parâmetro de ordem do sistema em função do parâmetro de ruído em redes de diversos tamanhos e conectividade z = 8. Vemos que a magnetização do sistema assume o valor M = 1 na ausência de ruído, assim como esperado. Observamos também que M é uma função contínua do ruído, existindo uma região onde sua variação é mais acentuada, indicando a ocorrência de uma transição ordem-desordem. Nessa região



Figura 4.2 Parâmetro de ordem do sistema em função do parâmetro de ruído para z = 8 e N = 1000, 2000, 4000 e 6000 sítios de baixo para cima. No detalhe da figura acompanhamos $M_N(q = 2/3)$ em função dos tamanhos das redes com a mesma conectividade e N = 1000, 2000, 4000, 6000 e 10000. A linha sólida é o melhor ajuste linear e a tracejada ilustra a extrapolação para o limite termodinâmico.

a magnetização assume valores decrescentes com o tamanho do sistema, sugerindo uma tendência a zero no limite termodinâmico $(N \rightarrow \infty)$. Além disso, note que a dependência com N só é significativa após a transição. No detalhe da figura analisamos o comportamento de $M_N(q = 2/3)$ com $N^{-1/2}$. O excelente ajuste linear para os pontos confirma a dependência prevista no capítulo 4 para esta grandeza.

Na figura 4.3 podemos ver o parâmetro de ordem do sistema para N = 4000 e diversos valores de conectividade. Vemos que em todos os valores de conectividade estudados temos a ocorrência de uma transição ordem-desordem no sistema. É possível concluir também que o valor onde a transição ocorre é uma função crescente de *z*, ou seja, o aumento do número médio de vizinhos de cada sítio favorece a ocorrência de ordenamento no sistema. Em nossas



Figura 4.3 Parâmetro de ordem do sistema em função do parâmetro de ruído para N = 4000 e z = 2, 4, 6, 8, 10, 20, 30 e 50, da esquerda para a direita.

simulações verificamos que em q = 2/3 a magnetização independe da conectividade, o que está de acordo com a nossa análise feita no capítulo 4.

4.2.2 Susceptibilidade

Na figura 4.4 construímos o gráfico da susceptibilidade em função de q em redes com conectividade z = 8 e diversos tamanhos. Os resultados das simulações confirmaram as previsões $\chi_N(q=0) = 0$ e $\chi_N(q=2/3) = 0,09135(5)$. De forma similar à magnetização, a susceptibilidade demonstra ter um comportamento suave, exceto para o intervalo do parâmetro de ruído que identificamos como a região crítica. O valor da susceptibilidade nesta região é uma função crescente de *N*, sugerindo uma divergência no limite $N \rightarrow \infty$. Este comportamento é compatí-


Figura 4.4 Susceptibilidade em função do parâmetro de ruído para z = 8 e N = 1000, 2000, 4000 e 6000 sítios.

vel com o aumento na correlação entre os sítios da rede: flutuações estatísticas na opinião de alguns poucos indivíduos levam a flutuações nas opiniões de todos os indivíduos do sistema. Os comportamentos observados para o parâmetro de ordem e para sua flutuação caracterizam uma transição de fase de segunda ordem. O valor do ruído onde ocorre a divergência apresenta dependência com o tamanho da rede, devido a efeitos de tamanho finito do sistema. Isto indica que a transição ocorre em um valor efetivo $q_c(N) < q_c(\infty)$. A partir do gráfico, concluímos também que a dependência da susceptibilidade com o tamanho do sistema se resume à região próxima ao ponto crítico.

Analisamos também o comportamento da susceptibilidade para diferentes valores da conectividade. Na figura 4.5 acompanhamos $\chi_N(q)$ para N = 4000 sítios e vários valores de *z*. Vemos que o valor máximo para as flutuações são uma função decrescente da conectividade



Figura 4.5 Susceptibilidade em função do parametro de ruído para N = 4000 e z = 2, 4, 6, 8, 10, 20, 30 e 50, da esquerda para a direita.

média, sugerindo que o aumento no número de ligações por sítio diminui as flutuações no sistema para um mesmo valor de N. Notamos ainda que o valor limite $\chi(q = 2/3)$ não apresenta dependência com a conectividade.

4.2.3 O cumulante de Binder

Calculamos o cumulante de quarta ordem de Binder com o objetivo de obter os valores críticos do parâmetro de ruído q_c onde a transição ocorre. Segundo a análise feita no capítulo 3, o valor do cumulante no ponto crítico é independente do tamanho do sistema, ou seja, para grafos de tamanhos diferentes e mesma conectividade, as curvas de $U_N(q)$ interceptam-se em $q = q_c$.

Na figura 4.6 são apresentadas as curvas para $U_N(q)$ em grafos com z = 8. Vemos que



Figura 4.6 Cumulante de quarta ordem de Binder em função do parametro de ruído para z = 8 e N = 1000, 2000, 4000 e 6000 sítios (do menor para o maior valor de U_{min}). No detalhe da figura podemos ver mais claramente o cruzamento das curvas.

nos limites q = 0 e q = 2/3, o cumulante assume os valores 2/3 e 1/3, respectivamnete, confirmando nossas previsões. Além disso, note que estes valores se estendem por uma região próxima aos valores limites, indicando que possíveis correções na função distribuição de probabilidade, P(m), tem contribuição nula na razão $\langle m^4 \rangle / (\langle m^2 \rangle)^2$ presente na definição do cumulante de quarta ordem de Binder. No detalhe da figura temos o cruzamento das curvas, que ocorrem nos valores $q_c = 0.347(2)$ e $U^* = U(q = q_c) = 0.41(1)$ para este valor de conectividade. Os erros de cada grandeza são obtidos pela diferença entre o valor máximo e o mínimo dos cruzamentos. Durante a análise dos dados notamos que o valor onde ocorre o cruzamento das curvas para dois tamanhos diferentes N_1 e N_2 , apresenta uma leve dependência com o parâmetro $\overline{N} = (N_1 + N_2)/2$, a qual tende a se anular quando tomamos redes maiores. Acreditamos que essa dependência ocorre devido a correções de ordem superior na relação de escala (3.45).



Figura 4.7 Cumulante de quarta ordem de Binder para os tamanhos N = 1000, 2000, 4000, e 6000 (do menor para o maior valor de $|U_{min}|$) e conectividades z = 8, 10, 20 e 30 da (esquerda para a direita). A linha tracejada indica o valor $U^* = U(q_c) = 0.41$.

Logo após a transição, o cumulante possui um mínimo, cujo módulo, $|U_{min}|$, é uma função crescente de N. Este comportamento sugere que $\langle m^4 \rangle$ decresce mais lentamente do que $(\langle m^2 \rangle)^2$ à medida que aumentamos N.

Na figura 4.7 acompanhamos o cumulante de quarta ordem de Binder para os valores z = 8, 10, 20 e 30 em tamanhos de redes distintos. Como já observado, o valor crítico do ruído é uma função crescente da conectividade média. Note, contudo, que o valor crítico do cumulante, U^* , não apresenta dependência da conectividade. Estimamos $U^* = 0.41(2)$ para todos os tamanhos e conectividades estudadas (vide tabela 4.1).



Figura 4.8 Diagrama de fases para o 3-MVM comparado com os resultados para o 2-MVM reproduzido de [34]. Para os pontos (z,q) abaixo da linha o sistema se encontra em um estado ordenado, para pontos acima temos a fase desordenada. As retas são apenas guias para os olhos.

4.3 Diagrama de fases

A partir do cumulante de Binder estimamos o valor crítico do parâmetro para diversos valores de conectividade média, reunindo-os na tabela 4.1, juntamente com os valores críticos do cumulante de Binder.

Com os valores da tabela construímos o diagrama de fases no plano q versus z, apresentado na figura 4.8. Comparamos o diagrama de fases do nosso modelo com o diagrama obtido na referência [34] para o modelo do voto da maioria com dois estados (2-MVM) em grafos aleatórios de Erdös-Rényi, que também apresenta uma transição do tipo ordem-desordem de segunda ordem. Assim como neste trabalho anterior, a variação da curva crítica, $q_c(z)$, é mais

4.4 EXPOENTES CRÍTICOS

Ζ	q_c	U^*
2	0.084(5)	0.41(2)
4	0.228(1)	0.40(2)
6	0.3015(5)	0.40(1)
8	0.347(2)	0.41(1)
10	0.3785(2)	0.40(1)
12	0.3999(1)	0.40(2)
20	0.4586(5)	0.41(2)
30	0.4957(1)	0.42(1)
50	0.533(1)	0.42(2)

Tabela 4.1 Valores críticos do parâmetro de ruído e do cumulante de Binder para vários valores da conectividade média z.

acentuada para valores pequenos de conectividade. Note que em ambos os modelos os valores máximos obtidos para o parâmetro de ruído crítico são menores que os correspondentes valores máximos permitidos: 1/2 para 2 - MVM e 2/3 para 3 - MVM. Contudo, para um determinado valor de *z*, o valor crítico do ruído é maior para o 3-MVM, sugerindo que o aumento no número de escolhas possíveis favorece a formação de ordem no sistema.

4.4 Expoentes críticos

Assim como discutido no capítulo 3, o módulo da derivada do cumulante de Binder no ponto crítico pode ser usado para estimar o valor do expoente 1/v. No gráfico da figura 4.9 vemos o comportamento de $ln(|U'(q_c)|)$ em função de ln(N). Durante a nossa análise notamos que o comportamento de $ln(|U'(q_c)|)$ não apresenta uma dependência clara com z, o que se traduzia em curvas superpostas. Para melhor visualização adicionamos a cada curva o valor de z, constriundo o gráfico na figura. O valor do expoente 1/v é estimado pela inclinação das curvas obtidas por um ajuste linear dos pontos. Os resultados assim obtidos para vários valores da conectividade estão reunidos na tabela 4.2. O erro na estimativa é dado pela incerteza no coeficiente angular do ajuste linear.



Figura 4.9 Acompanhamento de derivada do cumulante de Binder em função do tamanho de rede para um *z* fixo. De baixo para cima z = 2, 4, 6, 8, 10, 20, 30, 50. Adicionamos o valor de *z* ao eixo das coordenadas das respectivas curvas. Os pontos são os valores numéricos e as linhas os melhores ajustes lineares obtidos.

Para estimar os quocientes $\beta/\nu e \gamma/\nu$ entre os expoentes utilizamos as funções Φ_{N_1,N_2} e Ψ_{N_1,N_2} , respectivamente, definidas nas equações (3.36) e (3.37). Para z = 8 e vários valores de *N* mostramos o comportamento destas funções com o parâmetro de ruído nas figuras 4.10 e 4.11.

A partir das intersecções das curvas para Φ , estimamos $\beta/v = 0.21(2)$ e $q_c = 0.348(2)$ para este valor de conectividade. Note que o valor estimado para q_c é ligeiramente maior que o obtido pelo cumulante de Binder. Este comportamento foi observado de forma sistemática em todos os valores de *z* estudados, decrescendo com o aumento dos tamanhos de rede usados. Devido ao comportamento bem determinado, acreditamos que esta discrepância tenha origem em correções de ordem superior para a forma escalada da magnetização (vide equações (3.43)-

4.5	COL	APSO	DE	DA	DC	S

Z	eta/v	γ/ν	1/v	D_{eff}
2	0.15(3)	0.75(2)	0.81(6)	1.05(8)
4	0.20(1)	0.65(1)	0.94(5)	1.05(3)
6	0.198(5)	0.66(5)	0.89(7)	1.06(6)
8	0.21(2)	0.62(5)	0.88(2)	1.04(9)
10	0.22(2)	0.68(2)	0.90(2)	1.12(6)
12	0.22(2)	0.66(2)	0.91(2)	1.1(6)
20	0.205(5)	0.67(2)	0.95(1)	1.07(3)
30	0.22(1)	0.66(2)	0.95(2)	1.1(3)
50	0.22(2)	0.64(7)	0.92(2)	1.08(6)

Tabela 4.2 Valores dos quocientes entre os expoentes: β/ν , $\gamma/\nu e 1/\nu$ para os valores da conectividade média estudados. Na última coluna calculamos a dimensão efetiva através da relação de *hiperescala*

(3.45)).

A partir das intersecções das curvas para Ψ , estimamos $\gamma/\nu = 0.62(5)$ e $q_c = 0.349(3)$ para este valor de conectividade. Aqui termos corretivos de ordem superior também geram uma ligeira diferença nas estimativas para o parâmetro de ruído crítico. Os erros de cada grandeza são obtidos pela diferença entre o valor máximo e o mínimo dos cruzamentos. O comportamento crítico apresentado pelas funções Φ , Ψ e pela derivada do cumulante de Binder estão de pleno acordo com o nosso *ansatz* $\xi_{finito} \sim N$.

Resumimos na tabela 4.2 os valores para os quocientes entre os expoentes críticos calculados para os valores de conectividade estudados. Não conseguimos, dentro dos limites de erro, determinar a existência de uma relação entre os quocientes dos expoentes críticos e a conectividade média da rede, estando todas as flutuações dentro dos limites de erro das tecnicas utilizadas. Note que a dimensão efetiva assume valores muito próximos da unidade, o que novamente confirma nossa hipótese de dependência entre o comprimento de correlação e o tamanho do sistema.



Figura 4.10 Dependência da função Φ_{N_1,N_2} com o ruído, para z = 8 e tamanhos de redes indicados. As linhas são os melhores ajustes polinomiais de terceira ordem.



Figura 4.11 Dependência da funccão Ψ_{N_1,N_2} com o parâmetro de ruído, para z = 8 e tamanhos de redes indicados. As linhas são os melhores ajustes polinomiais de terceira ordem.



Figura 4.12 Colapso de dados para o parâmetro de ordem com z = 8 e N = 1000, 2000, 4000, 6000 e 10000.

Colapso de dados 4.5

Como confirmação dos resultados até aqui obtidos, vamos submeter os valores estimados para o valor crítico do parâmetro de ruído e para os expoentes ao teste do colapso de dados para a magnetização e para o cumulante de Binder.

De acordo com as equações (3.43)-(3.45), podemos escrever as funções universais da magnetização e do cumulante de Binder como

$$\widetilde{M}(x) = N^{\beta/\nu} M_N(q) \tag{4.7}$$

$$\widetilde{U}(x) = U_N(q), \tag{4.8}$$



Figura 4.13 Colapso de dados para o cumulante de quarta ordem de Binder com z = 8 e N = 1000, 2000, 4000, 6000 e 10000.

onde $x = N^{1/\nu}(q - q_c)$ é a variável de escala.

Isto significa que fazendo a transformação adequada nos eixos de cada gráfico, teremos como resultado o gráfico de uma função universal, com todas as curvas superpostas. A região de colapso das curvas deve se estenter por toda a região crítica, onde as hipóteses de reescala são válidas. Para a magnetização, por exemplo, fazemos as seguintes transformações:

Coordenadas :
$$q \to N^{1/\nu}(q - q_c)$$

Abscissas : $M_N \to N^{\beta/\nu} M_N$, (4.9)

Na figura 4.12 apresentamos o colapso de dados para o parâmetro de ordem do sistema em grafos de conectividade média z = 8 e vários tamanhos de rede. Para este colapso foram usados os valores $\beta/\nu = 0.2105$, $1/\nu = 0.901$ e $q_c = 0.347$, que estão dentro da margem de erro dos

valores das tabelas 4.1 e 4.2 para este valor de conectividade. O bom colapso resultante é uma confirmação de que realizamos boas estimativas para essas quantidades. A região de colapso se estende por seis décadas de valores da variável escalada x.

Na figura 4.13 apresentamos o colapso para o cumulante de Binder para z = 8 e vários tamanhos de rede. Os colapsos foram obtidos usando $q_c = 0.3465$ e 1/v = 0.891. Novamente temos um bom colapso de dados, o que confirma nossas estimativas para estas quantidades. Note, entretaanto, que o colapso do cumulante de Binder se estende apenas por valores negativos da variável escalada. Assim como discutido, os valores do cumulante logo após o valor crítico do ruído exibem um mínimo, U_{min} , que apresenta dependência com o tamanhanho da rede.

As propriedades do cumulante de Binder estudadas, U^* e da derivada, exibiram comportamento independente da conectividade média das redes. Por outro lado, usamos o cumulante para estimar outras duas quantidades $q_c e 1/v$, que estão reunidas na variável de escala $x = N^{1/v}(q - q_c)$. Isso nos leva a concluir que, nesta variável, o cumulante de Binder deve ser uma função universal tanto para o tamanho da rede gerada, quanto para a conectividade média. Propusemos então um colapso de dados não usual. Com *N* fixo, realizamos a mudança de escala no eixo das abscissas utilizando para a curva correspondente a *z* os respectivos valores para $q_c e 1/v$, contidos nas tabelas 4.1 e 4.2, respectivamente. Na figura 4.14 mostramos os resultados para o colapso. Os valores usados estão muito próximos dos valores contidos nas tabelas, o que consolida nossos resultados para todas as conectividades estudadas. Note também que o colapso se estende apenas por valores negativos da variável escalada, uma vez que U_{min} apresenta dependência com a conectividade.



Figura 4.14 Colapso de dados para o cumulante de quarta ordem de Binder com N = 4000 fixo e z = 4, 6, 8, 10, 20, 30, 50.

CAPÍTULO 5 Conclusões

Propusemos uma generalização do modelo do voto da maioria com três estados para incluir aplicações em redes complexas. As novas regras definidas se resumem às regras conhecidas para o caso de redes quadradas. Além disso, mostramos que o modelo apresenta irreversibilidade microscópica e ergodicidade, assim como as realizações anteriores do modelo. Estudamos analiticamente as propriedades do sistema, nos limites q = 0 e q = 2/3, e obtivemos expressões válidas em qualquer rede onde o modelo seja implementado. Mostramos ainda que na região crítica o *ansatz* $\xi \sim N$ nos conduz a uma dimensão efetiva $d_{eff} = 1$.

Estudamos o comportamento do sistema através de simulações de Monte Carlo e teoria de escala de tamanho finito. Os resultados das simulações estão de pleno acordo com as previsões analíticas para os limites de ordem e de desordem. O estudo do parâmetro de ordem, da susceptibilidade e do cumulante de Binder nos permitiram concluir a existência de uma transição de fase de segunda ordem, no valor $q = q_c(z)$ do parâmetro de ruído do sistema. Nossas simulações mostraram que o valor crítico no qual ocorre a transição de fase é uma função crescente da conectividade média dos grafos. Construímos o diagrama de fases e calculamos os expoentes críticos do modelo. Os valores obtidos para os expoentes críticos sugerem que o modelo pertence a uma nova classe de universalidade.

Dois resultados em particular chamaram nossa atenção: O colapso não usual proposto para o cumulante de quarta ordem de Binder, para um tamanho de rede fixo, e o mínimo observado U_{min} para este cumulante. Acreditamos que ambos os resultados estejam ligados à topologia das redes. Estudos semelhantes ao que desenvolvemos em outros tipos de redes são necessários no sentido de elucidar esses pontos.

Referências Bibliográficas

- C. Castellano, S. Fortunato and V. Loreto. *Statistical physics of social dynamics*. Rev. Mod. Phys. 81, 591 (2009)
- [2] A.-L. Barabási and R. Albert. *Statistical mechanics of complex networks*. Rev Mod. Phys. 74, 47 (2002).
- [3] D. J. Watts. *Networks, Dynamics, and the Small-World Phenomenon*. American J. Sociology **105**, 493 (1999).
- [4] P. Clifford and A. Sudbury. A model for spatial conflict. Biometrika 60, 581 (1973).
- [5] R. Holley and T. Liggett. Ergodic theorems for weakly interacting systems and the voter model. Ann. Probab. 3, 643 (1975).
- [6] P. L. Krapivsky and S. Redner. *Dynamics of Majority Rule in Two-State Interacting Spin Systems*. Phys. Rev. Lett. 90, 238701 (2003).
- [7] M. J. de Oliveira. *Isotropic majority-vote model on a square lattice*. J. Stat. Phys. 66, 273 (1992).
- [8] R. Axelrod. The dissemination of culture: A model with local convergence and global polarization. J. Conflict Resolut. 41, 203 (1997).
- [9] C. Castellano, M. Marsili and A. Vespignani. Nonequilibrium Phase Transition in a Model for Social Influence. Phys. Rev. Lett. 85, 3536 (2000).

- [10] K. Klemm, V. M. Eguíluz, R. Toral and M. S. Miguel. Nonequilibrium transitions in complex networks: A model of social interaction. Phys. Rev. E 67, 026120 (2003).
- [11] K. Suchecki, V. M. Eguíluz and M. S. Miguel. *Voter model dynamics in complex networks: Role of dimensionality, disorder, and degree distribution*. Phys. Rev. E 72, 036132 (2005).
- [12] K. Suchecki and J. A. Holyst. Voter model on Sierpinski fractals. Physica A 362, 338 (2006).
- [13] C. Castellano, D. Vilone and A. Vespignani. *Incomplete ordering of the voter model on small-world networks*. Europhys. Lett. 63, 153 (2003).
- [14] M. A. Bab and E. V. Albanoa. *Dynamic behavior of the voter model on fractals: logarithmic-periodic oscillations as a signature of time discrete scale invariance*. Eur. Phys. J. B 63, 521 (2008).
- [15] S. H. Strogatz. Exploring complex networks. Nature 410, 268 (2001).
- [16] S. N. Dorogovtsev, and J. Mendes. Evolution of networks. Adv. Phys. 51, 1079 (2002).
- [17] S. N. Dorogovtsev, A. V. Goltsev and J. F. F. Mendes. *Critical phenomena in complex networks*. Rev Mod. Phys 80, 1275 (2008).
- [18] S. N. Dorogovtsev, J. J. F. Mendes, Evolution of Networks: From Biological Nets to the Internet and WWW. Oxford University Press, (2003).
- [19] S. Boccalettia, V. Latorab, Y. Morenod, M. Chavezf and D.-U. Hwanga. *Complex networks: Structure and dynamics*. Phys. Reports **424**, 175 (2006).
- [20] D. J. Watts and S. H. Strogatz. *Collective dynamics of small-world networks*. Nature **393**, 440 (1998).
- [21] M. E. J. Newman and D. J. Watts. Scaling and percolation in the small-world network model. Phys. Rev. E 60, 7332 (1999).

- [22] M. E. J. Newman and D.J. Watts. *Renormalization group analysis of the small-world network model*. Phys. Lett. A. 263, 341 (1999).
- [23] A.-L. Barabási and R. Albert. *Emergence of Scaling in Random Networks*. Science 286, 509 (1999).
- [24] P. Erdös and A. Rényi. On Random Graphs. I. Publicationes Mathematicae 6, 290 (1959).
- [25] P. Erdös and A. Rényi. *The Evolution of Random Graphs*. Publ. Math. Inst. Hung. Acad. Sci. 5, 17 (1960).
- [26] B. Bollobás and P. Erdös. *Cliques in Random Graphs. Math.* Proc. Cambridge Phil. Soc. 80, 419, (1976).
- [27] M. C. Marques. Nonequilibrium Ising model with competing dynamics: A MFRG approach. Phys. Lett. A 145, 379 (1990).
- [28] T. Tomé, M. J. de Oliveira, M. A. Santos. Non-equilibrium Ising model with competing Glauber dynamics. J. Phys. A: Math. Gen. 24, 3677 (1991).
- [29] M. A. Santos and S. Teixeira. Anisotropic voter model. J. Stat. Phys. 78, 963 (1995).
- [30] J. F. F. Mendes and M. A. Santos. *Short-time dynamics of a two-dimensional majority vote model*. Phys. Rev. E **57**, 108 (1998).
- [31] N. G. F. Medeiros, A. T. C. Silva and F. G. B. Moreira. *Domain motion in the voter model with noise*. Phys. Rev. E 73, 046120 (2006).
- [32] W. Kwak, J.-S. Yang, J.-I. Sohn and I.-M Kim. *Does the Majority Voter Model Belong to the Ising Universality Class on Three Dimensions?* Phys. Rev. E **75**, 061110 (2007).
- [33] J.-S. Yang, I.-M. Kim and W. Kwak. Existence of an upper critical dimension in the majority voter model. Phys. Rev. E 77, 051122 (2008).

- [34] L. F. C. Pereira and F. G. B. Moreira. *Majority-vote model on random graphs*. Phys. Rev. E 71, 016123 (2005).
- [35] F. W. S. Lima, A. O. Sousa and M. A. Sumuor. *Majority-vote on directed Erdös-Rényi random graphs*. Physica A 387, 3503 (2008).
- [36] P. R. A. Campos, V. M. de Oliveira and F. G. B. Moreira. Small-world effects in the majority-vote model. Phys. Rev. E 67, 026104 (2003).
- [37] F. W. S. Lima, U. L. Fulco and R. N. Costa Filho. *Majority-vote model on a random lattice*. Phys. Rev. E 71, 036105 (2005).
- [38] F. W. S. Lima. *Majoriry-Vote on directed Barabási-Albert networks*. Int. J. Mod. Phys. C 17, 1257 (2006).
- [39] E. M. S. Luz and F. W. S. Lima. *Majority-vote on directed small-world networks*. Int. J. Mod. Phys. C 18, 1251 (2007).
- [40] F. W. S. Lima. *Majority-vote on undirected Barabási-Albert networks*. Commun. Comput. Phys. 2, 358 (2007).
- [41] Z.-X. Wu and P. Holme. *Majority-vote model on hyperbolic lattices*. Phys. Rev. E. 81, 011133 (2010).
- [42] A. O. Sousa and T. Y. Song, Phys. Rev. E (in press).
- [43] G. Grinstein, C. Jayaprakash and Y. He. Statistical Mechanics of Probabilistic Cellular Automata. Phys. Rev. Lett. 55, 2527 (1985).
- [44] A. Brunstein and T. Tomé. Universal behavior in an irreversible model with C_{3v} symmetry. Phys. Rev. E 60, 3666 (1999).
- [45] T. Tomé and A. Petri. Cumulants of the three-state Potts model and of nonequilibrium models with C_{3v} symmetry. J. Phys. A 35, 5379 (2002).

- [46] F. Y. Wu. The Potts Model. Rev. Mod. Phys. 54, 235 (1982).
- [47] Paul L Meyer. Probabilidade: aplicações á estatística. Rio de Janeiro, Livros Técnicos e Científicos (1978).
- [48] Pedro Alberto Morettin. *Introdução á estatística para ciências exatas*. São Paulo, Atual (1981).
- [49] Tânia Tomé e Mário José de Oliveira. *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade*. Edusp, São Paulo (2001).
- [50] Elon Lages Lima. Álgebra linear. Rio de Janeiro, Impa (2006).
- [51] D. O. Hall. Fotossíntese. Paperback, Nova York (1980).
- [52] Beretta, G. P. Modeling Non-Equilibrium Dynamics of a Discrete Probability Distribution: General Rate Equation for Maximal Entropy Generation in a Maximum-Entropy Landscape with Time-Dependent Constraints. Entropy **10**, 160 (2008).
- [53] F. Reif. Fundamentals of statistical and thermal physics. Kogakusha company (1965).
- [54] k. Binder and D.P. Landau A Guide To Monte Carlo Simulations In Statistical Physics. Cambridge University Press (2000).
- [55] J. M. Yeomans. Statistical Mechanics of Phase Transitions. Oxford Science Publications, New York (2000).
- [56] M. E. J. Newman and G. T. Barkema Monte Carlo Methods In Statistical Physics. Oxford University Press, New York (1999).
- [57] S. H. Strogatz. Nonlinear dynamics and chaos: with applications to physics, biology, chemistry and engineering. Perseus, New York (1994).

- [58] H. E. Stanley. *Introduction to phase transition and critical phenomena*. Oxford University Press, Oxford (1971).
- [59] F. G. B. Moreira. Notas de aula do curso *Transições de fase e fenômenos críticos*. Programa de pós graduação em física - DF - UFPE, Recife (2009).

Livros Grátis

(<u>http://www.livrosgratis.com.br</u>)

Milhares de Livros para Download:

Baixar livros de Administração Baixar livros de Agronomia Baixar livros de Arquitetura Baixar livros de Artes Baixar livros de Astronomia Baixar livros de Biologia Geral Baixar livros de Ciência da Computação Baixar livros de Ciência da Informação Baixar livros de Ciência Política Baixar livros de Ciências da Saúde Baixar livros de Comunicação Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE Baixar livros de Defesa civil Baixar livros de Direito Baixar livros de Direitos humanos Baixar livros de Economia Baixar livros de Economia Doméstica Baixar livros de Educação Baixar livros de Educação - Trânsito Baixar livros de Educação Física Baixar livros de Engenharia Aeroespacial Baixar livros de Farmácia Baixar livros de Filosofia Baixar livros de Física Baixar livros de Geociências Baixar livros de Geografia Baixar livros de História Baixar livros de Línguas

Baixar livros de Literatura Baixar livros de Literatura de Cordel Baixar livros de Literatura Infantil Baixar livros de Matemática Baixar livros de Medicina Baixar livros de Medicina Veterinária Baixar livros de Meio Ambiente Baixar livros de Meteorologia Baixar Monografias e TCC Baixar livros Multidisciplinar Baixar livros de Música Baixar livros de Psicologia Baixar livros de Química Baixar livros de Saúde Coletiva Baixar livros de Servico Social Baixar livros de Sociologia Baixar livros de Teologia Baixar livros de Trabalho Baixar livros de Turismo