

**RENAN SERVAT SANDER**

**TRANSIÇÕES DE FASE PARA ESTADOS  
ABSORVENTES: UM ESTUDO EM REDES REGULARES  
E COMPLEXAS**

**Dissertação apresentada à Universidade Federal  
de Viçosa, como parte das exigências do Programa  
de Pós-Graduação em Física Aplicada, para  
obtenção do título *Magister Scientiae*.**

**VIÇOSA  
MINAS GERAIS - BRASIL  
2011**

**Ficha catalográfica preparada pela Seção de Catalogação e  
Classificação da Biblioteca Central da UFV**

T

S214t Sander, Renan Servat, 1986-  
2011 Transições de fase para estados absorventes : um estudo em  
redes regulares e complexas / Renan Servat Sander.  
– Viçosa, MG, 2011.  
xiii, 86f. : il. (algumas col.) ; 29cm.

Orientador: Silvio da Costa Ferreira Júnior.  
Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Viçosa.  
Referências bibliográficas: f. 83-86.

1. Mecânica - Estatística. 2. Fenômeno crítico.  
3. Transformações de fase. 4. Redes. 5. Termodinâmica de  
sistemas em não-equilíbrio. 6. Complexidade.  
I. Universidade Federal de Viçosa. II. Título.

CDD 22. ed. 531

RENAN SERVAT SANDER

TRANSIÇÕES DE FASE PARA ESTADOS ABSORVENTES: UM ESTUDO EM  
REDES REGULARES E COMPLEXAS

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada, para obtenção do título de *Magister Scientiae*.

APROVADA: 26 de julho de 2011.

---

Prof. Silvio da Costa F. Junior  
(Orientador)

---

Prof. Tiago José de Oliveira

---

Prof. Jürgen Fritz Stilck

---

Prof. Marcelo Lobato Martins

Aos meus pais, João Luiz e Ivone.

# Agradecimentos

Ao meu orientador, prof. Silvio Ferreira, pelos ensinamentos, pela atenção, apoio, paciência e sobretudo confiança.

Aos meus pais, João Luiz e Ivone, meu irmão Alexandre e minha tia Denise, pelo exemplo, formação e, em geral, por tudo que sempre fizeram por mim. Sem eles, eu não estaria aqui.

Aos meus amigos da época de república, Samuel, Vinicius, Jackson, Dodô, Cebola e Marcelo.

Aos colegas da Física, em especial aos grandes amigos da sala 211 e demais amigos da pós-graduação, como Angélica, Priscila, Bira, Ronan, etc.

Aos professores do Departamento de Física, pela formação acadêmica.

Ao GISC pelo suporte computacional.

À Universidade Federal de Viçosa.

À CAPES, ao CNPq e à FAPEMIG pelo suporte financeiro.

# Sumário

<b>Lista de Figuras</b>	<b>ix</b>
<b>Lista de Tabelas</b>	<b>x</b>
<b>Resumo</b>	<b>xi</b>
<b>Abstract</b>	<b>xii</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2 Redes Complexas</b>	<b>4</b>
2.1 Conceitos fundamentais em teoria de grafos . . . . .	4
2.2 Caracterização estatística de grafos . . . . .	8
2.3 Modelos clássicos de redes . . . . .	12
2.3.1 Grafo Aleatório . . . . .	13
2.3.2 O modelo de Watts-Strogatz . . . . .	14
2.3.3 O modelo de Barabási-Albert . . . . .	16
2.3.4 Modelo de configurações . . . . .	18
<b>3 Transições de fase para estados absorventes</b>	<b>21</b>
3.1 Processos dinâmicos . . . . .	21
3.1.1 A equação mestra . . . . .	21
3.2 Processos em equilíbrio . . . . .	23
3.2.1 Transições de Fase . . . . .	24
3.3 Processos fora do equilíbrio . . . . .	25
3.4 Universalidade . . . . .	27
3.4.1 Expoentes críticos . . . . .	27

3.5	Processo de contato . . . . .	29
3.5.1	Criticalidade . . . . .	30
3.5.2	Teoria de escala . . . . .	33
3.5.3	Escalonamento de tamanho finito . . . . .	36
3.5.4	Teoria de campo médio . . . . .	39
3.6	Percolação direcionada . . . . .	41
3.6.1	A conjectura PD . . . . .	43
3.7	Métodos de simulação . . . . .	44
3.7.1	Estado quase-estacionário . . . . .	45
3.7.2	O método de simulação quase-estacionária . . . . .	46
3.8	Razões entre momentos e cumulantes . . . . .	47
3.9	Processo de contato em redes sem escala . . . . .	49
3.10	Processo de contato por pares . . . . .	53
<b>4</b>	<b>A classe de percolação direcionada em três dimensões</b>	<b>56</b>
4.1	Modelos . . . . .	56
4.2	Simulações quase-estacionárias . . . . .	57
4.3	Resultados para $d = 3$ . . . . .	59
<b>5</b>	<b>Um processo de reação-difusão com infinitos estados absorventes em redes regulares e complexas</b>	<b>65</b>
5.1	Análise em redes regulares . . . . .	65
5.1.1	Aproximação de campo médio . . . . .	67
5.1.2	Simulações . . . . .	69
5.2	Análise na rede heterogênea . . . . .	72
5.2.1	Teoria de campo médio heterogênea . . . . .	72
5.2.2	Simulações . . . . .	75
<b>6</b>	<b>Considerações Finais</b>	<b>81</b>
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>83</b>

# Lista de Figuras

2.1	As pontes da cidade de Königsberg. Figura retirada de < <a href="http://www.mathsreach.org/Careers">http://www.mathsreach.org/Careers</a> >.	5
2.2	À esquerda, um mapa simplificado do centro da cidade de Königsberg, como era na época de Euler. À direita, sua representação como um grafo. Figuras retiradas de [4].	5
2.3	Representação gráfica de um grafo. Figura retirada de < <a href="http://www.uh.edu/engines/">http://www.uh.edu/engines/</a> >.	6
2.4	Diferenças básicas entre redes aleatórias e redes sem escala. Adaptado de [9] e [10].	17
2.5	Distribuição de conexões $P(k)$ para uma rede Barabási-Albert.	18
2.6	Gráfico $k_{nn} \times k$ gerado para $N = 10000$ e $m = 6$ .	20
2.7	Gráfico $P(k) \times k$ gerado com os mesmos parâmetros da figura anterior.	20
3.1	Gráfico que ilustra a transição de fase em um ferromagneto, com campo externo nulo. Figura retirada de [13].	25
3.2	Um simples processo de três estados. Os estados <b>1</b> e <b>2</b> são transientes, enquanto o estado <b>3</b> é absorvente.	26
3.3	Densidade de partículas no estado estacionário em função da taxa de replicação para o PC unidimensional.	30
3.4	Amostras do PC, começando com uma única partícula na origem de uma rede vazia. À esquerda: $\lambda < \lambda_c$ ; centro: $\lambda = \lambda_c$ ; à direita: $\lambda > \lambda_c$ .	31
3.5	Gráficos mostrando como $P_S(t)$ e $n(t)$ seguem leis de potência no ponto crítico (curvas em vermelho) e curvam positivamente (curvas azuis) e negativamente (curvas pretas) para o sistema no regime supercrítico e subcrítico, respectivamente.	32
3.6	Curvatura média em função de $\lambda$ para o <i>processo de replicação por contato</i> unidimensional (PRC) [22], um modelo muito similar ao PC que apresenta o mesmo comportamento crítico. A linha contínua representa um ajuste em polinômio cúbico. O PRC será definido no capítulo 4.	33
3.7	Gráfico $\rho(t) \times t$ mostrando a relaxação para o estado quase-estacionário para os tamanhos de rede $L = 25, 50, 100, 200, 400$ , com $\lambda = \lambda_c$ .	37
3.8	Densidade de partículas no estado quase-estacionário em função da taxa de replicação para o PC unidimensional.	37

3.9	Gráfico reescalado utilizando os dados da figura 3.8. . . . .	38
3.10	Dependência de $\bar{\rho}_{qe}$ , $\tau$ e $\chi$ com o tamanho do sistema para o PC unidimensional no ponto crítico. . . . .	39
3.11	Evolução temporal típica a partir de duas partículas, mostrando a percolação direcionada. Neste caso a direção preferencial é interpretada como uma coordenada temporal. Figura extraída de [27]. . . . .	42
3.12	Método convencional para determinar o valor das grandezas no estado QE. Neste caso, obtemos $\bar{\rho}_{qe}$ tomando a média dos valores de $\rho$ na região em destaque. . . . .	45
3.13	Razão entre momentos $m_2/m_1^2$ em função do tamanho $L$ do sistema para o PC unidimensional. . . . .	48
3.14	Diagrama de fase para o PCP. Figura retirada de [37]. . . . .	54
3.15	Gráficos mostrando a dependência em lei de potência de $\rho_p(L)$ para o PCP unidimensional (à esquerda) e bidimensional (à direita) no ponto crítico. . . . .	54
3.16	À esquerda: leis de potência para $\rho$ , $\chi$ e $\tau$ no ponto crítico obtidos pela simulação QE para o PCP unidimensional. As linhas contínuas representam ajustes em lei de potência. À direita: razão entre momentos $m_2/m_1^2$ como função do tamanho do sistema para o PCP unidimensional. . . . .	55
4.1	Representação esquemática dos eventos de criação de partículas para os modelos estudados neste capítulo. Setas indicam as possíveis escolhas para o destino da partícula criada e os sítios com o símbolo $X$ representam aqueles que serão ocupados no passo. . . . .	57
4.2	Densidade crítica e o tempo de vida como funções de $L$ para o PRC bidimensional. Inserção: Razão entre momentos $m = \langle \rho^2 \rangle / \langle \rho \rangle^2$ para diferentes tamanhos do sistema. A linha tracejada é o valor de $m$ para o PC [29]. . . . .	59
4.3	À esquerda: quantidades críticas no estado QE como funções de $L$ para o PC em três dimensões. As linhas contínuas são ajustes de acordo com a equação 4.5. À direita: quantidade críticas no estado QE para o modelo SIS reescaladas usando leis de potência puras (símbolos preenchidos) e com a correção (símbolos sem preenchimento). Aplicou-se um desvio nestas curvas para melhorar a visibilidade. . . . .	60

4.4	Análise de espalhamento para o PRC tridimensional próximo a $\lambda_c$ . Os grupos de curvas de cima e de baixo correspondem à probabilidade de sobrevivência e ao número médio de sítios ocupados, respectivamente. Em cada grupo são mostradas curvas para $\lambda = 1,00362, 1,00363$ e $1,00364$ , de cima para baixo. As linhas tracejadas representam inclinações iguais a 0 e $-1$ , correspondendo aos expoentes de campo médio $\eta$ e $\delta$ , respectivamente. Inserção: densidade crítica média (não quase-estacionária) reescalada utilizando a lei de potência $t^{-\delta}$ para uma condição inicial na qual todos os sítios estão ocupados. . . . .	61
4.5	Simulações QE para o PRC tridimensional na criticalidade. As linhas sólidas representam ajustes de acordo com a equação 4.5 e as linhas tracejadas, leis de potência com os expoentes da classe PD que constam na tabela 4.1. . . . .	62
4.6	Grandezas críticas normalizadas usando o modelo SIS. Acima: tempos de vida como funções de $L$ . Abaixo: Raios de espalhamento ao quadrado como funções do tempo. Como podemos ver, a difusão e os tempos de vida são maiores para o PRC. . . . .	62
4.7	Razões entre momentos e entre momentos e cumulantes para o SIS, PC e PRC com $d = 3$ . As linhas sólidas representam ajustes não lineares com a função dada pela equação 4.6, com coeficiente de correlação $r > 0,999$ . . . . .	63
5.1	Evolução temporal do PCL unidimensional a partir de uma condição inicial com todos os sítios ativos. Sítios ativos são representados em vermelho, inativos em preto e vazios em branco. Os padrões de cima correspondem ao regime subcrítico e crítico, da esquerda para a direita, enquanto o padrão de baixo representa o regime supercrítico. . . . .	66
5.2	Gráficos mostrando a variação de curvatura para $n_2$ e $P_S$ em função de $t$ . As curvaturas positivas (negativas) ocorrem para taxas supercríticas (subcríticas). De baixo para cima, $\lambda = 6,2750, 6,2780, 6,2810$ e $6,2850$ . . . . .	70
5.3	$\bar{\phi}_{qe}, \chi$ e $\tau$ como funções de $L$ para o PCL unidimensional. . . . .	71
5.4	A razão entre momentos $m_2/m_1^2$ em função de $L$ . . . . .	71
5.5	$\bar{\phi}_{qe}, \chi$ e $\tau$ como funções de $L$ para o PCL bidimensional. . . . .	72
5.6	Relaxação crítica da densidade de sítios ativos para duas condições iniciais diferentes: todos os vértices ativos (em vermelho); 2% dos vértices ativos e o restante, inativos (em preto). Inserção: relaxação crítica da densidade de nós inativos. o tamanho da rede é $6,4 \times 10^5$ , com $\gamma = 2,75$ . . . . .	75
5.7	Fator $g$ como uma função do tamanho do sistema. Note que o comportamento em lei de potência $g \sim N^{(3-\gamma)/\omega}$ só será atingido para tamanhos muito grandes do sistema. . . . .	77

5.8	Razões entre momentos $m_2/m_1^2$ como funções de $\lambda$ , para uma rede com $\gamma = 2,75$ . Os resultados obtidos pelas simulações QE estão representados por símbolos e as linhas representam ajustes polinomiais. . . . .	78
5.9	Análise de ETF para a densidade QE de sítios ativos (acima) e para o tempo de vida (abaixo), para diferentes valores de $\gamma$ . As linhas tracejadas representam retas com inclinação $\pm 1/2$ e linhas contínuas representam ajustes em lei de potência. As curvas para os símbolos preenchidos foram deslocadas para uma melhor visualização. . . . .	79
5.10	Densidades parciais como funções de $k$ para o PCL na rede UCM. Símbolos representam resultados de simulações e linhas são as aproximações de CMH. Utilizamos uma rede de tamanho $N = 3,2 \times 10^5$ , com $\gamma = 2,75$ . . . . .	80
5.11	Distribuição de probabilidades quase-estacionária para vértices ativos no PCL e no PC em redes UCM. Utilizamos uma rede de tamanho $N = 3,2 \times 10^5$ , com $\gamma = 2,75$ . . . . .	80

# Lista de Tabelas

4.1	Expoentes críticos para a classe PD calculados a partir de expoentes de espalhamento. As relações de escala $\beta = \delta\nu_{\parallel}$ , $z = 2\nu_{\perp}/\nu_{\parallel}$ , e $\gamma = d\nu_{\perp} - 2\beta$ [19] foram utilizadas quando necessário. . . . .	61
4.2	Razões entre momentos assintóticas para o SIS e para o PC em $d = 3$ . . . . .	63
5.1	Taxas críticas e razões entre momentos para o PCL em redes regulares. O número entre parênteses representa o erro na última casa decimal. . . . .	72
5.2	Taxas críticas e razões entre momentos para o PCL em redes sem escala não correlacionadas. O número entre parênteses representa o erro na última casa decimal. . . . .	78
5.3	Expoentes críticos para o PCL em redes sem escala não correlacionadas. Os expoentes de campo médio $\hat{\nu}_{hmf} = (5 - \gamma)/4$ e $\hat{\alpha}_{hmf} = (\gamma - 1)/4$ também foram incluídos, para comparação. . . . .	78

# Resumo

SANDER, Renan Servat, M. Sc., Universidade Federal de Viçosa, julho de 2011. **Transições de fase para estados absorventes: um estudo em redes regulares e complexas.** Orientador: Silvio da Costa Ferreira Junior. Co-Orientadores: Marcelo Lobato Martins e José Arnaldo Re-dinz.

Transições de fase para estados absorventes, configurações das quais o sistema não pode escapar, são atualmente um tópico na fronteira da física estatística fora do equilíbrio. Concomitantemente com um crescente interesse em tais transições de fase em topologias complexas, ainda há muitos problemas em aberto sendo investigados em redes regulares, tais como os efeitos de desordem congelada, difusão, etc. Nas últimas décadas, redes complexas tem sido alvo de crescente interesse da comunidade científica devido ao fato de estas descreverem uma grande variedade de sistemas que possuem relevância tanto tecnológica quanto intelectual. Levando em conta a natureza dinâmica e o enorme tamanho das redes complexas reais, a abordagem da Física Estatística mostra-se muito conveniente devido a sua ligação com a teoria de grafos e a possibilidade de caracterizar fenômenos macroscópicos emergentes em termos da evolução dinâmica de elementos básicos que compoem o sistema. Na primeira parte desta dissertação, realizamos simulações pelo método quase-estacionário (QE) proposto por Oliveira e Dickman para o processo de contato (PC), para o modelo suscetível-infectado-suscetível (SIS) e para o processo de replicação por contato (PRC), em três dimensões, além de reproduzir alguns resultados já conhecidos pelo método QE. Utilizando este método, foi possível determinar as razões entre momentos dos parâmetros de ordem para a classe da percolação direcionada em três dimensões. Também mostramos que os expoentes de campo médio para o PRC tridimensional relatados na literatura são um transiente observado na análise de espalhamento. Na segunda parte, investigamos a transição de fase em um novo modelo, proposto nesta dissertação: o processo de contato por limiar (PCL). Análises foram realizadas em redes regulares e sem escala. Mostramos que o PCL pertence à classe da percolação direcionada em redes regulares. Em redes sem escala, mostramos que os expoentes críticos da análise de escalonamento de tamanho finito da densidade quase-estacionária de sítios ativos e do tempo de vida são os mesmos que foram obtidos para o PC em redes sem escala, tanto na teoria de campo médio heterogênea, quanto nas simulações QE.

# Abstract

SANDER, Renan Servat, M. Sc., Universidade Federal de Viçosa, july of 2011. **Phase transitions to absorbing states: a study on regular and complex networks.** Adviser: Silvio da Costa Ferreira Junior. Co-Advisers: Marcelo Lobato Martins and José Arnaldo Redinz.

Phase transitions into absorbing states, configurations from which the system can not escape, are currently a topic in the frontier of nonequilibrium Statistical Physics. Along with a growing interest in phase transitions on complex topologies, there are still many problems being investigated in regular networks, such as the effects of quenched disorder, diffusion, etc. In recent decades, complex networks have been a subject of increasing interest in the scientific community due to the fact that they describe a wide diversity of systems of both technological and intellectual relevance. Gathering the huge size and dynamic nature of real complex networks, the Statistical Physics approach has proven to be very convenient because of its connection with graph theory and the possibility of characterizing the macroscopic phenomena emerging in terms of the dynamics of the basic elements composing the system. In the first part of this dissertation, we have performed simulations using the quasi-stationary (QS) method proposed by Oliveira and Dickman for the contact process (CP), the susceptible-infected-susceptible (SIS) and the contact replication process (PRC) models in three dimensions, besides reproducing some results already known in the literature with the QE method. Using this method, we determined, for the first time, the moment ratios of the order parameter for the directed percolation (DP) class in three dimensions. We have also shown that the mean-field exponents for the three-dimensional PRC reported in the literature, are transients observed in the spreading analysis. In the second part, we have investigated the phase transition in a new model, proposed in this dissertation: the threshold contact process (TCP). Analyses were performed on regular and scale-free networks. We show that the TCP belongs to the DP universality class in regular networks. In scale-free networks, we show that the critical exponents for the finite-size scaling analysis of the quasi-stationary density of active sites and for the lifetime are the same obtained for the CP on scale-free networks, both in the heterogeneous mean-field theory, and in the QS simulations.

# Capítulo 1

## Introdução

Os diversos tipos de rede existentes estão presentes na nossa vida diária, sendo responsáveis, em parte, pelo modo como pensamos e agimos. Uma rede é basicamente qualquer sistema que pode ser representado matematicamente por um grafo: um conjunto de nós conectados aos pares por ligações que representam algum tipo de relação ou interação.

Em particular, redes complexas têm sido alvo de crescente interesse da comunidade científica devido ao fato de estas descreverem uma grande variedade de sistemas que possuem relevância tanto tecnológica quanto intelectual [3]. Por exemplo, a Internet é uma rede complexa composta por roteadores e computadores conectados por ligações físicas ou sem fio; idéias e fatos se espalham rapidamente por redes sociais, cujos nós representam pessoas e as ligações representam um certo tipo de relação social (como vemos no servidor de microblogging Twitter e na rede social Facebook, por exemplo); a World Wide Web (WWW) é uma gigantesca rede virtual composta de páginas da Web conectadas entre si por hiperlinks. De fato, os dados disponíveis para estudo passam por diversas áreas do conhecimento, desde a engenharia até a biologia. Portanto, é de interesse caracterizar e analisar sistematicamente as propriedades fundamentais destas redes.

Impulsionado por recentes desenvolvimentos que foram possibilitados pela análise do grande banco de dados já disponível acerca de redes reais, muitos conceitos novos e medidas de diferentes grandezas têm sido propostos e investigados. Mas, dentre estes, três se destacam no modo como atualmente pensamos sobre redes complexas: *agrupamento*<sup>1</sup>, *distribuição de conectividade*<sup>2</sup> e *propriedade de mundo pequeno*<sup>3</sup>.

Se levarmos em conta a natureza dinâmica e o enorme tamanho das redes complexas reais, a abordagem da física estatística mostra-se muito conveniente devido a sua ligação com a teoria de grafos e a possibilidade de caracterizar fenômenos macroscópicos emergentes em termos da evolução dinâmica de elementos básicos que compoem o sistema. Os avanços mais recentes no sentido de compreender as propriedades de grandes redes complexas tem chamado a atenção

---

<sup>1</sup> Refere-se à tendência observada em muitas redes de formarem-se grupos fechados de nós interconectados na vizinhança de um dado nó.

<sup>2</sup>  $P(k)$  é a probabilidade de que um nó escolhido ao acaso tenha conectividade  $k$ . Está relacionada com a heterogeneidade da rede.

<sup>3</sup> Nas redes que apresentam esta propriedade, a distância média entre dois nós quaisquer cresce com o logaritmo do número total de nós.

para as possíveis implicações que a sua estrutura possa ter sobre questões importantes a respeito de processos dinâmicos ocorrendo sobre tais redes. Apesar de as definições básicas de cada modelo permanecerem inalteradas, existe a necessidade de investigar sistematicamente e comparar o impacto dos vários tipos de rede sobre as características de processos dinâmicos de equilíbrio e de não equilíbrio.

As idéias da física estatística podem ser aplicadas além do contexto termodinâmico [27]; foram desenvolvidas, nas décadas passadas, teorias gerais de transições de fase e de fenômenos críticos, unificando a compreensão de transições magnéticas, transições gás-líquido, cristais líquidos e outros sistemas. Esta grande atividade foi acompanhada por desenvolvimentos paralelos em sistemas fora do equilíbrio e até em sistemas sem termodinâmica, para os quais não se aplicam os conceitos de energia e trabalho. Dentre as idéias da Física que foram exportadas para outras áreas, podemos destacar as transições de fase como sendo parte daquelas que deram melhores resultados; seus conceitos são utilizados na teoria de computação, inteligência artificial e na teoria de populações biológicas, por exemplo. Definimos transição de fase de maneira informal, mas adequada, como uma mudança abrupta e singular das propriedades macroscópicas de um sistema de muitos componentes, como função de um ou mais parâmetros de controle. Esta descrição engloba os sistemas já familiares da termodinâmica, assim como os sistemas fora do equilíbrio, dentre os quais percolação e epidemias são bons exemplos.

Uma classe de processos dinâmicos que desperta grande interesse é a de modelos com estados absorventes [19]. Transições de fase para estados absorventes, configurações das quais o sistema não pode escapar, são atualmente um tópico na fronteira da física estatística fora do equilíbrio. Concomitantemente com um crescente interesse em tais transições de fase em topologias complexas, ainda há muitos problemas em aberto sendo intensamente investigados em redes regulares, tais como os efeitos de desordem congelada, difusão, modelagem de sistemas presa-predador e replicação clonal.

É esperado que transições de fase para estados absorventes em modelos com um parâmetro de ordem escalar positivo, interações de curto alcance e sem simetrias adicionais ou desordem congelada pertençam à classe de universalidade da percolação direcionada (PD). Esta conjectura é conhecida como critério de Janssen-Grassberger [13]. Deve-se mencionar que o interesse neste tipo de transição de fase aumentou após a recente observação experimental desta classe de universalidade em transições para estados absorventes [1, 2]. Por outro lado, mesmo sendo esta a classe de universalidade mais robusta para tais transições de fase, a determinação numérica precisa dos expoentes críticos de um modelo específico pode ser “mascarada” por fatores como difusão e desordem congelada.

Espera-se que teorias de campo médio para processos dinâmicos em redes complexas funcionem corretamente [30]. Este fato foi verificado primeiramente para o modelo suscetível-infectado-suscetível (SIS), um processo epidêmico simples no qual sítios saudáveis são infectados a uma taxa  $\lambda$  (se houver ao menos uma conexão com algum sítio infectado), enquanto sítios infectados curam-se espontaneamente a uma taxa unitária. Surpreendentemente, foram encon-

trados estados de persistência da epidemia para qualquer  $\lambda$  não nulo usando cálculos de campo médio para o SIS em redes sem escala<sup>4</sup>, resultados confirmados por simulações numéricas.

O processo de contato (PC), exemplo padrão da classe PD com um único estado absorvente [19], é um modelo protótipo para propagação epidêmica e tem sido alvo de estudo em topologias complexas [33]. Recentemente, uma simples variação deste modelo foi introduzida para fins de modelagem de replicação clonal: o processo de replicação por contato (PRC) [22]. O processo de contato por pares (PCP) [38] é o primeiro modelo com infinitos estados absorventes que pertence à classe de universalidade da percolação direcionada (PD). Além de um estudo do PRC, propomos para este trabalho um modelo de partículas interagentes que retém algumas características tanto do PC quanto do PCP. Este modelo também possui infinitos estados absorventes mas, ao contrário do PCP e similar ao PC, o estado de ocupação de não mais do que um único sítio da rede pode mudar em um passo microscópico de tempo.

Nesta dissertação, temos como objetivo principal caracterizar a criticalidade do modelo em topologias regulares e complexas. O trabalho está organizado da seguinte maneira: no capítulo 2, apresentamos uma revisão de literatura sobre redes complexas (com ênfase nas propriedades principais e modelos clássicos para o estudo de processos dinâmicos). No capítulo 3 revisamos os principais conceitos e resultados sobre o estudo das transições de fase para estados absorventes. No capítulo 4, analisamos o PC, o modelo suscetível-infectado-suscetível (SIS) e o PRC para  $d = 3$ . No capítulo 5, apresentamos o modelo principal de que trata esta dissertação, as aproximações de campo médio para redes regulares e sem escala, além dos resultados obtidos por meio de simulações. O capítulo 6 fica reservado para as conclusões acerca deste trabalho.

---

<sup>4</sup>A distribuição de conexões para uma rede sem escala tem a forma  $P(k) \sim k^{-\gamma}$ , em que  $2 < \gamma \leq 3$ .

# Capítulo 2

## Redes Complexas

Em termos gerais, uma rede é qualquer sistema que pode ser matematicamente representado como um grafo cujos nós identificam os elementos do sistema e o conjunto de ligações existentes representa uma interação ou relação entre tais elementos. Este nível de abstração aplica-se a uma grande variedade de sistemas e, no âmbito teórico, o conceito de redes permite uma boa representação das inter-relações em sistemas complexos cuja caracterização necessita do mapeamento de interações entre um grande número de indivíduos.

A linguagem utilizada para descrever rigorosamente redes é a teoria de grafos. No entanto, o estudo recente de redes muito grandes trouxe a necessidade de definir novas métricas e observáveis estatísticos especificamente voltados para o estudo de sistemas de larga escala. Este capítulo baseia-se principalmente no livro *Dynamical processes on complex networks* (A. Barrat, M. Barthélemy e A. Vespignani) [3]. Nele serão introduzidas algumas noções, definições e a notação básica utilizadas em teoria de redes. Também será analisado o caso especial das redes sem escala e, por fim, revisaremos alguns modelos clássicos de rede que são úteis no estudo de processos dinâmicos.

### 2.1 Conceitos fundamentais em teoria de grafos

A teoria de grafos, um vasto campo de estudo da matemática, tem sua origem no trabalho pioneiro de Leonhard Euler (1707-1783) ao resolver a questão das pontes de Königsberg, um problema popular entre os cientistas de seu tempo. Este consiste no seguinte questionamento: partindo do centro de Königsberg (atual Caliningrado, Rússia), é possível dar um passeio pela cidade atravessando cada uma das sete pontes (figura 2.1) uma única vez?

A situação é mostrada de maneira esquematizada na figura 2.2 (à esquerda) e sua solução geral requer certa abstração matemática. A idéia de Euler foi abordar o problema utilizando um mapa de Königsberg ainda mais simples (figura 2.2 à direita). Agora, distâncias reais são grandezas irrelevantes para o caso em questão: partes distintas da cidade serão tratadas como *nós*, ou *vértices*; se uma parte da cidade é conectada a outra por uma das pontes, traçamos uma linha,

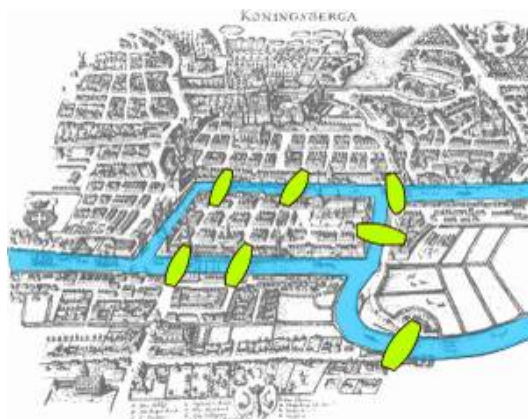


Figura 2.1: As pontes da cidade de Königsberg. Figura retirada de <http://www.mathsreach.org/Careers>.

ou *ligação*, entre estes vértices. Agora, o mapa da cidade tornou-se um grafo e, de posse deste novo formalismo o problema assume uma característica mais abstrata: será possível encontrar um caminho que passa por todas as ligações, apenas uma vez em cada uma delas?

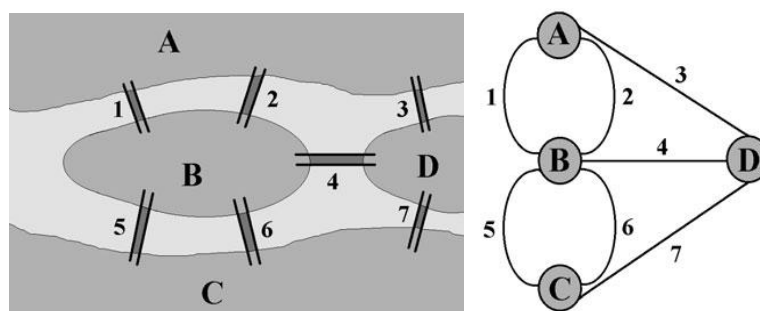


Figura 2.2: À esquerda, um mapa simplificado do centro da cidade de Königsberg, como era na época de Euler. À direita, sua representação como um grafo. Figuras retiradas de [4].

Note que, de certa forma, esse procedimento facilita a resolução do problema, já que agora todas as partes da cidade são descritas exatamente da mesma maneira (como vértices do grafo). Assim, uma solução, se existir, deve depender diretamente de propriedades intrínsecas do grafo. Uma grandeza intrínseca deste objeto é o *grau* de um nó  $i$ , ou número de conexões de um vértice, o qual será denotado por  $k_i$ . Se  $k_i$  for par, percebe-se que o vértice é um ponto de cruzamento, ou seja, pode-se entrar no nó por uma ligação e sair pela outra. Se o grau do vértice for ímpar, este só pode ser um ponto de início ou de término do caminho. O requisito para passar por cada ponte apenas uma vez só é satisfeito se não houver nenhum vértice de grau ímpar (de modo que os pontos de início e término coincidam) ou se houverem apenas dois vértices com grau ímpar (nesse caso, os pontos de início e término do caminho são distintos). Temos então a solução para o problema das pontes de Königsberg: observando o grafo da figura 2.2 nota-se que todos os vértices possuem grau ímpar, não satisfazendo portanto as condições acima. Logo, não existe caminho possível que passe apenas uma vez por cada uma das sete pontes. O estudo

deste tipo de problema contribuiu para que a teoria de grafos evoluísse desde então e, como veremos adiante, para grafos muito grandes (com muitos vértices), fez-se necessário o uso da estatística para descrevê-los. A seguir, trataremos de alguns aspectos do formalismo matemático utilizado para descrever tais objetos.

Define-se um grafo não direcionado como um par de conjuntos dado por  $G(V, E)$ , em que  $V$  é um conjunto não vazio e contável de elementos, ditos vértices (ou nós), enquanto  $E$  é um conjunto desordenado de pares de vértices, ditos ligações (ou conexões). Ao longo desta dissertação, iremos nos referir a um vértice pela sua ordem  $i$  no conjunto  $V$ . A conexão  $(i, j)$  une os vértices  $i$  e  $j$ , que são ditos adjacentes ou conectados<sup>1</sup>. Denota-se por  $N$  o número total de nós do grafo e esta grandeza define a ordem do grafo.

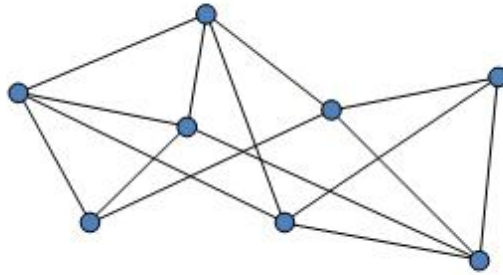


Figura 2.3: Representação gráfica de um grafo. Figura retirada de <<http://www.uh.edu/engines/>>.

Para um grafo de ordem  $N$ , o número máximo de ligações é dado pelo número de maneiras que podemos escolher dois deles em um total de  $N$ , ou seja,  $\binom{N}{2} = N(N - 1)/2$ . Um grafo em que todos os possíveis pares de nós estão conectados é chamado de *grafo completo*. Graficamente, costuma-se expressar um grafo como um conjunto de pontos, representando os vértices, com linhas unindo-os, representando as conexões (figura 2.3). Também podemos definir um grafo matematicamente de maneira conveniente utilizando a *matriz de adjacência*  $\mathbf{X} = \{x_{ij}\}$ . Trata-se de uma matrix  $N \times N$  definida do seguinte modo:

$$x_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{se } (i, j) \in E \\ 0 & \text{se } (i, j) \notin E \end{cases} \quad (2.1)$$

Para grafos não direcionados a matriz de adjacência é simétrica ( $x_{ij} = x_{ji}$ ), logo contém informações redundantes.

Um aspecto importante sobre a estrutura de grafos é a *acessibilidade* dos nós, isto é, a possibilidade de sair de um vértice e chegar em outro seguindo as conexões presentes na rede. Analisaremos as propriedades de conectividade definindo um caminho  $P_{i_0, i_n}$  em um dado grafo  $G = (V, E)$  como uma coleção ordenada de  $n + 1$  vértices  $V_P = \{i_0, i_1, \dots, i_n\}$  e  $n$  conexões  $E_P = \{(i_0, i_1), (i_1, i_2), \dots, (i_{n-1}, i_n)\}$ , de modo que  $i_\alpha \in V$  e  $(i_{\alpha-1}, i_\alpha) \in E$  para todo  $\alpha$ . O

<sup>1</sup>Também é comum chamar vértices conectados como *vizinhos* ou *vizinhos mais próximos*.

caminho  $P_{i_0, i_n}$  conecta os nós  $i_0$  e  $i_n$  e o *comprimento* deste caminho é dado por  $n$ . O número  $\mathcal{N}_{ij}$  de caminhos com comprimento  $n$  entre dois nós  $i$  e  $j$  é dado pelo elemento  $ij$  da  $n$ -ésima potência da matriz de adjacência:  $\mathcal{N}_{ij} = (\mathbf{X}^n)_{ij}$ . Um ciclo, ou *loop*, é um caminho fechado ( $i_0 = i_n$ ) no qual todos os nós e todas as ligações são distintas. Diz-se que um grafo é *conectado* se existe um caminho que conecta quaisquer dois vértices da rede.

O conceito de “caminho” é a base da definição de distância entre nós. A medida natural da distância entre dois vértices  $i$  e  $j$  é definida como o número de nós que o *menor caminho*  $l_{ij}$  entre ambos cruza. Quando dois nós pertencem a componentes desconectados da rede, definimos  $l_{ij} = \infty$ . Usando o comprimento do menor caminho como uma medida de distância entre vértices, é possível definir o tamanho típico e o *diâmetro* de um grafo, em que o diâmetro é definido como

$$d_G = \max_{i,j} l_{ij} \quad (2.2)$$

Outra definição aceita para o tamanho linear de um grafo é o *menor caminho médio*, definido como o valor médio de  $l_{ij}$  sobre todos os pares de vértices na rede

$$\langle l \rangle = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{ij} l_{ij} \quad (2.3)$$

Exemplos simples de distâncias em grafos incluem o grafo completo, em que  $\langle l \rangle = 1$  e a rede hipercúbica em  $D$  dimensões com  $N$  vértices:  $\langle l \rangle \sim N^{1/D}$ . Na maior parte dos grafos aleatórios, o menor caminho médio cresce com o logaritmo do número de nós:  $\langle l \rangle \sim \log N$ . Trata-se de um crescimento bem mais lento do que aquele observado para redes hipercúbicas. O fato de que quaisquer dois nós estão conectados por um caminho que possui um valor relativamente baixo constitui o chamado *efeito de mundo pequeno*.

No estudo de grafos é sempre aconselhável levar em conta a importância relativa de seus elementos básicos. A relevância de um nó ou de uma ligação é comumente definida como sendo a sua *centralidade*, um conceito bastante amplo. Determiná-la depende especificamente das propriedades que interessam para a análise em questão. As caracterizações mais utilizadas são centralidade por grau, centralidade por proximidade e centralidade por intermediação.

Na *centralidade por grau*, interpreta-se imediatamente, pela observação do grau  $k_i$  de um vértice, o quão bem conectado este vértice é com outros elementos no grafo.

A *centralidade por proximidade*, definida como

$$g_i = \frac{1}{\sum_{j \neq i} l_{ij}}. \quad (2.4)$$

é uma medida que atribui grande centralidade a nós que possuem baixos valores para o menor caminho até outros nós.

As medidas anteriores atribuem maior importância a vértices que são topologicamente melhor conectados ao resto da rede, mas não levam em conta nós que podem ser cruciais por

conectar diferentes regiões do grafo, agindo como pontes. Para considerar quantitativamente o papel desempenhado por tais vértices, é introduzido o conceito de *centralidade por intermediação*: é definido como o número de menores caminhos entre pares de nós que passam por um dado nó. Mais precisamente, se  $\sigma_{hj}$  é o número total de menores caminhos de  $h$  para  $j$  e  $\sigma_{hj}(i)$  é o número de menores caminhos que passam pelo nó  $i$ , a grandeza intermediação de  $i$  é definida como

$$b_i = \sum_{h \neq j \neq i} \frac{\sigma_{hj}(i)}{\sigma_{hj}}. \quad (2.5)$$

De acordo com estas definições, nós com maior centralidade fazem parte de um maior número de menores caminhos no grafo em relação a nós menos relevantes. A centralidade por “betweenness” de um vértice é frequentemente utilizada em redes de transporte para fornecer uma estimativa do tráfego que passa por este vértice, assumindo que o número de menores caminhos é uma primeira aproximação para a frequência de uso de um dado nó.

Juntamente com medidas de centralidade, podemos caracterizar os vértices de acordo com a estrutura da sua vizinhança local. O conceito de *agrupamento* refere-se à tendência observada em muitas redes naturais de formar grupos fechados na vizinhança de um dado nó. Assim, agrupamento implica a seguinte propriedade: se um vértice  $i$  está conectado a um vértice  $j$ , e ao mesmo tempo  $j$  está conectado a  $l$ , então existe uma alta probabilidade de  $i$  também estar conectado com  $l$ . Para um grafo não direcionado, o agrupamento pode ser medido quantitativamente por meio do *coeficiente de agrupamento*, que mede o quão coeso é um grupo local. O agrupamento  $C(i)$  de um nó  $i$  é definido como sendo a razão do número de ligações entre os vizinhos de  $i$  com o número máximo de tais ligações. Se o grau do vértice  $i$  é  $k_i$  e os vizinhos de  $i$  possuem  $e_i$  conexões entre si, temos:

$$C(i) = \frac{e_i}{k_i(k_i - 1)/2}. \quad (2.6)$$

Vale ressaltar que a medida acima só tem significado para  $k_i > 1$ . Para  $k_i \leq 1$  define-se  $C(i) \equiv 0$ .

O coeficiente de agrupamento médio de um grafo é dado por

$$\langle C \rangle = \frac{1}{N} \sum_i C(i). \quad (2.7)$$

## 2.2 Caracterização estatística de grafos

O recente desenvolvimento da ciência de redes deu-se em parte devido ao fato de que, nas últimas décadas, foi possível adquirir sistematicamente e manipular uma grande quantidade de dados para redes de grande escala. Porém, a análise de sistemas grandes não pode ser feita apenas observando elementos ou propriedades locais. Ou seja, para levar em conta o comporta-

mento global de certas grandezas, devemos lançar mão de medidas estatísticas.

Começaremos a nossa descrição introduzindo a distribuição de conexões  $P(k)$ , que é definida como sendo a probabilidade de que um nó escolhido ao acaso tenha conectividade (ou grau)  $k$ . Podemos obter esta distribuição construindo um histograma normalizado dos graus dos vértices da rede. Definimos o grau médio de um grafo não direcionado como

$$\langle k \rangle = \frac{1}{N} \sum_i k_i = \sum_k k P(k) \equiv \frac{2E}{N}, \quad (2.8)$$

já que cada ligação contribui para o grau de um nó. De maneira análoga ao que foi feito para  $\langle k \rangle$ , definimos o  $n$ -ésimo momento da distribuição de conexões como

$$\langle k^n \rangle = \sum_k k^n P(k). \quad (2.9)$$

Veremos adiante que as propriedades de  $P(k)$  são fundamentais para identificarmos diferentes classes de rede.

De acordo com  $P(k)$ , é comum classificar as redes em duas grandes classes: *homogêneas* ou *heterogêneas*. Nas redes homogêneas, observa-se que  $P(k)$  decai rapidamente (é frequente dizer que uma distribuição deste tipo apresenta uma “cauda leve”). Exemplos de distribuições que apresentam essa propriedade são a Gaussiana e a de Poisson. O segundo tipo corresponde a redes que possuem uma heterogeneidade estatística intrínseca (distribuições com “cauda pesada”) e, em geral, a distribuição de conexões para tais redes apresenta um decaimento em lei de potência da forma

$$P(k) \sim k^{-\gamma}. \quad (2.10)$$

Assim, note que é possível, mesmo que pouco provável, encontrarmos nós com grau  $k$  tal que  $k \gg \langle k \rangle$ .

Para obtermos uma melhor compreensão sobre o significado de tal heterogeneidade, observemos os dois primeiros momentos de  $k$ . Aproximando  $k$  como uma variável contínua, podemos obter o primeiro momento pela expressão

$$\langle k \rangle = \int_m^{k_c} k P(k) dk, \quad (2.11)$$

em que  $k_c$  é o maior grau existente para um nó na rede e  $m \geq 1$  é o menor grau existente. Assim, usando  $P(k)$  (normalizado, com  $k_c \rightarrow \infty$ ) de acordo com a equação (2.10), obtém-se:

$$\begin{aligned} \langle k \rangle &= (\gamma - 1)m^{\gamma-1} \int_m^{k_c} k^{-\gamma+1} dk \\ &= \frac{\gamma - 1}{\gamma - 2} (m^{2-\gamma} - k_c^{2-\gamma}). \end{aligned} \quad (2.12)$$

Agora, fazendo  $k_c \rightarrow \infty$  e  $\gamma > 2$  obtém-se

$$\langle k \rangle = \frac{\gamma - 1}{\gamma - 2} m^{2-\gamma}, \quad (2.13)$$

que é um valor finito e bem definido. Calculando o segundo momento, obtemos

$$\langle k^2 \rangle \sim k_c^{3-\gamma}. \quad (2.14)$$

Define-se a variância normalizada da distribuição  $P(k)$  como  $\sigma^2 / \langle k \rangle^2$ , em que a variância  $\sigma^2$  é igual a  $\langle k^2 \rangle - \langle k \rangle^2$ . Mas, ao tomarmos o limite assintótico para redes infinitas ( $k_c \rightarrow \infty$ ) nota-se que, para  $\gamma < 3$ ,  $\langle k^2 \rangle \rightarrow \infty$ . Ou seja, nestas condições as flutuações se tornam infinitas! É daí que surge o termo *rede sem escala*: como estas flutuações divergem no intervalo  $2 < \gamma \leq 3$ , o valor médio não pode ser uma escala característica para este sistema.

Pode-se definir um parâmetro  $\kappa$  para determinar o grau de heterogeneidade da rede por

$$\kappa = \frac{\langle k^2 \rangle}{\langle k \rangle}. \quad (2.15)$$

Como foi observado há pouco, se a rede é sem escala  $\kappa \rightarrow \infty$ . Entretanto, para redes homogêneas,  $\kappa \sim \langle k \rangle$ . Assim, levando em conta que na natureza não existem redes infinitas, podemos dizer que redes sem escala são aquelas nas quais  $\kappa \gg \langle k \rangle$  [4].

Apesar de a distribuição  $P(k)$  ter atraído a atenção da comunidade científica como um fator determinante para compreender a estrutura de redes de grande escala, hoje é claro que esta é apenas uma dentre várias grandezas estatísticas que podem ser usadas para caracterizar a organização estrutural e hierárquica de um grafo. Sendo mais específico, não é de se esperar que vértices conectem-se uns aos outros independentemente de seu tipo ou de suas propriedades. De fato, em muitos casos observa-se, através da coleta de dados de redes reais, justamente o contrário. Um comportamento padrão típico bem conhecido nas áreas de ciências sociais<sup>2</sup>, ecologia e epidemiologia como *associatividade* refere-se à uma tendência que os vértices têm de se conectar com outros vértices que têm propriedades similares. De maneira análoga, podemos definir um padrão de *desassociatividade*, que ocorre quando os constituintes da rede preferem ligar-se com outros que possuem diferentes atributos. Tais padrões exercem um efeito significativo nas propriedades topológicas de um grafo, afetando o modo como são formados grupos na rede e sendo determinantes em relação ao arranjo das conexões entre os vértices.

Padrões de associatividade podem ser definidos com relação a qualquer propriedade dos nós. Porém, no caso de estruturas de grande escala, o foco dos pesquisadores tem sido no estudo da associatividade com relação ao grau dos vértices. Na situação em que os nós tendem a conectar-se com outros de grau similar, dizemos que a rede é *associativa*. Em contraste a isso, observa-se que conexões em muitas redes biológicas e tecnológicas são mais propensas

<sup>2</sup>É uma observação comum neste contexto o fato que pessoas tendem a se associar com outras que compartilham dos mesmos interesses.

a unir vértices com grau consideravelmente diferente. Nesse caso, diz-se que o grafo é *desassociativo*. Apesar de outras possibilidades, as correlações são frequentemente caracterizadas de acordo com a probabilidade condicional  $P(k', k'', \dots, k^{(n)} \mid k)$  de que um vértice de grau  $k$  esteja simultaneamente conectado a outros  $n$  vértices com graus  $k', k'', \dots, k^{(n)}$ . Dizemos que uma rede é não correlacionada quando a probabilidade condicional acima é independente da estrutura do grafo, caso no qual a única função relevante é a distribuição de conectividade  $P(k)$ .

A probabilidade condicional  $P(k' \mid k)$ , a probabilidade de um vértice de grau  $k$  estar conectado a um vértice de grau  $k'$ , fornece mais detalhes sobre a correlação de graus na rede. Apesar de simples, o cálculo direto desta função a partir de dados empíricos geralmente é uma tarefa dispendiosa. Uma grandeza mais prática para estudarmos a estrutura da rede é dada pela média dos graus dos vizinhos mais próximos de um nó  $i$ :

$$k_{nn,i} = \frac{1}{k_i} \sum_{j \in \mathcal{V}(i)} k_j, \quad (2.16)$$

em que a soma é feita sobre os vértices que são vizinhos mais próximos de  $i$ . A partir desta grandeza, obtemos uma medida conveniente para investigar o comportamento da função de correlação de graus a partir do grau médio dos vizinhos mais próximos,  $k_{nn}(k)$ , para vértices de grau  $k$ :

$$k_{nn}(k) = \frac{1}{N_k} \sum_{i/k_i=k} k_{nn,i}, \quad (2.17)$$

em que  $N_k$  é o número de nós com grau  $k$ . Esta última quantidade é relacionada às correlações entre os graus de vértices que estão conectados e também pode ser escrita como

$$k_{nn}(k) = \sum_{k'} k' P(k' \mid k). \quad (2.18)$$

Se os graus de vértices vizinhos forem não correlacionados,  $P(k' \mid k)$  é uma função apenas de  $k'$  e, portanto,  $k_{nn}(k)$  é uma constante. Se houver correlações, identificamos duas classes gerais de redes analisando o comportamento de  $k_{nn}(k)$ . Se  $k_{nn}$  for uma função crescente de  $k$ , vértices com elevado grau tem uma probabilidade significativamente maior de estarem conectados a vértices que também possuam grau elevado e isso corresponde a uma rede associativa. Por outro lado, um comportamento decrescente da função  $k_{nn}(k)$  define uma rede desassociativa, no sentido que vértices com alto grau possuem uma vizinhança composta de vértices com grau baixo e o contrário é verdade para nós com menor grau.

É importante frisar, entretanto, que dada uma certa distribuição de conexões, uma rede de tamanho finito completamente decorrelacionada com relação a graus nem sempre é possível por causa de vínculos estruturais. De fato, qualquer rede com tamanho finito apresenta um *cu-*

*toff* estrutural  $k_c^3$  e o requisito de não haver ligações “soltas” faz com que sejam necessárias para construir uma rede não correlacionada múltiplas e auto-conexões, o que não se aplica a diversas redes de interesse. Redes com distribuições delimitadas e segundo momento  $\langle k^2 \rangle$  finito apresentam um grau máximo  $k_{max}$  abaixo do cutoff estrutural.

Para o caso de redes não correlacionadas, podemos obter uma forma explícita para a probabilidade condicional  $P(k' | k)$ . Conforme já mencionado, esta probabilidade não depende de  $k$  e sua forma funcional em termos de  $k'$  pode ser obtida calculando a probabilidade de que um dado vértice aponta para um outro vértice com grau  $k'$ . Esta probabilidade é dada pelo número total de ligações saindo de nós com grau  $k'$  dividido pelo número total de conexões que saem dos nós de qualquer grau. Já que cada um dos  $N_{k'}$  nós possui  $k'$  ligações, obtemos

$$P_{nc}(k' | k) = \frac{k' N_{k'}}{\sum_{k''} k'' N_{k''}}. \quad (2.19)$$

Considerando que  $P(k) = N_k/N$ , temos

$$P_{nc}(k' | k) = \frac{1}{\langle k \rangle} k' P(k'). \quad (2.20)$$

Segundo esta expressão, mesmo em uma rede descorrelacionada, a probabilidade de que qualquer ligação aponte para um nó com dado grau  $k'$  não é uniforme, mas proporcional ao próprio grau. Ou seja, seguindo qualquer conexão aleatoriamente é mais provável que terminemos em um nó com grau elevado (*hub*). Em um grafo, quanto mais conectado se é, mais fácil é de ser encontrado. Este resultado é especialmente relevante para o caso de redes em que os valores atribuídos para os graus variam muito e será particularmente útil em diversos cálculos analíticos onde a natureza heterogênea da rede afeta processos de equilíbrio e de não equilíbrio, mesmo no caso não correlacionado. Para este caso, o comportamento de  $k_{nn}(k)$  é facilmente obtido quando substituímos a equação (2.20) na equação (2.18):

$$k_{nn}^{nc}(k) = \frac{\langle k^2 \rangle}{\langle k \rangle}. \quad (2.21)$$

Logo, em uma rede aleatória não correlacionada, o grau médio dos vizinhos mais próximos não depende de  $k$  e assume um valor constante determinado pelos dois primeiros momentos da distribuição de conectividade.

## 2.3 Modelos clássicos de redes

Nesta seção, mostraremos alguns modelos de redes complexas que são muito importantes do ponto de vista prático e histórico, servindo mais tarde como ponto de partida e inspiração

<sup>3</sup>Valor máximo para o grau que um nó pode ter em uma dada rede

para a criação de modelos mais abrangentes. Maior ênfase será dada ao modelo de configurações, pois foi o utilizado nos resultados originais desta dissertação.

### 2.3.1 Grafo Aleatório

O modelo de grafo aleatório estático proposto por Erdős e Rényi [5] é um dos mais simples a apresentar o fator de aleatoriedade como elemento básico na construção de uma rede. Baseando-se na total falta de conhecimento sobre o que exatamente determina a maneira como são feitas as ligações entre os nós, o que se faz neste modelo é conectar pares de nós ao acaso com uma probabilidade  $p$ .

Na formulação original do modelo, é construído um grafo  $G(N, E)$  a partir de um conjunto de  $N$  vértices, que devem ser conectados por  $E$  ligações. Os pares de nós que cada ligação irá unir são escolhidos ao acaso dentre os  $N$  vértices. Em 1959, foi proposto [6] um modelo similar ao de Erdős-Rényi, que consiste na construção de um grafo  $G(N, p)$  a partir de  $N$  nós e cada uma das  $N(N - 1)/2$  ligações possíveis está presente com probabilidade  $p$  e ausente com a probabilidade complementar  $1 - p$ . A probabilidade de, ao contruir um grafo  $G(N, p)$ , obtermos um grafo particular  $G(N, E)$  é dada por uma distribuição binomial

$$P(G(N, E)) = p^E (1 - p)^{\frac{1}{2}N(N-1)-E}. \quad (2.22)$$

Levando em conta que cada ligação pode estar presente ou não, o ensemble de grafos  $G(N, p)$  é composto por  $2^{N(N-1)/2}$  elementos e algumas propriedades podem ser extraídas prontamente. Note que o número médio de ligações geradas na construção do grafo é dado por

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2}N(N - 1)p. \quad (2.23)$$

Mas, considerando que cada conexão contribui para aumentar em uma unidade o grau de dois nós simultaneamente, podemos obter o grau médio dos nós presentes no grafo como

$$\langle k \rangle = \frac{2\langle E \rangle}{N} = (N - 1)p \simeq Np, \quad (2.24)$$

em que consideramos um grafo com um número grande de vértices.

A fim de obter a distribuição de conectividade  $P(k)$  note que, considerando uma probabilidade de conexão  $p$ , a chance de criar um vértice de grau  $k$  equivale à probabilidade de que ele esteja conectado a um número  $k$  de vértices e desconectado dos outros  $N - 1 - k$  vértices restantes. Como a ligação de dois nós por uma conexão é um evento independente,  $P(k)$  é dado

pela distribuição binomial

$$P(k) = \binom{N-1}{k} p^k (1-p)^{N-1-k}. \quad (2.25)$$

Para valores grandes de  $N$  e tomando  $\langle k \rangle$  como uma constante, podemos aproximar esta distribuição como

$$P(k) = e^{-\langle k \rangle} \frac{\langle k \rangle^k}{k!}, \quad (2.26)$$

que é a conhecida distribuição de Poisson. Então, uma característica notável deste modelo é o fato de que a sua distribuição de conexões decai exponencialmente para grandes valores de  $k$ , de modo neste limite os valores para os graus apresentam baixas flutuações. Nesse sentido podemos considerar que este grafo aleatório é um exemplo básico de *rede homogênea* de modo que, para propósitos de caracterização estatística da rede, podemos considerar  $k \simeq \langle k \rangle$ .

Ainda para este modelo, podemos obter o coeficiente de agrupamento e extrair propriedades de mundo pequeno. Para um nó, a probabilidade de que quaisquer dois de seus vizinhos também estejam conectados entre si é dada pela probabilidade de conexão  $p$ . Assim, expressamos o coeficiente de agrupamento médio como

$$\langle C \rangle = p = \frac{\langle k \rangle}{N}. \quad (2.27)$$

Observe que, ao fixar  $\langle k \rangle$ ,  $\langle C \rangle$  vai a zero quando  $N \rightarrow \infty$ .

Para uma rede conectada de grau médio  $\langle k \rangle$ , o número médio de primeiros vizinhos de qualquer nó é dado por  $\langle k \rangle$ . Se a posição das conexões é completamente aleatória e considerarmos uma rede sem ciclos, podemos aproximar o número de vizinhos a uma distância  $d$  por  $\langle k \rangle^d$ . Agora, seja  $r_G$  tal que  $\langle k \rangle^{r_G} \simeq N$ . Temos que a grande maioria dos vértices está a uma distância  $r_G$  de um dado nó  $i$ , já que a grandeza  $\langle k \rangle^d$  cresce exponencialmente com  $d$ . Portanto, podemos aproximar o menor caminho médio por  $r_G$  para obter

$$\langle l \rangle \simeq \frac{\log N}{\log \langle k \rangle}. \quad (2.28)$$

O fato de  $\langle l \rangle$  escalar com o logaritmo do tamanho do sistema mostra que este modelo apresenta a propriedade de mundo pequeno, observada em um grande número de redes complexas.

### 2.3.2 O modelo de Watts-Strogatz

Como foi visto, para grafos aleatórios, o coeficiente de agrupamento depende da distribuição de ligações imposta e decai a zero no limite de grafos muito grandes. Porém, foi observado em muitas redes reais um valor muito grande para este coeficiente e isto trouxe a necessidade

de definir modelos de rede nos quais  $\langle C \rangle$  pode ter um valor arbitrário. Baseados na observação de que redes sociais apresentam um elevado agrupamento e, ao mesmo tempo, uma distância média entre vértices pequena, Watts e Strogatz [7] propuseram um modelo que se situa entre redes completamente ordenadas (que possuem  $\langle C \rangle$  grande) e redes puramente aleatórias (que apresentam  $\langle l \rangle$  pequeno).

No modelo original começa-se com um anel de  $N$  nós, de modo que cada um deles está simetricamente conectado aos seus  $2m$  vizinhos mais próximos<sup>4</sup>. Em seguida, para cada vértice, redireciona-se uma ligação para qualquer outro nó da rede (evitando auto-conexões) com probabilidade  $p$  e a ligação permanece inalterada com probabilidade  $1 - p$ . Este procedimento cria *atalhos* entre nós distantes no anel, de modo que o nível de aleatoriedade do grafo obtido ao fim do processo é regulado pelo parâmetro  $p$  e obtemos um grafo com  $\langle k \rangle = 2m$ . A distribuição  $P(k)$  pode ser obtida analiticamente e, tomando o limite  $p \rightarrow 1$ , a distribuição de conectividade é expressa como

$$P(k) = \frac{m^{k-m}}{(k-m)!} e^{-m}, \quad (2.29)$$

que é uma distribuição de Poisson para a variável  $k' \equiv k - m$ , cujo valor médio é dado por  $\langle k' \rangle = m$ .

Em essência,  $P(k)$  apresenta as mesmas características de um grafo aleatório homogêneo, mas  $p$  afeta fortemente os valores para o coeficiente de agrupamento e para o menor caminho médio. Quando  $p = 0$ , o número de conexões que une os vizinhos de cada vértice é igual a  $3m(m-1)/2$  e o número total de ligações possíveis é igual a  $2m(2m-1)/2$ . Isso nos leva a um coeficiente de agrupamento

$$\langle C \rangle = \frac{3(m-1)}{2(2m-1)}. \quad (2.30)$$

Enquanto isso, o menor caminho médio escala como em uma cadeia unidimensional:  $\langle l \rangle \sim N$ . Isso muda quando começamos a considerar uma probabilidade  $p$  não nula. Para valores pequenos de  $p$ , a rede mantém uma “memória” de um reticulado e, por consequência,  $\langle C \rangle$  é grande. Em particular, a dependência deste coeficiente com a probabilidade de redirecionamento é dada por [8]

$$\langle C(p) \rangle \simeq \frac{3(m-1)}{2(2m-1)} (1-p)^3. \quad (2.31)$$

Um fato interessante é que, mesmo com  $p$  pequeno, o surgimento de atalhos ligando pares de vértices distantes é responsável por reduzir drasticamente o menor caminho médio, enquanto que, para  $p \rightarrow 1$ , a rede tende a tornar-se um grafo aleatório. Vale observar que, mesmo no limite  $p \rightarrow 1$ , cada vértice mantém um grau mínimo  $m$ , de modo que localmente este modelo de rede não é equivalente ao modelo Erdős-Rényi. Este modelo é uma contribuição muito importante para a modelagem de redes sociais e outros sistemas, já que permite o ajuste de  $\langle C \rangle$  de maneira consistente com a teoria de grafos aleatórios estáticos [3], além de explicar os altos

<sup>4</sup>Cada nó em questão conecta-se com  $m$  nós vizinhos à esquerda e outros  $m$  nós à direita dele.

coeficientes de agrupamento observados em redes reais.

### 2.3.3 O modelo de Barabási-Albert

Em 1998, Albert *et al* [10] iniciaram um projeto para mapear a *World Wide Web* (WWW), esperando encontrar uma rede aleatória. Um software desenvolvido especialmente para este fim navegou de uma página à outra ao longo de um pequeno pedaço da Internet (mais especificamente, 325.729 sítios) e coletou todos os links disponíveis. O resultado foi surpreendente: apenas algumas poucas páginas muito conectadas (*hubs*) realmente mantinham toda a rede unida e coesa. Segundo os dados dos pesquisadores em questão, mais de 80% das páginas mapeadas possuíam menos de 4 conexões, porém, menos de 0,01% dos sítios possuía mais 1000 conexões! De fato, foi observado para esta rede que a probabilidade  $P(k)$  de um dado nó ter um número  $k$  de conexões é dada pela expressão  $P(k) \sim k^{-\gamma}$  (ou seja, trata-se de uma rede sem escala, com  $\gamma \approx 2$  neste caso), uma lei de potência em vez da curva em forma de sino que se esperava. Esta rede não é “democrática” em relação à distribuição de conexões e a curva em lei de potência descreve justamente sistemas nos quais alguns poucos hubs dominam, tais como Google, Yahoo e MSN. Nos últimos anos foram encontrados vários outros sistemas com distribuições similares, tais como: a estrutura física da Internet, redes de relacionamento sexual, a rede de pessoas conectadas por e-mail, a rede de colaboração de pesquisadores, redes de negócios, redes de atores de Hollywood e redes de interação de proteínas [10].

Entretanto, ainda permanecia a questão: qual o mecanismo responsável pelo surgimento das redes sem escala? Para responder esta questão, em 1999 Barabási e Albert [11] propuseram uma abordagem mais voltada à assimilação e evolução da rede, ou seja, enfatizando diretamente a captura da dinâmica da mesma. A topologia da rede pode ser obtida corretamente também, mas passou a ser um subproduto desta dinâmica. Esta abordagem dinâmica define a classe dos *modelos de conexão preferencial*, que exemplifica a emergência de redes com distribuição do tipo cauda pesada em termos dos processos elementares que governam o modo como são feitas as ligações de novos vértices adicionados ao grafo.

Albert e Barabási argumentaram que a natureza sem escala de redes reais é dada por dois mecanismos genéricos: *crescimento*, dado pela adição de novos nós à rede, e *ligação preferencial*, de modo que a “preferência de ligação” para estes novos nós adicionados depende do número de conexões de cada um dos nós já presentes na rede. Por exemplo, quando buscamos algo em um sítio de buscas na Internet é mais provável que o resultado da busca traga na página principal links para documentos bastante populares, que já estão altamente conectados. Estes dois mecanismos genéricos inspiraram a introdução do modelo Barabási-Albert, que levou pela primeira vez à obtenção de uma rede sem escala. A diferença entre redes aleatórias e sem escala é ilustrada na figura 2.4.

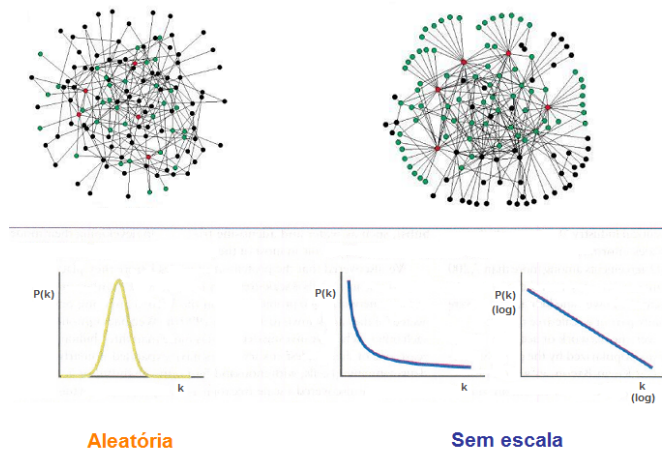


Figura 2.4: Diferenças básicas entre redes aleatórias e redes sem escala. Adaptado de [9] e [10].

Assim, combinando o fator ligação preferencial com a tendência de crescimento observada em muitas redes naturais define-se o modelo:

- **Crescimento:** começando com um pequeno número  $m_0$  de nós interconectados, a cada passo de tempo um novo nó é adicionado e se conecta com  $m$  outros vértices já existentes na rede.
- **Ligação preferencial:** ao escolher os nós com os quais o novo nó deverá se conectar, considera-se que a probabilidade  $\Pi$  de que um novo nó conecte-se ao nó  $i$  depende do número de ligações (ou grau)  $k_i$  deste nó da seguinte maneira:

$$\Pi(k_i) = \frac{k_i}{\sum_j k_j}, \quad (2.32)$$

em que o somatório no denominador é a soma dos graus de todos os vértices na rede. Estas regras definem uma classe de algoritmos que geram grafos conectados com grau médio fixo  $\langle k \rangle = 2m$ . Este tipo de algoritmo naturalmente tende a fornecer uma distribuição de conectividade estacionária da forma  $P(k) \sim k^{-3}$ , quando  $N \rightarrow \infty$  (figura 2.5).

Para este modelo, a distribuição de conexões é escrita como [3]

$$P(k, t) = \frac{t + (m_0/2m)\langle k \rangle_0}{t + m_0} 2m^2 k^{-3}, \quad (2.33)$$

em que  $\langle k \rangle_0$  é a conectividade média do núcleo inicial com  $m_0$  vértices. No limite em que  $t \rightarrow \infty$ , temos

$$P(k) = 2m^2 k^{-3}. \quad (2.34)$$

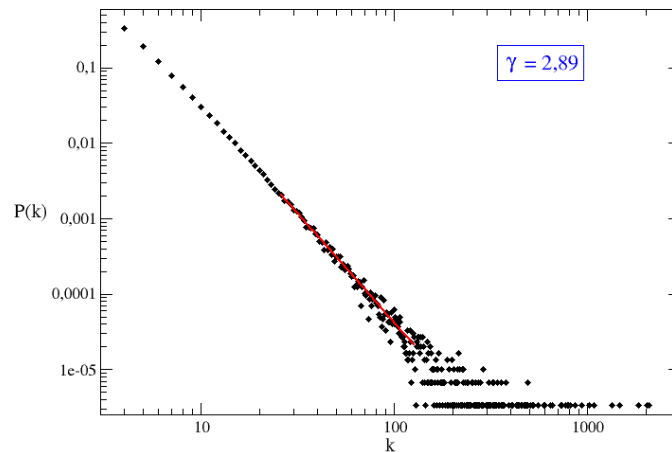


Figura 2.5: Distribuição de conexões  $P(k)$  para uma rede Barabási-Albert.

Finalmente, o coeficiente de agrupamento é dado por

$$\langle C \rangle = \frac{m}{8N} (\ln N)^2 \quad (2.35)$$

e o menor caminho médio por

$$\langle l \rangle \sim \frac{\log N}{\log \log N}. \quad (2.36)$$

### 2.3.4 Modelo de configurações

Foi observado que a maioria das redes reais apresentam correlações entre graus. No entanto, para muitos propósitos, as redes aleatórias não correlacionadas são importantes, especialmente no estudo de sistemas dinâmicos, cujas soluções analíticas geralmente estão disponíveis somente para este tipo de rede [12].

O algoritmo mais conhecido para construir redes aleatórias com uma distribuição  $P(k)$  arbitrária é o modelo de configurações (*configuration model*, ou CM). Pela definição original do algoritmo, atribui-se a cada vértice  $i$  (dentre  $N$  vértices) um número  $k_i$  de ligações que este nó irá fazer, de acordo com a distribuição  $P(k)$ , com  $m \leq k_i \leq N$  e impondo a condição de que  $\sum_i k_i$  seja um número par. Completa-se a rede unindo estas ligações entre pares de nós escolhidos ao acaso de acordo com uma distribuição de probabilidades uniforme. Desse modo, ao fim do procedimento teremos uma rede com distribuição de conexões  $P(k)$  que, em princípio, não apresenta correlações entre graus, pois os nós foram escolhidos de maneira aleatória.

Esta receita funciona muito bem para redes nas quais  $\langle k^2 \rangle$  é finito. Porém, para redes sem escala, deve-se tomar um certo cuidado. De fato pode-se mostrar que, para estas redes, é possível construir uma rede não correlacionada apenas assinalando aleatoriamente os graus para cada nó de acordo com a distribuição desejada. No entanto, procedendo deste modo, haverá uma fração de auto-conexões e conexões múltiplas, que são perfeitamente aceitáveis no contexto da

teoria de grafos, mas em geral não servem para a modelagem de sistemas reais. Normalmente bastaria impor restrições para evitar múltiplas e auto-conexões durante o processo de construção do sistema, porém, ao fazer isso nota-se que surgem correlações na rede.

De acordo com [12], para construirmos uma rede descorrelacionada, evitando auto-conexões e ligações múltiplas, o cutoff  $k_c$  da rede deve crescer no máximo tão rapidamente quanto  $N^{1/2}$ . De fato pode-se mostrar que, para uma rede com distribuição em lei de potência gerada pelo algoritmo CM,

$$k_c(N) \sim N^{1/(\gamma-1)}. \quad (2.37)$$

Se tomarmos  $\gamma < 3$  obtemos  $k_c > N^{1/2}$ , o que explica o fato de haverem correlações inevitáveis quando utilizamos este algoritmo. Para  $\gamma \geq 3$  esse problema não ocorre, já que neste caso  $k_c(N) \leq N^{1/2}$ .

Assim, já que o problema está na forma como  $k_c$  escala com o tamanho da rede, foi proposto [12] o algoritmo do modelo de configurações descorrelacionado (originalmente, *uncorrelated configuration model*, ou UCM), que baseia-se nos seguintes passos:

- Assinale para cada vértice  $i$  (de um conjunto de  $N$  vértices desconectados), um número  $k_i$  de ligações que este nó fará, de acordo com a distribuição  $P(k) \sim k^{-\gamma}$ , impondo que  $\sum_i k_i$  seja par e  $m \leq k_i \leq N^{1/2}$ .
- Construa a rede conectando as ligações em pares de nós escolhidos aleatoriamente de acordo com uma distribuição de probabilidades uniforme, evitando auto-conexões e conexões múltiplas.

Conforme discutido anteriormente neste capítulo, para redes não correlacionadas o grau médio dos primeiros vizinhos  $k_{nn}(k)$  deve ser independente de  $k$ . Isso pode ser observado no gráfico da figura 2.6. Na figura 2.7 mostramos a distribuição de conexões para alguns valores de  $\gamma$ . Neste trabalho, o algoritmo UCM será utilizado no estudo de um processo dinâmico em uma rede sem escala.

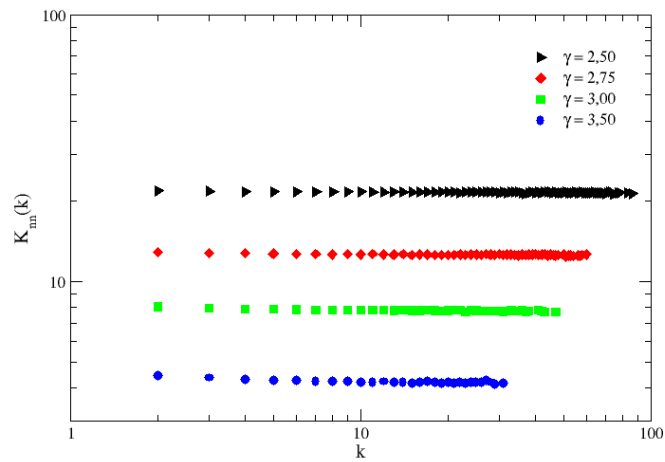


Figura 2.6: Gráfico  $k_{nn} \times k$  gerado para  $N = 10000$  e  $m = 6$ .

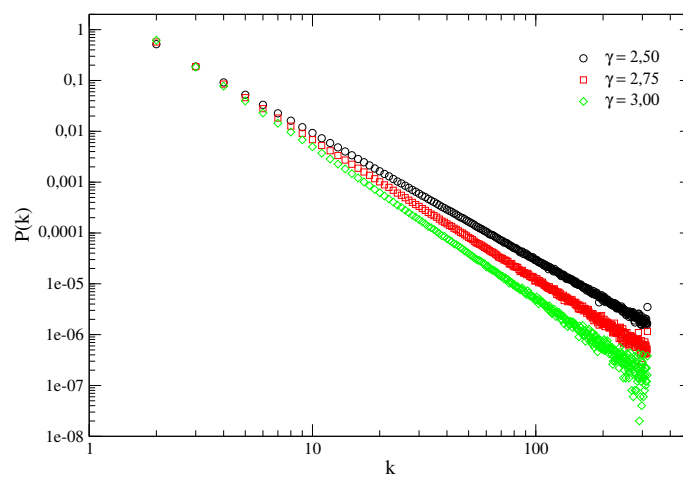


Figura 2.7: Gráfico  $P(k) \times k$  gerado com os mesmos parâmetros da figura anterior.

# Capítulo 3

## Transições de fase para estados absorventes

O objetivo deste capítulo é apresentar de maneira geral algumas idéias e conceitos que serão utilizados ao longo desta dissertação, tais como ferramentas para o estudo de fenômenos críticos (tanto no equilíbrio quanto fora do equilíbrio) e a descrição de um sistema de partículas por meio de equações mestras. Enfatizaremos processos nos quais há transição de fase para um estado absorvente, utilizando como exemplos principais o *processo de contato* e o *processo de contato por pares*.

### 3.1 Processos dinâmicos

Para descrever a dinâmica de um sistema de partículas estocástico é conveniente associar a cada sítio  $i$  da rede uma variável  $\sigma_i$ , que caracteriza o seu estado dinâmico. Se cada nó representa um indivíduo, a variável  $\sigma_i$  pode representar um certo atributo particular deste indivíduo. Por exemplo, consideremos o caso típico do espalhamento de uma epidemia: nesse cenário,  $\sigma_i$  indica se o indivíduo  $i$  está saudável ou infectado por uma dada doença. Para cada nó, podemos enumerar todos os estados possíveis  $\sigma_i = 0, 1, 2, \dots, \alpha$  e o conhecimento da variável de estado de todos os nós da rede nos permite definir um estado microscópico do sistema (microestado), ou seja, podemos representar uma configuração particular no tempo  $t$  pelo conjunto  $\sigma(t) = (\sigma_1(t), \sigma_2(t), \dots, \sigma_N(t))$ , em que  $i = 1, 2, \dots, N$ .

#### 3.1.1 A equação mestra

Em geral, não é possível seguir estritamente a dinâmica microscópica de sistemas muito grandes devido ao enorme número de variáveis envolvidas e à natureza estocástica intrínseca da maioria dos fenômenos em questão. A dinâmica do processo é dada através de transições ins-

transições  $\sigma \rightarrow \sigma'$ , que ocorrem espontaneamente a uma taxa  $W_{\sigma \rightarrow \sigma'} \geq 0$ . Sendo assim, temos que o estado inicial, o conjunto de todas as configurações e as taxas de transição descrevem por completo o *modelo estocástico* a ser estudado.

Seja  $P(\sigma, t)$  a probabilidade de, no instante de tempo  $t$ , encontrarmos o sistema no microestado  $\sigma$ . Considere que  $W_{\sigma \rightarrow \sigma'}$  é a taxa por unidade de tempo<sup>1</sup> com que ocorre a transição de um estado  $\sigma$  para um estado  $\sigma'$ . Se a evolução temporal de  $P(\sigma, t)$  pode ser determinada completamente pela distribuição de probabilidade no tempo  $t$  (sem depender do histórico da evolução do sistema) diz-se que o processo dinâmico apresenta a propriedade *markoviana*.

Podemos descrever a dinâmica de um sistema estocástico na forma de uma *equação mestra*, que será formulada em termos das taxas  $W$  de transição entre cada estado. Trata-se de uma equação diferencial linear que descreve o fluxo de probabilidade “entrando” e “saindo” de uma certa configuração  $\sigma$ . A equação de evolução temporal para  $P(\sigma, t)$ , ou equação mestra, é dada por

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\sigma, t) = \underbrace{\sum_{\sigma'} W_{\sigma' \rightarrow \sigma} P(\sigma')}_{\text{entrando}} - \underbrace{\sum_{\sigma'} W_{\sigma \rightarrow \sigma'} P(\sigma)}_{\text{saindo}}. \quad (3.1)$$

Há um balanceamento entre os termos de entrada e saída, de modo que deve ser obedecida a condição de normalização

$$\sum_{\sigma} P(\sigma, t) = 1. \quad (3.2)$$

Em princípio, de posse da solução formal da equação mestra podemos calcular os valores esperados de todas as grandezas de interesse do sistema. Dada qualquer função de estado  $A(\sigma)$ , obtém-se prontamente seu valor médio no tempo  $t$  como

$$\langle A(t) \rangle = \sum_{\sigma} A(\sigma) P(\sigma, t), \quad (3.3)$$

em que  $\langle A(t) \rangle$  representa a média de  $A(t)$ . Esta grandeza pode ser pensada como uma média sobre diferentes realizações estocásticas da evolução de um mesmo sistema começando com as mesmas condições iniciais. Neste contexto, há um interesse especial por sistemas que possuam um limite assintótico bem definido:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P(\sigma, t) = P_{\infty}(\sigma). \quad (3.4)$$

Então dizemos que o sistema está em um *estado estacionário*, no qual a média sobre a distribuição estacionária vale como representação do sistema após um certo tempo transiente.

A equação mestra descreve um *processo de Markov*, processo este que não possui uma “memória intrínseca”. Em sistemas que apresentam um número finito de estados, esta característica garante a unicidade do estado estacionário[13]. Em geral, para a maioria dos sistemas (mesmo

<sup>1</sup>Vale ressaltar que, em geral, os coeficientes  $W$  não são probabilidades. Logo, podem ser maiores que 1.

alguns muito simples), não é possível obter uma solução analítica da equação mestra. Assim, é comum empregar métodos de aproximação para a obtenção de uma solução. A aproximação de *campo médio* (CM) é uma das abordagens mais comuns e consiste em substituir as variáveis microscópicas pelos seus valores médios, sejam estes temporais ou espaciais. Estes modelos de CM levam a equações cinéticas que apesar de serem, em geral, acopladas e não lineares, podem ser analisadas numericamente de maneira mais simples.

Uma outra possibilidade, que será muito utilizada nesta dissertação, é o estudo dos modelos estocásticos por meio de simulações computacionais, nas quais taxas e probabilidades são representadas no computador com o uso de geradores de números aleatórios. Calcula-se numericamente a distribuição de estados do processo através da escolha aleatória dentre as possíveis transições para um estado, associando uma certa probabilidade a cada uma destas transições. Ao fim de cada transição, tipicamente incrementa-se o tempo em unidades de *passos de Monte Carlo*[14]. Espera-se que o sistema atinja o estado estacionário após um certo número de passos e que a distribuição dos estados convirja para a distribuição que é solução estacionária da equação mestra que descreve tal processo.

Um processo markoviano obedece à condição de *balanço detalhado* se a equação

$$W_{\sigma' \rightarrow \sigma} P(\sigma') = W_{\sigma \rightarrow \sigma'} P(\sigma) \quad (3.5)$$

é verificada para todo par de estados  $\sigma$  e  $\sigma'$ . Esta é uma condição forte que, em outras palavras, nos diz que cada par de termos de “entrada” e “saída” na equação mestra tem contribuição nula. No equilíbrio devemos ter

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\sigma, t) = 0, \quad (3.6)$$

logo conclui-se que o balanço detalhado é uma condição suficiente para o equilíbrio. Processos fora do equilíbrio não satisfazem esta condição, pelo menos não localmente. Na maioria dos casos, este tipo de processo está sujeito a forças e correntes externas, adição de energia ou novas partículas, ou até mesmo apresenta dissipação. Por consequência, em geral, a distribuição estacionária de probabilidade fora do equilíbrio é desconhecida<sup>2</sup>. A condição de balanço detalhado nos diz se o sistema é reversível microscopicamente ou não.

## 3.2 Processos em equilíbrio

Apesar de, na maioria dos casos, ser impossível obter uma solução da equação mestra, a hipótese ergódica e o axioma de maximização de entropia nos permitem obter uma forma explícita para a distribuição estacionária  $P_{\infty}(\sigma) = P_{eq}(\sigma)$  de sistemas físicos em equilíbrio. De acordo com a Mecânica Estatística de equilíbrio, um sistema estocástico isolado em um

<sup>2</sup>Note que a falta de balanço detalhado não implica a ausência de um estado estacionário.

estado estacionário maximiza sua entropia, ou seja, durante sua evolução o sistema assume todas as configurações possíveis de mesma energia (fixa) com igual probabilidade, formando o chamado ensemble micro-canônico. Em adição a isso, a hipótese ergódica atesta que, para sistemas isolados, a média sobre a evolução temporal de qualquer quantidade de interesse é igual a média sobre a distribuição estacionária de equilíbrio. Entretanto, em geral, sistemas físicos não são isolados, mas acoplados a um banho térmico externo que mantém fixa a temperatura de equilíbrio do sistema. Considerando que o axioma de maximização de entropia se aplica a este sistema acoplado e que a energia se conserva globalmente, a distribuição estacionária não é mais uniforme e a distribuição de equilíbrio agora é dada pela famosa distribuição de Boltzmann-Gibbs

$$P_{eq}(\sigma) = \frac{1}{Z} \exp(-H(\sigma)/k_B T), \quad (3.7)$$

em que  $T$  é a temperatura do banho térmico,  $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $H(\sigma)$  é a hamiltoniana que expressa a energia associada a cada configuração do sistema. A *função partição*  $Z$  é um fator de normalização obtido por meio da condição  $\sum_{\sigma} P_{eq}(\sigma) = 1$  e é expresso como

$$Z = \sum_{\sigma} \exp(-H(\sigma)/k_B T). \quad (3.8)$$

Isto significa que, no equilíbrio, não é necessário resolver a equação mestra, já que conhecemos a distribuição estacionária de antemão. Basta termos a expressão da hamiltoniana para que as propriedades estacionárias do sistema sejam obtidas. Porém, vale lembrar que a maioria dos processos dinâmicos relevantes para aplicações no mundo real são fenômenos de não equilíbrio, para os quais não é possível prover uma formulação em termos dos conceitos da termodinâmica de equilíbrio.

### 3.2.1 Transições de Fase

Há muito tempo a Mecânica Estatística tem dedicado esforços para compreender o fenômeno das transições de fase: na medida em que variamos um parâmetro externo, ocorre uma mudança no comportamento macroscópico do sistema em questão. O exemplo mais comum, porém não-trivial, de uma transição de fase é a transformação da água entre as fases líquida, sólida e gasosa, quando se varia a sua temperatura: na pressão atmosférica, a água torna-se gelo sólido precisamente a  $0^{\circ}C$  e sofre ebulição a  $100^{\circ}C$ . Outro exemplo é a mudança de fase em um material ferromagnético: acima de uma certa temperatura crítica, o material muda da fase ferromagnética para a fase paramagnética. Neste exemplo, a magnetização é o *parâmetro de ordem* do sistema, a temperatura é o *parâmetro de controle* e a temperatura crítica na qual ocorre a transição de fase denominamos *ponto crítico*.

Segundo a teoria fenomenológica de Landau, em uma transição contínua o parâmetro de or-

dem varia continuamente entre as fases do sistema, enquanto que em uma transição descontínua o parâmetro de ordem apresenta um “salto” no ponto de transição.

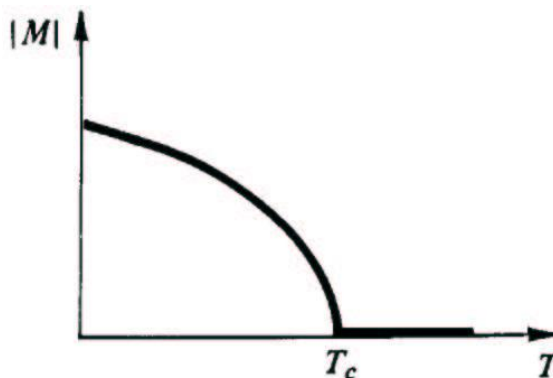


Figura 3.1: Gráfico que ilustra a transição de fase em um ferromagneto, com campo externo nulo. Figura retirada de [13].

No ponto crítico, os potenciais termodinâmicos não são analíticos (as derivadas acima de uma certa ordem divergem), caracterizando a transição de fase. Quando uma *derivada primeira* da energia livre é descontínua temos uma transição de fase de *primeira ordem* e, quando a singularidade ocorre na *derivada segunda* da energia livre, temos uma transição de fase de *segunda ordem*. Esta não-analiticidade não aparece em sistemas pequenos. A causa de tal comportamento singular é dada por flutuações microscópicas que atingem escalas macroscópicas, originando um comportamento coletivo que fica melhor caracterizado quando investigamos a correlação entre os constituintes do sistema. No exemplo da solidificação da água, a entropia do sistema (uma derivada primeira da energia livre de Gibbs) é descontínua, caracterizando uma transição de fase de primeira ordem. No caso do ferromagneto, a transição é classificada como sendo de segunda ordem, pois a singularidade ocorre na derivada segunda da energia livre.

Sistemas estacionários fora do equilíbrio podem sofrer transições de fase. Entretanto, diferentemente de sistemas em equilíbrio termodinâmico, geralmente não podemos relacionar as grandezas relevantes do problema a derivadas da energia livre[15]. Conhecemos estas transições por transições cinéticas, ou transições de não-equilíbrio[16, 17].

### 3.3 Processos fora do equilíbrio

Um processo é considerado fora do equilíbrio se sua dinâmica microscópica viola o princípio da reversibilidade microscópica (ou balanço detalhado). De um modo geral, todos os sistemas macroscópicos que estão submetidos a uma força externa não-conservativa ou a uma fonte de energia situam-se fora do equilíbrio. Isso geralmente é devido ao fato de que, mesmo no estado estacionário, a transição para um certo subconjunto pode ser favorecida. Existem pro-

cessos que violam o princípio da reversibilidade microscópica de tal modo que não podemos aplicar os conceitos da mecânica estatística de equilíbrio sequer de maneira aproximada. Estes processos são chamados de processos *longe do equilíbrio*.

Em particular, temos sistemas com *estados absorventes*. Esta denominação é atribuída a uma configuração na qual um sistema fora do equilíbrio pode ficar “aprisionado” em definitivo durante sua evolução. Um estado absorvente pode ser atingido a partir de outros estados, mas qualquer outro estado não pode ser atingido a partir do estado absorvente. Para um sistema finito com pelo menos um estado absorvente acessível, os estados não absorventes são chamados de estados *transientes*. Processos com estados absorventes são um tipo de processo longe do equilíbrio.

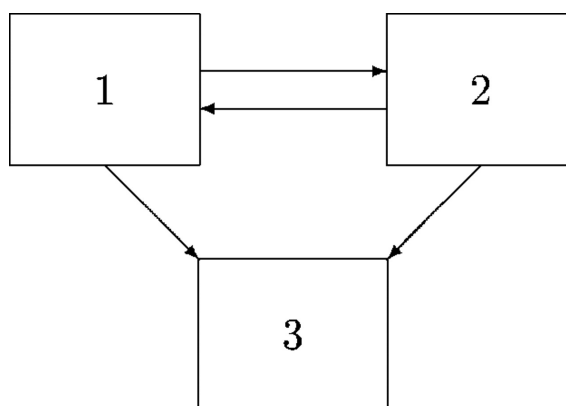


Figura 3.2: Um simples processo de três estados. Os estados 1 e 2 são transientes, enquanto o estado 3 é absorvente.

Para exemplificar, considere um processo simples que possui apenas 3 estados possíveis. As possíveis transições são exibidas de maneira esquemática na figura 3.2. Note que é possível acessar os estados 2 e 3 a partir do estado 1, assim como é possível fazer a transição para os estados 1 ou 3 a partir de 2. Ou seja, para este modelo, partindo de 1 ou 2 é possível acessar qualquer outra configuração do sistema, fato que caracteriza estes estados como sendo transientes. Porém, uma vez que o sistema atinge o estado 3, jamais sairá desta configuração. Empregando um certo coloquialismo, pode-se dizer que a dinâmica do sistema foi “absorvida” no instante em que o estado absorvente 3 foi atingido.

Um tipo especial de transição de fase fora do equilíbrio (e que aparece com grande frequência neste trabalho) é a que ocorre em sistemas com estados absorventes que admitem um ou mais estados estacionários ativos (não-triviais) além do estado estacionário absorvente. Denotamos estas transições por *transições de fase para estados absorventes*.

Processos com estados absorventes aparecem com frequência na modelagem de muitos fenômenos de diversas áreas do conhecimento, tais como reações químicas, epidemiologia e dinâmica populacional.

## 3.4 Universalidade

O conceito de universalidade [18] é uma idéia importante para o estudo de transições de fase, tanto no equilíbrio quanto longe dele. Em Física Estatística, universalidade é a observação de que existem propriedades para uma grande classe de sistemas que não dependem dos detalhes dinâmicos. Com este conceito, esperamos que o comportamento crítico de tais transições possa ser associado a um conjunto finito de possíveis classes, as quais chamamos de classes de universalidade. Esta noção de universalidade foi proposta originalmente por físicos experimentais cujo objetivo era descrever a observação de que vários sistemas aparentemente sem relação apresentavam o mesmo tipo de comportamento singular em uma transição de fase. Transições contínuas são caracterizadas pela ausência de um comprimento característico que, em geral, são caracterizados por leis de potência. Analisamos as classes de universalidade em termos de expoentes e funções de escala definidos próximos da criticalidade. Logo, uma estimativa precisa destes expoentes é de fundamental importância.

### 3.4.1 Expoentes críticos

Na Mecânica Estatística de equilíbrio, podemos descrever as transições de fase em termos de uma teoria de escala fenomenológica. Por exemplo, considerando que um campo externo  $H$  é nulo temos que, abaixo de uma certa temperatura crítica<sup>3</sup>  $T_c$ , um ferromagneto ideal apresenta uma magnetização  $M$  não nula. Foi observado que na fase ordenada ( $T < T_c$ ), na medida em que nos aproximamos de  $T_c$ , essa magnetização espontânea vai a zero seguindo uma lei de potência

$$|M| \sim (T_c - T)^\beta. \quad (3.9)$$

O expoente  $\beta$  é um *expoente crítico*.

Também foram introduzidos outros expoentes para descrever o comportamento de grandezas tais como o calor específico  $C$  e a susceptibilidade magnética  $\chi$  que, na criticalidade, também apresentam comportamentos em leis de potência:

$$C \sim |T_c - T|^{-\alpha} \quad (3.10)$$

$$\chi \sim |T_c - T|^{-\gamma}. \quad (3.11)$$

Sabemos que grandezas físicas como calor específico, susceptibilidade magnética e magnetização são propriedades macroscópicas da matéria, fazendo parte da descrição termodinâmica de um sistema. Mas, como o nosso objetivo é estudar o comportamento do sistema próximo a uma transição de fase, é necessário entender o que acontece neste sistema em uma escala mi-

<sup>3</sup>Esta temperatura crítica é conhecida como *temperatura de Curie*.

croscópica.

Para obter uma descrição microscópica dessa transição de fase ferromagnética, a interação entre *spins* é o elemento mais importante. O modelo microscópico mais simples utilizado para descrever a transição de fases em um ferromagneto é o modelo de Ising, cuja hamiltoniana é definida como

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j, \quad (3.12)$$

em que  $J$  é a *constante de troca*,  $\sigma_i = \pm 1$  é a variável de spin que representa o momento magnético em cada sítio e o índice  $\langle i, j \rangle$  indica que a soma deve ser feita sobre sítios  $i$  e  $j$  que sejam primeiros vizinhos. Graças à sua simplicidade, o modelo de Ising tem sido estudado extensivamente tanto em situações nas quais os elementos do sistema estão localizados em redes regulares  $D$ -dimensionais, quanto no caso em que todos estão conectados uns aos outros. O primeiro caso corresponde à situações mais próximas da realidade dos materiais magnéticos; por outro lado, no segundo caso, cada spin está submetido à mesma “influência” (ou campo médio) com relação aos outros.

É útil definir uma função de correlação,  $c(r)$ ,

$$c(r) = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \quad (3.13)$$

em que  $r = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ . Esta função permite analisar como a variável de estado em uma posição correlaciona-se com o estado de um sítio que está a uma distância  $r$ . Assim, se fizermos  $r \rightarrow \infty$ ,  $c(r)$  vai a zero. Para valores longe do ponto crítico,  $c(r)$  decai exponencialmente como

$$c(r) \sim e^{-r/\xi}, \quad (3.14)$$

em que  $\xi$  é o *comprimento de correlação* do sistema, dependente da temperatura.

Para temperaturas próximas de  $T_c$ , observa-se o aparecimento de correlações de longo alcance (ou seja,  $\xi \rightarrow \infty^4$ ) e, nessas condições, a função de correlação tem um decaimento dado por

$$c(r) \sim \frac{1}{r^{d-2-\eta}}, \quad (3.15)$$

em que  $d$  é a dimensão do sistema e  $\eta$  é um expoente crítico associado à função de correlação.

Isso quer dizer que, fora da criticalidade, um sistema composto por muitos corpos apresenta correlações entre seus constituintes que estão limitadas por um comprimento  $\xi$ . Na criticalidade, as correlações decaem lentamente, sem que haja qualquer comprimento característico. Quando  $T \rightarrow T_c$ , o comprimento de correlação diverge como

$$\xi \sim |T - T_c|^{-\nu}, \quad (3.16)$$

---

<sup>4</sup>Esta divergência de  $\xi$  é a origem primária de todos os fenômenos que são associados à criticalidade.

em que  $\nu$  é outro expoente crítico. De fato, caracterizamos o ponto crítico pela inexistência de uma escala de comprimento, o que torna o sistema invariante sob transformações de escala.

No caso das transições de fase para estados absorventes ocorre algo similar. Entretanto, sistemas longe do equilíbrio devem necessariamente possuir uma dinâmica, de modo que agora existem dois comprimentos de correlação diferentes: o *comprimento de correlação espacial*  $\xi_{\perp}$  e o *comprimento de correlação temporal*  $\xi_{\parallel}$ , juntamente com os respectivos expoentes associados  $\nu_{\perp}$  e  $\nu_{\parallel}$ . Chama-se a razão entre esses expoentes,  $z = \nu_{\parallel}/\nu_{\perp}$ , de *expoente dinâmico* por relacionar as escalas espacial e temporal na criticalidade.

### 3.5 Processo de contato

O Processo de contato (PC) foi proposto por T. E. Harris em 1974 como um modelo simples para propagação epidêmica. Na interpretação do modelo, cada sítio  $i$  de uma rede (no caso mais típico, uma rede hipercúbica  $d$ -dimensional) representa um indivíduo que pode estar em um de dois estados: infectado ( $\sigma_i = 1$ ) ou saudável ( $\sigma_i = 0$ ). Com frequência nos referimos a sítios infectados como *sítios ocupados* e a sítios saudáveis como *sítios vazios*. Para este modelo diz-se que sítios ocupados são *sítios ativos* e estes, por sua vez, transmitem a infecção através do contato com os vizinhos mais próximos. Um sítio vazio somente pode tornar-se ocupado ( $\sigma_i(t) = 0 \rightarrow \sigma_i(t) = 1$ ) se houver um primeiro vizinho que está ocupado. Esta ocupação se dá a uma taxa  $\lambda m$ , em que  $\lambda$  é a taxa de infecção (ou taxa de replicação) para o sistema e  $m$  é a fração de primeiros vizinhos do sítio  $i$  que está infectada. Por sua vez, sítios infectados se recuperam a uma taxa unitária e prontamente estão suscetíveis à reinfeção. Consequentemente, é fácil perceber que o estado  $\sigma_i = 0, \forall i$  é um estado absorvente.

Pode-se interpretar o PC como um processo no qual uma certa condição transiente ou excitação se espalha através de uma influência de curto alcance [19] e se este espalhamento não for suficientemente rápido, tal excitação do sistema desaparece. A fronteira existente entre a persistência e a extinção da atividade é marcada por um ponto crítico  $\lambda_c$ .

No PC o parâmetro de ordem, de maneira análoga à magnetização no modelo de Ising, é a densidade de sítios ativos (ou partículas) no estado estacionário,  $\bar{\rho}$ , que é nula no estado absorvente. Na medida em que  $\lambda$  aumenta além de  $\lambda_c$ , ocorre uma transição de fase contínua do estado absorvente para um estado ativo estacionário, como ilustrado na figura 3.3.

Este modelo não possui solução exata, mas várias propriedades importantes dele estão rigorosamente bem estabelecidas e seus parâmetros críticos são conhecidos com elevada precisão por meio de estudos numéricos. Assim, é comum dizer que o PC é o “modelo de Ising” das transições de fase para estados absorventes, servindo muito bem como ponto de partida para o estudo de problemas de não equilíbrio.

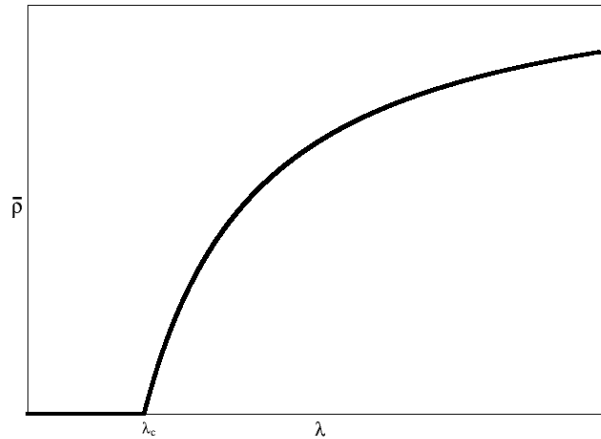


Figura 3.3: Densidade de partículas no estado estacionário em função da taxa de replicação para o PC unidimensional.

### 3.5.1 Criticalidade

No estado estacionário, quando o sistema se encontra próximo ao ponto crítico, observa-se que a densidade de sítios ativos segue uma lei de potência

$$\bar{\rho} \sim |\lambda - \lambda_c|^\beta, \quad (3.17)$$

em que  $\bar{\rho} = \rho(\infty)$  e  $\beta$  é o expoente crítico associado ao parâmetro de ordem.

Para analisarmos a evolução temporal do PC (figura 3.4) é conveniente começar a evolução do sistema a partir de uma configuração muito simples, próxima do estado absorvente: uma única partícula na origem da rede vazia. Sendo assim, um ensaio (ou amostra) pode simplesmente cair no estado absorvente após o primeiro evento, mas também pode “sobreviver” por um tempo grande. Cada amostra de simulação termina no tempo máximo que o sistema permaneceu sem cair no estado absorvente. Nesta simulação de espalhamento, as grandezas mais básicas para a análise são o *número médio de partículas*

$$n(t) = \left\langle \sum_i \sigma_i(t) \right\rangle \quad (3.18)$$

e a *probabilidade de sobrevivência* média  $P_S(t)$ , que é a probabilidade de, no instante  $t$ , o sistema não se encontrar no estado absorvente. Na criticalidade, observa-se a lei de potência

$$P_S(\infty) \sim |\lambda - \lambda_c|^{\beta'}. \quad (3.19)$$

Para o PC,  $\beta = \beta'$  [20]. Isso implica que, quando  $t \rightarrow \infty$ ,  $P_S$  se torna proporcional a  $\rho$ .



Figura 3.4: Amostras do PC, começando com uma única partícula na origem de uma rede vazia. À esquerda:  $\lambda < \lambda_c$ ; centro:  $\lambda = \lambda_c$ ; à direita:  $\lambda > \lambda_c$ .

Ainda na vizinhança de  $\lambda_c$ , os comprimentos de correlação espacial e temporal seguem as respectivas leis de potência

$$\xi_{\perp} \sim |\lambda - \lambda_c|^{-\nu_{\perp}}, \quad (3.20)$$

$$\xi_{\parallel} \sim |\lambda - \lambda_c|^{-\nu_{\parallel}}. \quad (3.21)$$

Outras quantidades que fornecem informações relevantes acerca do processo são o *espalhamento médio* das partículas a partir da partícula de origem

$$R^2 \equiv \frac{1}{n(t)} \left\langle \sum_{\mathbf{r}} r^2 \sigma_{\mathbf{r}} \right\rangle \quad (3.22)$$

e a variância da densidade de sítios ativos no estado estacionário

$$\chi \equiv L^d (\langle \rho^2 \rangle - \langle \rho \rangle^2), \quad (3.23)$$

em que  $L$  é a dimensão linear do sistema. Essa variância nos fornece uma medida das flutuações do parâmetro de ordem. Na vizinhança do ponto crítico, estas flutuações tornam-se muito grandes, seguindo a seguinte lei de potência:

$$\chi \sim |\lambda - \lambda_c|^{-\gamma}. \quad (3.24)$$

No regime *subcrítico* ( $\lambda < \lambda_c$ ), tanto  $P_S(t)$  quanto  $n(t)$  decaem exponencialmente. As partículas geradas a partir da partícula original se espalham difusivamente via sequências nas quais uma partícula gera outra em um sítio vizinho e desaparece logo em seguida. Nestas condições,  $R^2(t) \sim t$ . Seja  $\rho(0, 0|\mathbf{r}, t)$  a probabilidade condicional de encontrarmos uma partícula em  $\mathbf{r}$  no instante  $t$ , dado que há um sítio ativo na origem e todos os outros sítios da rede estão vazios em  $t = 0$ . No regime subcrítico,

$$\rho(0, 0|\mathbf{r}, t) \simeq e^{-r/\xi_{\perp}} e^{-t/\xi_{\parallel}} \quad (3.25)$$

para valores grandes de  $r$  e  $t$ .

No regime *supercrítico* ( $\lambda > \lambda_c$ ), uma amostra pode sobreviver por tempo indefinido ( $P_S(t) \rightarrow P_S(\infty) > 0$ , quando  $t \rightarrow \infty$ ). E, no ponto crítico, as grandezas  $P_S(t)$ ,  $n(t)$  e  $R^2(t)$  seguem leis de potência:

$$P_S(t) \sim t^{-\delta}, \quad (3.26)$$

$$n(t) \sim t^\eta, \quad (3.27)$$

$$R^2(t) \sim t^{2/z}. \quad (3.28)$$

As três equações acima valem para tempos longos e requerem que o sistema seja grande o suficiente para que nenhuma partícula atinja a fronteira.

Baseado nisso, podemos utilizar as curvas  $P_S(t) \times t$  e  $n(t) \times t$  para estimar a localização do ponto crítico. Como para  $\lambda > \lambda_c$  ( $\lambda < \lambda_c$ ) estes gráficos, na escala logarítmica, apresentam uma curvatura positiva (negativa), podemos traçar gráficos para diferentes valores de  $\lambda$  e, em seguida, por meio de um gráfico da curvatura média em função de  $\lambda$  determinar para qual valor de taxa a curvatura é nula. Este valor é uma estimativa precisa da taxa crítica  $\lambda_c$ .

Um método para determinar o ponto de curvatura nula será exposto a seguir. O que nos

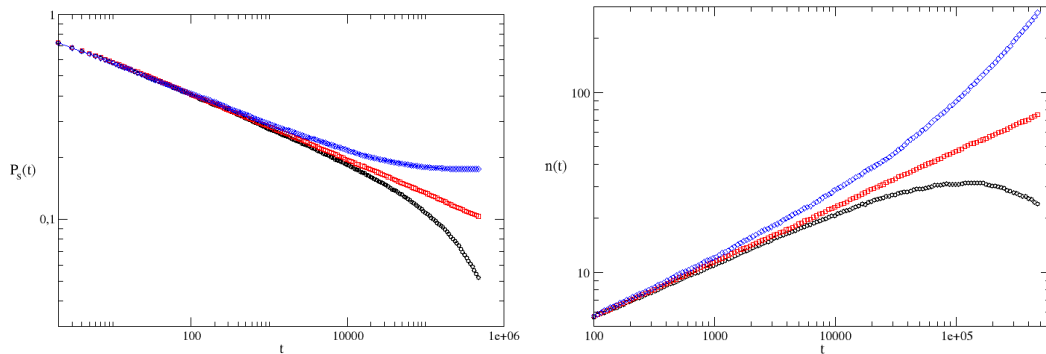


Figura 3.5: Gráficos mostrando como  $P_S(t)$  e  $n(t)$  seguem leis de potência no ponto crítico (curvas em vermelho) e curvam positivamente (curvas azuis) e negativamente (curvas pretas) para o sistema no regime supercrítico e subcrítico, respectivamente.

interessa aqui é a *curvatura média*  $\langle \kappa \rangle$  para o conjunto de dados que temos à disposição, mas, para obtê-la, precisamos determinar primeiro a *curvatura local*  $\kappa$ , dada por

$$\kappa(t) = \frac{P_3''(t)}{[1 + (P_3'(t))^2]^{3/2}}, \quad (3.29)$$

em que  $P_3(t)$  é um polinômio de ordem cúbica obtido por ajustes nos dados. De posse da expressão para  $\kappa$ , definimos a curvatura média como

$$\langle \kappa \rangle = \frac{1}{\log_{10} t_f - \log_{10} t_i} \int_{t_i}^{t_f} \kappa(t) dt. \quad (3.30)$$

Finalmente, após aplicar este procedimento para cada curva  $P_S(t) \times t$  ou  $n(t) \times t$ , podemos traçar o gráfico da curvatura média como função de  $\lambda$ , conforme mostrado na figura 3.6. O ponto crítico  $\lambda_c$  é obtido pela extrapolação dos dados, utilizando uma regressão polinômial [21].

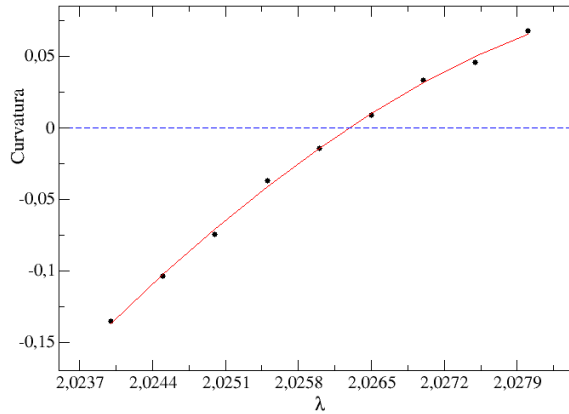


Figura 3.6: Curvatura média em função de  $\lambda$  para o *processo de replicação por contato* unidimensional (PRC) [22], um modelo muito similar ao PC que apresenta o mesmo comportamento crítico. A linha contínua representa um ajuste em polinômio cúbico. O PRC será definido no capítulo 4.

### 3.5.2 Teoria de escala

O objetivo da *teoria de escala* é fornecer uma descrição relativamente simples do sistema na proximidade do ponto crítico, ou seja: quando  $\lambda \rightarrow \lambda_c$ ,  $\xi_{\perp} \rightarrow \infty$  e  $\xi_{\parallel} \rightarrow \infty$ . Seguiremos aqui uma abordagem fenomenológica proposta por Grassberger e de la Torre [20], que descreve a evolução a partir do estado inicial que consideramos na subseção anterior: uma única partícula na origem da rede vazia.

A idéia principal por trás da teoria de escala baseia-se na hipótese de que as propriedades assintóticas do sistema, nas proximidades do ponto crítico, são invariantes sob transformações de escala do tipo

$$\begin{aligned}
 \Delta &\rightarrow a\Delta, \\
 r &\rightarrow a^{-\nu_{\perp}}r, \\
 t &\rightarrow a^{-\nu_{\parallel}}t, \\
 \rho &\rightarrow a^{\beta}\rho, \\
 P &\rightarrow a^{\beta'}P,
 \end{aligned} \tag{3.31}$$

em que  $a > 0$  é um fator de escala e introduzimos a notação  $\Delta \equiv |\lambda - \lambda_c|$ . Esta invariância sob tais transformações impõe restrições à forma das funções que governam o comportamento

crítico, como será visto adiante.

Como exemplo, analisaremos o que acontece com a probabilidade de sobrevivência,  $P_S$ , exatamente no ponto crítico. Impondo a invariância de escala tem-se

$$P_S(t) = a^{\beta'} P_S(a^{-\nu_{\parallel}} t). \quad (3.32)$$

Temos a liberdade para escolher um valor de  $a$  tal que  $a^{-\nu_{\parallel}} t = 1$ . Daí, tem-se  $a = t^{1/\nu_{\parallel}}$  e, por consequência

$$P_S(t) = t^{-\beta'/\nu_{\parallel}} P_S(1). \quad (3.33)$$

Fazendo  $\beta'/\nu_{\parallel} = \beta/\nu_{\parallel} = \delta$  obtem-se, no ponto crítico

$$P_S(t) \sim t^{-\delta}. \quad (3.34)$$

Deve-se considerar também o caso em que não estamos exatamente no ponto crítico, porém próximo a ele. Neste caso, devemos tomar  $P_S$  como

$$P_S(\Delta, t) = a^{\beta'} P_S(a\Delta, a^{-\nu_{\parallel}} t). \quad (3.35)$$

Novamente tomando  $a = t^{1/\nu_{\parallel}}$ , tem-se finalmente que, próximo ao ponto crítico,  $P_S$  escala como

$$P_S(\Delta, t) = t^{-\beta/\nu_{\parallel}} P_S(\Delta t^{1/\nu_{\parallel}}, 1). \quad (3.36)$$

Pode-se reescrever a equação acima como

$$P_S(t) \simeq t^{-\delta} \Phi(\Delta t^{1/\nu_{\parallel}}), \quad (3.37)$$

em que  $\Phi$  é uma função de escala que depende unicamente do argumento  $\Delta t^{1/\nu_{\parallel}}$ . Note que a equação (3.34) é recuperada quando tomamos  $\Delta = 0$ .

Consideremos novamente a probabilidade condicional  $\rho(0, 0|\mathbf{r}, t)$ . Neste caso, no *regime de escala* ( $\lambda$  próximo de  $\lambda_c$ ), pela invariância de escala tem-se

$$\rho(0, 0|\mathbf{r}, t) \simeq t^{\eta-d/z} \mathcal{F}(r/t^{1/z}, \Delta t^{1/\nu_{\parallel}}) \quad (3.38)$$

levando em conta tempos longos e sistemas grandes. Na equação acima,  $\mathcal{F}$  é uma função de escala universal,  $d$  é a dimensão do sistema e  $z = \nu_{\parallel}/\nu_{\perp}$ . Também é importante esclarecer que o fator multiplicativo  $t^{\eta-d/z}$  aparece na equação (3.38) pois, no ponto crítico, devemos recuperar

a equação (3.27) ao integrar  $\rho(0, 0|\mathbf{r}, t)$  sobre todo o espaço. É o que verificaremos agora:

$$\begin{aligned}
 n(t) &= \left\langle \sum_i \sigma_i(t) \right\rangle \\
 &= \int \rho(0, 0|\mathbf{r}, t) d^d r \\
 &= t^{\eta-d/z} \int \mathcal{F}(r/t^{1/z}, \Delta t^{\nu_{\parallel}}) d^d r
 \end{aligned} \tag{3.39}$$

Agora, seja  $u = r/t^{1/z}$ . A partir disso, obtemos

$$\begin{aligned}
 n(t) &= t^{\eta-d/z} t^{d/z} \int \mathcal{F}(\Delta t^{1/\nu_{\parallel}}) d^d u \\
 &\simeq t^{\eta} \mathcal{F}_1(\Delta t^{1/\nu_{\parallel}})
 \end{aligned} \tag{3.40}$$

que, no ponto crítico, recupera a relação  $n(t) \sim t^{\eta}$ .

Também para que a relação de escala (3.38) seja consistente, a expressão (3.28) deve ser prontamente obtida quando calculamos o segundo momento de  $\rho(0, 0|\mathbf{r}, t)$ , integrando novamente sobre todo o espaço. Então, conforme feito anteriormente, temos

$$\begin{aligned}
 R^2(t) &= \langle r^2(t) \rangle \\
 &= \frac{1}{n(t)} \int r^2 \rho(0, 0|\mathbf{r}, t) d^d r \\
 &= \frac{1}{n(t)} \int r^2 t^{\eta-d/z} \mathcal{F}(r/t^{1/z}, \Delta t^{1/\nu_{\parallel}}) d^d r \\
 &\stackrel{u=r/t^{1/z}}{=} \frac{t^{\eta}}{n(t)} t^{2/z} \int u^2 \mathcal{F}(u, \Delta t^{1/\nu_{\parallel}}) d^d u \\
 &\simeq t^{2/z} \mathcal{F}_2(\Delta t^{1/\nu_{\parallel}}).
 \end{aligned} \tag{3.41}$$

Vimos que

$$P_{S_{\infty}} = \lim_{t \rightarrow \infty} P_S(t) = \bar{\rho}. \tag{3.42}$$

Porém, no estado estacionário é válida a relação  $\rho(0, 0|\mathbf{r}, t) \sim \bar{\rho} P_{S_{\infty}}$  e  $\bar{\rho} \sim \Delta^{\beta}$ , implicando que

$$\rho(0, 0|\mathbf{r}, t) \equiv \Delta^{\beta} \Delta^{\beta'} \stackrel{\beta=\beta'}{\sim} \Delta^{2\beta}. \tag{3.43}$$

Com base na lei de escala (3.38), obtemos  $\rho \sim \Delta^{\nu_{\parallel}(d/z-\eta)}$ . Agora, comparando esta última com a expressão (3.43), devemos ter

$$\begin{aligned}
 \nu_{\parallel} \left( \frac{d}{z} - \eta \right) &= 2\beta \\
 d/z - \eta &\stackrel{\delta=\beta/\nu_{\parallel}}{=} 2\delta \\
 2\delta + \eta &= Zd,
 \end{aligned} \tag{3.44}$$

em que  $Z = 1/z$ . Uma equação deste tipo, que relaciona dimensionalidade com expoentes críticos, é chamada de *relação de hiperescala*.

### 3.5.3 Escalonamento de tamanho finito

Quando o sistema se encontra nas proximidades do ponto crítico, as propriedades intensivas deste sistema apresentam grande dependência com relação ao seu tamanho. De fato, para fins práticos de análise numérica utilizando métodos simulacionais, o sistema necessariamente terá um tamanho finito. A técnica de *escalonamento de tamanho finito* (ETF) nos permite localizar o ponto crítico e fazer estimativas dos expoentes críticos com base em dados para sistemas com vários tamanhos [23]. Esta teoria baseia-se na hipótese de que, próximo à criticalidade, a dependência em  $L$  das propriedades intensivas é dada unicamente por meio da razão  $L/\xi_{\perp}$ , que representaremos por  $\Delta L^{1/\nu_{\perp}}$ .

Sabemos que, para modelos com estados absorventes em redes de tamanho finito, que possuem um número finito de configurações, o único estado estacionário é justamente o estado absorvente. Por essa razão, quando desejamos obter informações acerca do estado ativo por meio de simulações, analisamos o estado *quase-estacionário* (QE). Em uma amostra de simulação, o estado QE é atingido após um certo transiente, que é uma função de  $\Delta$ , do tamanho do sistema e da condição inicial<sup>5</sup>. Quando tomamos uma amostragem grande para calcular as grandezas relevantes, o estado QE é contabilizado apenas com as amostras que “sobreviveram”. Em outras palavras, realiza-se a média de uma certa quantidade em função de  $t$  apenas sobre aquelas amostras nas quais o sistema não atingiu o estado absorvente até o instante  $t$ . Na figura 3.7 vemos como a densidade média de partículas no estado quase-estacionário  $\bar{\rho}_{qe}$  (ou *densidade quase-estacionária*) atinge um valor constante após um certo tempo; a figura 3.8 ilustra como os valores obtidos para  $\bar{\rho}_{qe}$  em função de  $\lambda$  convergem para o seu valor estacionário na medida em que  $L$  cresce, tornando a transição de fase cada vez mais evidente.

Para  $\lambda \approx \lambda_c$ , com  $L$  grande, podemos escrever a densidade de sítios ativos no regime QE,  $\bar{\rho}_{qe}(\Delta, L)$ , como

$$\bar{\rho}_{qe}(\Delta, L) \sim L^{-\beta/\nu_{\perp}} f(\Delta L^{1/\nu_{\perp}}) \quad (3.45)$$

A função de escala  $f(x)$  deve escalar como  $f(x) \sim x^{\beta}$  para valores grandes de  $x$  (ou seja,  $L \gg \xi$ ), já que  $\bar{\rho} \sim \Delta^{\beta}$ . A partir deste ponto, iremos nos referir ao comprimento de correlação espacial  $\xi_{\perp}$  simplesmente como  $\xi$ . Então, de acordo com esta forma de escala, se traçarmos um gráfico  $L^{\beta/\nu_{\perp}} \bar{\rho}_{qe} \times \Delta L^{1/\nu_{\perp}}$  devemos observar que curvas para diversos valores de  $L$  devem coincidir. E de fato isso acontece, como podemos verificar na figura 3.9, em que os dados da

<sup>5</sup>É comum começar a simulação com todos os sítios da rede ocupados.

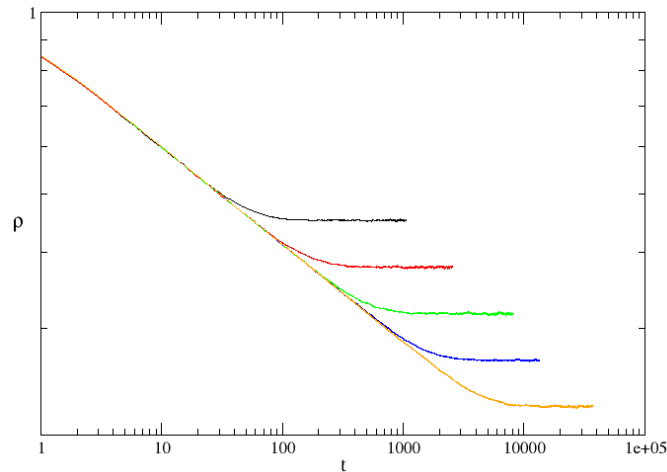


Figura 3.7: Gráfico  $\rho(t) \times t$  mostrando a relaxação para o estado quase-estacionário para os tamanhos de rede  $L = 25, 50, 100, 200, 400$ , com  $\lambda = \lambda_c$

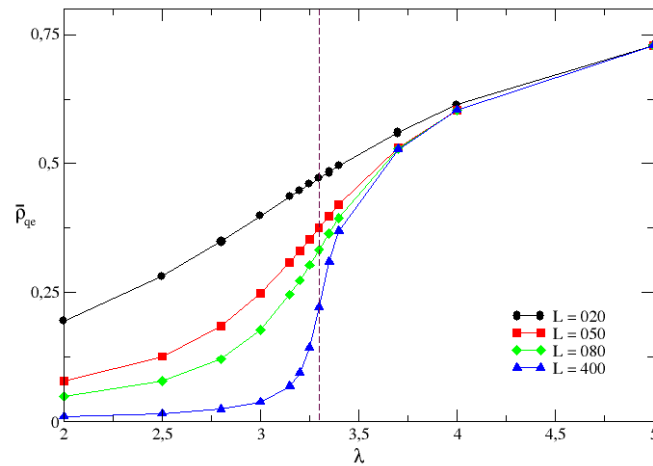


Figura 3.8: Densidade de partículas no estado quase-estacionário em função da taxa de replicação para o PC unidimensional.

figura 3.8 colapsam perfeitamente na curva  $f(x)$ . Quando não conhecemos  $\lambda_c$  e/ou os expoentes podemos variar seus valores de modo a produzir o melhor colapso [24].

Pela análise de ETF, podemos determinar o ponto crítico usando a dependência de  $\bar{\rho}_{qe}(\Delta, L)$  em  $L$ . No ponto crítico, pela equação (3.45), temos

$$\bar{\rho}_{qe}(L) \sim L^{-\beta/\nu_{\perp}}. \quad (3.46)$$

Logo, para  $\lambda = \lambda_c$ , a inclinação de um gráfico  $\ln \bar{\rho}_{qe} \times \ln L$  nos fornece o valor do expoente  $\beta/\nu_{\perp}$ . Quando fora do ponto crítico, não encontramos uma lei de potência, mas sim curvas com concavidades para cima no regime supercrítico ( $\lambda > \lambda_c$ ) e concavidades para baixo no regime subcrítico ( $\lambda < \lambda_c$ ). Uma análise de curvatura neste tipo de gráfico pode ser utilizada para determinar o valor de  $\lambda_c$ .

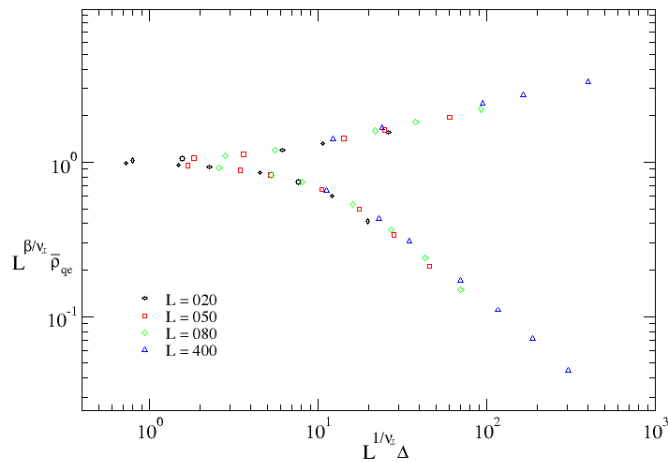


Figura 3.9: Gráfico reescalado utilizando os dados da figura 3.8.

Se aplicarmos a técnica de ETF para a variância da densidade quase-estacionária, obtemos

$$\chi(\Delta, L) \sim L^{\gamma/\nu_{\perp}} g(\Delta L^{1/\nu_{\perp}}) \quad (3.47)$$

de modo que agora temos a função de escala  $g(x) \sim x^{-\gamma}$  para valores grandes de  $x$ . No ponto crítico,

$$\chi(L) \sim L^{\gamma/\nu_{\perp}} \quad (3.48)$$

Agora, considere a evolução do sistema partindo de uma rede com todos os sítios ocupados. Podemos caracterizar o *tempo de vida* do sistema de diversas maneiras como, por exemplo, por meio do tempo  $\tau_m$  necessário para que a probabilidade de sobrevivência caia pela metade. Essa grandeza é um tempo de relaxação, portanto, para tamanhos de sistema muito maiores que o comprimento de correlação, escala como  $\tau_m \sim \Delta^{-\nu_{\parallel}}$ . Seguindo um procedimento como o anterior, temos

$$\tau_m(\Delta, L) \sim L^{\nu_{\parallel}/\nu_{\perp}} G(\Delta L^{1/\nu_{\perp}}) \quad (3.49)$$

em que  $G(x) \sim x^{-\nu_{\parallel}}$  para  $x$  muito grande. Para  $\lambda = \lambda_c$ ,  $\tau_m \sim L^{\nu_{\parallel}/\nu_{\perp}}$ . Note que, para  $\lambda > \lambda_c$ ,  $\tau_m$  cresce exponencialmente e, para  $\lambda < \lambda_c$ , um valor constante é atingido na medida em que  $L \rightarrow \infty$ . Novamente, podemos realizar um estudo de curvatura sobre  $\tau_m$  como função de  $L$  e  $\lambda$ , determinar  $\lambda_c$  e obter o expoente  $\nu_{\parallel}/\nu_{\perp}$ .

Na figura 3.10, resultados de simulações confirmam algumas leis de potência que esperávamos para o PC.

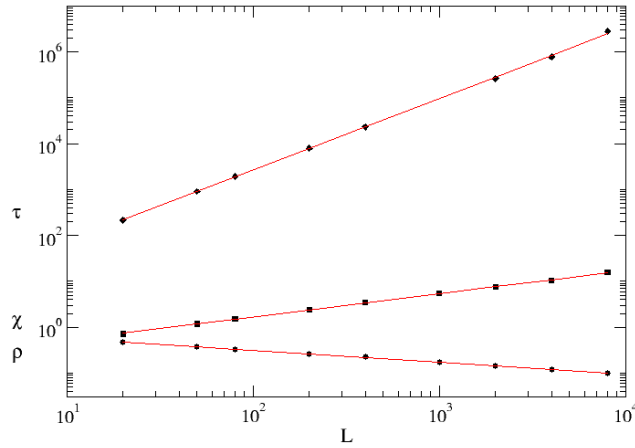


Figura 3.10: Dependência de  $\bar{\rho}_{qe}$ ,  $\tau$  e  $\chi$  com o tamanho do sistema para o PC unidimensional no ponto crítico.

### 3.5.4 Teoria de campo médio

Conforme discutido anteriormente, podemos escrever uma equação mestra para o PC a fim de analisar a evolução temporal de  $\rho(\mathbf{x}, t)$ , sendo que  $\rho(\mathbf{x}, t) = \text{Prob}[\sigma_{\mathbf{x}}(t) = 1]$ . Consequentemente,  $1 - \rho(\mathbf{x}, t) = \text{Prob}[\sigma_{\mathbf{x}}(t) = 0]$ . Tal equação de movimento é dada por

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{x}, t) = -\rho(\mathbf{x}, t) + \frac{\lambda}{q} \sum_{\mathbf{y}} \text{Prob}[\sigma_{\mathbf{y}}(t) = 1, \sigma_{\mathbf{x}}(t) = 0], \quad (3.50)$$

em que  $\mathbf{y}$  são os vizinhos mais próximos de  $\mathbf{x}$ ,  $q$  é o número de coordenação da rede<sup>6</sup> e  $\text{Prob}[\sigma_{\mathbf{y}}(t) = 1, \sigma_{\mathbf{x}}(t) = 0]$  é a probabilidade de que o sítio em  $\mathbf{x}$  esteja vazio, dado que o sítio vizinho em  $\mathbf{y}$  está ocupado. O primeiro termo desta equação para  $\partial\rho/\partial t$  é o termo de aniquilação de partículas, enquanto o segundo termo representa a criação de uma partícula no sítio em  $\mathbf{x}$  pela partícula em  $\mathbf{y}$ .

A equação acima é exata, porém não podemos resolvê-la analiticamente, já que ela depende da probabilidade condicional de dois sítios, mas esta depende da de três sítios e assim por diante, de modo que há uma hierarquia infinita. A aproximação de campo médio usual, assume que a probabilidade de ocupação para um dado sítio é independente dos vizinhos. Assim, tem-se que

$$p(\blacksquare|\square) = p(\blacksquare)p(\square), \quad (3.51)$$

onde introduzimos a notação  $p(\blacksquare) \equiv \text{Prob}[\sigma_i(t) = 1]$  e  $p(\square) \equiv \text{Prob}[\sigma_i(t) = 0]$ . Substituindo a equação (3.51) na equação (3.50) encontramos

$$\frac{d}{dt} \rho(t) = \rho(\lambda - 1) - \lambda\rho^2, \quad (3.52)$$

<sup>6</sup>Para reticulados,  $q = 2d$ .

onde definimos  $p(\blacksquare) = \rho(t)$  e  $p(\square) = 1 - \rho(t)$ . A expressão acima é a *equação de Malthus-Verhulst*, que modela a evolução temporal do tamanho de uma população cujo crescimento é limitado pela oferta finita de recursos no ambiente [13].

Tomando o limite do estado estacionário,  $d\rho/dt = 0$ , temos que  $\rho(t) \rightarrow \bar{\rho}$ , em que

$$\bar{\rho} = 0 \quad \text{ou} \quad \bar{\rho} = \frac{\lambda - 1}{\lambda}. \quad (3.53)$$

Para todo  $\lambda$  tal que  $\lambda \leq 1$ , a única solução estacionária é a solução trivial, ou seja, o estado absorvente  $\bar{\rho} = 0$ . Entretanto, para  $\lambda > 1$ , existe um estado estacionário ativo dado pela equação (3.53). Desse modo,  $\lambda_c = 1$  marca o ponto crítico onde o parâmetro de ordem sofre uma mudança contínua, conforme foi visto no diagrama de fase para o PC.

Denotando  $\Delta \equiv \lambda - \lambda_c$ , para  $\Delta > 0$ , a equação (3.52) nos mostra que

$$\bar{\rho} = \Delta/\lambda \quad (3.54)$$

Perto do ponto crítico, o parâmetro de ordem escala como  $\bar{\rho} \sim \Delta^\beta$ . Logo, a teoria de campo médio fornece  $\beta = 1$ . Analisemos agora a solução geral da equação (3.52)

$$\rho(t) = \frac{\lambda - 1}{\lambda - e^{-(\lambda-1)t}}, \quad (3.55)$$

em que consideramos como condição inicial todos os sítios da rede ocupados ( $\rho(0) = 1$ ). Na região subcrítica,  $\rho(t)$  decai a zero exponencialmente como

$$\rho(t) = Ae^{-(1-\lambda)t}. \quad (3.56)$$

Na região supercrítica,  $\rho(t)$  relaxa para  $\bar{\rho}$  como

$$\rho(t) = \frac{\lambda - 1}{\lambda} - Be^{-(\lambda-1)t}. \quad (3.57)$$

De maneira mais sucinta, para  $\lambda \neq 1$ , tem-se

$$\rho(t) - \bar{\rho} \sim \exp(|1 - \lambda|t). \quad (3.58)$$

Logo,  $\tau = |1 - \lambda|^{-1}$ .

Agora, se substituirmos  $\lambda_c$  na equação (3.52), obteremos

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -\rho^2. \quad (3.59)$$

Portanto, no ponto crítico, a densidade de partículas sofre um decaimento em lei de potência como

$$\rho(t) \sim t^{-1}, \quad (3.60)$$

Como visto anteriormente, no ponto crítico, temos que  $\rho(t) \sim t^{-\delta}$ , em que  $\delta = \beta/\nu_{\parallel}$  e, portanto,  $\nu_{\parallel} = 1$ .

Resta agora obter o expoente  $\nu_{\perp}$ , relacionado ao comprimento de correlação  $\xi$  e, por consequência, com a escala espacial do sistema. O procedimento para fazer isso é escrever a equação (3.52) na sua forma contínua [19], de modo que a função  $\phi(\mathbf{x}, t)$  representa a densidade local de partículas. Acrescentando um termo de difusão para levar em conta flutuações espaciais, chega-se à equação

$$\frac{\partial}{\partial t}\phi(\mathbf{x}, t) = (\lambda - 1)\phi(\mathbf{x}, t) - \lambda\phi^2(\mathbf{x}, t) + D\nabla^2\phi(\mathbf{x}, t), \quad (3.61)$$

sendo  $D > 0$ . Impondo a hipótese de invariância de escala, podemos mostrar que  $\beta/\nu_{\perp} = 2$ , logo  $\nu_{\perp} = 1/2$ .

Então, lembrando, os valores obtidos para os expoentes críticos pela teoria de campo médio são

$$\begin{aligned} \beta &= 1 \\ \nu_{\parallel} &= 1 \\ \nu_{\perp} &= 1/2 \end{aligned}$$

Por meio de outros métodos também podemos obter estes expoentes, para fins comparativos. Ao fazer isso, nota-se que os valores obtidos pela teoria de campo médio estão quantitativamente incompatíveis com aqueles obtidos por métodos mais sofisticados, como a expansão em séries [25]. A explicação para isso é o fato de que, na teoria de campo médio, desprezamos as correlações entre os sítios, tratando-os como estatisticamente independentes, e estas correlações são fortes em baixas dimensões. Por exemplo, para  $d = 1$ , foi encontrado o valor  $\lambda_c = 3,297848(20)$  (por meio de expansões em série) para o ponto crítico do PC, que é distante do valor  $\lambda_c = 1$  previsto pela teoria de campo médio. Porém, do ponto de vista qualitativo, a teoria fornece bons resultados. De fato, ao analisar o modelo para  $d = 2$  e  $d = 3$ , observa-se que o valor para o ponto crítico e dos expoentes aproxima-se cada vez mais dos valores de campo médio. Para  $d \geq 4$  os expoentes previstos pela aproximação de campo médio são exatos. Nesse caso, diz-se que  $d_c = 4$ , em que  $d_c$  é a *dimensão crítica superior* do modelo.

## 3.6 Percolação direcionada

Um exemplo fundamental de sistemas sem termodinâmica que exibem uma transição contínua é o problema de percolação. Historicamente, este conceito surgiu no estudo do fenômeno de transporte de um fluido através de um meio poroso para tentar solucionar um problema de

entupimento de máscaras de gás. Formulado por Broadbent e Hammersley [26] no final da década de 50, o modelo de percolação concentra-se em descrever o meio poroso como uma rede de ligações, ou canais aleatórios, por onde um fluido determinístico escoar.

Usualmente, para fins de modelagem, utilizamos uma rede regular cujos sítios representam os poros e as ligações entre os sítios representam os canais. Simula-se a passagem do líquido através dos poros considerando que uma ligação é aberta com probabilidade  $p$  e fechada com probabilidade  $1 - p$ , sendo que  $0 \leq p \leq 1$ . Estes canais estarão interligados se o número destes for suficientemente grande, tornando o meio permeável à passagem do fluido. Dizemos que, neste caso, houve a percolação do fluido. Também pode-se provar que existe um valor crítico  $p = p_c$  para o qual ocorre uma transição de fase contínua entre a fase impermeável e a fase permeável ao fluido.

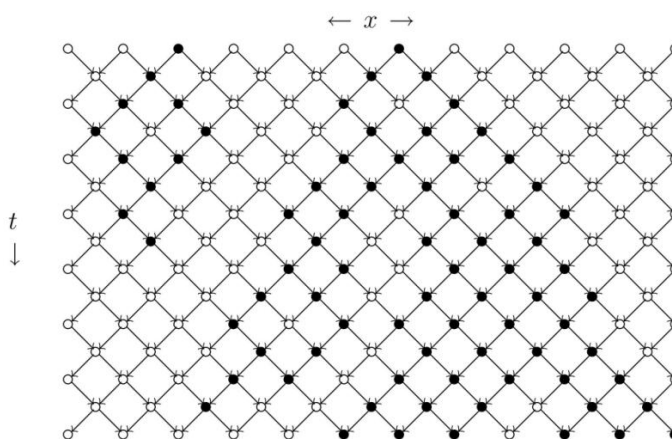


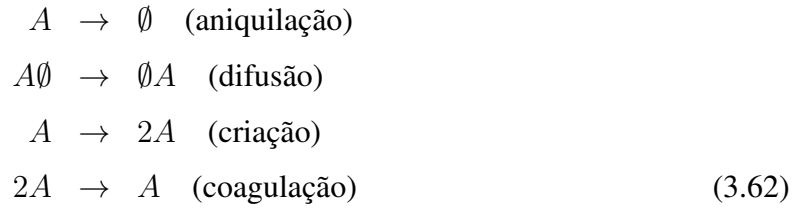
Figura 3.11: Evolução temporal típica a partir de duas partículas, mostrando a percolação direcionada. Neste caso a direção preferencial é interpretada como uma coordenada temporal. Figura extraída de [27].

Até o momento, estamos considerando o caso em que o fluido pode escoar para qualquer direção, caracterizando uma percolação isotrópica. Porém, se considerarmos uma direção preferencial para o escoamento, temos a *percolação direcionada* (tal consideração pode ser utilizada para modelar a força gravitacional ou uma rede de diodos aleatória). Esta direção preferencial pode ser interpretada como uma coordenada temporal em um modelo no qual uma rede quadrada foi girada a um ângulo de  $45^\circ$ . Nesse caso, cada sítio deve possuir dois primeiros vizinhos tanto na linha acima dele quanto na linha abaixo

Agora, como o fluxo acontece em apenas uma direção, consideraremos os sítios “molhados” ( $x_i = 1$ ) como ativos e sítios “secos” ( $x_i = 0$ ) como inativos. Podemos imaginar que a linha superior da rede está acoplada a um reservatório de água que vai percolar a rede caso exista um caminho de ligações. Dizemos que este processo apresenta *atualização síncrona*, ou seja, quando o tempo avança em uma unidade todos os sítios da rede são atualizados.

Levando em conta o escopo deste trabalho, uma idéia interessante é comparar o modelo de percolação direcionada (PD) com um processo de reação-difusão. Nesta interpretação, cada

sítio ativo representa uma partícula  $A$ , sendo que possíveis transições são dadas por:



A partir disso, vemos que a configuração na qual todos os sítios estão vazios (ou secos) é absorvente, o que equivale a dizer não haverão mais ligações abertas para qualquer tempo futuro. O tratamento analítico do modelo é análogo àquele desenvolvido para transições de fase ferromagnéticas. Sendo assim, próximo de  $p_c$ , o sistema apresenta os comprimentos de correlação característicos  $\xi_{\perp}$  e  $\xi_{\parallel}$ , que divergem como

$$\xi_{\perp} \sim |p - p_c|^{-\nu_{\perp}}, \tag{3.63}$$

$$\xi_{\parallel} \sim |p - p_c|^{-\nu_{\parallel}}. \tag{3.64}$$

Então, no fim das contas, tanto a percolação direcionada quanto a isotrópica apresentam um ponto crítico. Assim como no caso do PC, mesmo que estes modelos não possam ser interpretados utilizando a termodinâmica, ocorre o surgimento de propriedades de escala relacionadas a correlações de longo alcance (do mesmo modo que em fenômenos de equilíbrio). Porém, a diferença de simetria existente entre o caso direcionado e o isotrópico faz com que os expoentes críticos não sejam os mesmos. Para a percolação direcionada, observa-se que os expoentes críticos obtidos são os mesmos do processo de contato e outros modelos. Com isso, caracteriza-se a *classe de universalidade* da percolação direcionada (classe PD).

### 3.6.1 A conjectura PD

Um certo modelo pertence à classe PD se forem obedecidas as seguintes condições:

- O modelo apresenta uma transição de fase contínua para um único estado absorvente.
- Tal transição é caracterizada por um parâmetro de ordem escalar e positivo.
- Nas regras dinâmicas do modelo, só há interações de curto alcance.
- O sistema não apresenta desordem congelada ou simetrias adicionais.

Este conjunto de condições é apenas uma conjectura que, até então, não foi demonstrada com rigor. Porém, esta vem sendo reforçada por um grande número de evidências numéricas, para

diversos modelos além do PC e da percolação direcionada. Inclusive, dentre estes, modelos com infinitos estados absorventes como o *processo de contato por pares* (PCP) e um novo modelo de reação-difusão proposto nesta dissertação, um *processo de contato por limiar* que será analisado no capítulo seguinte.

### 3.7 Métodos de simulação

Como já sabemos, mesmo em processos simples como o PC, nem sempre é possível encontrar soluções exatas. Além disso, a teoria de campo médio não fornece bons resultados quantitativos para  $d < d_c$  e nem sempre técnicas mais sofisticadas que permitem melhores aproximações (como, por exemplo, expansão em séries) estão disponíveis. Sendo assim, a análise numérica por meio de simulações é uma ferramenta valiosa para o estudo do comportamento crítico em modelos de não equilíbrio.

Para modelos em rede que exibem transições de fase para estados absorventes, existem dois modos bem consolidados de se realizar simulações computacionais<sup>7</sup>. O primeiro deles baseia-se na dinâmica do comportamento de escala. Por exemplo, quando analisamos o espalhamento de sítios ativos a partir de uma única semente ativa na rede para valores próximos do ponto crítico. De um modo geral, este é um método razoavelmente eficiente e por meio dele é possível determinar os expoentes críticos com boa precisão, utilizando para isso a teoria de escala. Porém, este tipo de simulação restringe-se à vizinhança do ponto crítico e devemos sempre tomar cuidado para que a atividade não atinja as fronteiras da rede. Portanto, este método não pode ser usado em redes complexas, pois a propriedade de mundo pequeno implica em redes de diâmetros muito pequenos mesmo com um número muito grande de vértices.

O outro tipo de simulação mencionado fundamenta-se no comportamento estacionário de algumas grandezas de interesse, restringindo-se às amostras que não visitaram o estado absorvente. Para esta análise em reticulados, comumente utilizamos uma rede com condições de contorno periódicas e iniciamos o processo de simulação com uma configuração que represente um estado longe do estado absorvente. Por simplicidade, geralmente utilizamos a rede toda ocupada por sítios ativos como condição inicial. Vê-se que, após um certo tempo de simulação, o sistema relaxa para um estado quase-estacionário, que flutua em torno de um valor médio (figura 3.12). O procedimento é feito para diferentes tamanhos do sistema, de modo que o comportamento crítico possa então ser estudado com base na teoria de ETF.

Porém, este tipo de simulação também apresenta algumas desvantagens. Como todo o procedimento de simulação é feito para tamanhos de sistema finitos, o sistema invariavelmente será levado ao estado absorvente por alguma flutuação, de modo que a análise para tempos longos é ineficiente. Além do mais, a forma de obter o valor médio é relativamente arbitrária, envol-

---

<sup>7</sup>Outra possibilidade para a análise é iniciarmos a simulação com todos os sítios da rede ocupados (ou uma fração deles) e estudarmos a dinâmica rumo ao estado absorvente. Porém, esta análise fornece somente um expoente crítico

vendo alguns procedimentos interpretativos.

Para que as estimativas das quantidades estudadas sejam confiáveis, é necessário tomar um número grande de amostras de simulação para efetuar o cálculo dos valores médios como funções do tempo  $t$ . Note que, ao longo da evolução temporal temos um número cada vez menor de amostras que sobrevivem, de modo que o espaço amostral fica severamente reduzido nesse regime, dando origem às flutuações observadas na figura 3.12.

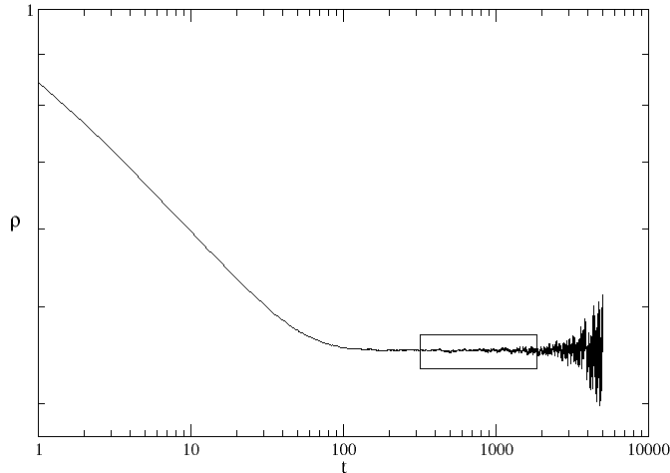


Figura 3.12: Método convencional para determinar o valor das grandezas no estado QE. Neste caso, obtemos  $\bar{\rho}_{qe}$  tomando a média dos valores de  $\rho$  na região em destaque.

Um método recente de simulação quase-estacionária, proposto por Oliveira e Dickman em 2005 [28], contorna tais limitações e fornece as propriedades da distribuição QE diretamente. Segue a idéia necessária para conceber e implementar o método.

### 3.7.1 Estado quase-estacionário

De acordo com o que foi visto até agora, processos estocásticos com estados absorventes em redes finitas podem apresentar dois tipos de comportamento para um certo tempo. Dependendo dos parâmetros de controle, a atividade pode já estar extinta após ter atingido um estado absorvente ou em um dos estados transientes. Para o último caso, podemos encontrar a distribuição de probabilidades dos estados impondo a condição de que o evento de cair no estado absorvente não tenha ocorrido. A seguir, definiremos a distribuição quase-estacionária.

Seja um processo markoviano  $X_t$  em tempo contínuo que pode ter atribuído a ele os valores  $n = 0, 1, 2, \dots, N$ , em que  $n = 0$  é o estado absorvente. Dado um estado inicial  $X_0$ ,  $p_n(t)$  denota a probabilidade de termos  $X_t = n$ . Definimos a probabilidade de sobrevivência como

$$P_S(t) = \sum_{n \geq 1} p_n(t). \quad (3.65)$$

Agora, suponha que, para  $t \rightarrow \infty$  a razão  $p_n(t)/P_S(t)$  atinja um valor constante, para cada  $t$ . O fator  $P_S(t)$  no denominador desta fração justifica-se pela necessidade de normalizar as probabilidades  $p_n(t)$ . Define-se a distribuição quase-estacionária como

$$\bar{p}_n = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{p_n(t)}{P_S(t)}, \quad n \geq 1, \quad (3.66)$$

sendo que  $\bar{p}_0 \equiv 0$ . Por normalização,

$$\sum_{n \geq 1} \bar{p}_n = 1. \quad (3.67)$$

Definiremos também o tempo de meia vida de um estado QE como

$$\tau = \frac{1}{A_0}, \quad (3.68)$$

em que  $A_0 = \sum_n W_{n \rightarrow 0} \bar{p}_n$  é o fluxo de probabilidade rumo ao estado absorvente.

### 3.7.2 O método de simulação quase-estacionária

De maneira sucinta, explicaremos o método proposto por de Oliveira e Dickman [28]. Seja  $X_t$  a simulação convencional do processo estocástico original que possui um estado absorvente. Define-se um processo similar  $X_t^*$ , mas cuja distribuição estacionária seja a distribuição QE do processo  $X_t$ . Assim,  $X_t^*$  não deve possuir uma distribuição estacionária trivial, ou seja, a única distribuição estacionária para tamanhos finitos, o estado absorvente, não pode aparecer na dinâmica de  $X_t^*$ . Sendo assim, para  $n > 0$ , a evolução de  $X_t^*$  equivale a de  $X_t$ , com  $X_t^*$  iniciando sempre em um estado não-absorvente. Isso é conseguido se fizermos  $X_t$  passar para um estado em que  $n > 0$  sempre que o estado absorvente for atingido e assim continuar a dinâmica normalmente, com as mesmas taxas de transição de  $X_t$ .

Como não temos conhecimento da distribuição de probabilidades utilizada para determinar  $X_t^*$  quando  $X_t$  visita o estado absorvente, armazenamos uma certa quantidade  $M$  de configurações do sistema. Assim, ao longo da evolução da simulação,  $X_t^*$  visita os estados de acordo com a distribuição QE. Para garantir que a distribuição de  $X_t^*$  convirja diretamente para a distribuição QE, a lista de configurações armazenadas é atualizada repondo uma das configurações pela atual com probabilidade  $p_{rep}$  a cada passo de tempo. O tempo médio de permanência de uma dada configuração na lista é igual a  $M/p_{rep}$ .

### 3.8 Razões entre momentos e cumulantes

Como foi visto anteriormente, podemos caracterizar as classes de universalidade em termos de suas funções de escala e seus expoentes críticos. De um modo geral, obter os expoentes críticos é mais simples do que obter as funções de escala. Mas, como veremos adiante, certos pontos das funções de escala são representados por algumas razões entre momentos e cumulantes especiais, obtidos a partir da distribuição de probabilidades para o parâmetro de ordem do modelo em questão [13]. Sendo assim, podemos utilizar os valores numéricos dessas razões como um método alternativo para determinar a classe de universalidade.

Dada a distribuição de probabilidades para o parâmetro de ordem,  $P(\rho, L)$ , definimos os momentos desta distribuição como

$$m_n \equiv \langle \rho^n \rangle = \int_0^1 \rho^n P(\rho, L) d\rho, \quad (3.69)$$

em que  $\rho$  é o parâmetro de ordem e  $\langle \dots \rangle$  é uma média efetuada no estado estacionário.

Podemos relacionar os cumulantes  $K_n$  de  $\rho$  com os momentos por meio da relação de recorrência

$$K_n = m_n - \sum_{k=1}^{n-1} \binom{n-1}{k-1} K_k m_{n-k}. \quad (3.70)$$

Para sistemas em equilíbrio, já é estabelecido o método da obtenção de razões e cumulantes para identificar classes de universalidade [14]. Dickman e da Silva foram os primeiros a utilizar este tipo de análise para o caso em que há transições de fase para estados absorventes [29]. O argumento a ser utilizado é um análogo àquele do caso em equilíbrio. Mas primeiro, note que a integral definida da equação (3.69) é avaliada sob todo o intervalo de valores que podem ser assumidos pela grandeza para a qual se quer calcular o momento. Para o caso de sistemas em que o parâmetro de ordem pode assumir valores negativos (como os modelos para transições ferromagnéticas) só é possível analisar os momentos pares, já que os ímpares são nulos pela simetria do intervalo de integração com relação à origem. Porém, para modelos com transições de fase para estados absorventes, o parâmetro de ordem é uma grandeza positiva. Logo, para os tipos de sistema de que trata esta dissertação, a análise dos momentos ímpares também é possível.

Para garantir que tais razões tenham caráter universal, utilizaremos o argumento a seguir. Para  $\lambda = \lambda_c$ ,

$$m_1 \simeq AL^{-\beta/\nu_\perp}, \quad (3.71)$$

em que  $A$  é uma constante não-universal e  $\beta$  e  $\nu_\perp$  são os expoentes críticos como definidos na seção 3.5.

Pela teoria de ETF, na criticalidade, a distribuição de probabilidades deve seguir a seguinte

relação:

$$P(\rho, L; \lambda_c) = P(\rho/m_1) \simeq \frac{1}{AL^{-\beta/\nu_\perp}} \mathcal{P}\left(\frac{\rho}{AL^{-\beta/\nu_\perp}}\right), \quad (3.72)$$

em que  $\mathcal{P}$  é uma função de escala universal. Então, pela equação (3.69),

$$m_n \simeq A^n L^{-n\beta/\nu_\perp} I_n, \quad (3.73)$$

em que  $I_n$  é dado por

$$I_n = \int_0^\infty u^n \mathcal{P}(u) du \quad (3.74)$$

e não depende do tamanho do sistema, nem mesmo do modelo considerado. A partir disso, tem-se que razões da forma  $m_n/m_r^i m_s^j$  são universais quando os índices de  $m$  são tais que a igualdade  $ir + js = n$  é respeitada. Alguns exemplos de razões entre momentos que seguem esse critério são:  $m_4/m_2^2$ ,  $m_3/m_1^3$ ,  $m_3/(m_1 m_2)$  e  $m_2/m_1^2$ . Na figura 3.13, vemos como a razão  $m_2/m_1^2$  tende a um valor constante para tamanhos maiores do sistema.

Para as razões entre cumulantes e entre cumulantes e momentos, a argumentação é a mesma. São exemplos de razões universais deste tipo:  $K_4/K_2^2$  e  $K_2/m_1^2$ , em que

$$K_2 = m_2 - m_1^2, \quad (3.75)$$

$$K_4 = m_4 - 4m_3 m_1 - 3m_2^2 + 12m_2 m_1^2 - 6m_1^4. \quad (3.76)$$

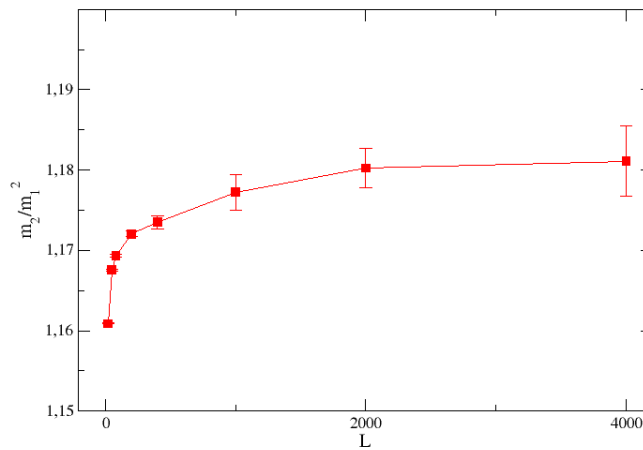


Figura 3.13: Razão entre momentos  $m_2/m_1^2$  em função do tamanho  $L$  do sistema para o PC unidimensional.

### 3.9 Processo de contato em redes sem escala

Nesta seção, trataremos do processo de contato em uma rede heterogênea. Sendo mais específico, mostraremos uma teoria de campo médio para o PC em redes sem escala de acordo com os trabalhos recentes de Castellano e Pastor-Satorras, Boguña *et al* e Ferreira *et al* [30, 31, 32, 33].

Nos últimos anos, o estudo de processos dinâmicos em redes complexas tem recebido grande atenção na comunidade científica. Para redes regulares a abordagem por teoria de campo médio mostrou-se muito importante, descrevendo qualitativamente a maioria das transições de fase. Para estas redes, em baixas dimensões, não podemos desprezar o efeito causado pelas flutuações, mas, acima da dimensão crítica para o modelo em questão, a teoria torna-se quantitativamente correta com relação aos expoentes críticos obtidos. Para o caso das redes complexas, como a maioria delas apresenta a propriedade de mundo pequeno, podemos tratá-las como sendo sistemas de dimensão infinita. Logo, é de se esperar que a teoria de campo médio forneça uma descrição correta para processos dinâmicos neste tipo de substrato.

Obteremos agora a equação para a evolução temporal de  $\rho_k$  [30], a densidade de sítios com grau  $k$  que estão ocupados. A densidade total de sítios ocupados é obtida por meio da relação  $\rho(t) = \sum_k \rho_k P(k)$ . Considere uma rede caracterizada por uma distribuição de conexões  $P(k)$  e correlações entre graus dadas pela probabilidade condicional  $P(k'|k)$ . Sendo assim, tem-se

$$\frac{d}{dt}\rho_k(t) = -\rho_k(t) + \lambda k [1 - \rho_k(t)] \sum_{k'} \frac{P(k'|k)\rho_{k'}(t)}{k'} \quad (3.77)$$

Como no caso de redes regulares, o termo de aniquilação de partículas em vértices de grau  $k$  é proporcional à  $\rho_k(t)$ . Já o termo de criação é proporcional à taxa de criação  $\lambda$ , à probabilidade de que um nó de grau  $k$  esteja vazio  $[1 - \rho_k(t)]$ , que este nó esteja conectado a outro nó ocupado de grau  $k'$  e finalmente que o vizinho escolha criar a nova partícula no vértice de grau  $k$  que estamos considerando (fator  $1/k'$  no somatório).

Assumindo que a rede não apresenta correlação entre graus, temos que a equação  $P(k'|k) = k'P(k')/\langle k \rangle$  é válida, de modo que a equação de taxa toma a forma

$$\frac{d}{dt}\rho_k(t) = -\rho_k(t) + \lambda \frac{k}{\langle k \rangle} [1 - \rho_k(t)] \rho(t). \quad (3.78)$$

A solução da equação acima depende da forma de  $P(k)$ . Para redes homogêneas (nas quais  $P(k)$  decai exponencialmente para grandes valores de  $k$ ), todos os vértices são aproximadamente equivalentes. Sendo assim, temos  $\rho_k(t) \simeq \rho(t)$  e  $k \simeq \langle k \rangle$ . Desse modo, temos

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -\lambda \rho^2(t) + (\lambda - 1)\rho(t) \quad (3.79)$$

Esta equação descreve o PC em uma rede de dimensão infinita, caracterizado por um ponto crítico  $\lambda_c = 1$ , de modo que  $\beta = 1$  e  $\nu_{\parallel} = 1$ .

Para redes heterogêneas, a distribuição  $P(k)$  apresenta grandes flutuações. Assim, é necessário considerar explicitamente o modo como as densidades parciais  $\rho_k$  dependem de  $k$ . Impondo a condição do limite estacionário, obtemos as soluções

$$\bar{\rho}_k = \frac{\lambda k \bar{\rho} / \langle k \rangle}{1 + \lambda k \bar{\rho} / \langle k \rangle}. \quad (3.80)$$

Para determinar o comportamento de  $\bar{\rho}(\lambda)$ , devemos analisar a equação auto-consistente para esta grandeza, que é obtida combinando a equação (3.80) com a expressão para  $\rho$  em função de  $\rho_k$ . Daí, temos

$$\bar{\rho} = \frac{\lambda \bar{\rho}}{\langle k \rangle} \sum_k \frac{k P(k)}{1 + \lambda k \bar{\rho} / \langle k \rangle}, \quad (3.81)$$

que depende explicitamente da distribuição de conectividade. Conforme foi visto no capítulo 2, para redes sem escala e tomando  $k$  como sendo uma variável contínua, esta distribuição é expressa como

$$P(k) = (\gamma - 1) m^{\gamma-1} k^{-\gamma}, \quad (3.82)$$

em que  $m$  é o menor grau da rede. A solução da equação auto-consistente depende diretamente do expoente  $\gamma$ . Ao substituir o somatório da equação por uma integral, no limite de tamanho infinito

$$\bar{\rho} = F \left[ 1, \gamma - 1, \gamma, -\frac{1}{\lambda \bar{\rho} m / \langle k \rangle} \right], \quad (3.83)$$

em que  $F[a, b, c, z]$  é a função hipergeométrica de Gauss. Utilizando a expansão assintótica da função hipergeométrica para  $z \rightarrow \infty$ , podemos inverter a expressão (3.83) e assim analisar a criticalidade para valores pequenos de  $\bar{\rho}$ . Procedendo desta maneira, temos

$$\begin{aligned} \bar{\rho}(\lambda) &\sim (\lambda - 1)^{1/(\gamma-2)}, & 2 < \gamma < 3 \\ \bar{\rho}(\lambda) &\sim \lambda - 1, & \gamma > 3 \end{aligned}$$

A partir disso,  $\lambda_c = 1$  tanto para  $2 < \gamma < 3$  quanto para  $\gamma > 3$  e o expoente crítico  $\beta$  é dado por

$$\begin{aligned} \beta &= \frac{1}{\gamma - 2}, & 2 < \gamma < 3 \\ \beta &= 1, & \gamma > 3 \end{aligned}$$

Agora, devemos considerar para o sistema os efeitos de tamanho finito, que devem afetar os resultados obtidos até o momento. No caso de redes sem escala infinitas, temos  $k \in [m, \infty]$ . Porém, para uma rede finita com um certo tamanho  $N$ , existe um grau máximo  $k_c$ , de modo que agora  $k \in [m, k_c]$ . Este  $k_c$  apresenta uma dependência com o tamanho da rede e, para redes não correlacionadas geradas pelo algoritmo UCM,  $k_c \sim N^{1/2}$  [12]. Então, para redes finitas e

novamente tomando  $k$  contínuo, a equação 3.81 nos leva a

$$\bar{\rho} = F \left[ 1, \gamma - 1, \gamma, -\frac{1}{\lambda \bar{\rho} m / \langle k \rangle} \right] - \left( \frac{k_c}{m} \right)^{1-\gamma} F \left[ 1, \gamma - 1, \gamma, -\frac{1}{\lambda \bar{\rho} k_c / \langle k \rangle} \right]. \quad (3.84)$$

Para obter o comportamento crítico de campo médio, a expressão acima será resolvida para o limite em que  $\bar{\rho} \rightarrow 0$  para um certo valor de  $\bar{\rho} k_c$ . Feito isso, tem-se

$$\bar{\rho} = \frac{\langle k \rangle}{\lambda k_c} f \left( \frac{\langle k \rangle (\lambda - 1) k_c^{\gamma-2}}{\lambda m^{\gamma-1}} \right), \quad (3.85)$$

em que  $f(x)$  é a inversa da função

$$g(x) = \frac{F[1, \gamma - 1, \gamma, -1/x] + \Gamma(\gamma)\Gamma(2 - \gamma)x^{\gamma-1}}{x}. \quad (3.86)$$

Para  $x \gg 1$ ,  $f(x)$  diverge como  $x^{1/(\gamma-2)}$ , que concorda com o limite de tamanho infinito. Para valores pequenos de  $x$ ,  $f(x) \rightarrow 0$  para  $x \rightarrow x_0^+$ , tal que  $x_0 > 0$ . Então, se a quantidade  $\lambda - 1$  é diminuída abaixo de um valor que seja proporcional a  $k_c^{2-\gamma}$ , então  $\bar{\rho} = 0$ .

Daqui em diante, para prosseguir com a análise, utilizaremos a técnica de ETF. Porém, alguns cuidados devem ser tomados neste momento. Pelo que já se conhece do PC em redes regulares uma idéia inicial aparentemente coerente seria assumir que a densidade quase-estacionária de partículas na rede  $\rho_{qe}(\Delta, N)$  é expressa como [30]

$$\rho_{qe} = N^{-\beta/\nu_\perp} f(\Delta N^{1/\nu_\perp}), \quad (3.87)$$

ou seja, isso equivale a afirmar que, em uma rede sem escala descorrelacionada com relação a graus, os efeitos de tamanho finito que este processo apresenta só dependem do tamanho  $N$  do sistema. Entretanto, existe uma outra classe de processos, os quais apresentam uma anomalia nos efeitos de tamanho finito [31]: além da dependência com  $N$ , suas propriedades dependem de maneira explícita e independente também do grau de corte  $k_c$  da distribuição  $P(k)$ . Anteriormente foram publicados estudos feitos em redes infinitas, porém com a imposição de um cutoff artificial [34]. Foi encontrada uma dependência com  $k_c$  e isso levou a um comportamento crítico completamente diferente daquele previsto para redes infinitas. Note que levar em conta o verdadeiro “limite termodinâmico” para redes sem escala equivale a tomar  $N \rightarrow \infty$  e  $k_c \rightarrow \infty$  simultaneamente. Quando  $k_c$  é fixado, o segundo momento  $\langle k^2 \rangle$  torna-se finito até mesmo para  $\gamma < 3$ . Desse modo, a rede passa a ter escala característica. Assim, vemos que o modo de atingir tal limite não é único. Os valores que podemos escolher para  $k_c$  podem ser expressos como

$$k_c \sim N^{1/\omega}, \quad 2 \leq \omega < \infty. \quad (3.88)$$

Ocorre que a teoria de campo médio para o PC em redes heterogêneas exhibe este comportamento de escala anômalo, o que no fim das contas explica as discrepâncias entre a teoria de

campo médio e simulações realizadas em redes com vizinhança aleatória que foram encontradas na literatura [35]. Está demonstrado que alguns estudos nos quais foi empregada a técnica de ETF padrão (que presume uma dependência exclusiva em  $N$ ) estão incompletos.

Para compreender de fato os efeitos de tamanho finito do PC utilizaremos a idéia de que, no regime de campo médio e com baixas densidades, este processo pode ser visto como uma simulação do processo de espalhamento<sup>8</sup>, idêntico àquele que foi analisado para redes regulares (iniciando com uma única partícula ativa na rede). As taxas de transição para este processo são dadas por [33]

$$\begin{aligned} W_{n \rightarrow n-1} &= n \\ W_{n \rightarrow n+1} &= \lambda n \left[ 1 - \frac{\sum_k k \rho_k P(k)}{\langle k \rangle} \right], \end{aligned} \quad (3.89)$$

em que um fator  $W_{n \rightarrow m}$  denota a taxa com que ocorre a transição de um estado com  $n$  partículas para um estado com  $m$  partículas. Então, sabendo que, próximo a  $\lambda_c$ ,  $\bar{\rho}$  é muito pequeno tal que  $\rho(t) \ll \langle k \rangle / k$ , o termo com  $k$  no denominador da equação 3.80 pode ser desprezado. Assim, esta equação toma a forma

$$\bar{\rho}_k \simeq \lambda k \bar{\rho} / \langle k \rangle. \quad (3.90)$$

Agora, considerando que  $\bar{\rho} = n/N$  e substituindo a expressão aproximada para  $\bar{\rho}_k$  nas equações de taxa, obtém-se

$$\begin{aligned} W_{n \rightarrow n-1} &= n \\ W_{n \rightarrow n+1} &= \lambda n \left( 1 - \lambda g \frac{n}{N} \right), \end{aligned} \quad (3.91)$$

em que  $g = \langle k^2 \rangle / \langle k \rangle^2$ . Com base em evidências numéricas e argumentos de escala (que, mais tarde foram confirmados mais rigorosamente nas referências [32, 36]), foram propostas as seguintes leis de escala para o tempo característico  $\tau$  e a densidade estacionária  $\bar{\rho}$ :

$$\tau \sim (N/g)^{1/2}, \quad (3.92)$$

$$\bar{\rho} \sim (Ng)^{-1/2}. \quad (3.93)$$

Para uma rede com expoente da distribuição de conexões  $\gamma$ , um grau de corte dado como na equação (3.88) e tomando  $N$  grande, temos as seguintes leis de escala para  $g$ :

$$\begin{aligned} g &\sim k_c^{3-\gamma}, & 2 < \gamma < 3 \\ g &\sim \text{constante}. & \gamma > 3 \end{aligned}$$

<sup>8</sup>Mais rigorosamente, a nível de campo médio, o PC será mapeado em um processo de um passo (um passeio aleatório tendencioso).

Consequentemente,

$$\bar{\rho} \sim N^{-\hat{\nu}}, \quad \text{em que } \hat{\nu} = \frac{1}{2} + \max\left(\frac{3-\gamma}{2\omega}, 0\right), \quad (3.94)$$

enquanto, para o tempo característico, obtém-se

$$\tau \sim N^{\hat{\alpha}}, \quad \text{em que } \hat{\alpha} = \frac{1}{2} - \max\left(\frac{3-\gamma}{2\omega}, 0\right) \quad (3.95)$$

No regime supercrítico de campo médio foi verificado que  $\bar{\rho} \sim \Delta^\beta$ , em que  $\beta = 1/(\gamma-2)$ , com  $\Delta = \lambda - \lambda_c$ . De acordo com [32], a densidade QE para sistemas finitos tem um comportamento anômalo dado por

$$\bar{\rho}(\Delta, N) = \frac{1}{\sqrt{gN}} G\left(\Delta \sqrt{\frac{N}{g}}\right), \quad \text{com } \frac{\Delta}{g} \ll \frac{\lambda\langle k \rangle}{k_c}, \quad (3.96)$$

em que  $G(x) \sim x$ , para  $x \gg 1$  e  $G(x) = \text{constante}$  para  $x \ll 1$ .

Estes resultados foram verificados por simulações [33], que confirmam as leis de escala acima.

### 3.10 Processo de contato por pares

Até o início dos anos 90, muitos modelos com um único estado absorvente pertencentes à classe de universalidade PD já haviam sido estudados e caracterizados. Entretanto, nessa época ainda haviam poucos trabalhos sobre a universalidade e criticalidade de modelos que apresentam muitos estados absorventes [37]. Nesta seção será apresentado de maneira breve o *processo de contato por pares* (PCP), proposto por Iwan Jensen em 1992 [38], um modelo simples que apresenta infinitos estados absorventes.

Tais modelos foram concebidos inicialmente para descrever processos catalíticos e este, em especial, é conhecido como o primeiro deles a situar-se firmemente na classe de universalidade da percolação direcionada (PD). No PCP, pares de partículas conectadas (primeiros vizinhos, necessariamente) aniquilam-se com uma probabilidade  $p$  ou criam uma nova partícula em um sítio escolhido aleatoriamente (com chance  $1-p$ ) que esteja conectado a uma das duas partículas do par em questão. Logo, estados absorventes para este sistema são todos aqueles em que não houverem pares de partículas. Aqui o nosso parâmetro de ordem será a densidade de pares de partículas no sistema  $\rho_p$  e, como o evento de criação dá origem a pelo menos um novo par na rede, as regras de evolução para os pares são similares às regras do PC, o que deve dar origem ao mesmo comportamento crítico. Abaixo de uma probabilidade crítica  $p_c$  o sistema encontra-se no estado ativo e, acima dela, em um dos estados absorventes ( $\rho_p = 0$ ), conforme ilustra o diagrama de fase para este modelo na figura 3.14.

Assim como no PC, no ponto crítico o comprimento de correlação e o tempo de relaxação

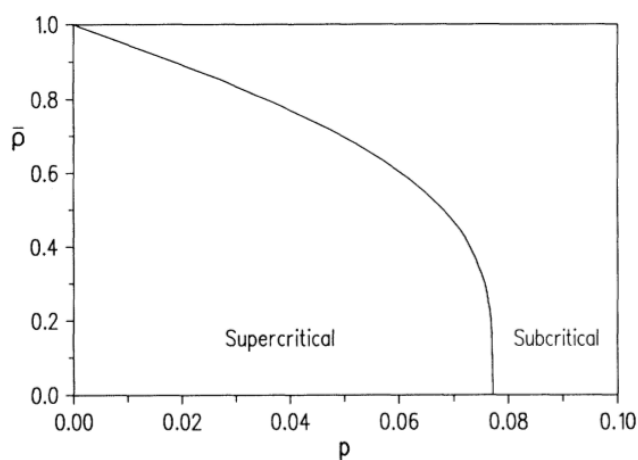


Figura 3.14: Diagrama de fase para o PCP. Figura retirada de [37].

divergem seguindo leis de potência. O método de análise e as demais leis de escala também são as mesmas. Uma particularidade deste modelo é que, por meio de métodos simulacionais, notou-se que os expoentes da classe PD só são obtidos quando utiliza-se estados pré-absorventes gerados pela própria dinâmica do sistema como configurações iniciais [37]. Nas figuras a seguir vemos como a densidade de pares quase-estacionária apresenta uma dependência em lei de potência com o tamanho linear  $L$  no ponto crítico (assim como  $\tau$  e  $\chi$ ) e como a razão entre momentos  $m_2/m_1^2$  tende a um valor constante na medida em que  $L$  cresce.

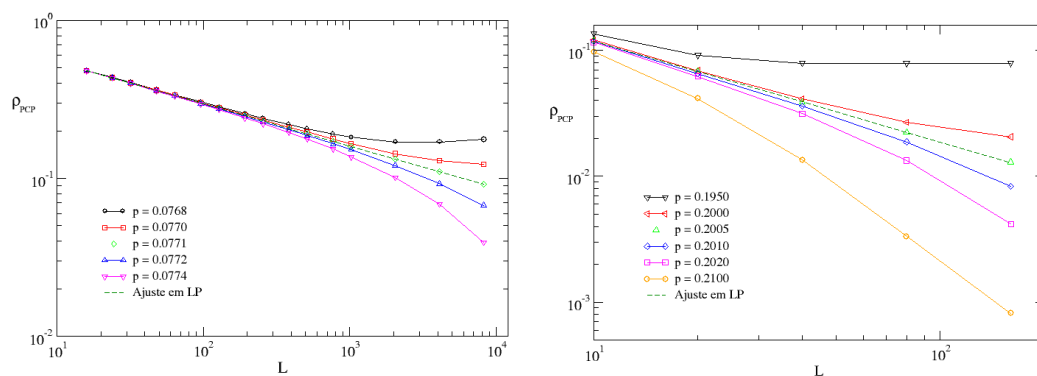


Figura 3.15: Gráficos mostrando a dependência em lei de potência de  $\rho_p(L)$  para o PCP unidimensional (à esquerda) e bidimensional (à direita) no ponto crítico.

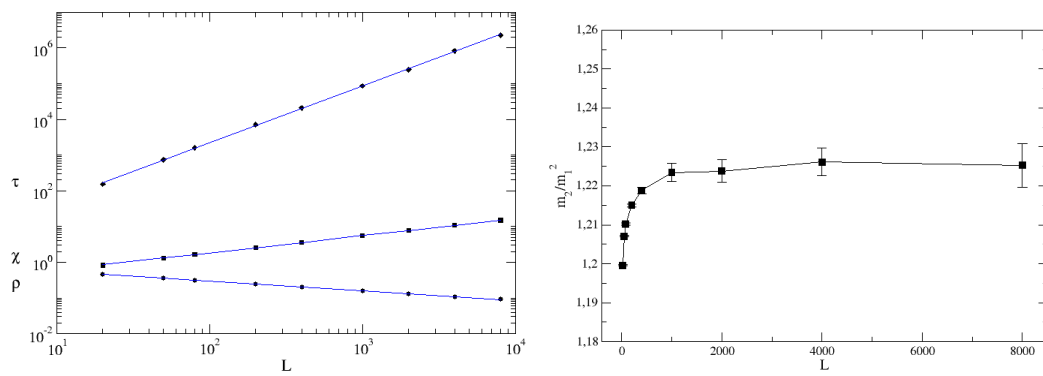


Figura 3.16: À esquerda: leis de potência para  $\rho$ ,  $\chi$  e  $\tau$  no ponto crítico obtidos pela simulação QE para o PCP unidimensional. As linhas contínuas representam ajustes em lei de potência. À direita: razão entre momentos  $m_2/m_1^2$  como função do tamanho do sistema para o PCP unidimensional.

# Capítulo 4

## A classe de percolação direcionada em três dimensões

Neste capítulo apresentaremos resultados de simulações para modelos com um único estado absorvente em redes regulares tridimensionais conforme publicado no artigo *Quasi-stationary simulations of the directed percolation universality class* [39] (R. S. Sander, M. M. de Oliveira, and S. C. Ferreira, J. Stat. Mech. Theor. Exp. 2009, P08011 2009). Analisamos o processo de contato (PC), o modelo suscetível-infectado-suscetível (SIS) e o processo de replicação por contato (PRC). As razões entre momentos dos parâmetros de ordem para a classe PD foram estabelecidos por meio da análise dos conhecidos modelos PC e SIS. Também mostraremos que o expoente de campo médio encontrado previamente na literatura para o PRC em  $d = 3$  [21] é um transiente que foi observado na análise de espalhamento.

### 4.1 Modelos

Apresentaremos nesta seção os modelos utilizados ao longo do estudo. Não entraremos em maiores detalhes a respeito do processo de contato, pois ele já foi apresentado e caracterizado no capítulo anterior, assim como na literatura.

O modelo SIS, também conhecido na literatura como *modelo A* [29], é uma variação do PC no qual qualquer sítio vazio que possua um ou mais primeiros vizinhos ocupados torna-se ocupado a uma taxa  $\lambda$ . Assim como no PC, assumiremos que um sítio torna-se desocupado a uma taxa unitária.

O *processo de replicação por contato* (PRC) [22] é um modelo proposto para analisar o fenômeno de replicação monoclonal e também apresenta regras muito similares às do PC. Ao invés de indivíduos, os sítios representam lugares onde ficam as células. De maneira análoga ao processo de cura do PC, células morrem a uma taxa unitária. Replicação da célula ocorre a uma taxa  $\lambda$  e a nova célula criada ocupa um dos vizinhos próximos que esteja vazio, escolhido ao acaso. Assim, um sítio vazio  $i$  é ocupado a uma taxa  $\lambda \sum_j \sigma_j / n_j$ , em que  $\sigma_j = 0, 1$  é definido

como no capítulo anterior para o PC,  $n_j$  é o número de primeiros vizinhos do sítio  $j$  que estão ocupados e a soma é feita sobre todos os vizinhos do sítio  $i$ . Note que, para este modelo, o processo de criação é facilitado, já que a ocupação flui de maneira uniforme apenas entre primeiros vizinhos que estão vazios, implicando em menores valores para as taxas críticas. De fato as taxas críticas relatadas para o PRC são dadas por  $\lambda_c = 2,02634(4)$ ;  $1,08320(7)$  e  $1,0000(1)$  para  $d = 1, 2$  e  $3$  [22, 21], em comparação com aqueles do PC:  $\lambda_c = 3,297849$  [40];  $1,64877(3)$  e  $1,31686(1)$  [41], respectivamente. É importante observar que estes três modelos compartilham as mesmas simetrias e, por consequência, espera-se que pertençam à mesma classe de universalidade.

Para todos os modelos considerados, foram realizadas simulações Monte Carlo usando o

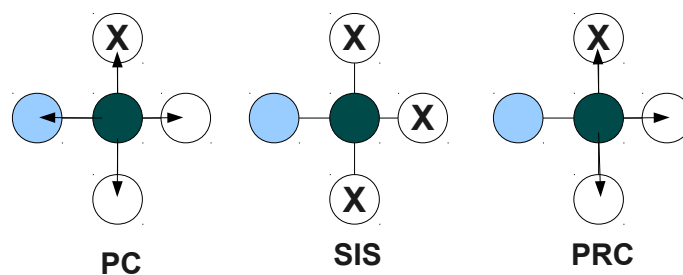


Figura 4.1: Representação esquemática dos eventos de criação de partículas para os modelos estudados neste capítulo. Setas indicam as possíveis escolhas para o destino da partícula criada e os sítios com o símbolo  $X$  representam aqueles que serão ocupados no passo.

procedimento usual [19]: um dado evento, criação ou aniquilação, é selecionado com probabilidades  $p = \lambda/(1 + \lambda)$  e  $1 - p$ , respectivamente e, após isso, um sítio ocupado  $i$  é escolhido aleatoriamente. No evento de aniquilação, o sítio  $i$  é desocupado (isso vale para os três modelos), enquanto criação depende do modelo. No PC, um vizinho próximo a  $i$  é escolhido ao acaso e infectado, caso esteja vazio. No modelo SIS, todos os sítios vazios na vizinhança de  $i$  são ocupados. Finalmente, no PRC, um dos sítios vizinhos vazios (se houver) é selecionado aleatoriamente e torna-se ocupado. Para todos os casos, o tempo é aumentado em  $\Delta t = 1/n(t)$ , em que  $N$  é o total de sítios ocupados. A figura 4.1 ilustra a diferença entre os três modelos,

## 4.2 Simulações quase-estacionárias

Os modelos foram analisados por meio de simulações de espalhamento e pelo método QE. Para a última, utilizamos para a probabilidade de reposição um valor relativamente elevado,  $p_{rep} = 0,05$ , durante um período inicial de relaxação para aumentar a velocidade com que as configurações armazenadas das condições iniciais fossem substituídas. Para o restante da simulação, utilizamos  $p_{rep} = 2 \times 10^{-5}$ . Cada amostra de simulação foi realizada com um número  $t_m = 2 \times 10^8$  de passos de tempo e as médias foram tomadas após um tempo de

relaxação  $t_r = 1 \times 10^8$ . As incertezas e os valores médios foram obtidos após pelo menos 15 amostras (para o maior tamanho do sistema) independentes de simulação, levando em conta todos os sítios da rede ocupados como condição inicial. Utilizamos condições de contorno periódicas.

Para determinar o ponto crítico  $\lambda_c$ , simulamos a dinâmica de espalhamento a partir de uma semente inicial, conforme descrito no capítulo 3. Foi levado em conta que, na criticalidade, a probabilidade de sobrevivência  $P(t)$  e o número médio de partículas na rede seguem as leis de potência

$$P(t) \sim t^{-\delta} \quad \text{e} \quad n(t) \sim t^\eta, \quad (4.1)$$

respectivamente.

Para ilustrar o método, apresentaremos resultados de simulações QE realizadas para o modelo bidimensional do PRC, pois apenas simulações de espalhamento haviam sido realizadas até então. No ponto crítico, a densidade QE vai a zero quando  $L \rightarrow \infty$ . A figura 4.2 mostra a densidade e tempos de vida no regime crítico como funções da dimensão linear do sistema. O tempo de vida foi calculado como [42]

$$\tau = 1/p_1, \quad (4.2)$$

em que  $p_1$  é a probabilidade de haver uma tentativa de acesso ao estado absorvente em simulações quase-estacionárias. As leis de potência

$$\bar{\rho}_{qe} \sim L^{-\beta/\nu_\perp} \quad \text{e} \quad \tau \sim L^{\nu_\parallel/\nu_\perp} \quad (4.3)$$

foram verificadas e os ajustes para  $L > 20$  fornecem  $\beta/\nu_\perp = 0,800(7)$  e  $\nu_\parallel/\nu_\perp = 1,764(14)$ . Conforme esperado, estes expoentes apresentam uma boa concordância com os expoentes conhecidos para a classe de universalidade PD [41]. Também analisamos a variância da densidade QE, definida por  $\chi = L^d(\langle \rho^2 \rangle - \langle \rho \rangle^2)$  e que segue a lei de potência

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu_\perp} \quad (4.4)$$

com o expoente  $\gamma/\nu_\perp = 0,412(8)$ , novamente em acordo com o valor da classe PD.

De acordo com o capítulo anterior, a razão entre momentos do parâmetro de ordem é uma ferramenta bem difundida para determinar o ponto crítico de sistemas tanto em equilíbrio quanto fora dele e, em particular, para modelos pertencentes à classe PD. Para este tipo de modelo, foi demonstrado que algumas razões entre momentos e cumulantes são universais. A inserção na figura 4.2 mostra a razão entre momentos  $m = \langle \rho^2 \rangle / \langle \rho \rangle^2$  para o PRC bidimensional no ponto crítico, variando a dimensão linear do sistema. É conhecido que, para o PC bidimensional [29], esta razão tem seu valor crítico dado por  $m_c = 1,3257(5)$ . Usando dados para  $L \geq 80$ , foi en-

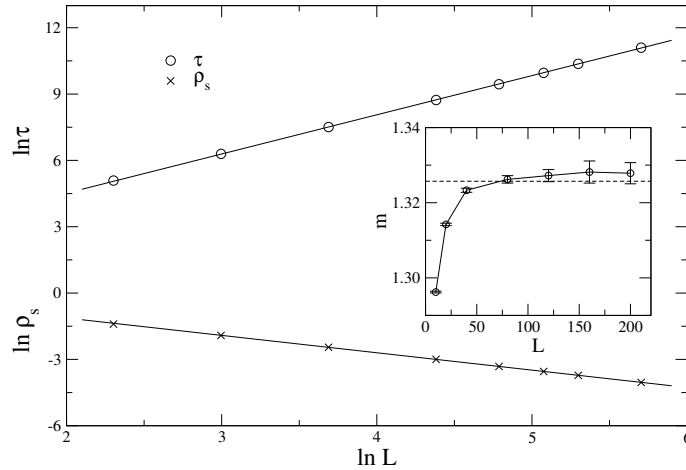


Figura 4.2: Densidade crítica e o tempo de vida como funções de  $L$  para o PRC bidimensional. Inserção: Razão entre momentos  $m = \langle \rho^2 \rangle / \langle \rho \rangle^2$  para diferentes tamanhos do sistema. A linha tracejada é o valor de  $m$  para o PC [29].

contrado o valor  $m_c = 1,3274(9)$  para o PRC em  $d = 2$ . Mais uma vez, este resultado concorda com a classe PD. Em adição a isso, verificamos também a concordância das outras razões entre momentos e cumulantes que são universais para este tipo de sistema em  $d = 1$  e  $d = 2$ .

### 4.3 Resultados para $d = 3$

Simulações quase-estacionárias para o PC e para o SIS são mostradas na figura 4.3. A taxa crítica  $\lambda_c = 1,31686$  para o PC foi obtida em [41], enquanto a taxa crítica para o modelo SIS,  $\lambda_c = 0,24805(2)$ , foi estimada neste trabalho pela análise de espalhamento. Ajustes em lei de potência para  $L > 20$  fornecem os expoentes  $\beta/\nu_\perp = 1,400(8)$ ,  $\gamma/\nu_\perp = 0,233(5)$  e  $\nu_\parallel/\nu_\perp = 1,919(9)$  para o PC, enquanto  $\beta/\nu_\perp = 1,395(5)$ ,  $\gamma/\nu_\perp = 0,252(14)$  e  $\nu_\parallel/\nu_\perp = 1,944(6)$  foram obtidos para o modelo SIS. Note que todos eles são consistentes com a classe de universalidade PD, apesar de os dados terem desviado de leis de potência para tamanhos pequenos. Este efeito pode ser considerado se levarmos em conta uma conveniente correção para a amplitude da lei de escala para o tempo de vida dado por

$$\ln \tau = \frac{\nu_\parallel}{\nu_\perp} \ln L + \frac{A}{L^{d\vartheta}} + \text{constante} \quad (4.5)$$

e assim por diante para as demais grandezas. Na verdade, os resultados obtidos não são afetados de maneira significativa pela escolha particular da correção. O valor  $\vartheta = 0,75$  estabelecido para o PC unidimensional [28] também foi adotado para este problema com  $d = 3$ . Utilizando esta correção, os expoentes são  $\beta/\nu_\perp = 1,395(4)$ ,  $\gamma/\nu_\perp = 0,216(3)$  e  $\nu_\parallel/\nu_\perp = 1,916(5)$  para o processo de contato, implicando em uma significativa redução das estimativas de erro e uma

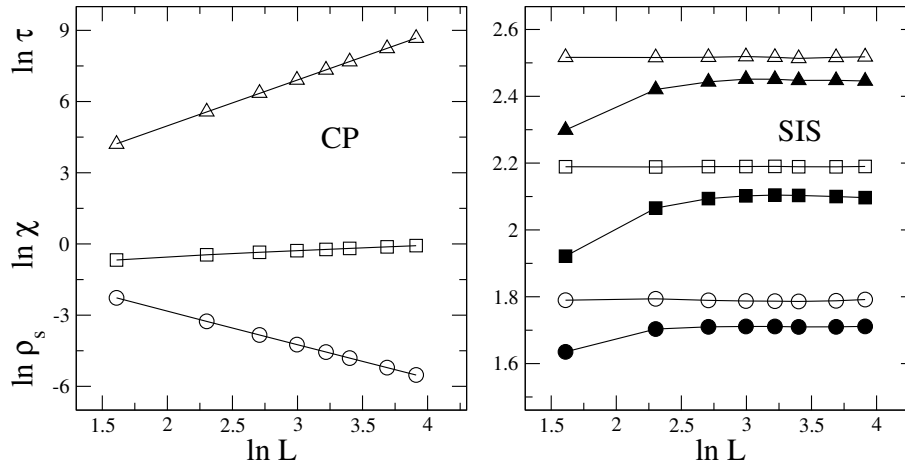


Figura 4.3: À esquerda: quantidades críticas no estado QE como funções de  $L$  para o PC em três dimensões. As linhas contínuas são ajustes de acordo com a equação 4.5. À direita: quantidade críticas no estado QE para o modelo SIS reescaladas usando leis de potência puras (símbolos preenchidos) e com a correção (símbolos sem preenchimento). Aplicou-se um desvio nestas curvas para melhorar a visibilidade.

maior proximidade dos valores com a classe PD. Para o modelo SIS, após aplicar as correções tem-se  $\beta/\nu_{\perp} = 1,403(4)$ ,  $\gamma/\nu_{\perp} = 0,209(2)$  e  $\nu_{\parallel}/\nu_{\perp} = 1,922(2)$ . Neste caso, a melhora das estimativas foi ainda maior assim como a proximidade com a classe PD. No gráfico à esquerda da figura 4.3, comparamos as grandezas reescaladas por suas respectivas leis de potência ( $\tau/L^{\nu_{\parallel}/\nu_{\perp}}$  e assim por diante) com as mesmas grandezas, mas de acordo com a equação 4.5. A superposição entre ambas é notável.

Um ponto central deste trabalho é a análise do PRC em três dimensões, para o qual a classe de universalidade era uma questão em aberto até então. Inicialmente, empregou-se a simulação de espalhamento para recalculer o ponto crítico e foi obtido um valor 0,3% maior do que aquele encontrado na literatura [21]. Pelo critério de curvatura para gráficos  $n(t) \times t$ , a melhor estimativa é  $\lambda_c = 1,00363(1)$ . Esta pequena discrepância deve ser levada em conta, já que elimina a igualdade existente até então entre as taxas de criação e aniquilação. As curvas para  $n(t)$  e  $P(t)$  apresentam transientes que são consistentes com os expoentes de campo médio para a classe PD (figura 4.4), em acordo com simulações realizadas anteriormente para o PRC [21]. Mesmo que um grande intervalo no regime de lei de potência não tenha sido obtido para o maior tempo de simulação, os expoentes obtidos para os ajustes no intervalo  $t = 10^4 - 10^5$ ,  $\eta = 0,09(2)$ ,  $\delta = 0,78(3)$  e  $z = 1,04(1)$  não excluem a possibilidade de enquadrar o modelo na classe PD (tabela 4.1). Em adição a isso, a densidade crítica para uma configuração inicial com todos os sítios ocupados decai como  $\rho \sim t^{-0,76(2)}$  para  $t > 10^3$ , em ótimo acordo com a classe PD (inserção na figura 4.4).

Resultados de simulações QE para o PRC no ponto crítico são mostrados na figura 4.5. Os expoentes obtidos a partir dos ajustes (para  $L > 20$ )  $\beta/\nu_{\perp} = 1,325(6)$ ,  $\gamma/\nu_{\perp} = 0,29(5)$  e

Tabela 4.1: Expoentes críticos para a classe PD calculados a partir de expoentes de espalhamento. As relações de escala  $\beta = \delta\nu_{\parallel}$ ,  $z = 2\nu_{\perp}/\nu_{\parallel}$ , e  $\gamma = d\nu_{\perp} - 2\beta$  [19] foram utilizadas quando necessário.

Quase-estacionário			Espalhamento		
Expoente	$d = 2$	$d = 3$	Expoente	$d = 2$	$d = 3$
$\nu_{\parallel}/\nu_{\perp}$	1.765(3)	1.919(4)	$\delta$	0.452(1)	0.756(1)
$\beta/\nu_{\perp}$	0.799(2)	1.394(5)	$\eta$	0.229(3)	0.110(1)
$\gamma/\nu_{\perp}$	0.401(4)	0.212(96)	$z$	1.133(2)	1.042(2)

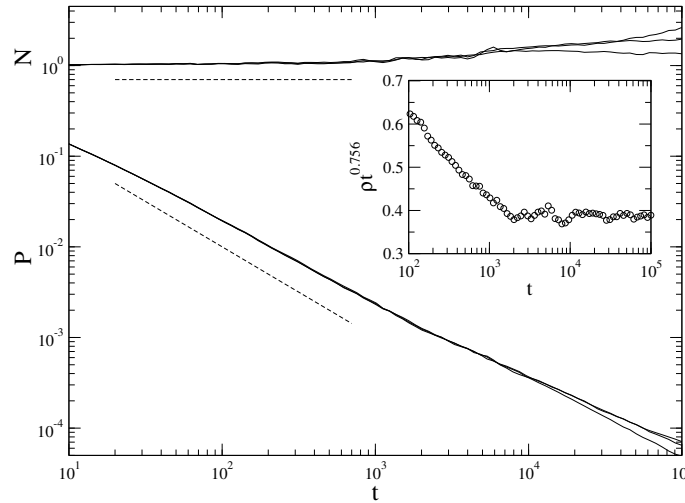


Figura 4.4: Análise de espalhamento para o PRC tridimensional próximo a  $\lambda_c$ . Os grupos de curvas de cima e de baixo correspondem à probabilidade de sobrevivência e ao número médio de sítios ocupados, respectivamente. Em cada grupo são mostradas curvas para  $\lambda = 1,00362, 1,00363$  e  $1,00364$ , de cima para baixo. As linhas tracejadas representam inclinações iguais a 0 e  $-1$ , correspondendo aos expoentes de campo médio  $\eta$  e  $\delta$ , respectivamente. Inserção: densidade crítica média (não quase-estacionária) reescalada utilizando a lei de potência  $t^{-\delta}$  para uma condição inicial na qual todos os sítios estão ocupados.

$\nu_{\parallel}/\nu_{\perp} = 1,79(1)$  não são conclusivos com relação a classe de universalidade PD. Entretanto, com exceção do expoente da lei de potência para o tempo de vida, os outros parecem convergir para o valor esperado da classe PD. Após aplicar a correção de escala, os expoentes para  $\bar{\rho}_{qe}$  e  $\chi$ ,  $\beta/\nu_{\perp} = 1,374(3)$  e  $\gamma/\nu_{\perp} = 0,19(4)$ , aproximam-se dos valores esperados. A análise para o tempo de vida merece alguns comentários. O método QE utilizado neste trabalho envolve a transição para uma configuração absorvente que passa pelo estado no qual há uma única partícula. No regime crítico do PRC, o evento de criação ocorre com uma frequência ligeiramente maior que o evento de aniquilação, como pode ser verificado pela taxa crítica obtida, juntamente com as regras para o modelo. Por consequência disso, grandes agrupamentos de sítios ocupados são encontrados com maior raridade no PRC do que no PC (a raridade é ainda maior, se compararmos com o modelo SIS), de modo que a frequência de visita ao estado pré-absorvente é muito baixa (figura 4.5). Além disso, o tempo médio que uma configuração é mantida na lista que contém a história da simulação QE,  $M/p_{rep}$ , deve ser muito maior que o tempo de vida da amostra para evitar que a mesma apareça repetidamente muitas vezes na lista. Evidentemente, esse efeito é intensificado para tamanhos grandes da rede. Sendo assim, seria necessário um

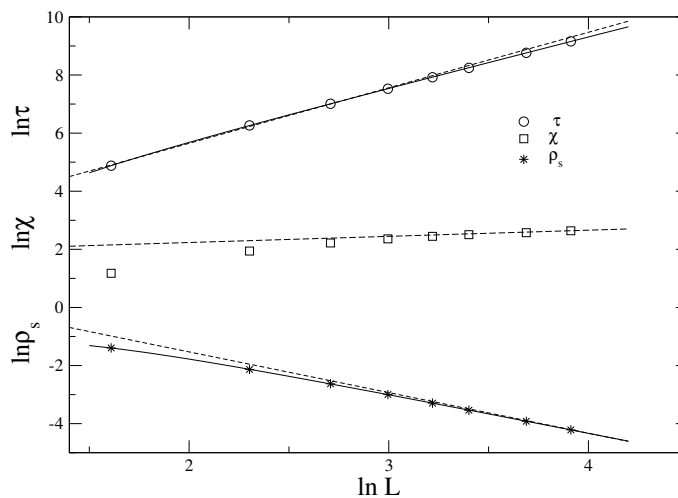


Figura 4.5: Simulações QE para o PRC tridimensional na criticalidade. As linhas sólidas representam ajustes de acordo com a equação 4.5 e as linhas tracejadas, leis de potência com os expoentes da classe PD que constam na tabela 4.1.

valor de  $p_{rep}$  que é proibitivamente pequeno em termos computacionais e/ou um valor exageradamente grande de  $M$ , juntamente com uma extensa relaxação e grandes tempos para calcular as médias. Ao invés do tempo de vida, podemos determinar o tempo característico  $\tau_p$  para que a densidade de sítios ocupados atinja o estado QE por meio de simulações convencionais. As relações de escala  $\rho \sim L^{-1,41(2)}$  e  $\tau_p \sim L^{1,88(2)}$  foram obtidas para o PRC, entrando em acordo com a classe DP conforme previsto pela conjectura de Janssen-Grassberger.

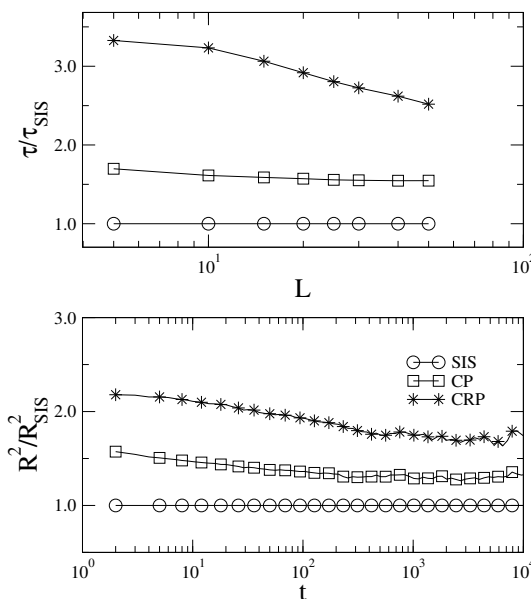


Figura 4.6: Grandezas críticas normalizadas usando o modelo SIS. Acima: tempos de vida como funções de  $L$ . Abaixo: Raios de espalhamento ao quadrado como funções do tempo. Como podemos ver, a difusão e os tempos de vida são maiores para o PRC.

Na figura 4.6, são mostradas diversas razões entre momentos e entre momentos e cumulan-

tes como funções da dimensão linear do sistema. As razões para o modelo SIS e para o PC parecem convergir para um valor constante quando  $L \rightarrow \infty$ . Levando em conta uma correção dada por

$$m(L) = m(\infty) + aL^{-\psi}, \quad (4.6)$$

em que  $a$  e  $\psi$  são parâmetros de ajuste, as razões entre momentos e momentos e cumulantes no

Tabela 4.2: Razões entre momentos assintóticas para o SIS e para o PC em  $d = 3$ .

Modelo	$\kappa_2/\mu_1^2$	$\kappa_4/\kappa_2^2$	$\mu_3/\mu_1^3$	$\mu_3/\mu_1\mu_2$	$\mu_4/\mu_2^2$
SIS	0.469(3)	0.490(6)	2.678(12)	1.822(3)	2.629(12)
PC	0.470(2)	0.454(10)	2.697(6)	1.833(3)	2.649(18)

limite assintótico podem ser encontradas. Como alguns dados para o quarto momento possuem barras de erro muito grandes, estes foram excluídos dos ajustes. As razões extrapoladas para o PC e para o SIS estão listadas na tabela 4.2 e são consistentes com a hipótese de universalidade. Foi observado um comportamento diferente para estas grandezas no PRC: ao invés de convergir monotonicamente para um valor constante, as razões entre momentos e entre momentos e cumulantes decrescem após atingirem um valor máximo. Novamente podemos associar esta diferença com a proximidade numérica das taxas de criação e aniquilação, assim como a alta difusividade resultante. De fato, a razão  $\mu_2/\mu_1^2$  cresce até o valor 1,550, que é próximo ao valor estabelecido, 1,660, para o PC no grafo completo [42]. Novamente observa-se, para pequenos sistemas, um comportamento típico de campo médio que deve convergir para a classe PD no limite assintótico de grandes sistemas.

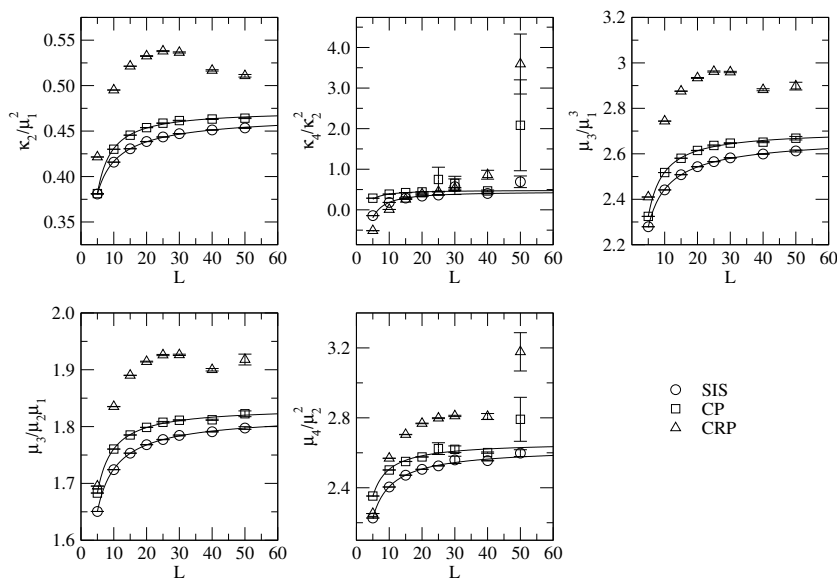


Figura 4.7: Razões entre momentos e entre momentos e cumulantes para o SIS, PC e PRC com  $d = 3$ . As linhas sólidas representam ajustes não lineares com a função dada pela equação 4.6, com coeficiente de correlação  $r > 0,999$ .



## Capítulo 5

# Um processo de reação-difusão com infinitos estados absorventes em redes regulares e complexas

Neste capítulo apresentaremos um processo de reação-difusão que possui dinâmica similar ao processo de contato por pares (PCP) e, assim como tal, apresenta um número infinito de estados absorventes. Uma das motivações para a proposta do modelo é o fato que o algoritmo para simular o PCP demanda um tempo computacional relativamente longo e elevada quantidade de memória principal<sup>1</sup>, sendo computacionalmente ineficiente quando é necessário implementar o modelo em um grafo arbitrário. Na tentativa de contornar este tipo de dificuldade, propomos o *processo de contato por limiar*, um modelo que remove o vínculo fermiônico<sup>2</sup>, preservando todas as características importantes do PCP, conforme será mostrado adiante.

Empregamos técnicas de campo médio convencional e heterogêneo e o método quase-estacionário proposto por Oliveira e Dickman, que foram explicados com maiores detalhes no capítulo 3. O estudo foi feito em redes com topologias regulares (reticulados) e complexas, mais especificamente, redes sem escala.

### 5.1 Análise em redes regulares

Antes de definir o PCL, faremos uma breve recapitulação do processo de contato. No PC, cada sítio da rede pode apenas estar ocupado ou vazio ( $\sigma_i = 1$  ou  $\sigma_i = 0$ ). A dinâmica se dá por meio dos eventos de aniquilação de uma partícula (a uma taxa unitária) e criação a uma taxa  $\lambda m$  ( $\lambda$  é a taxa de criação e  $m$  a fração de sítios ocupados que sejam primeiros vizinhos). O único estado absorvente do PC é aquele no qual todos os sítios da rede estão vazios ( $\sigma_i = 0, \forall i$ ).

Levando em conta o que já conhecemos sobre o PC, ao novo modelo adicionaremos mais um detalhe: além dos estados possíveis  $\sigma_i = 0$  e  $\sigma_i = 1$ , permitiremos que cada sítio da

---

<sup>1</sup>Neste caso, memória RAM (*random access memory*, ou memória de acesso aleatório).

<sup>2</sup>Em um modelo deste tipo, cada sítio da rede só pode ser ocupado por no máximo uma única partícula.

rede também possa ser ocupado por duas partículas, ou seja, haverá um terceiro estado possível  $\sigma_i = 2$  para um sítio  $i$ . Agora, os sítios ativos serão apenas aqueles que possuem ocupação igual a 2. Em outras palavras, pode-se dizer que somente sítios com 2 partículas podem criar uma nova partícula. Note que o PCL não é equivalente ao *processo de transferência por limiar* [43], um outro modelo pertencente à classe PD. Representando o estado de um sítio vazio, ocupado ou duplamente ocupado por  $V, O, D$ , as seguintes reações descrevem o modelo:



Observe que, assim como o PCP, o PCL possui um número infinito de estados absorventes, e há uma equivalência entre a densidade de sítios com duas partículas e a densidade de pares do PCP e sítios ocupados por apenas uma partícula são equivalentes a partículas isoladas no PCP. Em ambos modelos, a atividade é espalhada por meio de um substrato composto por partículas inativas, conforme ilustrado na figura 5.1.

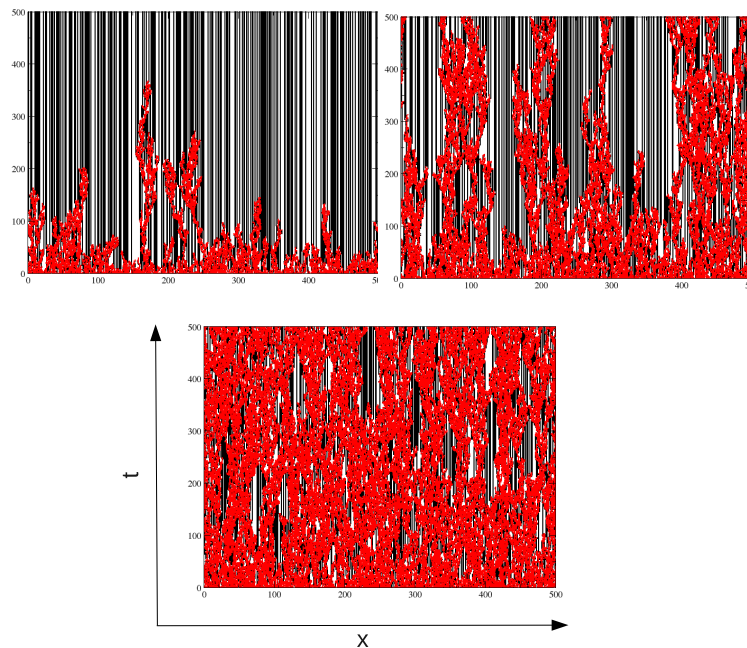


Figura 5.1: Evolução temporal do PCL unidimensional a partir de uma condição inicial com todos os sítios ativos. Sítios ativos são representados em vermelho, inativos em preto e vazios em branco. Os padrões de cima correspondem ao regime subcrítico e crítico, da esquerda para a direita, enquanto o padrão de baixo representa o regime supercrítico.

O parâmetro de ordem para o PCL será a densidade de sítios que contém duas partículas  $\phi(t)$ . Continuaremos denotando a densidade de sítios com uma partícula por  $\rho(t)$ . Um sítio contendo uma ou nenhuma partícula tem uma partícula adicionada a ele a uma taxa  $\lambda m$ , em que  $m$  é o número de vizinhos ativos (a chance de um sítio com ocupação igual a 1 ou 0 receber mais uma partícula é a mesma). Note que um sítio desocupado não se torna ativo ao receber

uma partícula, como ocorre no PC. Também existe o evento de duas partículas em um mesmo sítio se aniquilarem, desocupando o sítio. Este evento ocorre a uma taxa unitária

Note que qualquer configuração do sistema em que não hajam sítios com duas partículas na rede é um estado absorvente. Como, para uma rede infinita, existem infinitos modos de arranjar o sistema tendo sítios ocupados com uma partícula, temos a ocorrência de infinitos estados absorventes.

### 5.1.1 Aproximação de campo médio

Nosso objetivo aqui é obter uma aproximação de campo médio para este modelo em  $d = 1$ , utilizando o mesmo procedimento que foi explicado para o processo de contato unidimensional. Como agora  $\sigma_i$  pode assumir três estados e pelas características da dinâmica do modelo, devemos obter duas equações: uma para a evolução de  $\phi(t)$  e outra para a evolução de  $\rho(t)$ . A notação que utilizaremos para mostrar os cálculos é a seguinte: **2** representa um sítio que contém duas partículas, **1** representa um sítio ocupado por uma partícula e **0** representa o sítio vazio.

Note que devemos tomar cuidado na hora de considerar as possíveis transições em cada equação. Por exemplo, ao contabilizarmos as possíveis transições que variam a densidade de sítios ativos, a transição **020**  $\rightarrow$  **021** não contribui para o cálculo. Mesmo que tenha ocorrido a criação de uma partícula, nenhum sítio ativo foi criado.

Primeiramente, seja  $p(\mathbf{2}) \equiv \phi(t)$ ,  $p(\mathbf{1}) \equiv \rho(t)$  e  $p(\mathbf{0}) \equiv 1 - \phi(t) - \rho(t)$ . Vejamos as possíveis transições para obter a equação de evolução temporal para  $\phi(t)$ . Temos o evento de aniquilação quando **2**  $\rightarrow$  **0** (independente do estado dos primeiros vizinhos deste sítio), e a transição (**21**  $\rightarrow$  **22**). A partir disso, podemos escrever a equação para a evolução de  $\phi(t)$ . Já fazendo as devidas considerações de simetria, temos

$$\frac{d}{dt}\phi(t) = -p(\mathbf{2}) + \lambda[p(\mathbf{21})]. \quad (5.2)$$

Aplicando a aproximação de campo médio ( $p(\mathbf{21}) \approx p(\mathbf{2})p(\mathbf{1}) = \phi(t)\rho(t)$ ) e substituindo os valores para as respectivas probabilidades, chega-se à expressão

$$\frac{d\phi}{dt} = \phi(\lambda\rho - 1), \quad (5.3)$$

que é a equação de campo médio para os sítios ativos.

Agora, vejamos as possíveis transições que contabilizam para a variação temporal da densidade de sítios com uma partícula,  $\rho(t)$ . Aniquilação ocorre quando temos a transição (**12**  $\rightarrow$  **22**), a uma taxa  $\lambda/2$ . O termo de criação é dado por (**02**  $\rightarrow$  **12**), que deve ser multiplicado por

dois para considerar a simetria. Então, temos a expressão

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = \lambda[p(\mathbf{02}) - p(\mathbf{12})], \quad (5.4)$$

da qual finalmente obtém-se

$$\frac{d\rho}{dt} = \lambda\phi(1 - 2\rho - \phi) \quad (5.5)$$

Assim, devemos analisar o sistema de equações diferenciais não-lineares composto pelas equações (5.3) e (5.5). Note que  $\phi^* = 0$  é uma solução para qualquer valor de  $\rho$ . A condição do estado estacionário,  $d\phi/dt = d\rho/dt = 0$ , fornece

$$\rho^* = \frac{1}{\lambda} \quad (5.6)$$

e

$$\begin{aligned} \phi^* &= 1 - 2\rho^* \\ &= 1 - 2/\lambda. \end{aligned} \quad (5.7)$$

Portanto,  $\lambda_c = 2$ . Assim como no processo de contato, o parâmetro de ordem  $\phi$  no estado estacionário escala com a distância ao ponto crítico como

$$\phi^* \sim \Delta^\beta, \quad (5.8)$$

em que  $\Delta \equiv \lambda - \lambda_c$ . Logo, obtém-se que  $\beta = 1$ .

Definiremos um novo sistema de coordenadas como

$$\begin{aligned} \tilde{\phi}(t) &\equiv \phi(t) - \phi^* \\ \tilde{\rho}(t) &\equiv \rho(t) - \rho^* \end{aligned} \quad (5.9)$$

Aplicando as formas já conhecidas para  $f(\phi, \rho)$  e  $g(\phi, \rho)$ , temos

$$\frac{d\tilde{\phi}}{dt} = \lambda\tilde{\rho}(\phi^* + \tilde{\phi}) \quad (5.10)$$

$$\frac{d\tilde{\rho}}{dt} = \lambda\tilde{\phi}(2\tilde{\rho} + \tilde{\phi}) - \lambda\phi^*(2\tilde{\rho} + \tilde{\phi}) \quad (5.11)$$

e, fazendo  $\tilde{\phi}, \tilde{\rho} \ll 1$ , as equações acima se reduzem a

$$\frac{d\tilde{\phi}}{dt} = \lambda\tilde{\rho}\phi^* \quad (5.12)$$

$$\frac{d\tilde{\rho}}{dt} = -\lambda\phi^*(2\tilde{\rho} + \tilde{\phi}). \quad (5.13)$$

Assim, a matriz jacobiana dessa equação é expressa como

$$\mathbb{J} = \begin{bmatrix} 0 & \lambda\phi^* \\ -\lambda\phi^* & -2\lambda\phi^* \end{bmatrix}. \quad (5.14)$$

Os autovalores são obtidos pela equação  $\det(\mathbb{J} - \alpha\mathbb{I}) = 0$ , que possui um autovalor degenerado  $\alpha = 2 - \lambda$ . Portanto, a solução desse sistema será

$$\vec{X}(t) = \vec{X}_0 e^{-t/\tau}, \quad (5.15)$$

em que  $\vec{X} = \begin{bmatrix} \tilde{\phi} \\ \tilde{\rho} \end{bmatrix}$ . Logo,

$$\tau = \frac{1}{\lambda - 2}. \quad (5.16)$$

Conseqüentemente, usando a definição  $\tau \sim \Delta^{\nu_{\parallel}}$ , encontramos  $\nu_{\parallel} = 1$ . No ponto crítico  $\lambda = 2$ , temos que

$$\frac{1}{\phi} \frac{d}{dt}(\rho + \phi) = 1 - 2(\rho + \phi). \quad (5.17)$$

Mas, para tempos longos, vimos que  $\rho \approx 1/2$ . Substituindo na equação acima, encontramos

$$\frac{1}{\phi} \frac{d\phi}{dt} = -2\phi \implies \phi = \frac{1}{2t + 1/\phi_0}. \quad (5.18)$$

Portanto,  $\phi \sim t^{-\delta}$ , com  $\delta = 1$ .

### 5.1.2 Simulações

A análise do modelo para  $d = 1$  e  $d = 2$  foi feita por meio de simulações de espalhamento e pelo método QE. O protocolo adotado para as simulações é semelhante ao usado no capítulo 4. Ao longo da simulação mantivemos uma lista com os sítios ativos (ou seja, apenas aqueles com duas partículas), para poupar esforço computacional. Em cada passo, um desses sítios é selecionado ao acaso e, com probabilidade  $p = \lambda/(1 + \lambda)$ , cria-se uma partícula em um dos primeiros vizinhos selecionado aleatoriamente (tentativas de criação em um sítio com duas partículas são frustradas). Aniquilação ocorre com a probabilidade complementar  $1 - p$ , de modo que neste evento o sítio selecionado torna-se vazio. Após cada passo, o tempo é incrementado por  $\Delta t = 1/n_2$ , em que  $n_2$  é o número de sítios ativos.

Note que, para a análise de espalhamento, a simulação começa com o sistema em um estado pré-absorvente (na iminência de visitar o estado absorvente) e o estudo é realizado observando a evolução temporal das grandezas  $P_S(t)$  (probabilidade média de sobrevivência) e  $n_2(t)$  (número médio de sítios ativos). Porém, para este sistema, assim como no PCP, a análise não pode simplesmente ser feita iniciando o processo com um único sítio ativo na origem, pois o modelo

apresenta um número muito grande de estados pré-absorventes. Assim, o espalhamento foi realizado utilizando configurações pré-absorventes geradas pela própria dinâmica do sistema. Este método também foi utilizado para auxiliar na determinação dos pontos críticos pelo método da análise de curvatura,  $\lambda_c = 6,2810(2)$  para  $d = 1$  e  $\lambda_c = 3,23712(5)$  para  $d = 2$ .

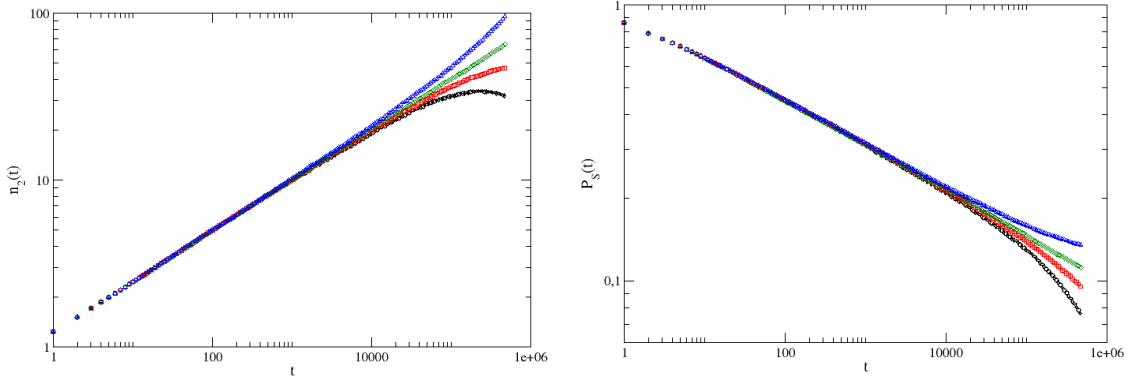


Figura 5.2: Gráficos mostrando a variação de curvatura para  $n_2$  e  $P_S$  em função de  $t$ . As curvaturas positivas (negativas) ocorrem para taxas supercríticas (subcríticas). De baixo para cima,  $\lambda = 6,2750, 6,2780, 6,2810$  e  $6,2850$ .

As curvas para  $P_S(t)$  e  $n_2(t)$  seguem as leis de potência

$$P_S(t) \sim t^{-\delta} \quad \text{e} \quad n_2(t) \sim t^\eta. \quad (5.19)$$

Ajustes em lei de potência nas curvas obtidas para  $d = 1$ , fornecem os expoentes  $\delta = 0,167(1)$  e  $\eta = 0,303(1)$ . Nota-se que estes expoentes estão em boa concordância com a classe PD discutida no capítulo 3 [19].

Assim como no PC, a criticalidade deste modelo pode ser completamente determinada pelo conjunto de expoentes  $\beta, \nu_{\parallel}$  e  $\nu_{\perp}$ . Por meio de simulações QE verificamos as leis de escala

$$\overline{\phi}_{qe} \sim L^{-\beta/\nu_{\perp}}, \quad \chi \sim L^{\gamma/\nu_{\perp}} \quad \text{e} \quad \tau \sim L^{\nu_{\parallel}/\nu_{\perp}}, \quad (5.20)$$

assim como as razões entre momentos universais descritos no capítulo 3:  $m_4/m_2^2, m_3/(m_1 m_2)$  e  $m_2/m_1^2$ .

Nas simulações pelo método QE na rede unidimensional (com condições de contorno periódicas), utilizamos uma probabilidade de reposição  $p_{rep} = 0,02$  e cada amostra foi realizada com um número  $t_m = 2 \times 10^8$  de passos de tempo, sendo que as médias foram tomadas após um tempo de relaxação  $t_r = 10^8$ . Obtivemos os valores médios e incertezas após 50 amostras independentes de simulação, tomando todos os sítios da rede ativos como condição inicial.

Assim, para o modelo em  $d = 1$ , obtivemos  $\beta/\nu_{\perp} = 0.263(1)$ ,  $\nu_{\parallel}/\nu_{\perp} = 1,543(10)$  e  $\gamma/\nu_{\perp} = 0,4984(5)$  (figura 5.3). De acordo com a literatura [13], os valores esperados para a classe PD são dados por:  $\beta/\nu_{\perp} \approx 0,2521$ ,  $\nu_{\parallel}/\nu_{\perp} \approx 1,5807$  e  $\gamma/\nu_{\perp} \approx 0,4959$ . Os valores obtidos sugerem fortemente que este modelo pertence à classe PD. Também nota-se que as razões

entre momentos aproximam-se dos valores conhecidos para modelos pertencentes à classe PD [29], conforme mostra a figura 5.4.

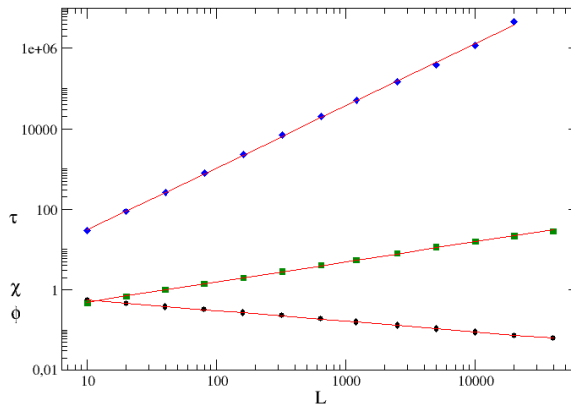


Figura 5.3:  $\overline{\phi}_{qe}$ ,  $\chi$  e  $\tau$  como funções de  $L$  para a PCL unidimensional.

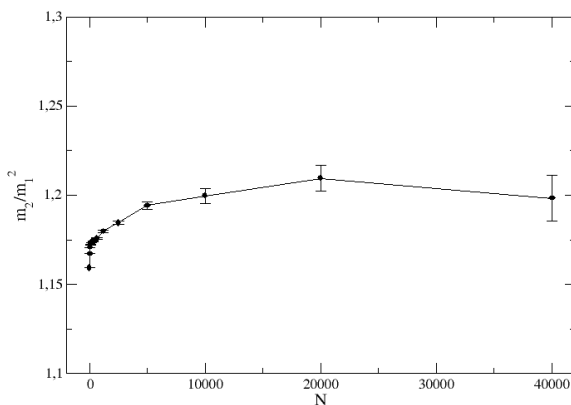


Figura 5.4: A razão entre momentos  $m_2/m_1^2$  em função de  $L$ .

Nas simulações em uma rede quadrada, utilizamos  $p_{rep} = 0,005$ , cada amostra foi realizada com um número  $t_m = 2 \times 10^7$  de passos de tempo e as médias foram tomadas após um tempo de relaxação  $t_r = 10^7$ . Realizamos 50 amostras independentes de simulação, tomando todos os sítios da rede ativos como condição inicial, para obter os valores médios e incertezas.

Para o modelo em duas dimensões obtivemos  $\beta/\nu_{\perp} = 0.807(3)$ ,  $\nu_{\parallel}/\nu_{\perp} = 1,743(8)$  e  $\gamma/\nu_{\perp} = 0,399(2)$  (figura 5.5). Para a classe PD, os valores esperados são dados por:  $\beta/\nu_{\perp} \approx 0.795$ ,  $\nu_{\parallel}/\nu_{\perp} \approx 1,764$  e  $\gamma/\nu_{\perp} \approx 0,409$ . Portanto, assim como no caso unidimensional, os expoentes obtidos sugerem que o modelo pertença à classe PD.

As razões entre momentos para  $d = 1$  e  $d = 2$  estão listados na tabela 5.1.2. Ambos estão em boa concordância com a classe PD.

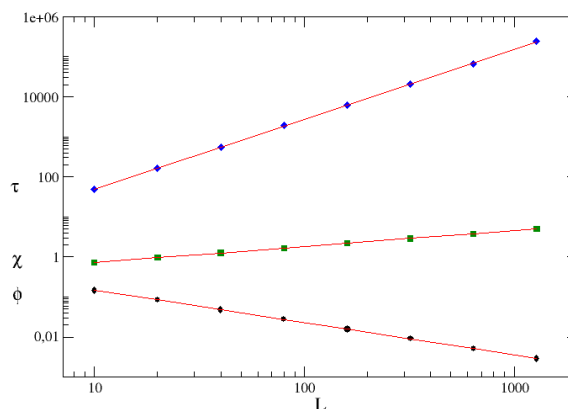


Figura 5.5:  $\bar{\phi}_{qe}$ ,  $\chi$  e  $\tau$  como funções de  $L$  para o PCL bidimensional.

$d$	$\lambda_c$	$M_{11}^2$	$M_{12}^3$	$M_{22}^4$
1	6,2810(2)	1.19(1)	1,34(2)	1,64(4)
2	3,23712(5)	1,35(1)	1,62(2)	2,18(4)

Tabela 5.1: Taxas críticas e razões entre momentos para o PCL em redes regulares. O número entre parênteses representa o erro na última casa decimal.

## 5.2 Análise na rede heterogênea

Nesta seção, mostraremos a análise para o PCL em redes complexas heterogêneas que possuem uma distribuição de conectividades dada por  $P(k) \sim k^{-\gamma}$ . Como foi visto para o processo de contato no capítulo 3, processos dinâmicos ocorrendo nestas redes podem apresentar um comportamento crítico bem diferente daquele que é conhecido para redes regulares. O modo como compreendemos o comportamento crítico de sistemas em redes complexas baseia-se essencialmente na aplicação de técnicas de campo médio e, em particular, espera-se que abordagens utilizando esta teoria forneçam resultados corretos, já que a propriedade de mundo pequeno que surge devido a natureza aleatória das conexões na rede faz com que, na prática, tais redes possuam dimensão infinita.

### 5.2.1 Teoria de campo médio heterogênea

Para redes com alto grau de heterogeneidade, como redes sem escala, deve ser considerada a *teoria de campo médio heterogênea* (CMH), na qual as grandezas dinâmicas do sistema são substituídas por grandezas equivalentes, considerando que estas só dependam do grau  $k$  do vértice em questão. Para o PCL, estas quantidades são a densidade média de sítios ativos em nós com grau  $k$ ,  $\phi_k$ , e, analogamente, a densidade de sítios inativos  $\rho_k$ . A densidade total de

sítios ativos e inativos pode ser obtida por meio de  $\phi_k$  e  $\rho_k$  por meio das equações

$$\phi = \sum_k \phi_k P(k), \quad (5.21)$$

$$\rho = \sum_k \rho_k P(k) \quad (5.22)$$

As equações de CMH para as reações dadas em (5.2) são:

$$\frac{d\phi_k}{dt} = -\phi_k + \lambda k \rho_k \Theta_k \quad (5.23)$$

$$\frac{d\rho_k}{dt} = \lambda k (1 - \rho_k - \phi_k) \Theta_k - \lambda k \rho_k \Theta_k, \quad (5.24)$$

em que

$$\Theta_k = \sum_{k'} \frac{P(k'|k) \phi_{k'}}{k'}, \quad (5.25)$$

com  $P(k'|k)$  sendo a probabilidade de que um vértice com grau  $k$  esteja conectado a um vértice com grau  $k'$ . Na equação (5.23), o primeiro termo representa a aniquilação espontânea que ocorre em sítios ativos com taxa 1 e o segundo termo representa a criação, que ocorre a uma taxa  $\lambda$ , em nós que contenham uma única partícula. Para a equação (5.24), o primeiro termo representa a ocupação em um vértice vazio devido à interação com nós ativos (evento  $0 \rightarrow 1$ ) e o segundo termo representa a criação de uma partícula em um vértice inativo (evento  $1 \rightarrow 2$ ). O fator  $1/k'$  aparece na equação para  $\Theta$  pois deve-se considerar a probabilidade de o nó com grau  $k'$  criar uma partícula no vértice de grau  $k$ .

Para  $t \rightarrow \infty$ ,  $d\rho_k/dt = 0$ , temos

$$\rho_k = \frac{1 - \phi_k}{2} \quad (5.26)$$

e

$$\frac{d\phi_k}{dt} = -\phi_k + \frac{\lambda}{2} k (1 - \phi_k) \Theta_k. \quad (5.27)$$

Porém, note que a equação (5.27) é a mesma equação de movimento obtida para o parâmetro de ordem do processo de contato, conforme visto na seção 3.9, mas com uma taxa de criação efetiva  $\lambda' = \lambda/2$ . Desse modo, podemos utilizar os resultados conhecidos para as análises do PC em redes sem escala descorrelacionadas. Foi mostrado que, no limite de tamanho infinito, o PC passa por uma transição de fase contínua em  $\lambda'_c = 1$ . Assim, para o PCL, temos  $\lambda_c = 2$ . Em redes não correlacionadas, para as quais  $P(k'|k) = k' P(k')/\langle k \rangle$  e  $\Theta_k = \phi/\langle k \rangle$  a densidade total de sítios ativos,  $\phi$ , diverge no ponto crítico como

$$\phi \sim (\lambda - \lambda_c)^\beta, \quad (5.28)$$

em que

$$\beta = \max\left(\frac{1}{\gamma - 2}, 1\right). \quad (5.29)$$

Para sistemas finitos, a análise da transição para um estado absorvente requer a aplicação da técnica de escalonamento de tamanho finito (ETF) já que, devido a flutuações, o sistema pode atingir um estado absorvente mesmo estando no regime supercrítico. Nos últimos anos, a teoria de CMH para o escalonamento de tamanho finito foi desenvolvida por completo para o PC. A partir dos resultados obtidos, temos que a probabilidade de haver  $n$  vértices ativos no sistema para o regime quase-estacionário (QE) é dada por [33]

$$\bar{P}_n = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} f\left(\frac{n}{\sqrt{\Omega}}\right), \quad (5.30)$$

em que  $\int_0^\infty f(x)dx = 1$ ,  $\Omega = N/g$  e  $g = \langle k^2 \rangle / \langle k \rangle^2$ . A partir dessa distribuição QE, obtemos as leis de escala para a densidade crítica de sítios ativos e o tempo característico:

$$\bar{\phi} \sim (gN)^{-1/2} \quad (5.31)$$

$$\tau \sim \left(\frac{N}{g}\right)^{1/2} \quad (5.32)$$

Para uma distribuição do tipo  $P(k) \sim k^{-\gamma}$ , o fator  $g$  diverge em função do cutoff  $k_c$  como

$$\begin{aligned} g &\sim k_c^{3-\gamma}, & 2 < \gamma < 3 \\ g &\sim \text{constante.} & \gamma > 3 \end{aligned}$$

Para  $\gamma = 3$ ,  $g$  diverge logarithmicamente. Assim, considerando um cutoff geral do tipo  $k_c \sim N^{1/\omega}$ , obtemos para  $\bar{\phi}$

$$\bar{\phi} \sim N^{-\hat{\nu}}, \quad \text{em que } \hat{\nu} = \frac{1}{2} + \max\left(\frac{3-\gamma}{2\omega}, 0\right) \quad (5.33)$$

e, para o tempo característico,

$$\tau \sim N^{\hat{\alpha}}, \quad \text{em que } \hat{\alpha} = \frac{1}{2} - \max\left(\frac{3-\gamma}{2\omega}, 0\right). \quad (5.34)$$

Tomando o limite estacionário da equação (5.27), é fácil mostrar que

$$\bar{\phi}_k = \frac{\lambda k \phi}{2\langle k \rangle} + \mathcal{O}(2). \quad (5.35)$$

E, portanto,

$$\bar{\rho}_k = \frac{1}{2} - \frac{\lambda k \phi}{4\langle k \rangle} + \mathcal{O}(2), \quad (5.36)$$

em que  $\mathcal{O}(2)$  são termos de segunda e maiores ordens em  $k\phi$ .

### 5.2.2 Simulações

Com o objetivo de analisar a criticalidade do PCL em redes heterogêneas, realizamos simulações pelo método quase-estacionário em redes geradas pelo algoritmo UCM (seção 2.3.4), ou seja, redes sem escala e descorrelacionadas, com um cutoff que escala como  $k_c \sim N^{1/2}$ . Notou-se que, diferentemente do PCL em topologias regulares (e até mesmo do PC em redes heterogêneas), o tempo de relaxação do PCL depende fortemente das condições iniciais. Esta propriedade do modelo é mostrada na figura 5.6, onde mostramos a relaxação de  $\phi$  para duas condições iniciais diferentes: na primeira condição, começamos a simulação com todos os vértices ativos; na segunda, ocupou-se 2% da rede com nós ativos e o restante com apenas uma partícula.

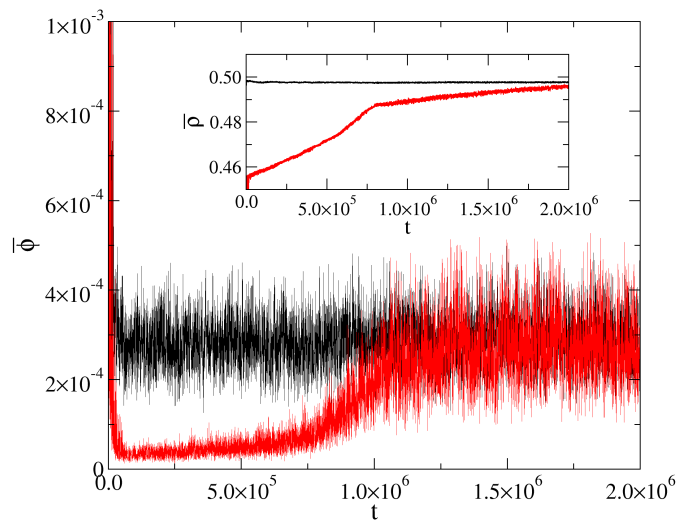


Figura 5.6: Relaxação crítica da densidade de sítios ativos para duas condições iniciais diferentes: todos os vértices ativos (em vermelho); 2% dos vértices ativos e o restante, inativos (em preto). Inserção: relaxação crítica da densidade de nós inativos. o tamanho da rede é  $6,4 \times 10^5$ , com  $\gamma = 2$ , 75.

Quando começamos a simulação na rede com todos os sítios ativos há uma fase metaestável, na qual o sistema permanece em um regime pseudo-estacionário com densidades muito baixas. O sistema passa para o verdadeiro regime estacionário apenas após um certo transiente, que pode ser muito grande em redes maiores. Entretanto, se começarmos com uma rede preenchida de sítios inativos, porém com uma pequena fração de vértices ativos, esta fase metaestável não aparece e o sistema vai direto para o verdadeiro regime QE.

Para redes com  $\gamma > 3$ , valores para os quais a rede perde a sua característica sem escala, a relaxação da densidade  $\phi$  inicialmente decai para um regime com baixa densidade, mas logo assume os valores do estado estacionário, sem que o sistema permaneça por muito tempo no regime de configurações metaestáveis.

Se levarmos em conta a propriedades de mundo pequeno que estas redes apresentam, esta dependência incomum com a condição inicial parece ainda mais intrigante. Para este tipo de rede, seria de se esperar que a atividade propagasse rapidamente por meio dos atalhos, de modo

que o tempo de relaxação tivesse um valor muito pequeno. Podemos explicar a existência desta fase metaestável em termos de algumas propriedades que este processo de reação-difusão apresenta. Note mais uma vez que só há criação se houver um vértice inativo na vizinhança próxima de um vértice ativo. Desse modo, a atividade no PCL se espalha por meio de um *backbone*, composto por sítios inativos. Quando começamos a dinâmica a partir da rede completamente preenchida por sítios ativos, o evento de criação ocorre com frequência muito baixa, já que não há espaço para que isso aconteça. Nesse estágio da simulação o evento de aniquilação predomina e isso faz com que o backbone se fragmente em uma série de componentes isolados, de modo que não haverá espalhamento da atividade até que seja construído este suporte composto por nós inativos. Este argumento explica porque, em redes homogêneas,  $\phi$  decai a um valor baixo e depois aumenta para aquele do estado estacionário. Pela teoria de campo médio homogênea, podemos ver que  $\rho - (1/2) \sim t^{-1}$ . Mas, para redes muito heterogêneas, o principal meio utilizado para espalhar a atividade são os hubs, que possuem uma elevada centralidade. Enquanto os hubs não estiverem ocupados por uma partícula (ou seja, integrados ao suporte composto por vértices inativos) o sistema permanecerá no regime de densidades muito baixas, no qual a atividade só não termina porque a abordagem utilizada analisa o estado quase-estacionário.

As simulações QE foram realizadas para tamanhos do sistema variando de  $5 \times 10^3$  a  $1,28 \times 10^6$ . Os tempos de relaxação e de média  $t_r = t_m = 10^7$  foram utilizados para todas as simulações. Armazenamos um número  $M = 200$  de configurações do sistema, atualizando esta lista com probabilidade  $p_{rep} = 0,005\Delta t$ , em que  $\Delta t = 1/n_2$  é o incremento do passo de tempo ao longo da simulação. Vale observar que, durante 20% do tempo total de simulação ( $t = t_r + t_m$ ), adotamos um valor 10 vezes maior para  $p_{rep}$  de modo a evitar que a lista contivesse um número muito grande de configurações similares. Fixamos o grau mínimo em  $m_0 = 6$  e investigamos o sistema para  $\gamma = 2,50, 2,75$  e  $3,25$ . Foram tomadas 50 amostras independentes de simulação para calcular as grandezas dinâmicas médias sobre diferentes redes.

A tarefa de determinar o ponto crítico para processos dinâmicos em redes complexas apresenta uma complicação adicional, que é a dependência explícita em grandezas como o fator  $g$  nas leis de escala obtidas pela teoria de ETF. No limite de  $k$  contínuo,  $g$  se comporta como

$$g = \frac{(\gamma - 2)^2 m_0^{\gamma-1} (1 - \xi^{\gamma-1})(1 - \xi^{3-\gamma})}{(\gamma - 1)(3 - \gamma) (1 - \xi^{\gamma-2})^2} k_c^{3-\gamma}, \quad (5.37)$$

em que  $\xi = m_0/k_c < 1$ . Considerando  $2 < \gamma < 3$  e expandindo  $g$  até a ordem mais baixa em  $\xi$ , temos

$$g \simeq \text{constante} \times (1 - \xi^{3-\gamma} + 2\xi^{\gamma-2} \dots) k_c^{3-\gamma}. \quad (5.38)$$

Agora, substituindo a relação anterior em  $\bar{\phi} \sim (gN)^{-1/2}$ , obtemos a seguinte expressão para a densidade QE

$$\ln \bar{\phi} = C - \hat{\nu} \ln N + \frac{1}{2} \frac{m_0^{3-\gamma}}{N^{\frac{3-\gamma}{\omega}}} - \frac{m_0^{\gamma-2}}{N^{\frac{\gamma-2}{\omega}}}. \quad (5.39)$$

Expressões semelhantes podem ser obtidas para o caso  $\gamma \leq 3$ . Observe que, em nível de campo médio, os gráficos  $\phi \times N$  na escala logarítmica são afetados por fortes correções de escala, já que os expoentes  $(3 - \gamma)/\omega$  e  $(\gamma - 2)/\omega$  podem assumir valores muito pequenos para  $\gamma \approx 3$  e  $\gamma \approx 2$ , respectivamente (figura 5.7). Para  $\gamma = 3$  estas correções são logarítmicas e nunca podem ser desprezadas, mesmo no limite  $N \rightarrow \infty$ .

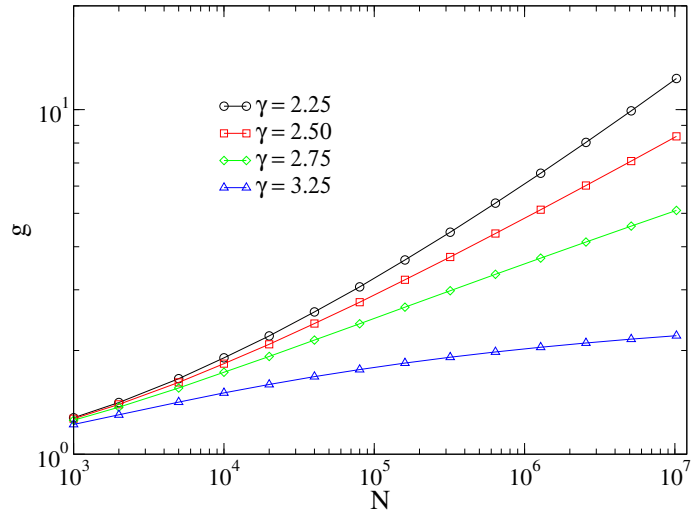


Figura 5.7: Fator  $g$  como uma função do tamanho do sistema. Note que o comportamento em lei de potência  $g \sim N^{(3-\gamma)/\omega}$  só será atingido para tamanhos muito grandes do sistema.

Felizmente, para determinar  $\lambda_c$ , podemos contornar estes obstáculos analisando as razões entre momentos que tem a forma

$$M_{qs}^n = \frac{m_n}{m_q m_s}, \quad q + s = n, \quad (5.40)$$

em que  $m_n = \langle \phi^n \rangle$ . Espera-se que, no ponto crítico, estas razões sejam independentes do tamanho do sistema. A figura 5.8 mostra a razão entre momentos de segunda ordem em função da taxa de criação para diferentes tamanhos de rede. Como previsto, as curvas se cruzam no mesmo ponto, fornecendo  $\lambda_c = 2,1662(3)$ . A razão crítica  $M_{11}^2 = 1,788(3)$  obtida para o PCL apresenta boa concordância com a razão crítica  $M_{11}^2 = 1,77(2)$ , obtida para o processo de contato na mesma rede. Razões entre momentos de ordens maiores também foram investigadas, como mostra a tabela 5.2.2 e todos os valores concordam com os obtidos para o PC nos mesmos tipos de rede [44]. Observe também que os pontos críticos encontrados são levemente maiores do que  $\lambda_c = 2$ , previsto pela teoria de CMH. Este resultado não surpreende, já que a aproximação de campo médio despreza qualquer tipo de correlação dinâmica, até mesmo a correlação entre primeiros vizinhos.

Após estimar o ponto crítico com boa precisão através da análise das razões entre momentos, podemos sondar os expoentes críticos de campo médio, assim como as leis de escala (5.31) e (5.32). A figura 5.9 mostra a densidade crítica de sítios ativos e o tempo característico como funções do tamanho do sistema. Fazendo ajustes em lei de potência e comparando com

$\gamma$	$\lambda_c$	$M_{11}^2$	$M_{12}^3$	$M_{22}^4$
2,50	2,1300(5)	1,835(3)	2,566(7)	4,50(2)
2,75	2,1662(3)	1,788(3)	2,450(7)	4,15(2)
3,25	2,2230(4)	1,704(6)	2,26(1)	3,59(6)

Tabela 5.2: Taxas críticas e razões entre momentos para o PCL em redes sem escala não correlacionadas. O número entre parênteses representa o erro na última casa decimal.

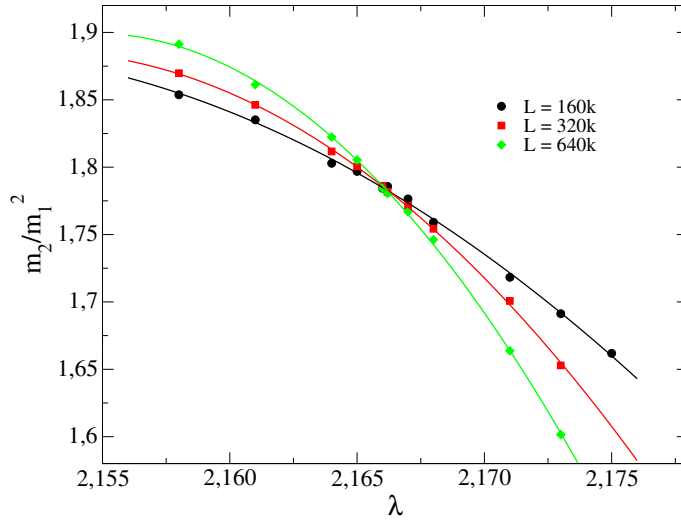


Figura 5.8: Razões entre momentos  $m_2/m_1^2$  como funções de  $\lambda$ , para uma rede com  $\gamma = 2,75$ . Os resultados obtidos pelas simulações QE estão representados por símbolos e as linhas representam ajustes polinomiais.

$\bar{\phi}_{qe} \sim N^{-\hat{\nu}}$ , encontramos os expoentes  $\hat{\nu} = 0,63(1)$ ,  $0,60(1)$  e  $0,52(1)$  para  $\gamma = 2,50$ ,  $2,75$  e  $3,25$ , respectivamente. Estes expoentes estão próximos aos previstos pela teoria de CMH  $\hat{\nu} = (5 - \gamma)/4$  (tabela 5.2.2). Ajustes em lei de potência para o tempo característico  $\tau$  também fornecem expoentes próximos àqueles previstos pela teoria de CMH, como mostrado na tabela 5.2.2. Entretanto, alguns expoentes previstos teoricamente diferem dos obtidos por simulação, especialmente para o caso  $\gamma = 2,75$ .

$\gamma$	$\hat{\nu}$	$\hat{\nu}_{hmf}$	$S_\nu$	$\hat{\alpha}$	$\hat{\alpha}_{hmf}$	$S_\alpha$
2,50	0,63(1)	0,625	0,51(1)	0,36(1)	0,375	0,49(1)
2,75	0,60(1)	0,563	0,51(1)	0,41(1)	0,438	0,49(1)
3,25	0,52(1)	0,500	0,49(1)	0,49(1)	0,500	0,51(1)

Tabela 5.3: Expoentes críticos para o PCL em redes sem escala não correlacionadas. Os expoentes de campo médio  $\hat{\nu}_{hmf} = (5 - \gamma)/4$  e  $\hat{\alpha}_{hmf} = (\gamma - 1)/4$  também foram incluídos, para comparação.

Esta leve discrepância se deve à curvatura que surge para tamanhos “pequenos” devido à

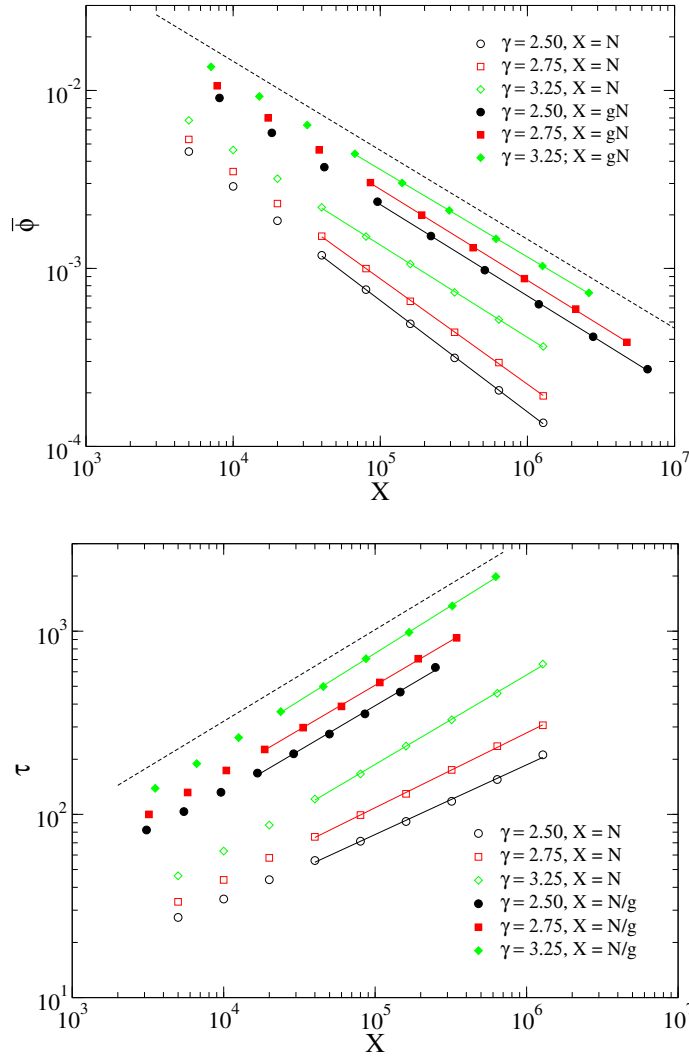


Figura 5.9: Análise de ETF para a densidade QE de sítios ativos (acima) e para o tempo de vida (abaixo), para diferentes valores de  $\gamma$ . As linhas tracejadas representam retas com inclinação  $\pm 1/2$  e linhas contínuas representam ajustes em lei de potência. As curvas para os símbolos preenchidos foram deslocadas para uma melhor visualização.

dependência explícita com o fator  $g$  nas leis de escala para  $\bar{\phi}_{qe}$  e  $\tau$ . Se fizermos ajustes em lei de potência do tipo  $\bar{\phi}_{qe} \sim (gN)^{-S_\nu}$  e  $\tau \sim (N/g)^{S_\alpha}$ , vemos que todos os expoentes calculados numericamente concordam com o resultado de campo médio  $S_\alpha = S_\nu = 1/2$ , como consta na tabela 5.2.2. Note que, de posse da distribuição  $P(k)$  normalizada, o fator  $g$  pode ser calculado de maneira exata e usado no ajuste.

Na figura 5.10, que mostra as densidades parciais  $\phi_k$  e  $\rho_k$  como funções de  $k$ , vemos mais resultados que corroboram a teoria de CMH. De acordo com as equações (5.35) e (5.36), a teoria de CMH prevê que estas grandezas, no ponto crítico, variam linearmente com  $k$ . A figura 5.11 compara as distribuições quase-estacionárias de atividade para o PCL e para o PC em redes semelhantes. Observa-se que as distribuições são quantitativamente similares.

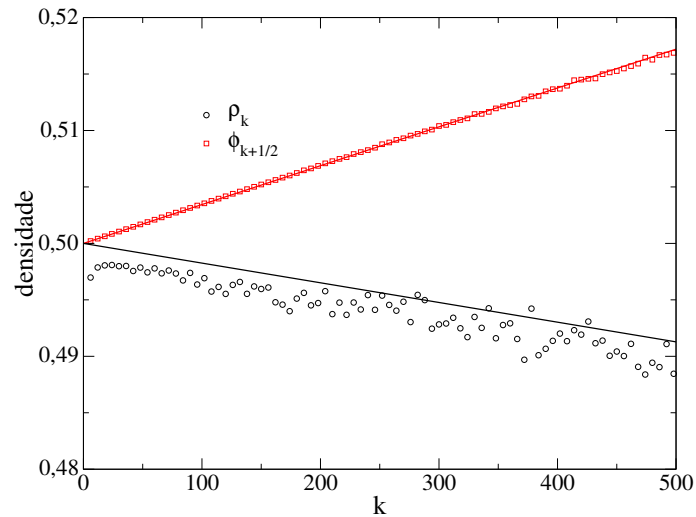


Figura 5.10: Densidades parciais como funções de  $k$  para o PCL na rede UCM. Símbolos representam resultados de simulações e linhas são as aproximações de CMH. Utilizamos uma rede de tamanho  $N = 3,2 \times 10^5$ , com  $\gamma = 2,75$ .

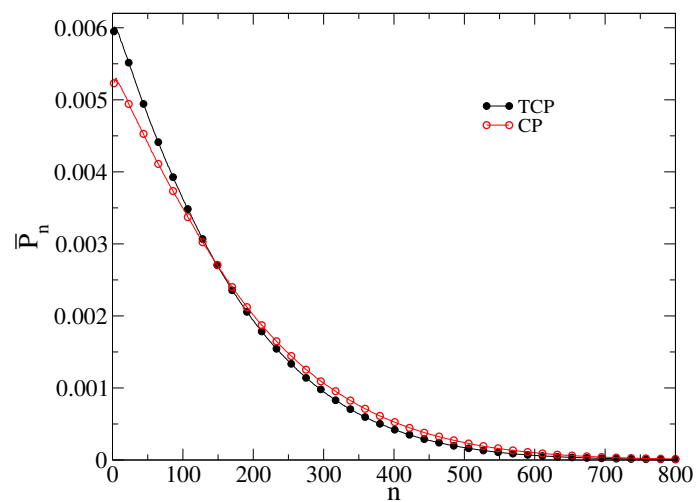


Figura 5.11: Distribuição de probabilidades quase-estacionária para vértices ativos no PCL e no PC em redes UCM. Utilizamos uma rede de tamanho  $N = 3,2 \times 10^5$ , com  $\gamma = 2,75$ .

# Capítulo 6

## Considerações Finais

Na primeira parte deste trabalho (capítulo 4), realizamos simulações para o processo de contato (PC), para o modelo suscetível-infectado-suscetível (SIS) e para o processo de replicação por contato (PRC) em três dimensões, além de reproduzir alguns resultados já conhecidos pelo método de simulação quase-estacionária. Utilizando este método, foi possível determinar as razões entre momentos dos parâmetros de ordem para a classe PD em três dimensões. Também mostramos que os expoentes de campo médio para o PRC tridimensional determinados em [21] são um transiente observado na análise de espalhamento.

Simulações quase-estacionárias e correções convenientes na escala revelaram que o PRC pertence à classe de universalidade da percolação direcionada, como se esperava pelo critério de Janssen-Grassberger. Entretanto, as razões entre momentos para o PRC concordam com os valores da classe PD para  $d = 1$  e  $d = 2$ , mas não para  $d = 3$ . Esta discrepância é explicada pela proximidade que há entre o evento de criação e o evento de aniquilação (que ocorrem com probabilidades muito próximas), originando um comportamento transiente difusivo no PRC.

No capítulo 5, investigamos a transição de fase do processo de contato por limiar (PCL) em redes regulares e sem escala. O modelo, que possui infinitos estados absorventes, é análogo ao processo de contato por pares. De maneira similar a este modelo, foi mostrado que o PCL pertence à classe PD em redes regulares. Em redes sem escala, mostramos que os expoentes críticos da análise de ETF da densidade quase-estacionária de sítios ativos e do tempo de vida são os mesmos que foram obtidos para o PC em redes sem escala, tanto na teoria de CMH, quanto nas simulações QE. Na verdade, a principal diferença entre a dinâmica do PCL e do PC é a forte dependência da relaxação para o estado QE com a condição inicial.

A concordância observada entre expoentes críticos de diferentes modelos e substratos, sugere a conjectura que o comportamento crítico para o PC em uma rede *annealed* [32, 31] pode ser um comportamento robusto e universal, que descreve um grande número de sistemas com transições de fase para estados absorventes em redes complexas. Devido à natureza tipo campo médio imposta pela propriedade de mundo pequeno, suspeita-se que os expoentes obtidos pela análise de ETF para a classe de universalidade do PC-CMH são mais robustos em redes complexas do que em redes regulares e podem incluir modelos com infinitas configurações absorventes que, em baixas dimensões, não pertencem à mesma classe do PC.



# Referências Bibliográficas

- [1] TAKEUCHI K. A.; KURODA M.; CHATÉ H.; SANO M., *Directed percolation criticality in turbulent liquid crystals*, Phys. Rev. Lett., **99**, 2007
- [2] CORTÉ L.; CHAIKIN P. M.; GOLLUB J. P.; PINE D. J., *Random Organization in periodically driven systems*, Nature Physics, **4**, 420-424, 2008.
- [3] BARRAT A.; BARTHÉLEMY M.; VESPIGNANI A., *Dynamical process on complex networks*, Cambridge: Cambridge University Press, 2008.
- [4] CALDARELLI G., *Scale-free Networks - complex webs in nature and technology*, Oxford: Oxford University Press, 2007.
- [5] ERDŐS P.; RÉNYI A., *On Random Graphs*, Publ. Math. **6**, 290-297, 1959.
- [6] GILBERT E. N., *Random Graphs*, Ann. Math. Statist, **30**, 1141-1144, 1959.
- [7] WATTS D. J.; STROGATZ S. H., *Collective Dynamics of 'small-world' networks*, Nature, **393**, 1998.
- [8] BARRAT A.; WEIGT M., *On the properties of small-world network models*. Eur. Phys. J. **13**, 547-560, 2000.
- [9] ALBERT R.; BARABÁSI A., *Statistical mechanics of complex networks*. Rev. Mod. Phys. **74**, 2002.
- [10] ALBERT R.; JEONG H.; BARABÁSI A., *Error and attack tolerance of complex networks*. Nature, **406**, 378-482, 2000.
- [11] BARABÁSI A.; ALBERT R., *Emergence of scaling in random networks*. Science, **286**, 509-512, 1999.
- [12] CATANZARO M. BOGUÑA M.; PASTOR-SATORRAS, *Generation of uncorrelated random scale-free networks*. Phys. Rev. E **71**, 027103, 2005.
- [13] OLIVEIRA M. M., *Simulações de sistemas com estados absorventes: método e aplicações..* 2007. 64f. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, MG, 2007.

- [14] BINDER K., *Finite-size scaling analysis of Ising-model block distribution functions*. Z. Phys. B Con. Mat., **43**, 119-140, 1981.
- [15] DERRIDA B.; LEBOWITZ J. L.; SPEER E. R., *Free Energy Functional For Nonequilibrium Systems: An Exactly Soluble Case*. Phys. Rev. Lett, **87**, 150601, 2001.
- [16] HAKEN H., *Synergetics*. Nova Iorque:Springer-Verlag, 1983.
- [17] NICOLIS G.; PRIGOGINE I., *Self-organization in Nonequilibrium Systems*. Nova Iorque:Wiley Interscience, 1977.
- [18] STANLEY H. E., *Scaling, universality, and renormalization: Three pillars of modern critical phenomena*. Rev. Mod. Phys., **71**, S358-S366, 1999.
- [19] MARRO J.; DICKMAN R., *Nonequilibrium Phase Transition in Lattice Models*. Cambridge: Cambridge University Press, 1999.
- [20] GRASSBERGER P.; DE LA TORRE A., *Reggeon field-theory (schlogl 1st model) on a lattice - monte-carlo calculations of critical behavior*. Ann. Phys., **122**, 373-396, 1979.
- [21] FERREIRA JR. S. C., *Critical behavior of the two- and three-dimensional contact replication processes*. Phys. Rev. E, **71**, 017104, 2005.
- [22] FERREIRA JR. S. C., *Absorbing state transition in a one-dimensional contact replication process*. Phys. Rev. E, **70**, 036119, 2004.
- [23] PRIVMAN V., *Nonequilibrium Statistical Mechanics in One Dimension*. Cambridge:Cambridge University Press, 2005.
- [24] AUKRUST T.; BROWNE D. A.; WEBMAN I., *Critical behavior of an autocatalytic reaction model*. Phys. Rev. A, **41**, 5294-5301, 1990.
- [25] JENSEN I.; DICKMAN R., *Time-dependent perturbation-theory for nonequilibrium lattice models*. J. Stat. Phys., **71**, 89-127, 1993.
- [26] BROADBENT S. R.; HAMMERSLEY J. M., *Percolation Process, I and II*. Proc. Cambridge Phil. Society, **53**, 629-645, 1957.
- [27] DICKMAN A. G.; DICKMAN R.; BARBOSA F. A. *Transições de fase sem termodinâmica*. Rev. Bras. Ens. Fis., **28**, 23-33, 2006.
- [28] OLIVEIRA M. M.; DICKMAN R., *How to simulate the quasistationary state*, Phys. Rev. E. **71**, 016129, 2005.
- [29] DICKMAN R.; SILVA J. K. L., *Moment Ratios for Absorbing-State Phase Transitions*. Phys. Rev. E, **58**, 1998.

- [30] CASTELLANO C.; PASTOR-SATORRAS R., *Non Mean-Field Behavior of the Contact Process on Scale-Free Networks*, Phys. Rev. Lett. **96**, 038701, 2006.
- [31] CASTELLANO C. e PASTOR-SATORRAS R., *Routes to thermodynamic limit on scale-free networks*, Phys. Rev. Lett. **100**, 1487701, 2008.
- [32] BOGUÑÁ M. CASTELLANO C.; PASTOR-SATORRAS R., *Langevin approach for the dynamics of the contact process on annealed scale-free networks*, Phys Rev E, **79**, 036110, 2009.
- [33] FERREIRA S. C.; FERREIRA R. S.; PASTOR-SATORRAS R. *Quasistationary analysis of the contact process on annealed scale-free networks*, Phys. Rev. E, **83**, 066113, 2011.
- [34] PASTOR-SATORRAS R., *Epidemic Dynamics in finite size scale-free networks*. Phys. Rev. E. **65**, 035108, 2002.
- [35] CASTELLANO C.; PASTOR-SATORRAS R., *Reply to Ha et al.* Phys. Rev. Lett. **98**, 029802, 2007.
- [36] NOH J. D.; PARK H., *Critical behavior of the contact process in annealed scale-free networks*. Phys. Rev. E **79**, 056115, 2009.
- [37] DICKMAN R.; JENSEN I., *Nonequilibrium phase transitions in systems with infinitely many absorbing states*. Phys. Rev. E, **48**, 1710-1725, 1993.
- [38] JENSEN I., *Critical behavior of the pair contact process*. Phys. Rev. Lett., **70**, 1465-1468, 1993.
- [39] SANDER R. S.; de OLIVEIRA M. M.; FERREIRA S. C., *Quasi-stationary simulations of the directed percolation universality class in  $d = 3$  dimensions*. J. Stat. Mech., P08011, 2009.
- [40] DICKMAN R.; MUÑOZ M. A., *Interface scaling in the contact process*. Phys. Rev. E, **62**, 7632-7637, 2000.
- [41] DICKMAN R., *Reweighting in nonequilibrium simulations*. Phys. Rev. E, **60**, R2441-R2444, 1999.
- [42] DICKMAN R.; VIDIGAL R., *Quasi-stationary distributions for stochastic processes with an absorbing state*. J. Phys. A: Math Gen **35**, 1147, 2002
- [43] MENDES J. F. F.; DICKMAN R.; HENKEL M.; MARQUES M. C., *Generalized scaling for models with multiple absorbing states*. J. Phys. A: Math Gen **27**, 3019, 1994

- 
- [44] FERREIRA S. C.; FERREIRA R. S.; CASTELLANO C.; PASTOR-SATORRAS R., *Quasi-stationary simulations of the contact process on quenched networks*. ArXiv e-prints, 1107.0157, 2011