

**THAINÁ FERREIRA SILVA**

**DESORDEM E CRITICALIDADE DINÂMICA EM REDES DE CONTATO GERADAS POR  
EMPACOTAMENTO ALEATÓRIO DE DISCOS POLIDISPERSOS**

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

Orientador: Silvio da Costa Ferreira Jr.

Coorientador: Sidiney Geraldo Alves

**Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Central da Universidade  
Federal de Viçosa - Campus Viçosa**

T

S586d  
2024  
Silva, Thainá Ferreira, 1998-  
Desordem e criticalidade dinâmica em redes de contato  
geradas por empacotamento aleatório de discos polidispersos /  
Thainá Ferreira Silva. – Viçosa, MG, 2024.  
1 dissertação eletrônica (66 f.): il. (algumas color.).

Inclui apêndice.

Orientador: Silvio da Costa Ferreira Junior.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Viçosa,  
Departamento de Física, 2024.

Referências bibliográficas: f. 60-63.

DOI: <https://doi.org/10.47328/ufvbbt.2024.449>

Modo de acesso: World Wide Web.

1. Física nuclear. 2. Criticalidade (Engenharia nuclear).  
3. Entropia. I. Ferreira Junior, Silvio da Costa, 1976-.  
II. Universidade Federal de Viçosa. Departamento de Física.  
Programa de Pós-Graduação em Física. III. Título.

CDD 22. ed. 539.75


**THAINÁ FERREIRA SILVA**

**DESORDEM E CRITICALIDADE DINÂMICA EM REDES DE CONTATO GERADAS POR  
EMPACOTAMENTO ALEATÓRIO DE DISCOS POLIDISPERSOS**

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


APROVADA: 9 de abril de 2024.

Assentimento:

Documento assinado digitalmente  
 **THAINA FERREIRA SILVA**  
Data: 05/08/2024 22:19:22-0300  
Verifique em <https://validar.itf.gov.br>

---

Thainá Ferreira Silva  
Autor

Documento assinado digitalmente  
 **SILVIO DA COSTA FERREIRA JUNIOR**  
Data: 05/08/2024 21:45:05-0300  
Verifique em <https://validar.itf.gov.br>

---

Silvio da Costa Ferreira Junior  
Orientador

# Agradecimentos

Sintetizar os agradecimentos em poucas palavras não é uma tarefa fácil. No entanto, é com profunda gratidão que inicio esta seção de agradecimentos, reconhecendo o apoio e contribuições fundamentais de diversas pessoas ao longo deste projeto.

Para começar, gostaria de agradecer ao meu orientador, Prof. Silvio C. Ferreira, por todo o apoio, ensinamentos e discussões que corroboram e corroboraram com a minha formação desde 2017, e ao meu coorientador, Sidiney G. Alves, por toda disponibilidade, ajuda e por participar ativamente deste trabalho, mesmo distante fisicamente.

Aos meus familiares, em especial aos meus pais, meu irmão Victor e aos meus avós por todo o apoio, por confiarem e acreditarem em mim e nos meus sonhos. Vocês são de extrema importância para mim e independente de tudo, sem vocês ter vindo para Viçosa em 2017 não seria possível.

Ao meu namorado, Emílio, por ser meu amigo e companheiro durante o mestrado, por me ajudar a manter a calma nessa fase de escrita e me apoiar. Você tornou esse processo extremamente mais fácil e tranquilo.

Aos amigos que adquiri ao longo desses anos, por todas as trocas de vivências que tivemos. Em especial, aos que a física e Viçosa me proporcionaram, por compartilharem comigo o dia-a-dia, por todas as conversas que tivemos na salinha, por todos os vôleis e todas as vezes que fizemos algo, o mestrado foi bem mais fácil com a companhia de vocês.

À todas as pessoas que participaram deste trabalho, direta ou indiretamente, e àqueles que dedicarão uma parte do seu tempo à leitura deste texto.

Aos membros do Grupo de Investigação de Sistemas Complexos (GISC), por todos os debates que agregaram muito na minha formação desde a graduação.

Além disso, gostaria de agradecer à Universidade Federal de Viçosa. Por todos os professores e funcionários, cuja dedicação e comprometimento foram essenciais para a minha formação, e por toda estrutura, em especial ao Grupo de Investigação de Sistemas Complexos (GISC) e ao Núcleo de Simulação de Sistemas Complexos (NSSC).

Por fim, agradeço às agências de fomento, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais (FAPEMIG), Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), pela concessão da bolsa de estudos.

*“Do. Or do not. There is no try.”*

*Yoda - Star Wars*

# Resumo

SILVA, Thainá F., M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, Abril de 2024. **Desordem e criticalidade dinâmica em redes de contato geradas por empacotamento aleatório de discos polidispersos.** Orientador: Silvio da Costa Ferreira Junior. Coorientador: Sidney Geraldo Alves.

Quaisquer sistemas em que se formam estruturas de contato estão sujeitos a perturbações aleatórias, quer sejam impurezas na estrutura cristalina de um material ou estruturas heterogêneas de interações em sistemas complexos. Uma classe importante destas estruturas são as redes planares aperiódicas que podem emergir em materiais ou redes de infraestrutura tais como estações de energia e de transporte. A relevância dessa desordem pode ser investigada por meio do expoente de *wandering*,  $\omega$ . Quando a desordem do sistema é relevante para a criticalidade do modelo, segundo o critério de Harris-Luck,  $\omega > \omega_c$ , onde  $\omega_c = 1 - (1/d\nu_\perp)$ , a qual depende da dimensão do sistema,  $d$ , e do expoente do comprimento de correlação do sistema sem desordem,  $\nu_\perp$ . Diante disso, buscamos estudar se estruturas geradas a partir de modelos de empacotamento de discos rígidos formam estruturas com desordem relevante. Para isso, foram estudados três modelos de empacotamento de discos rígidos com partículas polidispersas. A partir desses modelos, redes de contato com vínculos geométricos foram construídas e caracterizadas utilizando teoria de grafos. Os resultados obtidos para a caracterização das redes relacionadas aos três modelos são semelhantes. Quando o raio mínimo das partículas tende a zero, as redes apresentam distribuição de grau com cauda pesada, estruturas hierárquicas, desassociativas e aumento da dimensão topológica. A partir do decaimento da flutuação do grau, podemos verificar se o expoente de *wandering* excede  $\omega_c$ , resultado este observado em todos os modelos, indicando desordem relevante pelo critério de Harris-Luck. Analisamos o efeito da desordem dessas redes na criticalidade do modelo suscetível-infectado-suscetível (SIS), nas quais não foram observadas assinaturas de mudanças na criticalidade da transição. Verificamos assim que a desordem produzida pela flutuação do grau não é capaz de alterar a criticalidade do sistema, o que, a princípio, viola o critério de Harris-Luck.

**Palavras-chave:** desordem, fenômenos críticos, empacotamento aleatório.

# Abstract

SILVA, Thainá F., M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, April de 2024. **Disorder and dynamical criticality on contact networks generated by random packing of polydisperse disks.** Advisor: Silvio da Costa Ferreira Junior. Co-advisor: Sidiney Geraldo Alves.

Any systems in which contact structures are formed are subject to random perturbations due to either impurities in the crystal structure of a material or heterogeneous structures from interactions in complex systems. An important class of these structures are aperiodic planar lattices that can be observed in materials or infrastructure networks such as power and transportation stations. The relevance of this perturbation can be investigated using the *wandering* exponent,  $\omega$ . When the disorder of the system is relevant to the criticality of the model, according to the Harris-Luck criterion,  $\omega > \omega_c$ , where  $\omega_c = 1 - (1/d\nu_\perp)$ , which depends on the dimension of the system,  $d$ , and the exponent of the correlation length of the disorder-free system,  $\nu_\perp$ . So, we study whether structures generated from hard disk packaging models generate structures with relevant disorder. Three models of packaging hard disks with polydisperse particles were studied. From these models, contact networks with geometric constraints were constructed and characterized using graph theory. The results obtained for the characterization of the networks related to the three models are similar. When the minimum radius of the particles tends to zero, the networks present a degree distribution with a heavy tail, hierarchical and dissociative structures and an increasing topological dimension. From the decay of the degree fluctuation, we can verify that the *wandering* exponent exceeds  $\omega_c$ , a result observed in all models, indicating relevant disorder according to the Harris-Luck criterion. We analyzed the effect of the disorder of these networks on the criticality of the susceptible-infected-susceptible (SIS) model, in which no signs of changes in the criticality of the transition were observed. We thus verify that the disorder produced by degree fluctuation is not capable of altering the criticality of the system, that, in principle, violates the Harris-Luck criterion.

**Keywords:** disorder, critical phenomena, random packaging.

# Sumário

<b>I</b>	<b>Introdução</b>	<b>10</b>
<b>II</b>	<b>Fundamentação teórica</b>	<b>13</b>
2.1	Empacotamento de discos rígidos . . . . .	13
2.2	Fundamentos de teoria de grafos . . . . .	15
2.2.1	Propriedades e medidas . . . . .	15
2.2.2	Estruturas e grafos . . . . .	21
2.3	Desordem e criticalidade . . . . .	23
2.3.1	Flutuação do grau . . . . .	25
2.3.2	Critério de Harris . . . . .	26
2.3.3	Critério de Harris-Luck . . . . .	27
2.3.4	Extensão do Critério de Harris-Luck . . . . .	28
<b>III</b>	<b>Modelos e implementação computacional</b>	<b>29</b>
3.1	Modelo de Eden . . . . .	29
3.1.1	Modelo de Eden fora de rede . . . . .	30
3.1.2	Modelo de Eden fora de rede com partículas polidispersas . . . . .	30
3.2	Modelo de empacotamento aleatório de discos sem acomodação . . . . .	32
3.3	Modelo de empacotamento aleatório de discos com acomodação . . . . .	33
3.4	Condição de contorno . . . . .	34
3.5	Detalhes computacionais . . . . .	34
3.5.1	Construção das redes complexas . . . . .	35
3.6	Modelo SIS: Suscetível-Infetado-Suscetível . . . . .	36
<b>IV</b>	<b>Resultados e Discussões</b>	<b>39</b>
4.1	Caracterização das redes . . . . .	39
4.1.1	Grau e distribuição de grau . . . . .	40
4.1.2	Coeficiente de agrupamento da rede . . . . .	45
4.1.3	Correlação do grau . . . . .	48
4.1.4	Menor caminho médio . . . . .	49
4.2	Efeitos de desordem . . . . .	51

4.2.1	Flutuação do grau . . . . .	52
4.2.2	Modelo SIS: Suscetível-Infectedo-Suscetível . . . . .	54
<b>V</b>	<b>Conclusões e Perspectivas</b>	<b>58</b>
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>60</b>
<b>A</b>	<b>Definição das redes de contato</b>	<b>64</b>

# Capítulo I

## Introdução

Uma das questões centrais do estudo de sistemas com interação de curto alcance é o efeito causado por impurezas aleatoriamente introduzidas em uma determinada estrutura espacial por meio da qual os agentes interagem, que são chamadas de desordem congelada [1]. Sistemas reais são, em sua grande maioria, afetados por este tipo de perturbação seja por contaminantes ou imperfeições da estrutura cristalina, ou pela própria dinâmica de formação das redes que são intrinsecamente irregulares como, por exemplo, redes de transporte terrestre e de distribuição de energia [2].

No estudo de transições de fases e fenômenos críticos, a desordem congelada pode alterar a criticalidade do sistema em comparação com estruturas limpas (sem desordem). Assim, a desordem congelada pode induzir regiões estendidas de criticalidade (as denominadas fases de Griffiths), alterar o expoente de decaimento no ponto crítico ou até mesmo levar a uma completa ofuscação da criticalidade da transição [1].

Ao longo dos últimos anos, diversos trabalhos foram desenvolvidos para compreender a transição de fase e fenômenos críticos em topologias aperiódicas, que podem ser afetadas pela desordem do sistema [3, 4]. Dentre esses trabalhos, um deles relaciona o nível de desordem da rede ao expoente crítico associado à divergência do comprimento de correlação do sistema limpo (sem desordem [5]), conhecido como critério de Harris-Luck [3, 6].

De acordo com o critério de Harris-Luck, se o expoente do comprimento de correlação do sistema limpo,  $\nu_{\perp}$ , em um sistema  $d$ -dimensional satisfaz a inequação  $\omega > \left(1 - \frac{1}{d\nu_{\perp}}\right) = \omega_c$ , onde  $\omega$  e  $\omega_c$  são conhecidos como expoente de *wandering* (ou expoente de flutuação geométrica) e expoente de *wandering* crítico, respectivamente, então a desordem do sistema é relevante. Adicionalmente, para redes com desordem completamente descorrelacionada, o expoente de *wandering* é de  $1/2$ , o que implica na relevância da desordem segundo o critério de Harris-Luck<sup>1</sup>.

Redes geradas com vínculos geométricos podem possuir padrões de correlação na desordem, o que implicaria em expoentes de *wandering* que caracterizam a desordem como

---

<sup>1</sup>Quando o expoente de *wandering* é de  $1/2$ , o critério de Harris-Luck recai no critério de Harris, o qual considera que se  $d\nu_{\perp} < 2$  a desordem será relevante [6]

irrelevante. Dessa forma, a transição de fase do sistema não sofre alterações e se comporta como um sistema limpo. Um exemplo fundamental desses tipos de redes são as redes de Voronoi-Delaunay, as quais possuem uma construção puramente geométrica. As estruturas dessas redes são complexas de serem estudadas computacionalmente, principalmente em dimensões superiores a 2.

As redes de Voronoi-Delaunay desempenham um papel crucial no estudo de critérios para a classificação de desordem, sendo um tema amplamente debatido na comunidade científica [7–9]. Inicialmente, foi calculado para essas redes um expoente de *wandering*  $\omega = 1/2$ , o que levaria o critério de Harris-Luck a prever desordem relevante para o sistema [10]. No entanto, a relevância da desordem nessas redes não foi confirmada em simulações extensivas de fenômenos críticos [7]. A resposta para esse problema só veio a ser encontrada recentemente no artigo de Barghathi e Votja [4], no qual mostraram que o expoente de *wandering* das redes Voronoi-Delaunay são, na verdade,  $\omega = 1/4$  devido à anti-correlações na distribuição geográfica da desordem, onde uma região com coordenação<sup>2</sup> acima da média é circundada por regiões de coordenação abaixo da média, eliminando assim a contradição com o critério de Harris-Luck. No entanto, esse problema ainda não está completamente resolvido, pois foi identificado um sistema [12] que viola a modificação proposta por Barghathi e Votja.

Em redes complexas, para investigar os efeitos da desordem na transição de fase para o estado absorvente, podemos utilizar modelos pertencentes à classe de universalidade da percolação dirigida, como os modelos suscetível-infectado-suscetível (SIS) e o processo de contato [10, 12, 13]. Conseqüentemente, se os resultados produzidos pela transição de fase em tais sistemas apresentarem mudanças na transição de fase, quando comparado com estruturas limpas, então a desordem do sistema é relevante.

Modelos de empacotamento de discos rígidos desempenham um papel fundamental no estudo da matéria condensada e na ciência dos materiais, sendo amplamente utilizados para descrever diversos sistemas, como as propriedades de coloides em concretos de alta performance, o crescimento de colônias celulares em sistemas biológicos, entre outros [14]. Entre os vários modelos de crescimento de empacotamento de discos rígidos, o modelo de Eden é um dos mais estudados. Inicialmente proposto para explicar fenômenos de crescimento de tumores [15], o modelo de Eden posteriormente serviu como base para muitos outros modelos, incluindo um que considera o crescimento de colônias celulares monodispersas fora de rede [16].

Embora muitos estudos na área de empacotamento tenham se concentrado na construção de agregados monodispersos [16, 17], na natureza, seja em meios granulares ou colônias celulares, a distribuição dos tamanhos das partículas nunca é monodispersa [18].

Modelos de agregação podem ser estudados no contexto de redes complexas. Para isso,

---

<sup>2</sup>A coordenação, ou número de coordenação, para um sítio de uma rede é dada pelo seu número de vizinhos [11].

a fim de analisar a estrutura de contato entre as partículas dos agregados, uma rede de contatos planar pode ser extraída [19]. Assim, utilizando a teoria dos grafos [20], é possível estudar as propriedades dessas redes de contato e caracterizar o tipo de estruturas obtidas.

Neste contexto, nesta dissertação buscamos estudar diversos modelos de agregação, tanto com partículas monodispersas quanto polidispersas, em duas dimensões. Para isso, propusemos três modelos de agregação: o primeiro é baseado no modelo de Eden fora de rede, enquanto os outros dois modelos explorados consideram a deposição aleatória de partículas no espaço. No caso polidisperso, as partículas possuem raios escolhidos aleatoriamente a partir de uma distribuição uniforme no intervalo  $(r_{\min}, 1)$ .

A partir dos agregados obtidos, extraímos as redes de contato e realizamos a caracterização por meio da distribuição de grau, coeficiente de agrupamento, correlação de grau e menor caminho médio. Em todos os modelos, observamos que a distribuição de grau apresenta uma cauda pesada à medida que  $r_{\min}$  diminui. Além disso, com a redução de  $r_{\min}$ , as redes tendem a se comportar como redes hierárquicas e desassociativas, tornando-se mais densas e apresentando uma redução no expoente de crescimento do menor caminho médio em função do tamanho da rede, o que implica no aumento da dimensão topológica.

Além disso, a fim de classificar a desordem das estruturas com base no critério de Harris-Luck para a classe de percolação dirigida, à qual o modelo SIS pertence, temos que a desordem é considerada relevante se  $\omega > 0.318$ . Comparando com o expoente de decaimento da flutuação de grau, verificamos que a condição para desordem relevante foi satisfeita. No entanto, ao estudar a transição de fase para o estado absorvente nas redes utilizando o modelo SIS, não observamos alterações na criticalidade em comparação com sistemas limpos. Assim, concluímos que a desordem provocada pela flutuação do grau não altera a criticalidade do modelo SIS em tais redes, o que contradiz o critério de Harris-Luck.

A presente dissertação será dividida em quatro capítulos. No capítulo II, discutiremos os modelos de agregação em um contexto histórico, apresentaremos algumas métricas provenientes da teoria de grafos e falaremos sobre os critérios de desordem encontrados na literatura. No capítulo III, descreveremos os modelos estudados com o uso de simulações, traremos detalhes computacionais utilizados para otimizar as simulações desenvolvidas e uma descrição do modelo SIS. No capítulo IV, apresentaremos os resultados obtidos e a discussão sobre eles. Por fim, no capítulo V, apresentaremos uma conclusão para os resultados obtidos e as perspectivas.

# Capítulo II

## Fundamentação teórica

Na comunidade científica, modelos de agregação foram estudados considerando diferentes abordagens, tais como a rugosidade<sup>1</sup> da interface durante o crescimento [16], os efeitos que diferentes distribuições de tamanho podem produzir em agregados polidispersos [18, 22] ou até mesmo as estruturas formadas a partir do contato entre as partículas dos agregados [23–25]. Essas estruturas resultantes do contato serão um dos focos deste trabalho, no qual buscamos estudar as redes de contato entre as partículas caracterizadas a partir dos agregados.

Neste contexto, o presente capítulo será dividido em três partes. Na primeira seção, trataremos alguns modelos desenvolvidos para o estudo de empacotamento de discos rígidos. A seção que segue trará algumas métricas e conceitos da teoria de grafos, ferramentas estas que utilizaremos para estudar as estruturas formadas pelos agregados. Por fim, com o intuito de estudar as desordens nas redes de contato, na última seção desse capítulo, abordaremos os critérios desenvolvidos ao longo dos últimos anos para a descrição da desordem de estruturas.

### 2.1 Empacotamento de discos rígidos

Modelos de empacotamento são pensados e estudados desde antes de 200a.C., quando Apolonio de Perga já pensava em um problema de empacotamento de círculos [26, 27]. O problema proposto por ele consistia em encontrar um círculo que tangenciasse outros 3 círculos. Na Fig.2.1 temos o esboço da solução deste problema, primeiro são adicionados três círculos tangenciando mutualmente, posteriormente é adicionado outro círculo no espaço vazio entre eles, de forma que este tangencie os 3 primeiros. Com isso, surgem 3 espaços vazios nos quais são adicionados novamente círculos que tangenciam os 3 círculos que estão em volta a este espaço e assim por diante, de modo que em cada etapa  $n$

---

<sup>1</sup>Em interfaces, a medida da rugosidade é dada pelo desvio padrão da altura da interface em relação à origem  $h(x, t)$ , ou seja,  $W(t) \equiv \left\langle \sqrt{\langle [h(x, t) - \langle h(x, t) \rangle]^2} \right\rangle$  [21].

( $n = 0, 1, 2, \dots$ ) de adição são adicionados  $3^n$  novos discos.

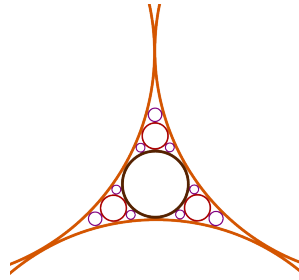


Figura 2.1: Exemplo de agregado construído a partir do problema de empacotamento de esferas de Apolônio com círculos de cores diferentes para cada camada de inserção de círculos.

Desde então, uma variedade de modelos de agregação tem sido desenvolvida para abordar uma gama diversificada de fenômenos, tais quais sistemas coloidais, meios granulares e biológicos. Normalmente tais estudos são realizados considerando crescimentos de não equilíbrio<sup>2</sup> [29].

Sistemas coloidais podem apresentar de uma variedade de propriedades reológicas, incluindo afinamento e espessamento por cisalhamento. No âmbito desses sistemas, enfrentamos um desafio ainda não solucionado, relacionado ao efeito que a introdução de um grão de areia exerce sobre o material como um todo, podendo inclusive induzir seu cisalhamento e potencialmente resultar na perda de materiais [30].

Materiais granulares como, por exemplo, sedimentos e pós, estão amplamente distribuídos na natureza e em contextos industriais, sendo comum, em uma primeira aproximação, considerar os grãos como esferas rígidas. Nessas situações, a maneira como os grãos se agrupam desempenha um papel crucial nas propriedades do material, sendo essa agregação também influenciada pela viscosidade do meio, pelo tamanho e massa das partículas [18]. Isso representa um desafio intrínseco à produção de concretos de alta performance, demandando estratégias para a minimização da porosidade no sistema [31].

Em sistemas biológicos, por sua vez, é possível estudarmos fenômenos como padrões de crescimento em colônias de células e o desenvolvimento de tumores [15]. Isso permite a exploração de fatores como a aleatoriedade na divisão celular, migração celular e as influências que o ambiente exerce na formação de padrões durante o crescimento.

Outra possível abordagem para o estudo de tais modelos de agregação é com o uso de redes complexas, assim como feito por [23–25], abordagem esta que será considerada neste trabalho. Diante disso, no presente trabalho estudaremos estruturas monodispersas e polidispersas a partir de métricas fornecidas pela teoria de grafos, as quais serão descritas na próxima seção.

<sup>2</sup>Modelos de não equilíbrio envolvem um fluxo constante de matéria, energia ou alguma outra quantidade [28]. No caso de crescimentos de não equilíbrio, a quantidade que está sempre aumentando é o número de partículas.

## 2.2 Fundamentos de teoria de grafos

Redes complexas são utilizadas no estudo de diversos fenômenos, desde o estudo da interação entre células às interações entre pessoas na sociedade, ou até no mapeamento de neurônios, ou linhas de transporte [20]. Para podermos compreender os sistemas descritos por redes complexas, precisamos saber como os componentes dessa rede interagem entre si. Tais interações podem ser descritas por meio da teoria de grafos.

Diante disso, nesta seção traremos alguns conceitos e métricas importantes para compreendermos redes complexas utilizando teoria de grafos com base na referência [20].

### 2.2.1 Propriedades e medidas

Para descrevermos um sistema complexo precisamos de informações sobre como é feita a interação entre seus componentes. Para descrevermos tais interações podemos utilizar redes complexas onde os elementos interagentes são conhecidos como nós ou vértices e a interação entre tais elementos são chamados de arestas ou ligações. Além disso, podemos associar a cada vértice de uma rede um grau, o qual é dado pelo número de ligações  $k$  que esse vértice faz com os outros.

Na Fig.2.2 temos o exemplo do grafo de uma rede com 5 vértices e 6 arestas conectando esses nós. Podemos observar nessa representação que a ligação entre os vértices não possui um sentido, ou seja, se um vértice  $i$  da rede está conectado com um vértice  $j$ ,  $j$  também estará conectado com  $i$ . Isso ocorre em redes chamadas de não direcionadas, as quais serão utilizadas ao longo deste trabalho.

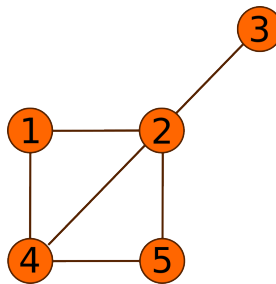


Figura 2.2: Exemplo de rede onde cada nó é representado por um círculo e arestas são representados pelas linhas que conectam dois nós.

### Matriz de adjacência

Para representarmos uma rede de maneira completa, conhecer a informação de quais vértices compõe esse sistema não é suficiente. Precisamos também de informações sobre as conexões que os vértices apresentam entre si. A forma mais completa de apresentarmos isso é por via uma matriz de adjacência.

Para uma rede com  $N$  nós, precisamos de uma matriz  $N \times N$  para fazer a representação. Assim, considerando uma rede não direcionada, temos que os elementos dessa matriz são:

- $A_{ij} = A_{ji} = 1$  se os nó  $i$  e  $j$  estão conectados;
- $A_{ij} = A_{ji} = 0$  caso contrário.

Sendo assim, a matriz construída para uma rede não direcionada é simétrica.

Por exemplo, podemos construir a matriz de adjacência da rede da Fig.2.2, a qual é dada por:

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & A_{14} & A_{15} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & A_{24} & A_{25} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & A_{34} & A_{35} \\ A_{41} & A_{42} & A_{43} & A_{44} & A_{45} \\ A_{51} & A_{52} & A_{53} & A_{54} & A_{55} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (2.1)$$

Por se tratar da representação de uma rede não direcionada, podemos observar que a matriz da Eq.2.1 é simétrica e possui diagonal nula, uma vez que um nó não está conectado a si mesmo e as conexões não são direcionadas.

### Distribuição de Grau

Quando definimos o grau de todos os nós de uma rede podemos calcular a densidade de partículas que possuem grau  $k$ , da seguinte forma:

$$P_k = \frac{N_k}{N}, \quad (2.2)$$

em que  $N_k$  é o número de partículas que possuem grau  $k$  e  $N$  é o número total de partículas do agregado. Fazendo esse cálculo para todos os graus da rede temos assim a função de distribuição de probabilidade do grau da rede.

Por exemplo, considerando a rede mostrada no início dessa seção, Fig.2.2, conseguimos calcular o grau de cada nó e obter a densidade de nós com cada grau. A partir dessa densidade conseguimos obter o gráfico da distribuição de grau para essa rede, Fig.2.3.

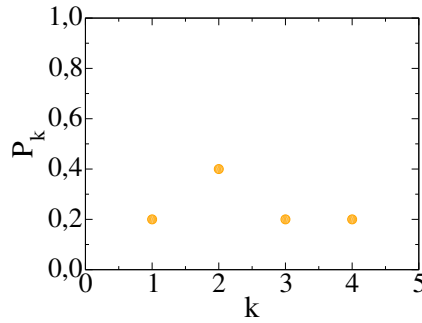


Figura 2.3: Distribuição de grau da rede mostrada na Fig.2.2. Para essa rede temos que  $P_1 = 0,2$  (3 possui grau 1),  $P_2 = 0,4$  (1 e 5 possuem grau 2),  $P_3 = 0,2$  (4 possui grau 3) e  $P_4 = 0,2$  (2 possui grau 4).

Dessa forma, ao analisarmos a distribuição de graus, obtemos a função de distribuição de probabilidades associada aos graus dos nós na rede. Portanto, ao selecionarmos um nó aleatório, a probabilidade de termos escolhido um nó de grau  $k$  é condicionada por  $P_k$ .

### Coefficiente de agrupamento

Em redes complexas, um dos conceitos para a definição de seu agrupamento está associada à formação de triângulos, ou seja, se os vizinhos de um nó também estão conectados entre si, temos um agrupamento. Quando verificamos as conexões entre todos os vizinhos de um nó, conseguimos calcular o grau de conexão dos vizinhos, ou seja, a quantidade de triângulos que essas ligações formam. Esta medida é conhecida como coeficiente de agrupamento, ou coeficiente de *clustering*, e nos dá a informação de como os vizinhos de cada partícula se relacionam.

Para realizar esse cálculo para um nó  $i$  é necessário ter a contagem da quantidade de vizinhos  $e_i$  entre os seus  $k_i$  vizinhos que então conectados entre si. Deste modo, o coeficiente de agrupamento é dado por:

$$c_i = \frac{2e_i}{k_i(k_i - 1)}, \text{ para } k_i > 1, \quad (2.3)$$

ou, em termos da matriz de adjacência

$$c_i = \frac{\sum_{jl} A_{ij} A_{jl} A_{li}}{k_i(k_i - 1)}, \text{ para } k_i > 1. \quad (2.4)$$

Se  $k_i \leq 1$ , definimos  $c_i \equiv 0$ . Esse coeficiente pode estar entre 0 e 1 de modo que:

- se  $c_i = 0$ , nenhum dos vizinhos de  $i$  estão conectados entre si;
- se  $c_i = 1$ , todos os vizinhos de  $i$  estão interligados.

Em resumo, o valor de  $c_i$  é a probabilidade de um par de vizinhos de um nó  $i$  escolhido ao acaso estarem conectados. Quanto maior o valor de  $c_i$ , maior a probabilidade de tal evento ocorrer.

Utilizando essa medida é possível fazer uma média do coeficiente de agrupamento para as partículas de mesmo grau de forma que

$$C_k = \frac{1}{N_k} \sum_{i | k_i=k} c_i, \quad (2.5)$$

em que  $C_k$  é o coeficiente médio de agrupamento para as partículas de grau  $k$ ,  $N_k$  é o número de partículas que possuem grau  $k$  e o somatório é sobre todos os nós  $i$  que possuem grau  $k$ . Assim, a partir da curva formada por  $C_k \times k$  podemos definir o tipo de estrutura que as ligações formam, como, por exemplo, se tais estruturas são hierárquicas.

Podemos também calcular o coeficiente de agrupamento médio para toda a rede. Então, sendo  $c_i$  o grau de um nó  $i$ , em uma rede com  $N$  nós, temos que o coeficiente médio é dado por:

$$\langle C \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N c_i. \quad (2.6)$$

Para a rede da Fig.2.2, temos que o coeficiente de agrupamento para os nós da rede são:  $c_1 = 1$ ,  $c_2 = 0,33$ ,  $c_3 = 0$ ,  $c_4 = 1$  e  $c_5 = 1$ . Assim, podemos calcular o coeficiente de agrupamento médio para os nós de mesmo grau, Fig.2.4, e o coeficiente de agrupamento médio para toda a rede,  $\langle C \rangle = 0.66$ .

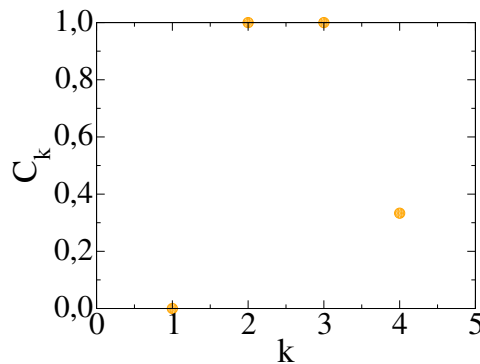


Figura 2.4: Coeficiente de agrupamento médio da rede representada na Fig.2.2 com  $C_1 = 0$ ,  $C_2 = 1,0$  ( $c_1 = 1$  e  $c_5 = 1$ ),  $C_3 = 1$  ( $c_4 = 1$ ) e  $C_4 = 0,33$  ( $c_2 = 0,33$ ).

### Correlação do grau

Em redes complexas existem os denominados *hubs*, que são nós com muitas conexões, ou seja, com um grau alto quando comparado com a média da rede. Quando analisamos tais redes complexas, pode surgir o seguinte questionamento: “esses *hubs* estão conectados com outros *hubs*, eles se evitam reciprocamente ou eles se comportam como qualquer outro nó da rede?”. Tal pergunta pode ser respondida com a medida da correlação do grau.

A correlação do grau para um nó  $i$  pode ser calculada pela média do grau dos nós

vizinhos de  $i$ , ou seja:

$$k_{nn}(i) = \frac{1}{k_i} \sum_{j=1}^N A_{ij} k_j, \quad (2.7)$$

onde  $A_{ij}$  é o elemento  $ij$  da matriz de adjacência,  $N$  é o número total de nós na rede,  $k_i$  e  $k_j$  o grau dos nós  $i$  e  $j$ , respectivamente.

Quando realizamos a média da correlação do grau para os nós de mesmo grau, podemos descobrir se a rede em questão é associativa, desassociativa ou neutra, sendo:

- Associativa: nós com grau alto (ou *hubs*) tendem a se conectar entre si ao mesmo tempo em que nós com grau pequeno também se conectam entre si;
- Desassociativa: nós com grau alto tendem a se conectar com nós de grau baixo e vice-versa;
- Neutra: rede com conexões aleatórias, *hubs* podem estar conectados com outros *hubs* ou com nós de grau baixo com *hubs* chance.

Essa informação pode ser dada através do expoente de correlação da correlação de grau em função do grau da rede, o expoente  $\mu$  nos gráficos da Fig.2.5. Deste modo, se o expoente é positivo temos uma rede associativa (Fig.2.5(a)), se é negativo temos uma rede desassociativa (Fig.2.5(b)) e se expoente é nulo temos uma rede neutra (Fig.2.5(c)).

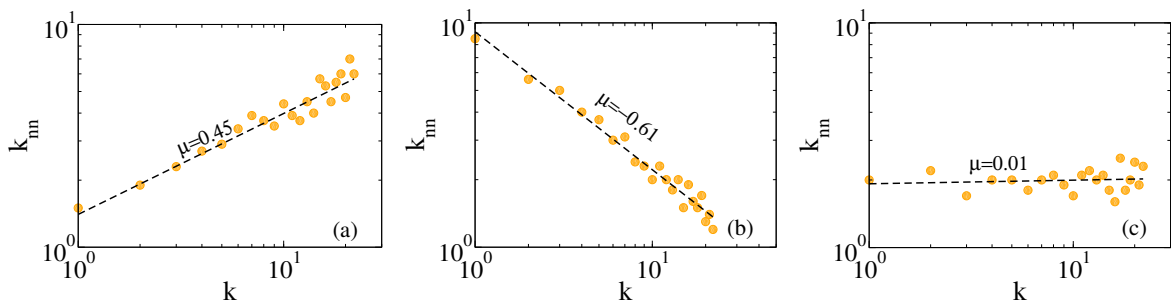


Figura 2.5: Gráfico de exemplos de correlações do grau ( $k_{nn}$ ) em função do grau ( $k$ ) produzidas por redes do tipo a) associativa, b) desassociativa e c) neutra.

### Distância e menor caminho médio

Na Física muito falamos sobre distâncias entre componentes de um mesmo sistema para, por exemplo, determinar a interação entre tais componentes. Na ciência de redes o conceito de distância também é importante, mas como ele é definido? Para responder essa pergunta podemos pensar em uma rede de contatos entre pessoas. Por exemplo, duas pessoas que são vizinhas podem não se conhecer e, ao mesmo tempo, manter conexões com pessoas que estão do outro lado do mundo, ou seja, a distância física entre os membros de tal rede de contatos não restringe as conexões.

No estudo de redes, a distância física muitas vezes não é relevante, sendo conveniente definirmos a distância a partir das conexões. Na Fig.2.6 temos que, para ir do nó 3 para o 4 podemos destacar dois caminhos possíveis, o primeiro sendo  $3 \rightarrow 2 \rightarrow 4$  e o segundo sendo  $3 \rightarrow 2 \rightarrow 5 \rightarrow 4$ . Em termos das ligações entre os caminhos temos que o primeiro deles possui duas ligações separando 3 e 4, enquanto que o segundo possui três ligações separando tais nós. Porém, por mais que existam diversos caminhos possíveis que separam dois nós, aqui estamos interessados apenas no menor caminho.

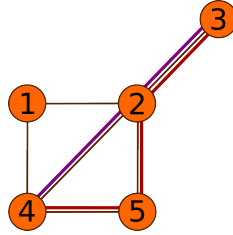


Figura 2.6: Rede com dois caminhos que ligam os nós 3 e 4 em destaque.

Porém, em alguns casos, como em redes de rodovias, distribuições de energia ou até mesmo em redes de contato entre partículas polidispersas, a distância entre as conexões é um fator relevante.

O menor caminho médio entre dois nós da rede pode ser calculado de duas formas, considerando distâncias topológicas e euclidianas. Por exemplo, considere os nós  $i$  e  $j$ , que estão conectados e imersos em uma rede bidimensional com posições  $(x_i, y_i)$  e  $(x_j, y_j)$ , a distância entre esses nós seria de  $l_{ij} = 1$  em termos de número de ligações (distância topológica) e de  $l_{ij} = \sqrt{(x_j - x_i)^2 + (y_j - y_i)^2}$  em termos do comprimento da aresta que liga  $i$  e  $j$  (distância euclidiana).

Assim, para o cálculo do menor caminho, quando consideramos a distância topológica, buscamos apenas o menor número de ligações, logo, na Fig.2.6, o caminho  $3 \rightarrow 2 \rightarrow 4$  é o menor. Porém, para o menor caminho médio considerando a distância euclidiana não podemos fazer tal afirmação, pois, mesmo que o caminho  $3 \rightarrow 2 \rightarrow 4$  tenha um número menor de ligações, pode ser que as ligações feitas por ele tenham um comprimento maior do que o caminho  $3 \rightarrow 2 \rightarrow 5 \rightarrow 4$ , de modo que  $l_{32} + l_{24} > l_{32} + l_{25} + l_{54}$ .

Contudo, independente da forma que realizamos os cálculos, podemos encontrar a menor distância,  $l_{ij}$ , entre dois nós  $i$  e  $j$ . Sendo assim, quando calculamos a menor distância entre todos os pares de nós de uma rede conseguimos calcular o menor caminho médio, dado por:

$$\langle l \rangle = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{i,j=0, N; j \neq i} l_{ij} \quad (2.8)$$

onde  $N$  é o número total de nós da rede, cálculo este feito para redes que possuem todos os componentes conectados.

Além disso, no contexto de redes complexas, podemos considerar uma aproximação para realizar o cálculo das dimensões euclidiana e topológica a partir do menor caminho

médio. Assim, sendo o menor caminho médio,  $\langle l \rangle$ , e o número de nós  $N$  estão relacionados de modo que:

$$\langle l \rangle \sim N^{1/d}. \quad (2.9)$$

Assim, quando utilizamos a mesma regra para gerar redes com diferentes números de nós  $N$ , se calculamos o menor caminho médio para todas essas redes e plotarmos um gráfico de  $N \times \langle l \rangle$ , podemos encontrar as dimensões do sistema a partir do expoente dessa curva, onde, utilizando a distância topológica obtemos a dimensão topológica e com a distância euclidiana obtemos a dimensão euclidiana da rede [32].

### 2.2.2 Estruturas e grafos

O estudo de modelos de empacotamento, agregação e estruturas cristalinas também pode ser guiado pela teoria de grafos. Para isso, podemos definir o número de coordenação de uma partícula ou ponto do espaço a partir da quantidade de partículas, ou pontos que estão próximos a ela. Como vimos, o conceito de número de coordenação define o grau de um nó. Então podemos representar as partículas ou pontos do espaço como os nós da rede e definir ligações entre esses nós conforme a sua proximidade com os demais nós da rede.

#### Redes de Voronoi-Delaunay

Utilizando o conceito de número de coordenação podemos definir redes a partir dos diagramas de Voronoi [7]. Esses diagramas são construídos a partir pontos aleatoriamente inseridos no espaço. Dado que  $N$  pontos foram aleatoriamente inseridos, é possível definir regiões  $V_i$ , com  $1 \leq i \leq N$ , de modo que toda a região do interior de  $V_i$  está mais próxima do ponto  $i$  do que de qualquer outro. Essas regiões,  $V_i$ , são denominadas células de Voronoi.

Na Fig.2.7(a) temos um exemplo desses diagramas de Voronoi. Em tais diagramas, as arestas que separam duas células de Voronoi (regiões com cores diferentes) são equidistantes aos pontos geradores dessas regiões. A partir da vizinhança entre as células de Voronoi, é possível construir uma rede recíproca, Fig.2.7(b), onde os nós são os pontos aleatoriamente introduzidos e as arestas da rede representam a vizinhança entre duas células de Voronoi, formando assim estruturas conhecidas como redes de Voronoi-Delaunay (VD). Com as redes estabelecidas, é possível caracterizá-las utilizando conceitos de teoria de grafos, de modo geral, tais redes possuem distribuição de grau que segue uma distribuição de Poisson centrada no grau médio  $\langle k \rangle = 6$  [7].

Ademais, as redes de VD foram estruturas interessantes para o desenvolvimento de critérios acerca da desordem de sistemas. Tais redes não possuem desordem relevante, classificação esta que pôde ser feita a partir dos critérios que descreveremos na próxima seção 2.3.

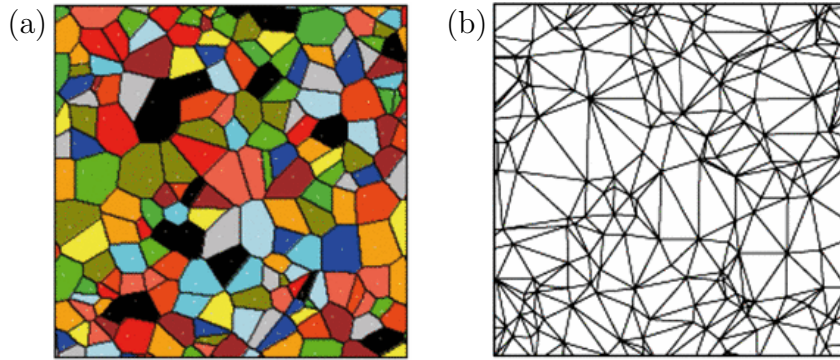


Figura 2.7: a) Exemplo de um diagrama de Voronoi com os pontos aleatoriamente introduzidos e com as regiões  $V_i$  definidas a partir dos pontos e b) a rede recíproca desse diagrama. Figuras da referência [7], cortesia de S. G. Alves.

### Redes Apolonianas

Com o uso dos agregados de Apolônio, como descrito no início da seção 2.1, pode-se definir uma rede de contato entre os discos [23, 24]. Na Fig. 2.8(a) temos um exemplo de agregado formado com a regra de Apolônio com  $n = 2$  etapas de adição de discos, contendo assim  $3 + \sum_{i=0}^n 3^i = 16$  discos e a rede correspondente a esse agregado na Fig. 2.8(b), construída a partir do contato entre os discos.

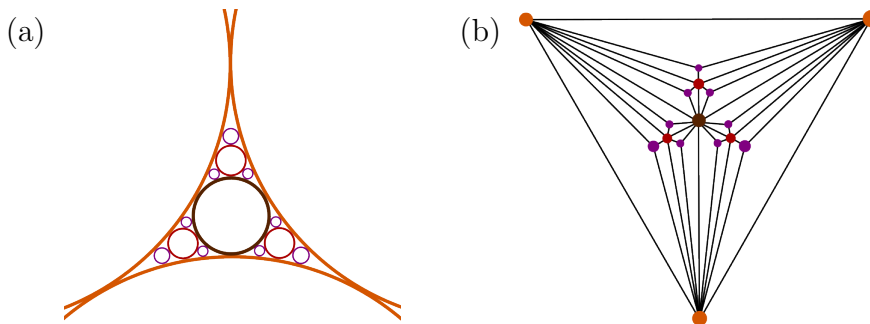


Figura 2.8: a) Exemplo do agregado de Apolônio e b) a rede de contato correspondente a esse agregado.

Tais estruturas podem ser estudadas via teoria de grafos e seus resultados dependem da dimensão estudada [25]. Considerando o caso bidimensional, como feito nas referências [23, 24], para  $n \rightarrow \infty$  etapas de adição de discos temos que o grau médio do agregado tende a um valor limite, o qual é dado por  $\langle k \rangle \approx 6$ . A distribuição de grau dessa estrutura apresenta uma cauda pesada com um decaimento em lei de potência [20], de modo que  $P(k) \sim k^{-\gamma}$  com  $\gamma = 2.585$  [23], ou seja, as redes Apolonianas são livres de escala. As redes possuem um alto coeficiente de agrupamento, o qual tende a  $C \approx 0.828$  e são redes hierárquicas  $C(k) \approx k^{-1}$ . São redes desassociativas de modo que  $k_{nn}(k) \sim k^{-0.415}$ . Além disso, as redes possuem efeitos de mundo pequeno à medida que cresce o número de nós

no sistema, onde o menor caminho médio escala sub-logaritmicamente<sup>3</sup> com o tamanho da rede [24]. Por fim, as redes possuem um comportamento planar<sup>4</sup> mesmo quando  $n \rightarrow \infty$ , limite este em que as arestas das redes passam a ocupar todo o espaço, mas permanecem sem se cruzar.

## 2.3 Desordem e criticalidade

O estudo das transições de fase abrange conceitos como parâmetros de ordem, parâmetros de controle e expoentes críticos, sendo fundamental para a compreensão de fenômenos físicos como a transição de fase líquido-gás, a transição ferro-paramagnética e até mesmo a transição de fase para o estado absorvente de uma epidemia em redes complexas [8, 28, 34]. O parâmetro de ordem é uma quantidade que adquire um valor diferente de zero em uma fase ativa e é zero na fase inativa, caracterizando a transição entre essas fases. O parâmetro de controle é uma variável externa que pode ser ajustada para induzir a transição de fase, como a temperatura, a pressão ou a taxa de infecção por contato. O expoente crítico descreve o comportamento das propriedades físicas perto do ponto crítico, quantificando como o parâmetro de ordem ou outras propriedades divergem ou tendem a zero.

A transição de fase nesses sistemas, quando a desordem é irrelevante, apresenta o ponto crítico e as regiões subcrítica (fase inativa) e supercrítica (fase ativa), as quais dependem do valor do parâmetro de controle  $\lambda$ , Fig. 2.9. Para  $\lambda < \lambda_c$ , temos a região subcrítica, na qual o valor do parâmetro de ordem decai exponencialmente para zero (parâmetro de ordem estacionário igual a zero). Para  $\lambda = \lambda_c$ , temos o ponto crítico, no qual o parâmetro de ordem tende lentamente a zero, com a curva apresentando um decaimento em lei de potência (parâmetro de ordem estacionário igual a zero), no qual o expoente do decaimento (expoente crítico) está associado à classe de universalidade do modelo estudado. Já para  $\lambda > \lambda_c$ , temos a região supercrítica, na qual o parâmetro de ordem flutua em torno de um valor diferente de zero (parâmetro de ordem estacionário diferente de zero).

No presente trabalho, estudaremos a transição de fase para o estado absorvente no contexto de redes complexas, utilizando modelos epidêmicos da classe de percolação dirigida. A dinâmica epidêmica será observada a partir da densidade de infectados ao longo do tempo ( $\rho(t)$ ), que pode ser entendida como o parâmetro de ordem, na qual o comportamento está associado à taxa de infecção por contato ( $\lambda$ ), que será o parâmetro de controle. Assim, em sistemas com desordem irrelevante, a dinâmica epidêmica ocorre como descrito no parágrafo anterior.

<sup>3</sup>O menor caminho médio escala sub-logaritmicamente com o tamanho do sistema, o que significa que essa medida cresce mais lentamente do que uma função logarítmica à medida que o sistema aumenta.

<sup>4</sup>Redes planares são aquelas embebidas no espaço bidimensional nas quais as arestas não se sobrepõem [33].

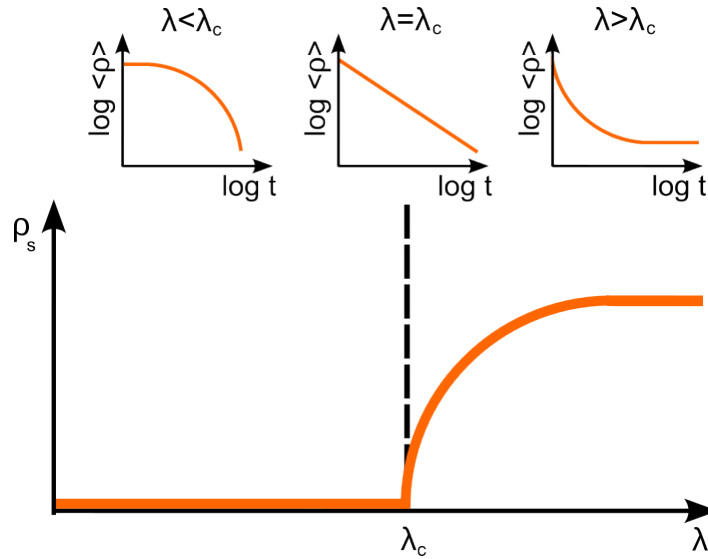


Figura 2.9: Parâmetro de ordem estacionário em função do parâmetro de controle, em sistemas sem desordem relevante, apresenta diferentes regimes: subcrítico ( $\lambda < \lambda_c$ ), crítico ( $\lambda = \lambda_c$ ) e supercrítico ( $\lambda > \lambda_c$ ). Para cada um desses regimes, a parte superior da figura mostra a evolução do parâmetro de ordem em função do tempo em uma escala log – log.

Quando analisamos uma dinâmica epidêmica em redes com desordem relevante, o comportamento crítico será alterado. Por exemplo, no gráfico da dinâmica para vários valores de  $\lambda$  em um intervalo  $[\lambda_0, \lambda_c]$ , poderiam apresentar comportamento crítico, resultando em uma região de criticalidade, conhecida como fase de Griffiths (Fig.2.10) [35]. Tal desordem relevante pode se manifestar de outras maneiras na dinâmica epidêmica, tal qual a alteração do expoente de decaimento do ponto crítico. Neste contexto, apresentaremos nesta seção os critérios desenvolvidos ao longo dos últimos anos para classificação da desordem de sistemas.

Os primeiros dois critérios que serão apresentados foram desenvolvidos para a descrição da transição de fase no modelo de Ising [35]. No entanto, nesta seção, apresentaremos esses critérios considerando a transição de fase gerada em sistemas a partir de modelos pertencentes à classe de percolação dirigida. Além disso, esses critérios estão intimamente conectados à flutuação no grau das redes. Desta forma, a primeira subseção desta seção aborda o cálculo da flutuação de grau.

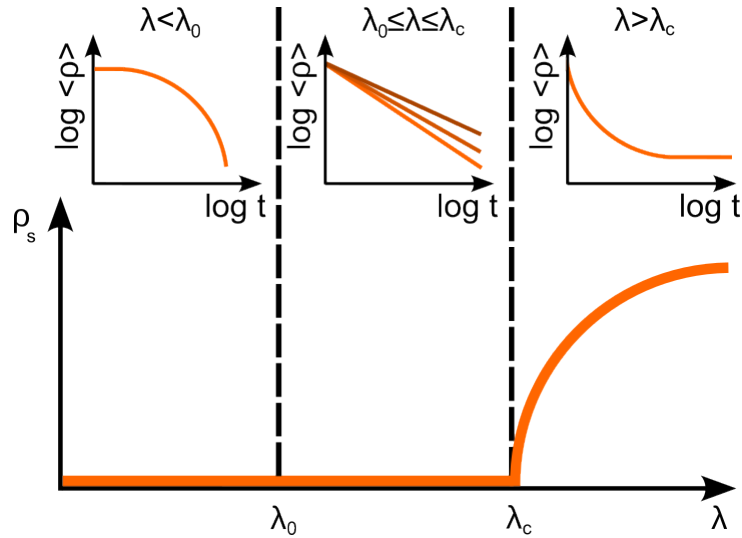


Figura 2.10: Parâmetro de ordem estacionário em função do parâmetro de controle para sistemas com desordem relevante apresentando fase de Griffiths para os regimes: subcrítico ( $\lambda < \lambda_0$ ), fase de Griffiths ( $\lambda_0 \leq \lambda \leq \lambda_c$ ) e supercrítico ( $\lambda > \lambda_c$ ). Para cada um desses regimes, a parte superior da figura mostra a evolução do parâmetro ordem em função do tempo em uma escala log–log. Podemos observar que na região da fase de Griffiths o decaimento em lei de potência ocorre com diferentes expoentes.

### 2.3.1 Flutuação do grau

Em redes formadas a partir de agregados, Fig.2.11(a), podemos definir a ligação entre as partículas. Se dividirmos esse agregado em blocos de lado  $\varepsilon_b$ , Fig.2.11(b) e Fig.2.11(c), podemos calcular o grau médio de cada um desses blocos, dado por:

$$K_\mu = \frac{1}{N_{b,\mu}} \sum_{i \in \mu} k_i \tag{2.10}$$

onde  $N_{b,\mu}$  é o número de partículas que estão no bloco  $\mu$  de tamanho  $\varepsilon_b$  e  $k_i$  é o grau de uma partícula  $i$  contida em  $\mu$ .

Com essa medida, podemos calcular a flutuação no grau  $\sigma_K$ , dado pela variância de  $K_\mu$  [4]

$$\sigma_K^2(\varepsilon_b) = \langle (K_\mu - \langle k \rangle)^2 \rangle_\mu \tag{2.11}$$

onde  $\langle \dots \rangle_\mu$  é a média de todos os blocos  $\mu$  e  $\langle k \rangle$  o grau médio total do agregado.

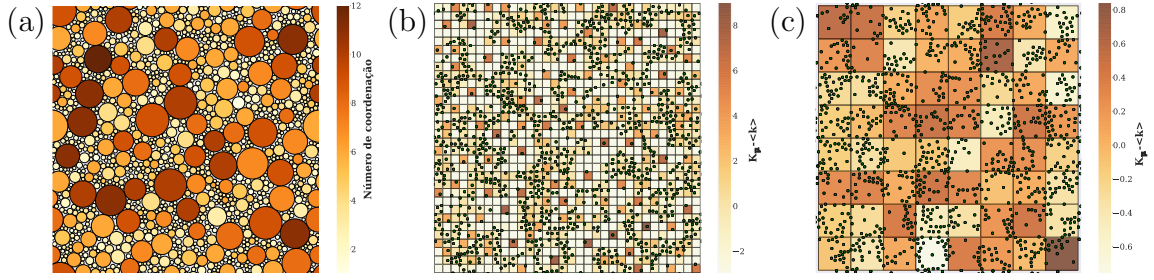


Figura 2.11: a) Agregado com partículas em cores diferentes de acordo com o seu número de coordenação (grau). Desvio do grau médio do agregado para as partículas com centros dentro para regiões de lado b)  $\varepsilon_b = 2$  e c)  $\varepsilon_b = 5$ .

### 2.3.2 Critério de Harris

Em 1974, A. B. Harris propôs uma maneira de classificar a relevância da desordem de sistemas críticos [6]. Para enunciar este critério podemos considerar que a transição de fase em um sistema ocorre para  $\lambda_c$ , definindo  $\Delta \equiv (\lambda - \lambda_c)/\lambda_c \approx 0$ , esse sistema possui um comprimento de correlação  $\xi_\perp$  que diverge no ponto crítico seguindo  $\xi_\perp \sim \Delta^{-\nu_\perp}$ , onde  $\nu_\perp$  é o expoente associado ao comprimento de correlação do modelo puro (sem desordem). Dividindo o sistema  $d$ -dimensional em domínios esféricos  $\Omega$  com raio  $R$  que englobam  $N_{R,\Omega}$  nós, que escala com  $N_{R,\Omega} \sim R^d$ . Assim, podemos definir nessas regiões um grau médio dado por:

$$K(R) = \frac{1}{N_{R,\Omega}} \sum_{i \in \Omega} k_i. \quad (2.12)$$

Seja o grau médio de toda rede  $K_0 = \langle k \rangle$ , sendo  $k_i$  uma variável aleatória e independente, podemos definir:

$$Z_j = \frac{\sum_{i \in \Omega} k_i - N_{R,\Omega} K_0}{\sqrt{N_{R,\Omega} \sigma_R(K)}}, \quad (2.13)$$

em que  $Z_j$  também é uma variável aleatória e independente a qual, pelo teorema central do limite, converge em distribuição para a distribuição gaussiana, com  $\langle Z \rangle = 0$  e  $\langle Z^2 \rangle = 1$ . Além disso, como  $\langle Z^2 \rangle = 1$  temos que  $\langle Z^2 \rangle = N_{R,\Omega} \sigma_R(K)^2 = 1$ , deste modo,  $\sigma_R(K) = N_{R,\Omega}^{-1/2}$ . Considerando para todo o sistema temos que  $N_{R,\Omega} \sim \langle N_{R,\Omega} \rangle \sim R^d$ , logo:

$$\sigma_R(K) \sim \langle N_{R,\Omega} \rangle^{-1/2} \sim R^{-d/2}. \quad (2.14)$$

Considerando  $\xi_\perp$  grande de modo que  $\xi_\perp \sim R$ , temos que:

$$\sigma_\xi(K) \sim \xi_\perp^{-d/2} \sim \Delta^{\nu_\perp d/2}. \quad (2.15)$$

Para que o comportamento crítico do sistema puro persista, temos que as flutuações devem ser irrelevantes à medida que  $\Delta \rightarrow 0$ , para isso temos que

$$d\nu_{\perp} > 2. \quad (2.16)$$

Então, se a condição

$$d\nu_{\perp} < 2, \quad (2.17)$$

é obedecida, a flutuação é mantida e deve-se esperar uma mudança no comportamento universal, ou seja, desordem relevante. Tais resultados são consistentes quando estudados em estruturas regulares, porém este critério não pode ser estendido para sistemas formados por estruturas não periódicas.

### 2.3.3 Critério de Harris-Luck

A fim de determinar desordem em estruturas não periódicas, em 1993, J. M. Luck propôs uma extensão para o critério de Harris, o qual ficou posteriormente conhecido como critério de Harris-Luck [3]. Para este critério podemos considerar as mesmas divisões do espaço em regiões  $\Omega$  e os cálculos feitos para o critério anterior. Tais critérios se diferem no decaimento da flutuação de grau, o qual para o critério de Harris-Luck segue:

$$\sigma_R(K) = \frac{\langle |K(R) - K_0| \rangle}{K_0} \sim \langle N_{R,\Omega} \rangle^{-(1-\omega)} \sim R^{-d(1-\omega)}, \quad (2.18)$$

onde  $\omega$  é o expoente de flutuação geométrica ou expoente de *wandering* e  $\langle \dots \rangle$  é a média sobre todas as regiões  $\Omega$  existentes. Comparando com decaimento de  $\sigma_R(K)$  para o critério anterior, obtemos que quando  $\omega = 1/2$  o critério de Harris-Luck recai no critério de Harris e teríamos novamente  $\sigma_K(R) \sim \langle N_{R,\Omega} \rangle^{-1/2}$ .

Novamente, próximo ao ponto crítico podemos definir  $\Delta \equiv (\lambda - \lambda_c)/\lambda_c \approx 0$ , para um comprimento de correlação grande de modo que  $R \sim \xi_{\perp}$  e a flutuação do grau  $\sigma_{\xi}(R)$  em um volume de correlação escala com

$$\sigma_{\xi}(R) \sim \xi_{\perp}^{-d(1-\omega)} \sim \Delta^{d\nu_{\perp}(1-\omega)}, \quad (2.19)$$

pois  $\xi_{\perp} \sim \Delta^{-\nu_{\perp}}$ . Deste modo, para comportamentos críticos regulares essas flutuações desaparecem quando  $\Delta \rightarrow 0$  desde que:

$$d\nu_{\perp}(1-\omega) > 1. \quad (2.20)$$

Deste modo, definindo  $\omega_c$ , a partir da equação 2.20, temos que:

$$\omega_c = 1 - \frac{1}{d\nu_{\perp}}, \quad (2.21)$$

por meio do qual temos que: se  $\omega > \omega_c$  efeitos de desordem são relevantes e podem alterar o caráter do comportamento crítico e, se  $\omega < \omega_c$  o comportamento crítico é mantido. Com isso, a partir do critério de Harris-Luck é possível prever efeitos de desordem em sistemas não periódicos, como quasicristais e estruturas aleatórias. Podemos notar também que se  $\omega_c = 1/2$ , a expressão 2.21 para o critério de Harris-Luck se reduz ao critério de Harris.

### 2.3.4 Extensão do Critério de Harris-Luck

Em 2008, de Oliveira et al [7] encontraram uma contradição a esse critério quando estudaram efeitos de desordem das redes de Voronoi-Delaunay e verificaram que a desordem não alterou as características da transição de fase.

Motivados pela referência [7], Barghathi e Vojta [4] propuseram em 2014 uma extensão ao critério de Harris-Luck para a forma de calcular a flutuação do grau. Pelo critério de Harris-Luck temos que a flutuação do grau considerando blocos de lado  $\varepsilon_b$  é dado por:

$$\sigma_K^2(\varepsilon_b) = \langle (K_\mu - \langle k \rangle)^2 \rangle_\mu, \quad (2.22)$$

como mostrado na subseção 2.3.1, em que  $\langle k \rangle$  é o grau médio da rede. Porém, para as redes de Voronoi-Delaunay bidimensionais, Barghathi e Vojta verificaram que alguns nós da rede possuem grau significativamente maior do que os demais, produzindo um efeito de correlação na borda dos blocos. Assim, quando se calcula a média do grau médio dos blocos  $\langle k \rangle_\mu$  temos que esse valor pode ser maior do que o grau médio total da rede,  $\langle k \rangle$ . Além disso, eles mostraram que para essas redes  $(\langle k \rangle_\mu - \langle k \rangle)$  decai lentamente, seguindo uma lei de potência dada por  $(\langle k \rangle_\mu - \langle k \rangle) \sim \varepsilon_b^{-1}$ . Por isso, propuseram que a flutuação de grau deve ser calculada considerando tal desvio do grau médio, conforme a seguinte relação:

$$\sigma_K^2(\varepsilon_b) = \langle (K_\mu - \langle k \rangle_\mu)^2 \rangle_\mu \sim \varepsilon_b^{-2d(1-\omega)}. \quad (2.23)$$

Fazendo tais considerações, Barghathi e Vojta encontraram expoente de decaimento de  $\sigma_K(\varepsilon_b)$  que não contradiz o critério de Harris-Luck.

Porém, isso não é tudo. Esse assunto permanece em aberto quando em 2018, na referência [12] os autores encontraram uma violação de tal critério de Harris-Luck com a extensão feita por Barghathi e Vojta.

# Capítulo III

## Modelos e implementação computacional

Neste capítulo descreveremos os modelos de agregação utilizados. Utilizamos três modelos diferentes e estudamos eles com partículas monodispersas e polidispersas. A partir dos agregados produzidos extraímos uma rede de contatos e discutiremos os detalhes dos modelos de crescimento dos agregados e as estratégias usadas na obtenção das redes. Nessa seção, além disso, descreveremos o modelo epidêmico suscetível-infectado-suscetível (SIS), que foi utilizado para verificar efeitos de desordem nas redes geradas.

### 3.1 Modelo de Eden

Em 1961, Murray Eden propôs um modelo para o estudo do crescimento de tumores em um reticulado [15]. Neste modelo, uma partícula semente é adicionada na origem do reticulado, Fig.3.1(a). Deste momento em diante, em cada passo que se segue, uma nova partícula é adicionada na periferia do agregado, Fig.3.1(b).

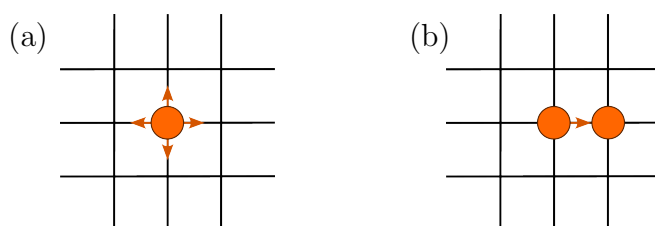


Figura 3.1: a) Exemplo de semente no modelo de Eden na rede quadrada com possíveis direções de duplicação da partícula. b) Nova partícula adicionada à periferia do agregado a partir da duplicação da partícula.

Outras formas de agregação foram construídas tomando como base o modelo de Eden, sendo a maioria desses estudos voltados para a investigação da evolução da interface do agregado durante o crescimento [16, 36]. Nas seções seguinte traremos variações do modelo de Eden, as quais foram estudadas no presente trabalho.

### 3.1.1 Modelo de Eden fora de rede

Na natureza, sistemas reais frequentemente não se assemelham a reticulados. Portanto, modelos fora de rede surgem como opções mais apropriadas para representar sistemas físicos reais. Nesses modelos, não há direções preferenciais estabelecidas durante o crescimento, o que evita efeitos de anisotropia que podem ocorrer em simulações [37].

Uma versão moderna para gerar agregados do tipo de Eden fora de rede foi proposto por Takeuchi [16] em 2012. Neste trabalho o foco estava na interface do agregado que foi definido da seguinte forma:

1. Inicialmente uma partícula semente com diâmetro de uma unidade é adicionada na origem de um espaço bidimensional;
2. Esta partícula é considerada ativa e partículas ativas podem ser escolhidas para serem duplicadas;
3. Após uma partícula ser escolhida, tenta-se adicionar uma partícula em uma direção aleatória entre  $(0, 2\pi]$ , seguindo uma distribuição uniforme, na fronteira dessa partícula;
4. Se não houver sobreposição com nenhuma outra partícula, essa partícula pode ser adicionada;
5. Quando não há mais espaço vazio na borda das partículas ativas elas são consideradas inativas, ou quando as partículas estão cercadas por um círculo fechado de partículas adjacentes, sendo aquelas que estão a uma distância menor do que  $\sqrt{3}$ , pela definição dos autores. Essa segunda exclusão de partículas pertencentes ao grupo de partículas ativas ocorre porque, partículas cercadas por outras não interferem na interface do agregado.

Tal otimização foi posteriormente utilizada em diversos trabalhos para gerar agregados de Eden fora de rede, em especial podemos citar a referência [36], no qual verificaram se tais agregados pertencem também à classe de universalidade de KPZ, assim como o modelo de Eden original.

### 3.1.2 Modelo de Eden fora de rede com partículas polidispersas

O modelo estudado nessa dissertação trata-se de uma modificação do modelo de Eden, na qual propomos estudar o modelo de Eden fora de rede com partículas polidispersas (de diferentes raios). Para isso, realizamos o crescimento do agregado da seguinte forma:

1. Inicialmente, fixa-se uma partícula circular com raio escolhido aleatoriamente, a partir de uma distribuição uniforme, entre um raio mínimo ( $r_{\min}$ ) e um raio máximo

- ( $r_{\max}$ ) em uma posição aleatória no sistema. Tal partícula dará início ao crescimento no agregado;
2. Essa partícula se duplica gerando uma nova partícula com raio também escolhido aleatoriamente dentro deste mesmo intervalo  $[r_{\min}, r_{\max}]$ . A posição da nova partícula é escolhida a partir de um ângulo  $\theta$  no intervalo  $[0, 2\pi]$  escolhido de forma aleatória;
  3. Repetimos esse passo novamente para tentar duplicar a primeira partícula, escolhendo um raio e ângulo para duplicação. Porém, como agora existe mais de uma partícula, é importante verificar se a possível nova partícula apresenta sobreposição com as partículas previamente adicionadas. Para essa verificação permitimos uma tolerância de sobreposição ( $\Delta_{\text{sob}}$ );
  4. Se houver sobreposição com alguma partícula, contamos essa como uma tentativa frustrada. Quando essa partícula alcançar uma quantidade  $M$  de tentativas frustradas seguidas, o raio máximo para a duplicação dessa partícula é reduzido por um fator  $f$ ,  $r_{\max} = fr_{\max}$ , e zeramos o contador de tentativas frustradas;
  5. Senão houver sobreposição, a partícula é então adicionada no agregado e o contador de tentativas frustradas da partícula mãe é zerado;
  6. Continuamos tentando duplicar essa mesma partícula. Quando o número de tentativas frustradas alcançar novamente a quantidade  $M$  reduzimos novamente o raio máximo permitido. Esses passos se repetem até que  $r_{\max} < r_{\min}$ ;
  7. Quando  $r_{\max} < r_{\min}$  a partícula se torna inativa e não pode ser mais duplicada, sendo necessário assim escolher ao acaso uma nova partícula dentre as partículas ativas;
  8. Quando uma nova partícula for escolhida,  $r_{\max}$  retorna ao seu o valor inicial;
  9. Todo o processo de tentativa de duplicação, contagem de tentativas frustradas e redução de raio máximo se repete para essa partícula, a qual se torna inativa seguindo a mesma regra e sendo necessário escolher uma nova partícula ativa;
  10. Quando não houverem mais partículas ativas a simulação é encerrada.

No passo 6, reduzimos o raio máximo ( $r_{\max}$ ) permitido para a duplicação da partícula mãe. Isso ocorre porque, quando a simulação atinge a quantidade  $M$  de tentativas frustradas, é provável que a borda da partícula mãe esteja predominantemente ocupada por outras partículas maiores. Se ainda houver espaço disponível na periferia dessa partícula, esse espaço pode ser ocupado apenas por partículas menores. Portanto, ao reduzir o raio máximo, favorecemos o surgimento de partículas menores. Já na etapa 8, ao escolher uma nova partícula mãe, restauramos o valor de  $r_{\max}$  para o seu valor original. Isso ocorre porque a borda dessa nova partícula mãe ainda pode ser ocupada por partículas

de raio próximo ao raio máximo. Assim, é necessário repetir o processo de redução do raio máximo após  $M$  tentativas frustradas.

Na Fig.3.2 ilustramos o esquema de duplicação de uma partícula. Neste caso a partícula laranja foi escolhida para ser duplicada na posição definida pelo ângulo  $\theta$ , após sortearmos o raio da nova partícula e verificar que o espaço que ela ocupará está livre a nova partícula foi adicionada.

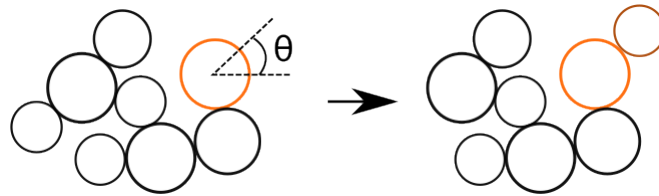


Figura 3.2: Duplicação de uma partícula.

## 3.2 Modelo de empacotamento aleatório de discos sem acomodação

Modelos de empacotamento podem também ser construídos a partir da deposição de partículas aleatoriamente no espaço. Neste trabalho, depositamos partículas aleatoriamente e com dimensões aleatórias dentre o tamanho mínimo e o tamanho máximo. Tal crescimento é feito da maneira que segue:

1. A cada passo uma partícula de raio aleatório entre o intervalo  $(r_{\min}, r_{\max})$  é adicionada em posição aleatória no espaço.
2. Se houver sobreposição com alguma partícula previamente adicionada, a deposição é recusada. Para essa verificação permitimos uma tolerância de sobreposição  $(\Delta_{\text{sob}})$ ;
3. No momento em que houver sobreposição com alguma partícula, contamos essa como uma tentativa frustrada. Novamente, quando a contagem alcançar uma quantidade  $M$  tentativas frustradas seguidas, o raio máximo para a deposição é reduzido por um fator  $f$ ,  $r_{\max} = fr_{\max}$ , e zeramos o contador de tentativas frustradas;
4. Se não houver sobreposição, a partícula é então adicionada no agregado e o contador de tentativas frustradas é zerado;
5. Quando o número de tentativas frustradas alcançar novamente a quantidade  $M$  reduzimos novamente o raio máximo permitido.
6. Esse passo se repete até que  $r_{\max} < r_{\min}$  e então a simulação é finalizada.

### 3.3 Modelo de empacotamento aleatório de discos com acomodação

O terceiro modelo estudado é uma variação do segundo modelo que estudamos, porém, realizando alguns passos para tentarmos adicionar uma nova partícula no agregado quando ocorrem sobreposições. A simulação ocorre da seguinte forma:

1. A cada passo uma partícula é depositada ao acaso, assim como no modelo anterior.
2. Se houver sobreposição com alguma partícula, a nova partícula é deslocada ao longo da direção do vetor que une os dois centros até que não ocorra mais sobreposição entre essas duas partículas, Fig.3.3;
3. Verificamos novamente se há outras sobreposições e se ainda existirem repetimos o passo anterior até uma quantidade  $N$  de vezes;
4. Ao final dessas  $N$  tentativas, se ainda houver sobreposições, reduzimos o raio da partícula em um fator  $f$ , de modo que  $r_i = r_i \cdot f$ , onde  $r_i$  é o raio da partícula, até que  $r_i < r_{\min}$ ;
5. Quando isso ocorrer, não permitimos que essa partícula seja adicionada no agregado e contamos essa como uma tentativa frustrada;
6. Se não houver sobreposição, a partícula é então adicionada no agregado e o contador de tentativas frustradas é zerado;
7. Quando o número de tentativas frustradas alcançar a quantidade  $M$  reduzimos o raio máximo permitido para as novas partículas do agregado utilizando o mesmo fator  $f$  citado anteriormente,  $r_{\max} = f r_{\max}$ .
8. Esse passo se repete até que  $r_{\max} < r_{\min}$  e então a simulação é finalizada.

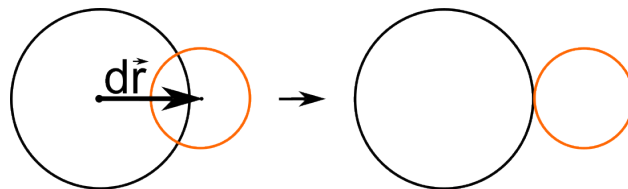


Figura 3.3: Movimento realizado pela partícula quando há sobreposição.

### 3.4 Condição de contorno

Para todos os modelos estudados consideramos condição de contorno periódica para o crescimento das estruturas, para isso, definimos o tamanho do espaço ( $L$ ), indo de  $[-L/2, L/2]$  e aplicamos tais condições durante o crescimento. Na Fig.3.4 temos o exemplo de um agregado gerado em uma região de tamanho  $L = 16r_{\max}$  com condição de contorno periódica. Nele, a partícula laranja deu origem à marrom, que possui uma parte de cada lado devido à condição de contorno periódica.

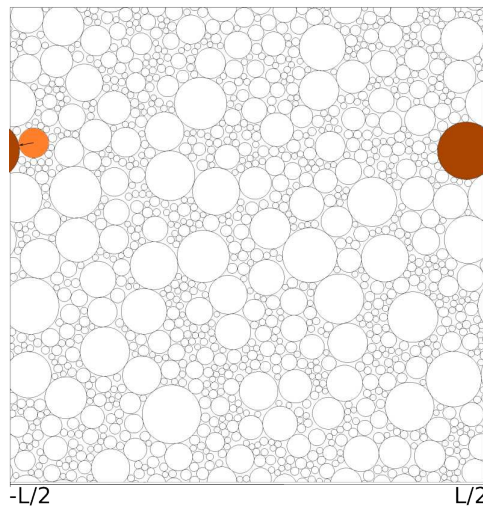


Figura 3.4: Duplicação de uma partícula em um agregado com condições de contorno periódicas.

### 3.5 Detalhes computacionais

Uma dificuldade relacionada à simulação de modelos fora de rede é a identificação da vizinhança de uma partícula de forma eficiente. Sem otimizações, a cada inserção de uma nova célula é necessário analisar as posições de todas as partículas adicionadas anteriormente, processo esse que torna o tempo de computação proibitivo à medida que o agregado alcança grandes tamanhos, o qual é justamente o limite em que estamos interessados. Assim, surge a necessidade de otimizações para reduzir os esforços computacionais necessários para as simulações.

Alves et al. [37] propuseram um método para determinar a vizinhança de partículas no processo de agregação fora de rede, o qual será adaptado para o caso polidisperso estudado nesta dissertação. A otimização envolve a criação de sub-regiões com lados de tamanho  $2r_{\max}$  e a verificação de quais partículas estão dentro dessas sub-regiões. Os índices das partículas cujos centros estão localizados dentro de cada sub-região são registrados em listas. A Fig.3.5 ilustra um exemplo da criação dessas regiões. Nela, é possível observar que

as partículas podem ocupar espaço em mais de um quadrado, mas para essa otimização, o aspecto crucial é a localização do centro das partículas.

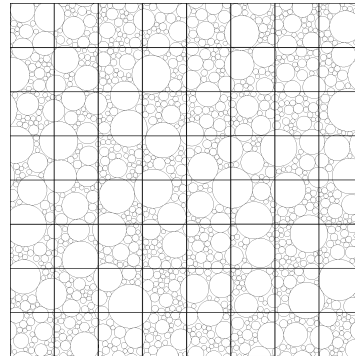


Figura 3.5: Agregado com rede auxiliar utilizada para determinação de vizinhanças.

Com essa informação, se uma partícula tenta ser adicionada e seu centro está no quadrado central (região vermelha) da Fig.3.6, por exemplo, precisamos verificar se há sobreposição dessa partícula apenas com as partículas que estão na mesma região e nos primeiros e segundos vizinhos (região em verde e azul, respectivamente). Caso não haja sobreposição dessa partícula com nenhuma das outras verificadas, essa partícula possui seu índice adicionado na região que ocupa seu centro, ou seja, na região vermelha.

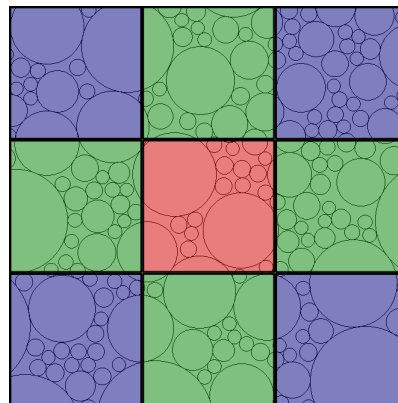


Figura 3.6: Agregado com matriz auxiliar correspondente para determinação de vizinhanças.

### 3.5.1 Construção das redes complexas

Ao final do crescimento do agregado, construímos a rede de contato entre as partículas. Para determinar a rede, consideramos uma separação limite para definir quais partículas são consideradas vizinhas. Se a distância entre os centros de duas partículas,  $d_{ij}$ , satisfaz a condição  $d_{ij} \leq (r_i + r_j + \Delta_{\text{sep}})$ , onde  $\Delta_{\text{sep}}$  é uma tolerância para a separação, as partículas são consideradas vizinhas, Fig.3.7.

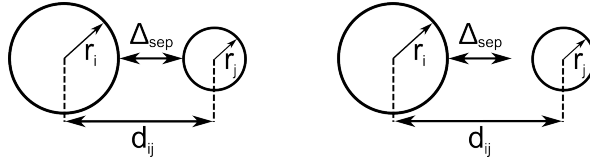


Figura 3.7: Exemplo de duas partículas, pois  $d_{ij} \leq (r_i + r_j + \Delta_{sep})$  e do caso em que não são vizinhas, pois  $d_{ij} > (r_i + r_j + \Delta_{sep})$ .

Para armazenarmos a rede de contato, utilizamos a lista de adjacência construída da forma que segue. Sabendo o grau  $k_i$  de todos os nós  $i$  do agregado, em uma rede com  $N$  partículas, precisamos de uma lista com  $\sum_{i=1}^N k_i$  posições para armazenarmos todas as conexões. Assim, para o índice 1 começamos na posição 1 dessa lista salvando seus vizinhos, os quais serão armazenados até a posição  $k_1$ ; na posição  $k_1 + 1$  começamos armazenar os vizinhos do nó 2 e vamos até a posição  $k_1 + 1 + k_2$  e assim por diante. De modo geral, se  $a_i$  armazena o início dos vizinhos do nó  $i$  na lista de adjacência,  $a_i$  é dado por  $a_i = 1 + \sum_{j=1}^{i-1} k_j$  para  $i > 1$  e  $a_i = 1$  para  $i = 1$ . Na Fig.3.8 temos o exemplo de uma rede e sua respectiva lista de adjacência.

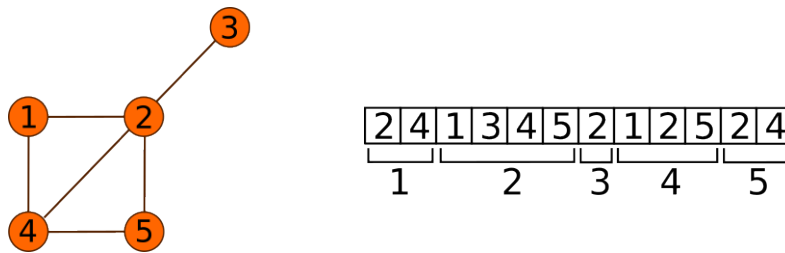


Figura 3.8: Exemplo de rede com 5 nós e as ligações entre eles e a lista de adjacência construída a partir da ligação entre as partículas.

### 3.6 Modelo SIS: Suscetível-Infetado-Suscetível

O modelo suscetível-infetado-suscetível (SIS) é comumente usado no estudo de epidemias [20]. Neste modelo cada sítio  $i$  da rede pode assumir dois estados, suscetível ( $\sigma_i = 0$ ) ou infetado ( $\sigma_i = 1$ ). A dinâmica do modelo ocorre de forma estocástica<sup>1</sup> e em cada passo de tempo um evento é escolhido ao acaso: cura ou infecção. Além disso, para as simulações utilizamos o algoritmo de Gillespie otimizado proposto na referência [38].

Dados os dois estados possíveis para os nós do sistema temos que, se um sítio está contaminado, ele pode transmitir para um de seus vizinhos com uma taxa  $\lambda k$ , sendo  $k$  grau do sítio e  $\lambda$  a taxa de infecção por contato. Por outro lado, se o sítio está infetado ele pode espontaneamente sair do estado infetado para o suscetível novamente com taxa  $\mu$ , Fig.3.9(a). Como exemplo temos a rede da Fig.3.9(b) a qual possui nós suscetíveis e

<sup>1</sup>Simulações estocásticas são aquelas que fazem o uso de variáveis aleatórias para definir seus processos.

infetados, assim, os nós 2 e 3 podem passar para o estado suscetível espontaneamente e os nós 1, 4 e 5 podem ser infetados pelo contato com o nó 2.

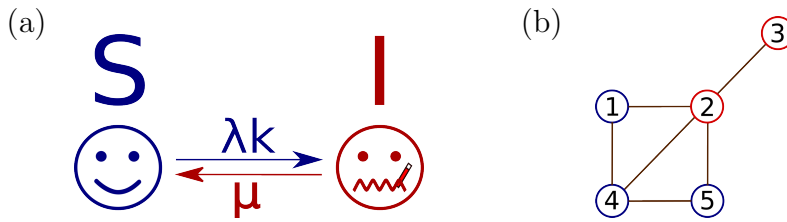


Figura 3.9: a) Representação do modelo SIS. Nele um indivíduo suscetível torna-se infetado com taxa  $\lambda k$  a partir do contato com um infetado e um indivíduo infetado torna-se suscetível novamente com taxa  $\mu$ . b) Exemplo de rede com nós infetados (nós 2 e 3 em vermelho) e nós suscetíveis (nós 1, 4 e 5 em azul).

Com base nas taxas individuais de cada nó podemos calcular a taxa total de infecção e cura, dadas por  $I = \mu \cdot N_I$  e  $S = \lambda \sum_{i=1}^{N_I} k_i$ , onde  $N_I$  é o número de nós infetados. Desse modo, em cada passo com probabilidade  $P_I = I/(I + S)$  ocorre um evento de tentativa de infecção e com probabilidade  $1 - P_I$  um evento de cura. Assim que o evento é escolhido definimos o nó que será curado ou o nó que irá infetar um de seus vizinhos. Durante o evento de infecção podemos escolher um nó já infetado para ser infetado, quando isso ocorre, chamamos esse passo de processo fantasma<sup>2</sup> e então apenas o passo de tempo é incrementado, dando continuidade à simulação. Em cada um desses passos incrementamos o tempo com base nas taxas, sendo o passo de tempo dado por  $dt = -\ln(\xi)/(I + S)$ , onde  $\xi$  é um número aleatório uniformemente distribuído no intervalo  $(0, 1)$ .

Assim, se considerarmos inicialmente todos os nós da rede infetados, conseguimos analisar o decaimento da epidemia, o qual pode apresentar três comportamentos, como vimos na Fig.2.9:

1. Estado absorvente: nessa fase o número de nós infetados decai exponencialmente para zero,  $N_I = 0$ , e quando chega a este estado ela não sai mais, já que não possuem nós infetados para infetar outros e continuar com a dinâmica epidêmica;
2. Estado estacionário ativo: neste estado a simulação tende a uma fração finita de indivíduos infetados, apresentando flutuações em torno desse valor;
3. Comportamento crítico: neste estado a simulação cai lentamente para o estado absorvente, seguindo uma lei de potência. Este estado que separa os estados absorvente e estacionário ativo.

O estudo da transição de fase do modelo SIS nas redes geradas por modelos de agregação pertencem à classe de universidade de percolação dirigida [28]. Para essa classe,

<sup>2</sup>Processos fantasmas são aqueles que não mudam o estado do sistema, mas contribuem para a contagem de tempo. Por exemplo, tentar infetar um nó já infetado não altera o estado do sistema [38].

o decaimento da dinâmica epidêmica no ponto crítico possui expoente crítico  $\alpha = 0.4523(10)$  em duas dimensões [39].

Por fim, para as simulações desenvolvidas consideramos a taxa de cura  $\mu = 1.0$  e o nosso parâmetro de controle é dado pela taxa de infecção por contato  $\lambda$ .

# Capítulo IV

## Resultados e Discussões

Neste capítulo apresentaremos os resultados das redes obtidas dos modelos de crescimento de agregados descritos no capítulo III, bem como informações sobre a desordem de tais redes. Para isso, definimos uma vizinhança a partir da proximidade entre as partículas como descrito na seção 3.5. Com as redes construídas, realizamos a caracterização delas via teoria de grafos, analisando a função de distribuição de graus (Eq.2.2), o coeficiente de agrupamento (Eq.2.5), correlação de grau (Eq.2.7) e o menor caminho médio (Eq.2.8). Além disso, comparamos o decaimento da flutuação de grau (Eq.2.11) com o expoente e *wandering* para o caso crítico, a fim de verificar se o decaimento é mais rápido (desordem irrelevante) ou mais lento (desordem relevante) do que ele. Finalmente, simulamos o modelo SIS nessas redes para verificar se a previsão para a relevância da desordem foi satisfeita. Assim, esse capítulo será organizado em duas seções, na primeira trataremos a caracterização das redes extraídas a partir dos três modelos e na segunda trataremos o resultado para o expoente de *wandering* e as simulações do modelo SIS nas redes.

### 4.1 Caracterização das redes

Para os modelos de agregação apresentados no capítulo III, utilizamos os seguintes conjuntos de parâmetros para gerar os agregados:

- **Modelo de Eden:** número de tentativas frustradas consecutivas para duplicar uma partícula  $M = 40$ , fator de redução do raio máximo permitido  $f = 0.8$  e tolerância de sobreposição  $\Delta_{\text{sob}} = r_{\text{min}}/10^8$ , a qual possui um valor baixo por ser apenas uma incerteza numérica;
- **Modelo de empacotamento aleatório de discos sem acomodação:** número de tentativas frustradas consecutivas  $M = 10^4$ , fator de redução do raio máximo  $f = 0.8$  e tolerância de sobreposição  $\Delta_{\text{sob}} = r_{\text{min}}/10^8$ ;

- **Modelo de empacotamento aleatório de discos com acomodação:** número de tentativas frustradas consecutivas  $M = 10^4$ , número de tentativas de mover uma partícula quando há sobreposição  $N = 20$ ,  $f = 0.8$  é o fator de redução do raio máximo das partículas e tolerância de sobreposição  $\Delta_{\text{sob}} = r_{\text{min}}/10^8$ .

Foram gerados agregados polidispersos com partículas cujo raio varia no intervalo  $[r_{\text{min}}, r_{\text{max}}]$ , com os raios sendo obtidos a partir de uma distribuição uniforme. Mantivemos  $r_{\text{max}} \equiv 1$  e variamos apenas o valor de  $r_{\text{min}}$ , por meio das razões  $r = r_{\text{max}}/r_{\text{min}}$  investigadas.

No Apêndice A discutimos os critérios utilizamos para a definição das redes a partir dos agregados, que consiste em gerar uma rede totalmente conectada. Para isso, realizamos alguns testes nas redes considerando as nas separações  $\Delta_{\text{sep}} = sr_{\text{min}}$  com os valores de  $s$  descritos na Tab.4.1 para os modelos de Eden, empacotamento de discos sem acomodação e empacotamento de discos com acomodação e razões  $r$  utilizadas.

<b>r</b>	<b>Eden</b>	<b>EDSA</b>	<b>EDCA</b>
<b>1</b>	0.1	1.5	0.9
<b>10</b>	0.1	1.7	0.7
<b>100</b>	0.1	1.7	0.7

Tabela 4.1: Tabela com os valores de  $s$  usados na separação, dado por  $\Delta_{\text{sep}} = sr_{\text{min}}$ , para os modelos de Eden, empacotamento de discos sem acomodação (EDSA) e empacotamento de discos com acomodação (EDCA) para as razões  $r = r_{\text{max}}/r_{\text{min}}$  indicadas.

Com as redes extraídas, a fim de caracterizá-las, foram calculadas a distribuição do grau, flutuação do grau, o agrupamento e o menor caminho médio entre os sítios da rede, medidas estas descritas no Capítulo 2.2. Todos os resultados apresentados nessa seção foram feitos com a média de 10 agregados.

### 4.1.1 Grau e distribuição de grau

Nessa seção discutiremos sobre o grau dos nós, as estruturas formadas nas redes de contato dos agregados e traremos o resultado da distribuição de grau para os modelos estudados. Para todos os modelos esperamos que as redes apresentem um limite superior para o grau dos nós, uma vez que há um limite para o número de partículas que podem ser adicionadas na periferia de uma partícula, devido ao seu tamanho mínimo finito. Vale ressaltar que esse limite não é fixo e deve aumentar com o incremento da razão  $r = r_{\text{max}}/r_{\text{min}}$ .

Inicialmente, consideramos os agregados gerados com o modelo de Eden fora de rede. A ilustração da rede de contato entre as partículas é mostrada na Fig.4.1. A partir da figura, é possível observar que, à medida que a razão  $r$  aumenta, as redes se tornam mais densas, preenchendo o espaço de forma mais compacta. No entanto, apesar da maior densidade,

as arestas das redes não se cruzam devido à tolerância utilizada, resultando em uma rede planar [33].

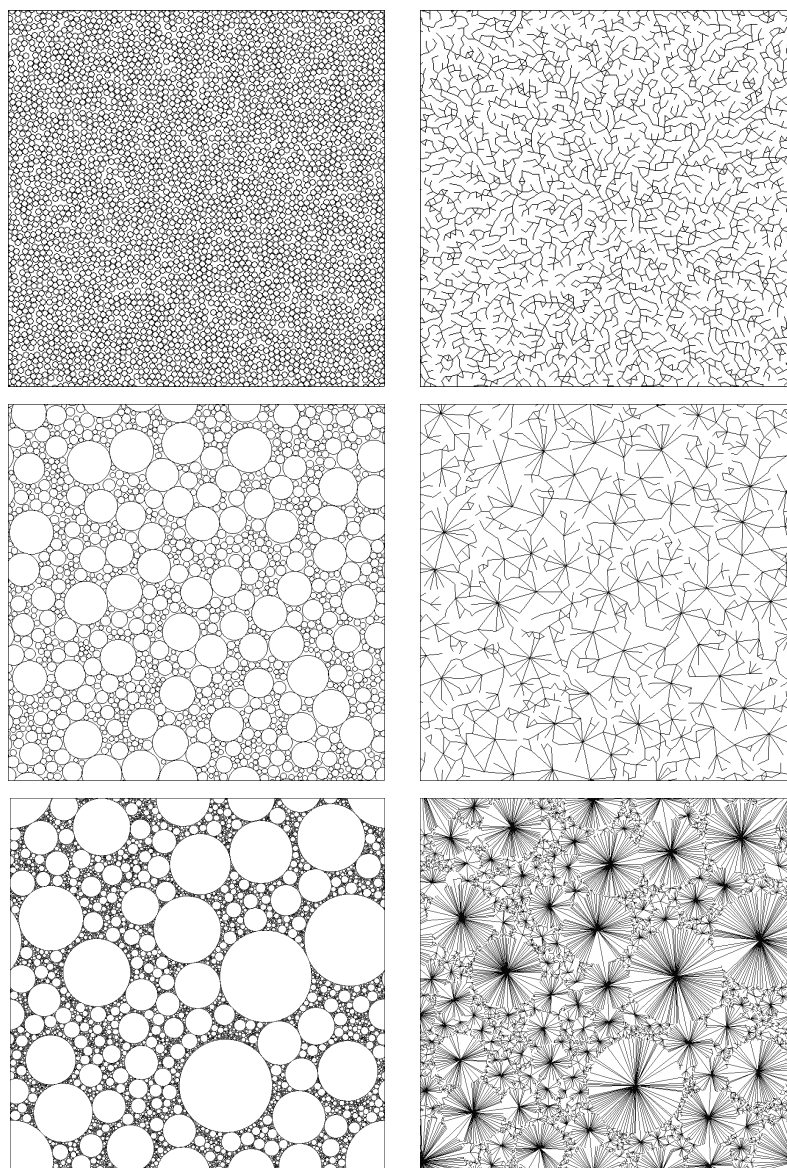


Figura 4.1: Exemplo de agregados gerados com o modelo de Eden fora de rede com condição de contorno periódica para diferentes razões  $r$  (lado direito da imagem) e suas respectivas redes de contato (lado esquerdo). As razões e tamanhos utilizados para gerar os agregados e o número aproximado de partículas desses agregados são, de cima para baixo:  $r = 1$ ,  $L = 128r_{\max}$  e  $N \approx 8.6 \times 10^2$ ;  $r = 10$ ,  $L = 16r_{\max}$  e  $N \approx 1.2 \times 10^3$ ;  $r = 100$ ,  $L = 8r_{\max}$  e  $N \approx 1.1 \times 10^4$ .

Considerando agora os agregados gerados com o modelo de empacotamento aleatório de discos sem acomodação, as redes são ilustradas na Fig.4.2. Assim como as redes do modelo de Eden, podemos observar que o aumento da razão acarreta surgimento de nós com graus maiores, gerando estruturas mais densas, mas ainda planares. Essas estruturas, comparadas com o modelo anterior, apresentam maiores números de triângulos, sendo esperado que o coeficiente de agrupamento dessas redes seja maior também.

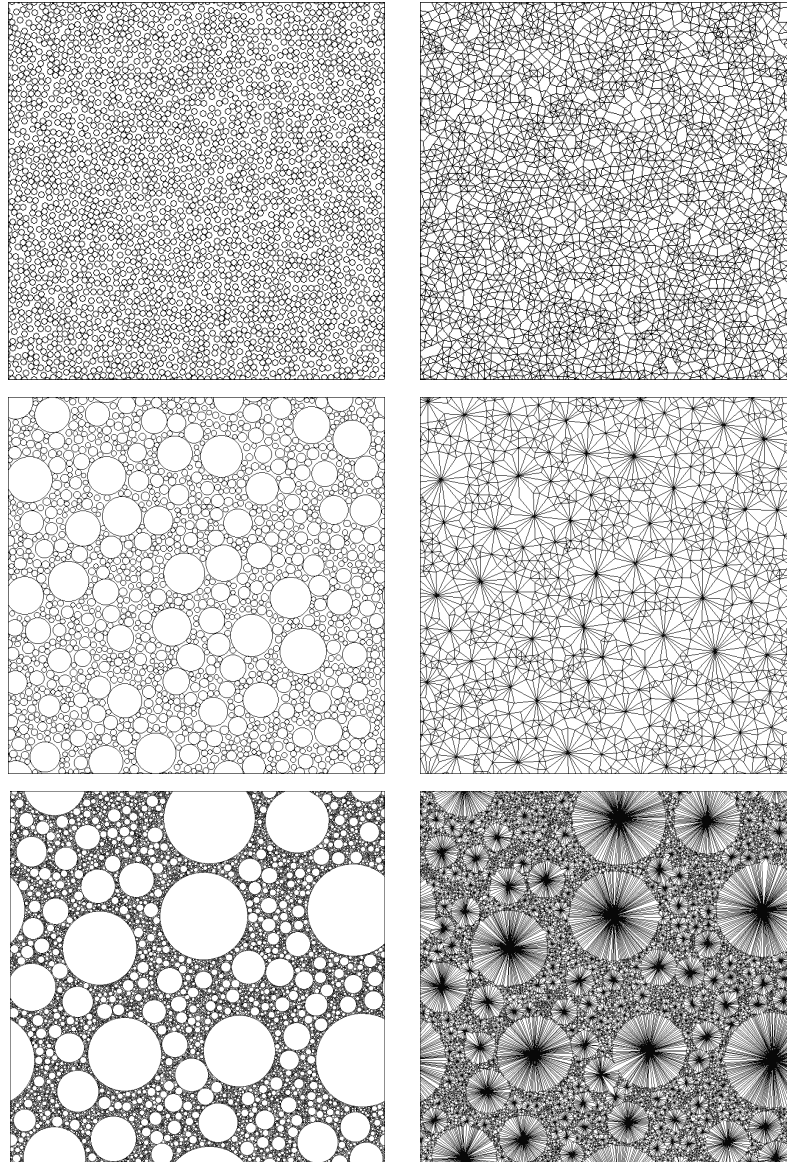


Figura 4.2: Exemplo de agregados gerados com o modelo de empacotamento aleatório de discos sem acomodação com condição de contorno periódica para diferentes razões  $r$  (lado direito da imagem) e suas respectivas redes de contato (lado esquerdo). As razões e tamanhos utilizados para gerar os agregados e o número aproximado de partículas desses agregados são, de cima para baixo:  $r = 1$ ,  $L = 128r_{\max}$  e  $n \approx 2.7 \times 10^3$ ;  $r = 10$ ,  $L = 16r_{\max}$  e  $N \approx 1.5 \times 10^3$ ;  $r = 100$ ,  $L = 8r_{\max}$  e  $N \approx 1.8 \times 10^4$ .

Por fim, para os agregados gerados com o modelo de empacotamento aleatório com acomodação, Fig.4.3, também não verificamos sobreposição entre vértices das redes, redes estas que apresentam mais conexões à medida que  $r$  aumenta. Além disso, tais redes também apresentam muitos triângulos, assim como o modelo sem acomodação, sendo esperado também que o coeficiente de agrupamento seja maior do que o do modelo de Eden.

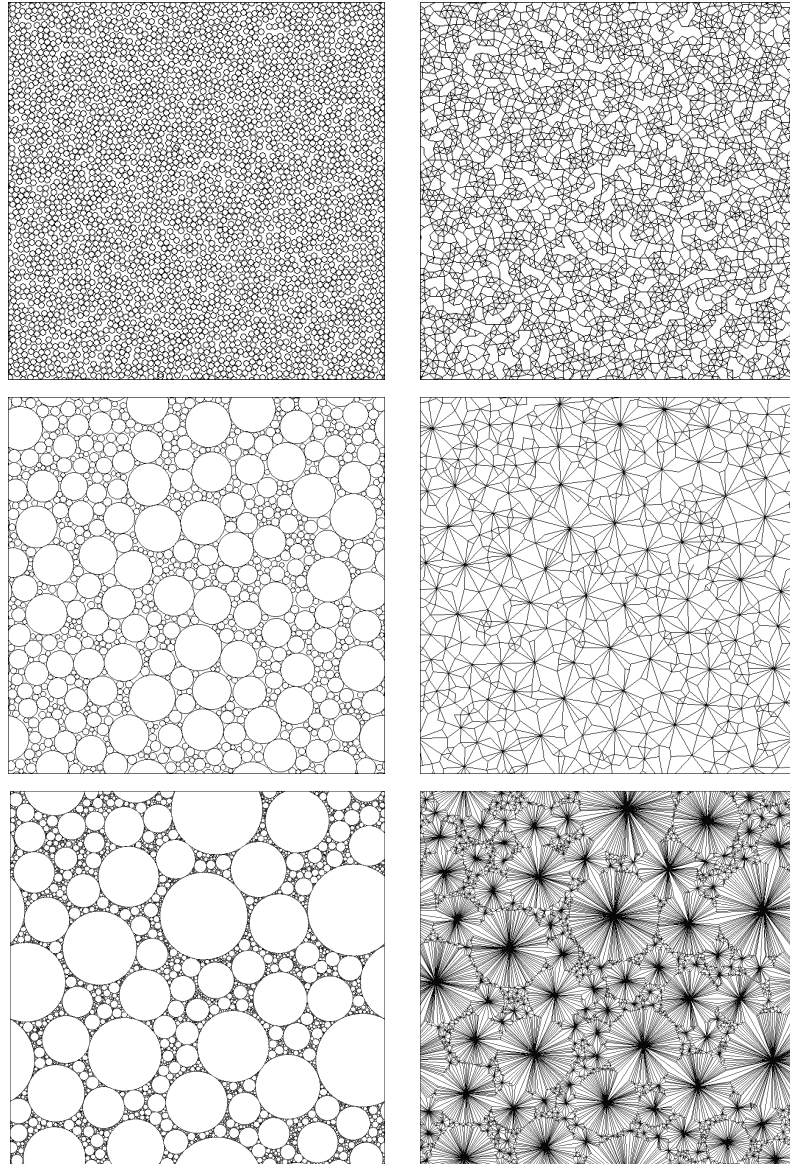


Figura 4.3: Exemplo de agregados gerados com o modelo de empacotamento aleatório de discos com acomodação e com condição de contorno periódica para diferentes razões  $r$  (lado direito da imagem) e suas respectivas redes de contato (lado esquerdo). As razões e tamanhos utilizados para gerar os agregados e o número aproximado de partículas nos agregados são, de cima para baixo:  $r = 1$ ,  $L = 128r_{\max}$  e  $N \approx 3.2 \times 10^3$ ;  $r = 10$ ,  $L = 16r_{\max}$  e  $N \approx 9.1 \times 10^2$ ;  $r = 100$ ,  $L = 8r_{\max}$  e  $N \approx 6.0 \times 10^3$ .

Na Fig.4.4 apresentamos a distribuição de grau média calculada a partir das redes geradas com os três modelos. Podemos observar que o início das curvas apresentam um comportamento diferente, pois, no modelo de Eden a densidade de partículas com grau igual à 1 é significativamente maior do que dos outros dois casos. Porém, a cauda da curva da distribuição dos três modelos apresentam um comportamento similar.

Em distribuições de grau com cauda em lei de potência temos que

$$P_k \sim k^{-\gamma}. \quad (4.1)$$

Analisando os gráficos obtidos para os três modelos, verificamos que eles não se comportam como uma lei de potência para todo o intervalo investigado, porém, podemos comparar as curvas obtidas com as redes apolonianas, as quais apresentam um comportamento em lei de potência com expoente  $\gamma \approx 2.6$  [23]. Podemos verificar na Fig. 4.4 que, para  $r = 100$  nos modelos de Eden e de empacotamento aleatório de discos com acomodação, parte das curvas possuem um decaimento compatível com o ao expoente das redes Apolonianas. No entanto, para o modelo de empacotamento aleatório de discos sem acomodação, a distribuição do grau decai mais rapidamente, o que provavelmente se deve ao fato de que foram realizadas tentativas insuficientes para a adição de novas partículas, resultando em um crescimento do agregado que ainda não atingiu o regime estacionário. Note que todas as três distribuições apresentam um corte superior que depende do raio mínimo, o que não ocorre nas redes Apolonianas, cujo raio mínimo é arbitrariamente pequeno. Portanto, esperamos que esses modelos se comportem de maneira similar às redes Apolonianas quando o raio mínimo  $r_{\min} \rightarrow 0$ .

Além disso, na tabela 4.2 apresentamos o grau médio  $\langle k \rangle$ , a variância  $\text{var}(k) = \langle k^2 \rangle - \langle k \rangle^2$  e a razão  $\kappa = \langle k^2 \rangle / \langle k \rangle^2$  para os três modelos usando diferentes razões, sendo essa última quantidade uma medida do grau de heterogeneidade da rede. A partir dessa tabela podemos verificar que à medida que a razão  $r$  aumenta a variância também aumenta devido ao surgimento de nós com graus maiores. Verificamos também que para  $r = 1$  em todos os modelos que  $\kappa \approx 1$ , que significa que essas distribuições de grau são tipo Poisson. Para as outras razões  $r$  verificamos que à medida que  $r$  aumenta,  $\kappa \gg 1$ , efeito esse que pode ser observado nos gráficos Fig.4.4 pelo surgimento de caudas pesadas.

	<b>r</b>	$\langle k \rangle$	<b>var(k)</b>	$\kappa$
<b>Eden</b>	<b>1</b>	2.43	0.95	1.16
	<b>10</b>	2.60	3.70	1.55
	<b>100</b>	2.58	14.33	3.15
<b>EDSA</b>	<b>1</b>	5.34	0.74	1.03
	<b>10</b>	5.57	5.56	1.18
	<b>100</b>	5.43	19.25	1.65
<b>EDCA</b>	<b>1</b>	4.52	0.95	1.04
	<b>10</b>	4.69	6.97	1.32
	<b>100</b>	4.86	43.11	2.82

Tabela 4.2: Tabela com grau médio, variância e coeficiente  $\kappa = \langle k^2 \rangle / \langle k \rangle^2$  para as redes obtidas dos modelos de Eden, empacotamento aleatório de discos sem acomodação (EDSA) e empacotamento aleatório de discos com acomodação (EDCA) para as razões  $r = \{1, 10, 100\}$ .

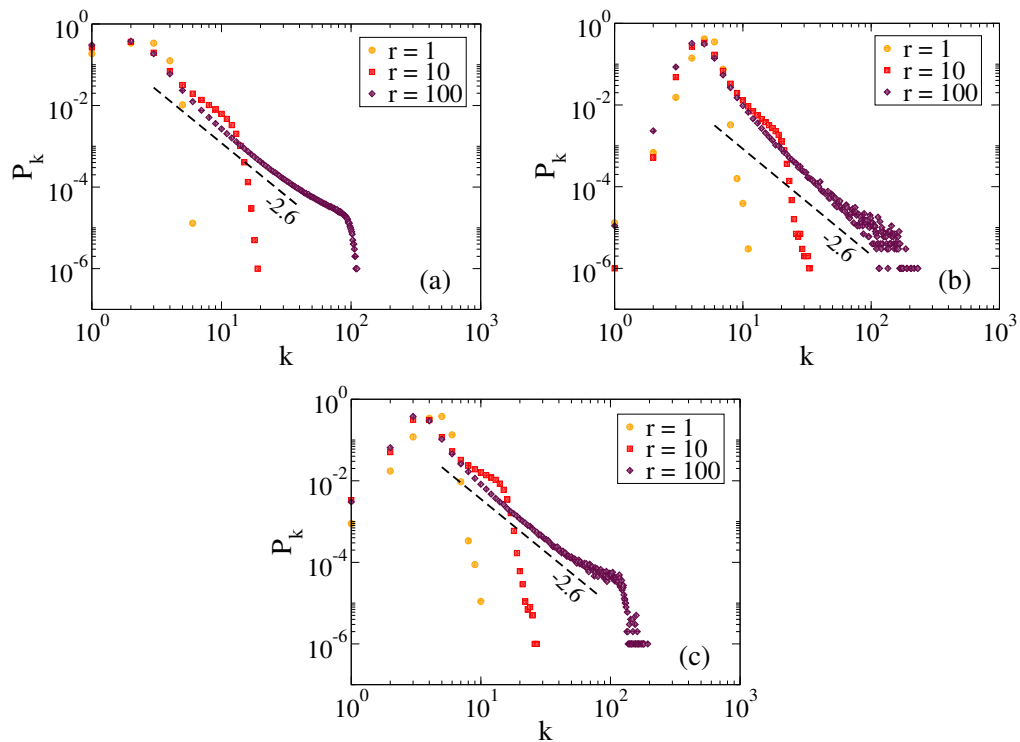


Figura 4.4: Distribuição do grau das redes para diferentes razões  $r = r_{\max}/r_{\min}$  indicados nas legendas para as redes geradas a partir dos modelos de (a) Eden (b) empacotamento aleatório de discos sem acomodação e (c) empacotamento aleatório de discos com acomodação. Para os três gráficos, comparamos o resultado para  $r = 100$  com o expoente associado às redes apolonianas, as quais possuem uma distribuição em lei de potência,  $P_k \sim k^{-\gamma}$  com expoente de  $\gamma = 2.6$ . Para os resultados do modelo de Eden, para  $r = 1$ ,  $r = 10$  e  $r = 100$ , foram obtidas redes com, respectivamente:  $L = 2048$  e  $\langle N \rangle \sim 8,7 \cdot 10^5$ ;  $L = 512$  e  $\langle N \rangle \sim 2,9 \cdot 10^5$ ;  $L = 256$ ;  $\langle N \rangle \sim 6,7 \cdot 10^5$ . Para o modelo de empacotamento aleatório sem acomodação, para  $r = 1$ ,  $r = 10$  e  $r = 100$ , foram obtidas redes com, respectivamente:  $L = 2048$  e  $\langle N \rangle \sim 6,7 \cdot 10^5$ ;  $L = 256$  e  $\langle N \rangle \sim 3,6 \cdot 10^5$ ;  $L = 16$  e  $\langle N \rangle \sim 7,1 \cdot 10^4$ . Para o modelo de empacotamento aleatório com acomodação, para  $r = 1$ ,  $r = 10$  e  $r = 100$ , foram obtidas redes com, respectivamente:  $L = 1024$  e  $\langle N \rangle \sim 2,1 \cdot 10^5$ ;  $L = 256$  e  $\langle N \rangle \sim 2,3 \cdot 10^5$ ;  $L = 32$  e  $\langle N \rangle \sim 9,7 \cdot 10^4$ . Para todas as medidas, foram realizadas médias entre 10 amostras de rede.

Em resumo, obtemos redes que tem distribuição de grau sem cauda pesada no caso monodisperso, que converge para uma distribuição com cauda pesada no limite  $r \gg 1$ , em que o expoente observado é compatível com o da rede Apoloniana.

#### 4.1.2 Coeficiente de agrupamento da rede

Para caracterizarmos o agrupamento das redes podemos calcular o coeficiente de agrupamento médio em função do grau dos nós da rede e calcularmos também o coeficiente de agrupamento médio total.

Assim, na Fig.4.5 apresentamos os resultados do coeficiente de agrupamento médio,  $C_k$ , em função do grau,  $k$ , para os três modelos. Podemos observar que o coeficiente de

agrupamento das redes cresce com o grau para  $r = 1$  nos três agregados e, com o aumento da razão, o decaimento passa a se comportar como uma lei de potência.

De acordo com Ravasz e Barabási [40], em estruturas hierárquicas o coeficiente de agrupamento médio em função do grau  $C_k$  segue uma lei de escala de modo que:

$$C(k) \sim k^{-1}. \quad (4.2)$$

Para verificar se esse é o caso dos modelos estudados plotamos nos gráficos da Fig.4.5, uma curva com expoente  $-1$ . Nestes gráficos observamos que à medida que a razão aumenta as curvas passam a tender cada vez mais a esse expoente  $-1$ .

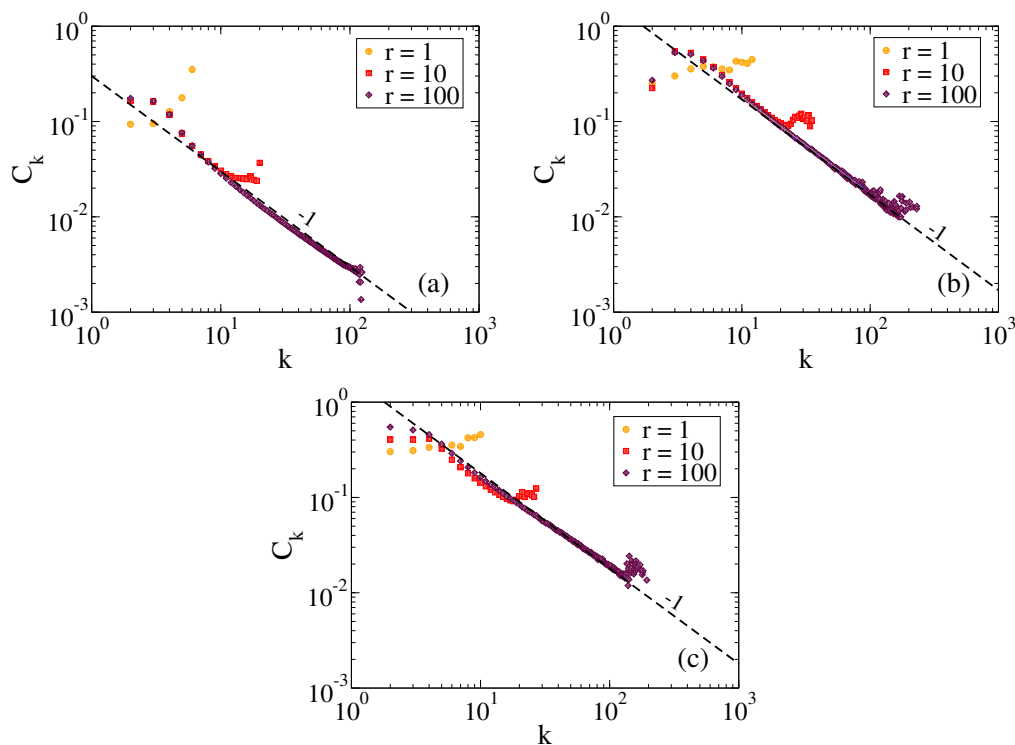


Figura 4.5: Coeficiente de agrupamento médio em função do grau dos nós para diferentes razões  $r = r_{\max}/r_{\min}$  indicados nas legendas para as redes geradas a partir dos modelos de (a) Eden (b) empacotamento aleatório de discos sem acomodação e (c) empacotamento aleatório de discos com acomodação. As linhas pontilhadas representam o decaimento  $k^{-1}$ , que é o decaimento de estruturas hierárquicas. Para os resultados do modelo de Eden, para  $r = 1$ ,  $r = 10$  e  $r = 100$ , foram obtidas redes com, respectivamente:  $L = 2048$  e  $\langle N \rangle \sim 8,7 \cdot 10^5$ ;  $L = 512$  e  $\langle N \rangle \sim 2,9 \cdot 10^5$ ;  $L = 256$ ;  $\langle N \rangle \sim 6,7 \cdot 10^5$ . Para o modelo de empacotamento aleatório sem acomodação, para  $r = 1$ ,  $r = 10$  e  $r = 100$ , foram obtidas redes com, respectivamente:  $L = 2048$  e  $\langle N \rangle \sim 6,7 \cdot 10^5$ ;  $L = 256$  e  $\langle N \rangle \sim 3,6 \cdot 10^5$ ;  $L = 16$  e  $\langle N \rangle \sim 7,1 \cdot 10^4$ . Para o modelo de empacotamento aleatório com acomodação, para  $r = 1$ ,  $r = 10$  e  $r = 100$ , foram obtidas redes com, respectivamente:  $L = 1024$  e  $\langle N \rangle \sim 2,1 \cdot 10^5$ ;  $L = 256$  e  $\langle N \rangle \sim 2,3 \cdot 10^5$ ;  $L = 32$  e  $\langle N \rangle \sim 9,7 \cdot 10^4$ . Para todas as medidas, foram realizadas médias entre 10 amostras de rede.

Verificamos também a dependência do coeficiente médio de agrupamento das redes

com o tamanho do sistema mostrado na Fig.4.6. Nos três modelos apresentados, podemos notar que, para uma mesma razão  $r$  o coeficiente de agrupamento não sofre alterações com o aumento do tamanho das redes, cujo valor médio é do mostrado na tabela 4.3, na qual podemos observar que o coeficiente de agrupamento tende a convergir para um mesmo valor com o aumento de  $r$ . Portanto, temos que o coeficiente de agrupamento dos últimos dois modelos é maior do que o do modelo de Eden, como observado na ilustração das Figs.4.1, 4.2 e 4.3. Comparando com as redes Apolonianas, todos esses modelos possuem um coeficiente de agrupamento inferior às mesmas, que é de aproximadamente 0.83, fato este é devido aos modelos de empacotamento aleatório serem desordenados enquanto que o modelo Apoloniano é uma estrutura determinística.

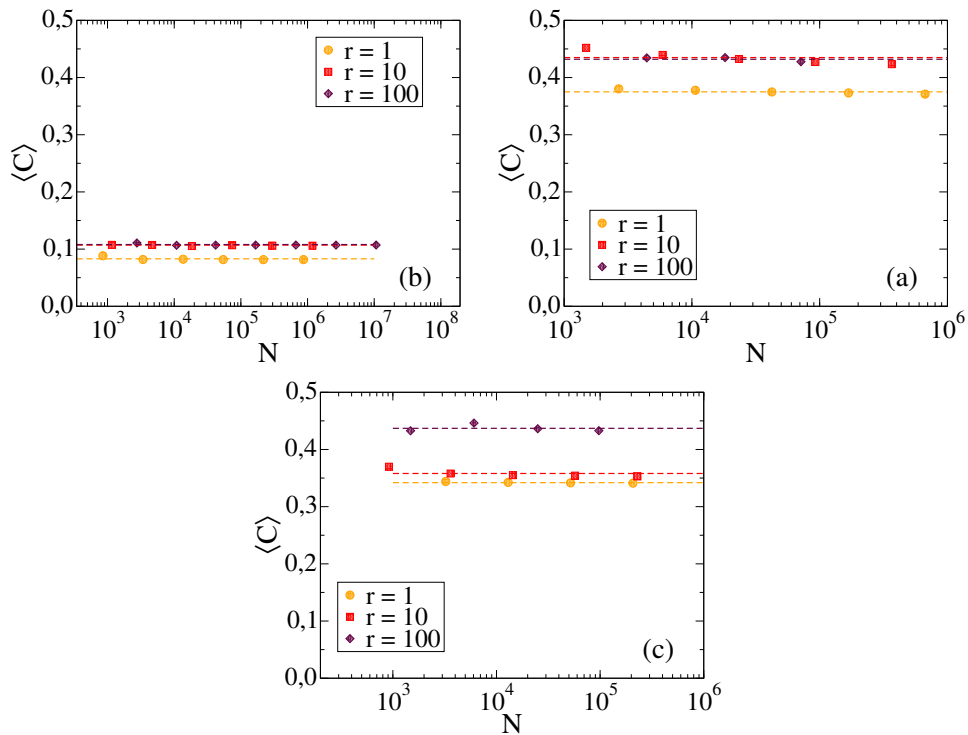


Figura 4.6: Coeficiente de agrupamento médio da rede em função do número de nós para diferentes razões  $r = r_{\max}/r_{\min}$  indicados nas legendas para as redes geradas a partir dos modelos de (a) Eden, empacotamento aleatório de discos (b) sem acomodação e (c) com acomodação. Para todos os resultados foram realizadas médias entre 10 amostras.

<b>r</b>	<b>Eden</b>	<b>EDSA</b>	<b>EDCA</b>
<b>1</b>	0.08	0.37	0.34
<b>10</b>	0.11	0.43	0.36
<b>100</b>	0.11	0.43	0.44

Tabela 4.3: Tabela com o coeficiente de agrupamento da rede médio para as redes obtidas a partir dos modelos de Eden, empacotamento aleatório de discos sem acomodação e empacotamento aleatório de discos com acomodação.

Assim, temos que tais redes se comportam como estruturas hierárquicas, comportamento este que é devido às regras de construção dos agregados. Nos agregados, partículas grandes são circundadas por partículas menores, que por sua vez são circundadas por partículas menores ainda, gerando assim estruturas hierárquicas. Além disso, o raio da partícula está diretamente associado ao seu grau, quanto maior a partícula, maior sua conectividade.

### 4.1.3 Correlação do grau

Para analisarmos como ocorrem as ligações entre os nós da rede podemos calcular a correlação de grau, a fim de verificarmos se a rede é associativa, desassociativa ou neutra, como descrito no capítulo 2.2. A partir das figuras mostradas para os agregados na primeira seção desse capítulo e como observado acima, para agregados polidispersos as partículas grandes estão rodeadas de partículas pequenas e, a partir das redes obtidas dessas estruturas, partículas pequenas geram nós de graus menores do que as partículas grandes. Diante disso, esperamos que as redes sejam mais desassociativas à medida que a razão  $r$  aumenta.

Para verificar se a previsão feita está correta, calculamos a correlação de grau para os modelos estudados. Na Fig.4.7 mostramos os gráficos da correlação de grau em função do grau dos nós para os modelos estudados. Para os três modelos estudados, temos que, para  $r = 1$  o gráfico possui um leve aumento da correlação do grau com o aumento do grau, sendo levemente associativa. Porém, com o aumento da razão  $r$  as curvas passam a ter um comportamento levemente desassociativo, tendendo a um comportamento neutro, que é mais suave para o de empacotamento aleatório de discos com acomodação, no qual a correlação do grau para  $r = 100$  possui um comportamento mais desassociativo do que os outros modelos.

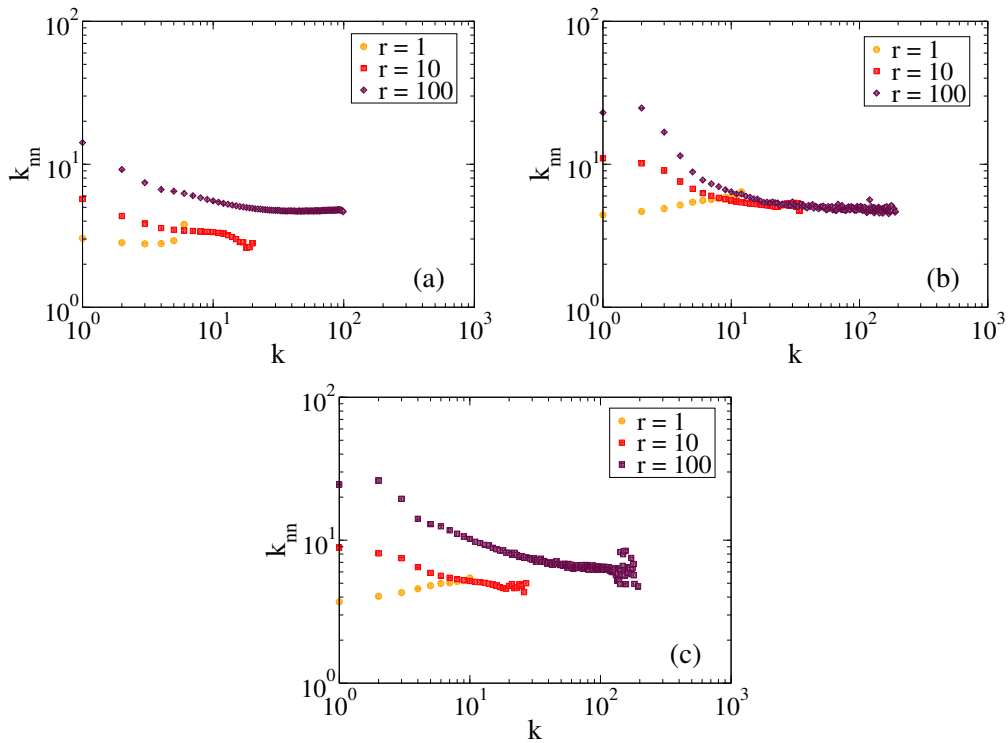


Figura 4.7: Correlação do grau médio em função do número de nós da rede para diferentes razões  $r = r_{\max}/r_{\min}$  indicados nas legendas para as redes geradas a partir dos modelos de (a) Eden (b) empacotamento aleatório de discos sem acomodação e (c) empacotamento aleatório de discos com acomodação. Para os resultados do modelo de Eden, para  $r = 1$ ,  $r = 10$  e  $r = 100$ , foram obtidas redes com, respectivamente:  $L = 2048$  e  $\langle N \rangle \sim 8,7 \cdot 10^5$ ;  $L = 512$  e  $\langle N \rangle \sim 2,9 \cdot 10^5$ ;  $L = 256$ ;  $\langle N \rangle \sim 6,7 \cdot 10^5$ . Para o modelo de empacotamento aleatório sem acomodação, para  $r = 1$ ,  $r = 10$  e  $r = 100$ , foram obtidas redes com, respectivamente:  $L = 2048$  e  $\langle N \rangle \sim 6,7 \cdot 10^5$ ;  $L = 256$  e  $\langle N \rangle \sim 3,6 \cdot 10^5$ ;  $L = 16$  e  $\langle N \rangle \sim 7,1 \cdot 10^4$ . Para o modelo de empacotamento aleatório com acomodação, para  $r = 1$ ,  $r = 10$  e  $r = 100$ , foram obtidas redes com, respectivamente:  $L = 1024$  e  $\langle N \rangle \sim 2,1 \cdot 10^5$ ;  $L = 256$  e  $\langle N \rangle \sim 2,3 \cdot 10^5$ ;  $L = 32$  e  $\langle N \rangle \sim 9,7 \cdot 10^4$ . Para todas as medidas, foram realizadas médias entre 10 amostras de rede.

De modo geral, para  $r = 1$  observamos um comportamento associativo. Com o aumento da razão, passamos a observar um padrão desassociativo nas curvas para os nós de grau baixo, curvas estas que passam a tender a um comportamento neutro com o aumento do grau. Tal comportamento pode ser explicado pela maneira que os agregados são formados, em que os nós altamente conectados são equivalentes às partículas com raios maiores, as quais tendem a ter conexões com partículas menores e menos conectadas, como podemos ver nas Figs. 4.1, 4.2 e 4.3.

#### 4.1.4 Menor caminho médio

A fim de calcular e comparar as dimensões das redes estudadas utilizamos o menor caminho médio para distâncias topológicas e euclidianas. Na Fig.4.8 mostramos os gráficos para os três modelos. Como tais resultados foram obtidos a partir da média entre amostras,

apresentamos também as barras de erro dos menores caminhos médios e do número de nós da rede. Além disso, destacamos os expoentes em leis de potência para as curvas a fim de obter as dimensões topológica e euclidiana do sistema. Uma vez que  $\langle l_{\text{qui}} \rangle \sim N^{1/d_t}$ , em que  $d_t$  é a dimensão topológica [32]. E, para a distância euclidiana,  $\langle l_{\text{euc}} \rangle \sim N^{1/d}$ , sendo  $d$  a dimensão euclidiana da rede. Se  $d_t = d$ , onde  $d$  é a dimensão euclidiana, temos um grafo planar convencional.

Em redes que possuem efeito de mundo pequeno nós temos que o menor caminho médio calculado com o uso da distância topológica segue a seguinte relação [20, 41]:

$$\langle l_{\text{qui}} \rangle \sim \ln N. \quad (4.3)$$

Este efeito pode ser observado, por exemplo, nas redes Apolonianas, nas quais  $\langle l_{\text{qui}} \rangle \propto (\ln N)^{3/4}$ .

Analisando os gráficos de  $\langle l_{\text{qui}} \rangle$  em função de  $N$ , que fornece a dimensão topológica, verificamos que as curvas dos três modelos seguem uma lei de potência com expoentes indicados na Fig.4.8. Neste gráfico, para  $r = 100$  consideramos apenas os três últimos pontos, pois o começo da curva não segue o mesmo expoente. Assim, para as razões e tamanhos de redes analisadas, as redes para  $r = 1$  são redes euclidianas, contudo, com o aumento da razão estas redes não apresentam assinaturas de mundo pequeno, com dimensão topológica diferente da euclidiana  $d = 2$ , porém, esperamos que para  $r \rightarrow \infty$  estas redes passem a apresentar assinaturas de mundo pequeno, que corresponde ao limite das redes Apolonianas.

Para os gráficos de  $\langle l_{\text{euc}} \rangle$  em função de  $N$  podemos encontrar a dimensão do sistema, já que  $\langle l_{\text{euc}} \rangle \sim N^{1/d}$ . Como as redes estudadas são planares, esperamos que o expoente dessas curvas sejam  $1/d \approx 0.5$ , como verificado na Fig.4.8(b), para todos os modelos e razões.

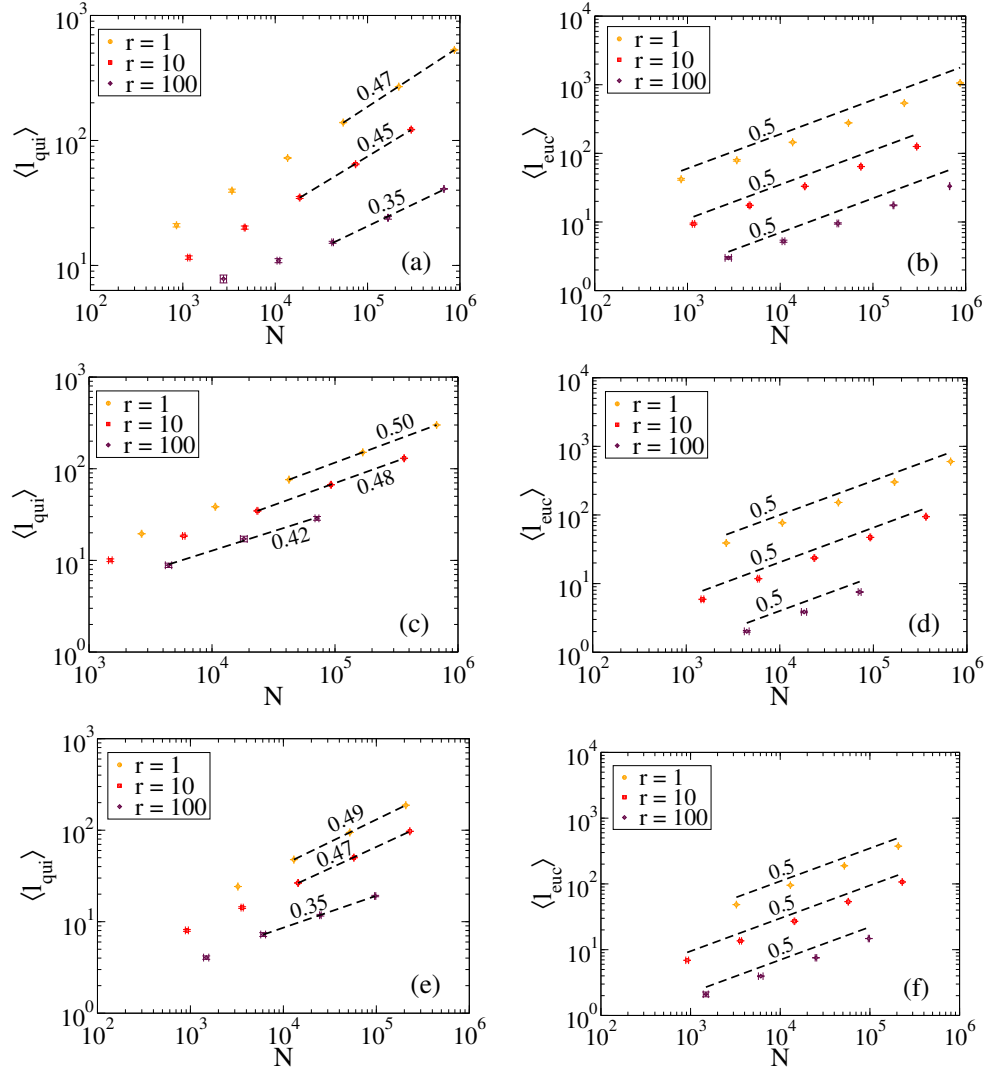


Figura 4.8: Menor caminho médio em função do número de partículas para diferentes razões  $r = r_{\max}/r_{\min}$  indicados nas legendas com distâncias topológica e euclidiana para os diferentes modelos: (a,b) Eden, (c,d) empacotamento aleatório sem acomodação e (e,f) com acomodação. Todos os resultados foram obtidos a partir da média entre 10 amostras.

## 4.2 Efeitos de desordem

Nesta seção discutiremos sobre a desordem das redes obtidas a partir dos modelos propostos. Em tais sistemas, verificamos os efeitos de desordem com o uso do modelo SIS, o qual possui expoente de correlação para o sistema limpo  $\nu_{\perp} = 0.733(4)$  para um sistema bidimensional [28]. A partir do critério de Harris-Luck, para o modelo SIS em duas dimensões temos que:

$$\omega_c = 1 - \frac{1}{d\nu_{\perp}} \approx 0.318. \quad (4.4)$$

Assim, se  $\omega > 0.318$  o critério estabelece que a desordem do sistema seja relevante.

Diante disso, separamos essa seção em duas partes, na primeira delas calculamos o expoente de *wandering* para as redes geradas, e na segunda apresentamos os resultados obtidos para as simulações do modelo SIS nessas redes a fim de verificar se o critério de Harris-Luck é satisfeito.

### 4.2.1 Flutuação do grau

Utilizando o método descrito na Seção 2.3.1, podemos calcular a flutuação do grau para regiões de tamanho  $\varepsilon_b$ . Assim, considerando as redes geradas a partir dos modelos investigados, calculamos a flutuação do grau, em função do tamanho  $\varepsilon_b$ , Fig.4.9. Estamos interessados apenas no regime assintótico em que:

$$\sigma_k \sim \varepsilon_b^{-d(1-\omega)} \quad (4.5)$$

sendo  $d$  a dimensão euclidiana do sistema.

Considerando que os agregados utilizados para a construção das redes estão embebidos no espaço bidimensional, temos que  $d = 2$ . Podemos comparar o decaimento com o expoente crítico  $\omega_c \approx 0.32$  para a classe de percolação dirigida em 2 dimensões e com o expoente de *wandering* para redes com desordem descorrelacionada, dado por  $\omega = 0.5$ , obtendo assim expoentes de decaimento de  $d(1 - \omega_c) = 1.36$  e  $d(1 - \omega) = 1.0$ , respectivamente.

Para  $r = 1$  e  $r = 10$  nos três modelos obtemos que o expoente de decaimento é próximo de 1, que implica que  $\omega \approx 1/2 > \omega_c$ , com isso, esperamos que a desordem para esses casos seja relevante. Para  $r = 100$  nos primeiro modelo temos que o expoente de decaimento também é de aproximadamente 1, assim  $\omega > \omega_c$ , porém, para os dois últimos modelos o comportamento da curva não alcançou o limite assintótico, sendo necessário realizar análises com redes maiores.

Considerando a extensão do critério de Harris-Luck proposta por Barghathi-Vojta, calculamos a diferença  $\langle k \rangle_\mu - \langle k \rangle$  em função do aumento do tamanho das regiões para  $r = 1$  e  $r = 100$  considerando o modelo de Eden. Não consideramos os outros modelos, pois, os expoentes de todos os modelos tendem ao mesmo valor para a mesma razão  $r$ . Verificamos que  $\langle k \rangle_\mu$  tende assintoticamente a  $\langle k \rangle$  mais rápido do que as redes de Voronoi, as quais possuem expoente de decaimento 1. Para a modificação na flutuação de grau proposta por Barghathi e Vojta, comparamos com a flutuação de grau sem essa alteração e verificamos que, para  $\varepsilon_b/r_{\min}$  não muito grande que os gráficos coincidem, tendendo ao mesmo expoente de decaimento, logo, o expoente de *wandering* é o mesmo independente das formas que é calculado. No restante da análise vamos considerar apenas a forma padrão, sem a correção de Barghathi e Vojta.

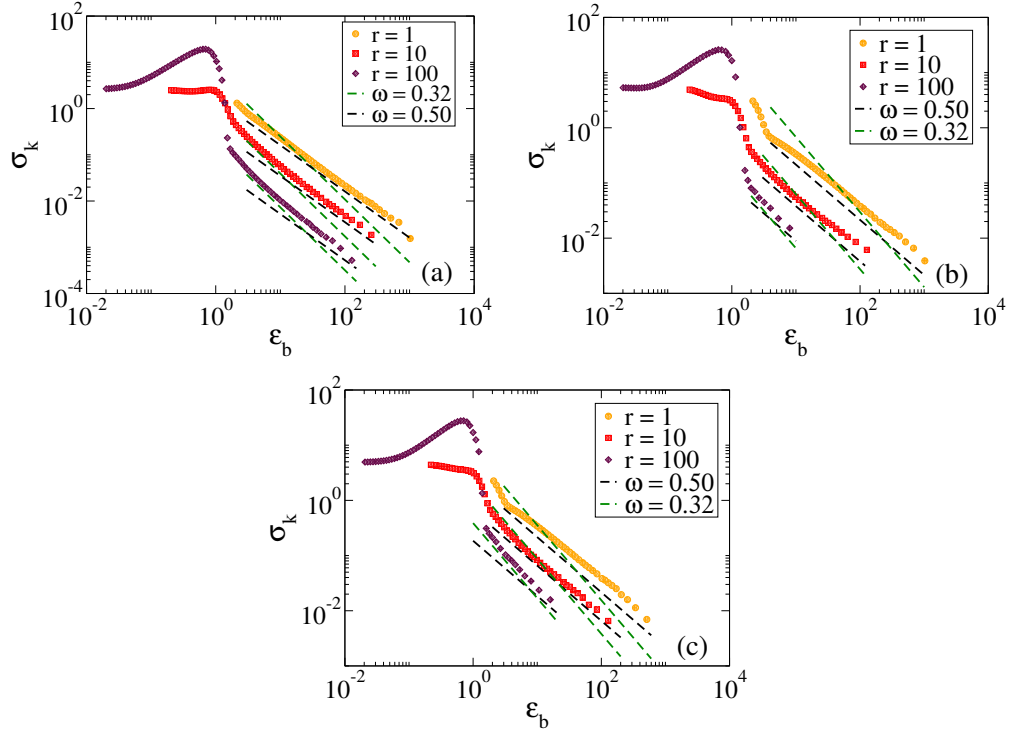


Figura 4.9: Flutuação do grau para diferentes valores de  $\varepsilon_b$  e para diferentes razões  $r = r_{\max}/r_{\min}$  indicados nas legendas para as redes obtidas a partir dos modelos de (a) Eden (b) empacotamento aleatório de discos sem acomodação e (c) empacotamento aleatório de discos com acomodação. No gráfico, as linhas pontilhadas representam expoentes de decaimento para  $\sigma_k$ , obtidas a partir de  $-d(1 - \omega)$  com  $\omega = 0.5$  (curva preta) e  $\omega = 0.32$  (curva verde), que representam o expoente de redes com desordem completamente descorrelacionada e o expoente crítico para modelos da classe de percolação dirigida, respectivamente. Para os resultados do modelo de Eden, para  $r = 1$ ,  $r = 10$  e  $r = 100$ , foram obtidas redes com, respectivamente:  $L = 2048$  e  $\langle N \rangle \sim 8,7 \cdot 10^5$ ;  $L = 512$  e  $\langle N \rangle \sim 2,9 \cdot 10^5$ ;  $L = 256$ ;  $\langle N \rangle \sim 6,7 \cdot 10^5$ . Para o modelo de empacotamento aleatório sem acomodação, para  $r = 1$ ,  $r = 10$  e  $r = 100$ , foram obtidas redes com, respectivamente:  $L = 2048$  e  $\langle N \rangle \sim 6,7 \cdot 10^5$ ;  $L = 256$  e  $\langle N \rangle \sim 3,6 \cdot 10^5$ ;  $L = 16$  e  $\langle N \rangle \sim 7,1 \cdot 10^4$ . Para o modelo de empacotamento aleatório com acomodação, para  $r = 1$ ,  $r = 10$  e  $r = 100$ , foram obtidas redes com, respectivamente:  $L = 1024$  e  $\langle N \rangle \sim 2,1 \cdot 10^5$ ;  $L = 256$  e  $\langle N \rangle \sim 2,3 \cdot 10^5$ ;  $L = 32$  e  $\langle N \rangle \sim 9,7 \cdot 10^4$ . Para todas as medidas, foram realizadas médias entre 10 amostras de rede.

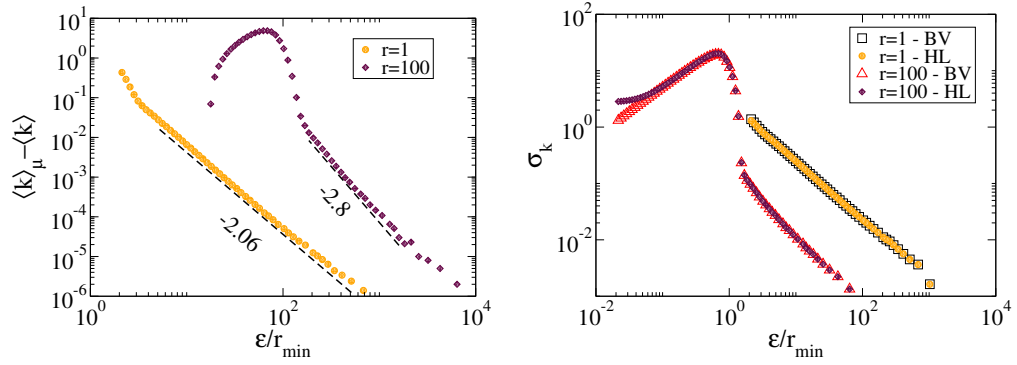


Figura 4.10: (a) Curva para  $\langle k \rangle_\mu - \langle k \rangle$  para  $r = 1$  e  $r = 100$  para o modelo de Eden. Linha com o expoente de decaimento para cada uma das curvas. (b) Flutuação de grau calculada considerando a flutuação de grau para Barghathi e Vojta (BV) e para Harris-Luck (HL) para  $r = 1$  e  $r = 100$  para o modelo de Eden. Para  $r = 1$  e  $r = 100$ , foram obtidas redes com, respectivamente:  $L = 2048$  e  $\langle N \rangle \sim 8,7 \cdot 10^5$ ;  $\langle N \rangle \sim 6,7 \cdot 10^5$ . Resultados obtidos a partir da média de 10 redes.

### 4.2.2 Modelo SIS: Suscetível-Infetado-Suscetível

Para as redes estudadas analisamos o expoente de *wandering*, o qual apresenta um valor maior do que  $\omega_c \approx 0.318$  para todos os modelos e razões. Por isso, o critério de Harris-Luck indica que a transição de fase do modelo SIS, que pertence à classe de percolação dirigida, nessas redes deve apresentar alguma característica de desordem relevante.

Para analisarmos os efeitos da desordem nas redes, realizamos simulações de decaimento da densidade de infectados utilizando o modelo SIS. Inicialmente, todos os nós da rede foram configurados no estado infectado. Em seguida, verificamos se a dinâmica da densidade de infectados,  $\rho$ , em função da taxa de infectados,  $\lambda$ , alcança o estado absorvente ou atinge o regime estacionário (para tempos grandes), além de analisar o comportamento da curva de decaimento na região crítica. A partir do comportamento das curvas de  $\rho$  para valores de  $\lambda$  próximo à região crítica,  $\lambda_c$ , podemos verificar se a criticalidade apresenta alguma diferença em relação a redes com desordem irrelevante.

Na Fig.4.11, apresentamos a evolução temporal da densidade de nós infectados ( $\rho$ ) para diferentes valores de  $\lambda$  para as razões  $r = 1, 10$  e  $100$  obtidas a partir das redes extraídas do modelo de Eden. Para tais resultados, foram realizadas 100 medidas para cada uma das 10 redes. Obtivemos que a transição de fase possui ponto crítico de  $\lambda_c = 0.817 \pm 0.003$ ,  $0.4925 \pm 0.075$  e  $0.210 \pm 0.005$ , respectivamente. Em todos os casos observamos que o expoente de decaimento da região da transição de fase segue o expoente da classe de universalidade de percolação dirigida, que é de aproximadamente  $\alpha \approx 0.45$  e a região de criticalidade não é estendida, ou seja, não observamos nenhum efeito da desordem relevante para essas redes.

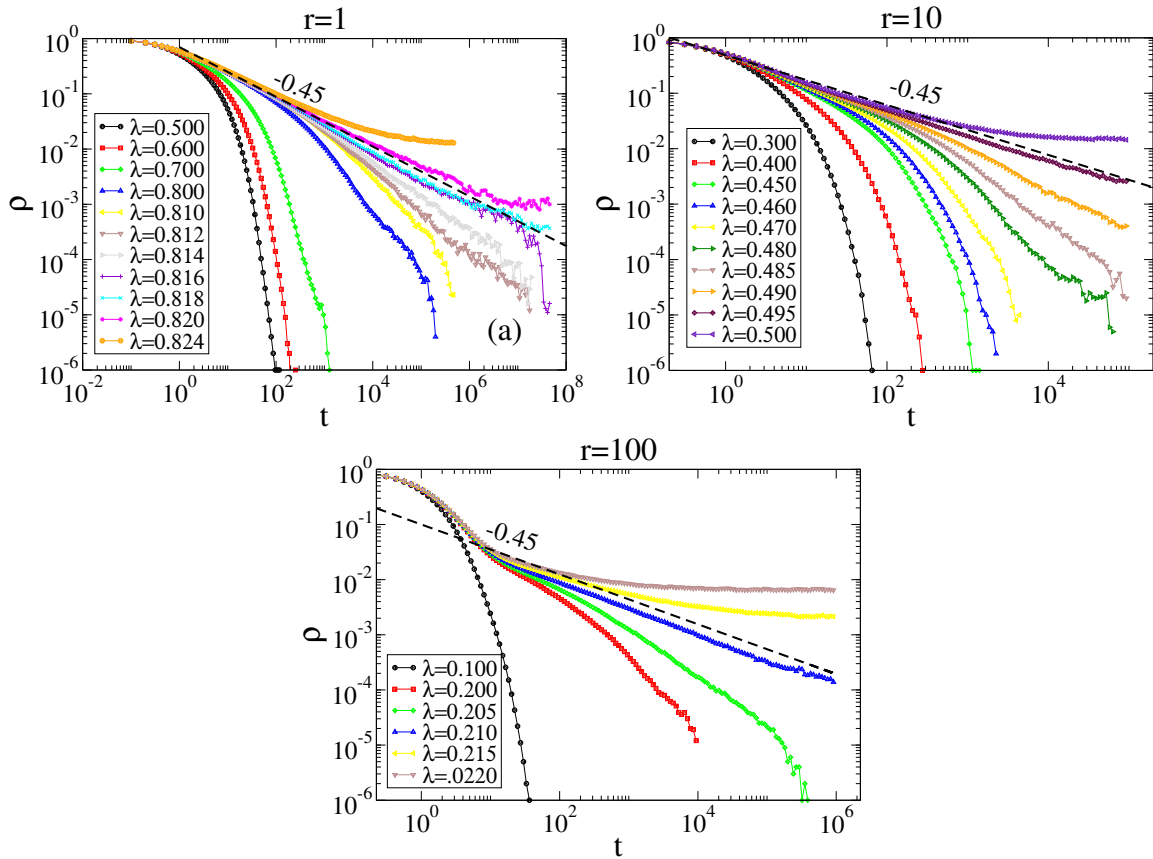


Figura 4.11: Propagação de uma epidemia com o uso do modelo SIS nas redes geradas com o uso do modelo de Eden para as razões, tamanhos e número médio de nós por amostra:  $r = 1$ ,  $L = 1024$  e  $\langle N \rangle \approx 2.2 \times 10^5$ ;  $r = 10$ ,  $L = 256$  e  $\langle N \rangle \approx 3.0 \times 10^5$ ;  $r = 100$ ,  $L = 128$  e  $\langle N \rangle \approx 1.9 \times 10^6$ . Comparamos o decaimento próximo à região crítica com o expoente  $-0.45$ , sendo o expoente crítico para o decaimento na classe de percolação dirigida. Foram realizadas as médias de 1000 medidas de decaimento, com 100 medidas de decaimento para cada uma das 10 redes utilizadas.

Na Fig.4.12 mostramos a evolução temporal da densidade de nós infectados ( $\rho$ ) para diferentes valores de  $\lambda$  para as razões  $r = 1, 10$ , e  $100$  para as redes geradas do modelo de empacotamento aleatório de discos sem acomodação. Agora, obtivemos para:  $r = 1$  temos que  $\lambda_c = 0.307 \pm 0.002$ , para  $r = 10$  temos que  $\lambda_c = 0.246 \pm 0.007$  e, para  $r = 100$  temos que  $\lambda_c = 0.165 \pm 0.015$ . Novamente, em tais resultados não foram observadas mudanças na criticalidade.

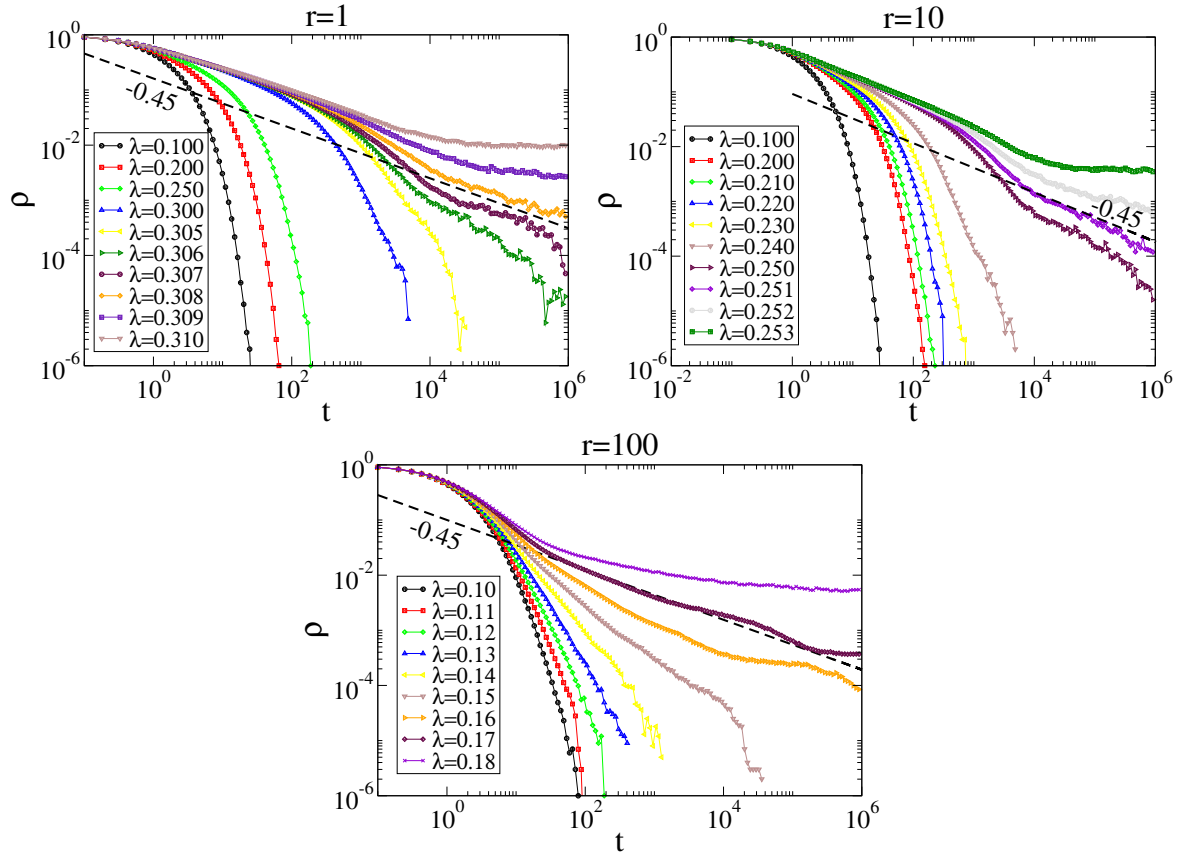


Figura 4.12: Propagação de uma epidemia com o uso do modelo SIS nas redes geradas com o uso do modelo de empacotamento aleatório de discos sem acomodação para as razões, tamanhos e número médio de nós por amostra:  $r = 1$ ,  $L = 1024$  e  $\langle N \rangle \approx 1.7 \times 10^5$ ;  $r = 10$ ,  $L = 256$  e  $\langle N \rangle \approx 3.6 \times 10^5$ ;  $r = 100$ ,  $L = 16$  e  $\langle N \rangle \approx 7.1 \times 10^4$ . Comparamos o decaimento próximo à região crítica com o expoente  $-0.45$ , sendo o expoente crítico para o decaimento na classe de percolação dirigida. Foram realizadas as médias de 1000 medidas de decaimento, com 100 medidas de decaimento para cada uma das 10 redes utilizadas.

Propagação de uma epidemia com o uso do modelo SIS nas redes geradas com o uso do modelo de empacotamento aleatório de discos sem acomodação para as razões, tamanhos e número médio de nós por amostra:  $r = 1$ ,  $L = 1024$  e  $\langle N \rangle \approx 1.7 \times 10^5$ ;  $r = 10$ ,  $L = 256$  e  $\langle N \rangle \approx 3.6 \times 10^5$ ;  $r = 100$ ,  $L = 16$  e  $\langle N \rangle \approx 7.1 \times 10^4$ .

Por último, na Fig.4.13 apresentamos a evolução temporal da densidade de infectados para diferentes valores de  $\lambda$  para as razões  $r = 1$ ,  $10$ , e  $100$  para as redes geradas com o uso do modelo de empacotamento aleatório de discos com acomodação. A partir dos gráficos, obtemos  $\lambda_c = 0.379 \pm 0.002$ ,  $\lambda_c = 0.275 \pm 0.001$  e  $\lambda_c = 0.136 \pm 0.003$ , respectivamente. Novamente, não foram observadas assinaturas de criticalidade na transição de fase.

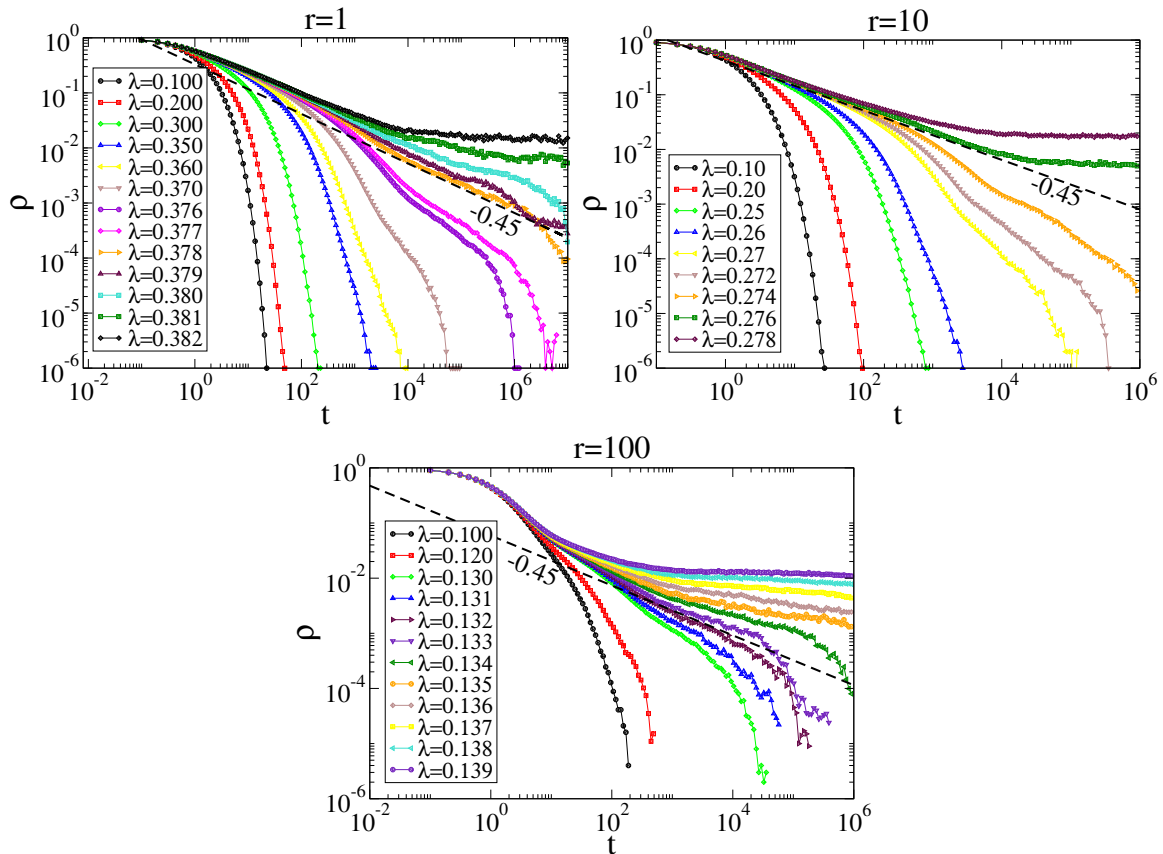


Figura 4.13: Propagação de uma epidemia com o uso do modelo SIS nas redes geradas com o uso do modelo de empacotamento aleatório de discos com acomodação para as razões, tamanhos e número médio de nós por amostra:  $r = 1$ ,  $L = 2048$  e  $\langle N \rangle \approx 2.1 \times 10^5$ ;  $r = 10$ ,  $L = 256$  e  $\langle N \rangle \approx 2.3 \times 10^5$ ;  $r = 100$ ,  $L = 32$ ,  $\langle N \rangle \approx 9.7 \times 10^4$ . Comparamos o decaimento próximo à região crítica com o expoente  $-0.45$ , sendo o expoente crítico para o decaimento na classe de percolação dirigida. Foram realizadas as médias de 1000 medidas de decaimento, com 100 medidas de decaimento para cada uma das 10 redes utilizadas.

Propagação de uma epidemia com o uso do modelo SIS nas redes geradas com o uso do modelo de empacotamento aleatório de discos com acomodação para as razões, tamanhos e número médio de nós por amostra:  $r = 1$ ,  $L = 2048$  e  $\langle N \rangle \approx 2.1 \times 10^5$ ;  $r = 10$ ,  $L = 256$  e  $\langle N \rangle \approx 2.3 \times 10^5$ ;  $r = 100$ ,  $L = 32$ ,  $\langle N \rangle \approx 9.7 \times 10^4$ .

Nos gráficos apresentados nessa seção para os modelos de empacotamento aleatório de discos sem e com acomodação, observamos que, para alguns valores de  $\lambda$  as curvas de  $\rho$  apresentam oscilações, fenômeno este que não foi observado para o modelo de Eden. Estas oscilações, podem ocorrer em decorrência do tamanho dos sistemas, podendo ser um efeito de redes pequenas, onde regiões raras podem levar a mudanças na criticalidade [42]. Para isso, para estes modelos, são necessárias análises com redes maiores.

Para os três modelos estudados não foram observadas alterações na criticalidade da transição de fase, quando comparada com resultados para sistemas com desordem irrelevante. Como sugerido pelo critério de Harris-Luck, a desordem desses sistemas deveriam ser relevantes, com isso, tais sistemas apresentam desacordo com tal critério.

# Capítulo V

## Conclusões e Perspectivas

A investigação de agregados formados a partir de estruturas esféricas possui grande relevância na física da matéria condensada e ciências dos materiais [14]. A partir de modelagens matemáticas e computacionais, podemos melhorar a compreensão sobre tais estruturas e caracterizá-las.

Com isso, no capítulo III apresentamos os três modelos de empacotamento de discos, o modelo de Eden fora de rede, modelo de empacotamento aleatório de discos sem acomodação e modelo de empacotamento de discos aleatório com acomodação. Para tais modelos estudamos agregados polidispersos com partículas de raio aleatório dentro do intervalo  $(r_{\min}, r_{\max})$ . No capítulo IV apresentamos os resultados obtidos a partir da caracterização de tais agregados utilizando as métricas de teoria de grafos descritas na seção 2.2.

Os resultados obtidos para tais modelos podem ser comparados com os resultados encontrados na literatura para as redes Apolonianas. Sendo assim, para os três modelos estudados, considerando a razão  $r = r_{\max}/r_{\min}$ , temos que, à medida que a razão  $r \gg 1$  temos que: a cauda da distribuição de grau torna-se pesada, apresentando comportamento assintótico que tende ao expoente de decaimento 2.6; as redes passam a se comportar como estruturas hierárquicas,  $C(k) \sim k^{-1}$  e tornam-se desassociativas; o expoente da inclinação do menor caminho médio em função do tamanho da rede reduz. Comparando com as redes Apolonianas, a principal diferença entre essas redes é o menor caminho médio, já que as redes Apolonianas possuem assinatura de mundo pequeno, com o menor caminho médio escalando sub-logaritmicamente com o aumento da rede. Esperamos que no limite  $r \rightarrow \infty$  que essas redes apresentem o mesmo comportamento.

Na física, podemos tratar dos mais diversos sistemas utilizando o mesmo ferramental. Desordem em estruturas podem ser estudadas a partir de teorias desenvolvidas para o estudo de spins em sistemas magnéticos [3, 6, 7]. E, é a partir dessas relações que podemos levar a discussão sobre desordem utilizando o critério de Harris-Luck na presente dissertação, critério este que foi apresentado na seção 2.3. Estudamos os efeitos de desordem produzidos no sistema devido às flutuações do grau das redes. Pelo critério de Harris-Luck temos que  $\sigma_k \sim \varepsilon_b^{-d(1-\omega)}$ , onde o expoente de *wandering* possui valor crítico dado por  $\omega_c$  e, quando

esse valor é excedido, a desordem deve ser relevante. Dado que verificamos os efeitos de desordem nos sistemas a partir do modelo SIS, para esse modelo em duas dimensões temos que  $\omega_c \approx 0.318$ . Pelo decaimento da flutuação de grau observada no capítulo IV, obtivemos que a desordem do sistema deveria ser relevante. No entanto, os resultados obtidos para as simulações do modelo SIS nas redes não apresentaram assinaturas de mudanças na criticalidade, ou seja, tais redes estão em desacordo para o critério de Harris-Luck.

Devido aos resultados obtidos, temos como perspectiva descobrir qual parâmetro deveria ser levado em conta para classificarmos a desordem dessas estruturas e escrever um artigo científico com os resultados obtidos.

# Referências Bibliográficas

- [1] T. Vojta, “Rare region effects at classical, quantum and nonequilibrium phase transitions,” *Journal of Physics A: Mathematical and General*, vol. 39, pp. R143–R205, may 2006.
- [2] R. Albert and A.-L. Barabási, “Statistical mechanics of complex networks,” *Reviews of modern physics*, vol. 74, no. 1, p. 47, 2002.
- [3] J. Luck, “A classification of critical phenomena on quasi-crystals and other aperiodic structures,” *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 24, no. 5, p. 359, 1993.
- [4] H. Barghathi and T. Vojta, “Phase transitions on random lattices: How random is topological disorder?,” *Physical review letters*, vol. 113, no. 12, p. 120602, 2014.
- [5] T. Vojta, J. Igo, and J. A. Hoyos, “Rare regions and griffiths singularities at a clean critical point: The five-dimensional disordered contact process,” *Physical Review E*, vol. 90, no. 1, p. 012139, 2014.
- [6] A. B. Harris, “Effect of random defects on the critical behaviour of ising models,” *Journal of Physics C: Solid State Physics*, vol. 7, p. 1671, may 1974.
- [7] M. M. de Oliveira, S. G. Alves, S. C. Ferreira, and R. Dickman, “Contact process on a voronoi triangulation,” *Phys. Rev. E*, vol. 78, p. 031133, Sep 2008.
- [8] M. M. de Oliveira, S. G. Alves, and S. C. Ferreira, “Continuous and discontinuous absorbing-state phase transitions on voronoi-delaunay random lattices,” *Phys. Rev. E*, vol. 93, p. 012110, Jan 2016.
- [9] A. Okabe, B. Boots, K. Sugihara, and S. N. Chiu, “Spatial tessellations: concepts and applications of voronoi diagrams,” 2009.
- [10] W. Janke and M. Weigel, “Harris-luck criterion for random lattices,” *Phys. Rev. B*, vol. 69, p. 144208, Apr 2004.
- [11] S. H. Simon, *The Oxford solid state basics*. OUP Oxford, 2013.

- 
- [12] M. Schrauth, J. S. Portela, and F. Goth, “Violation of the harris-barghathi-vojtta criterion,” *Physical Review Letters*, vol. 121, no. 10, p. 100601, 2018.
- [13] P. V. Martín, J. A. Bonachela, and M. A. Munoz, “Quenched disorder forbids discontinuous transitions in nonequilibrium low-dimensional systems,” *Physical Review E*, vol. 89, no. 1, p. 012145, 2014.
- [14] S. Torquato, “Perspective: Basic understanding of condensed phases of matter via packing models,” *The Journal of chemical physics*, vol. 149, no. 2, 2018.
- [15] M. Eden, “A two-dimensional growth process,” *Dynamics of fractal surfaces*, vol. 4, pp. 223–239, 1961.
- [16] K. A. Takeuchi, “Statistics of circular interface fluctuations in an off-lattice eden model,” *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, vol. 2012, p. P05007, may 2012.
- [17] S. Torquato and F. H. Stillinger, “Jammed hard-particle packings: From kepler to bernal and beyond,” *Reviews of modern physics*, vol. 82, no. 3, pp. 2633–2672, 2010.
- [18] R. S. Farr and R. D. Groot, “Close packing density of polydisperse hard spheres,” *The Journal of chemical physics*, vol. 131, no. 24, 2009.
- [19] S. S. Manna and D. Dhar, “Fractal dimension of backbone of eden trees,” *Phys. Rev. E*, vol. 54, pp. R3063–R3066, Oct 1996.
- [20] A.-L. Barabási and M. Pósfai, *Network science*. Cambridge: Cambridge University Press, 2016.
- [21] A.-L. Barabási and H. E. Stanley, *Fractal Concepts in Surface Growth*. Cambridge University Press, 1995.
- [22] A. Y. Cherny, E. M. Anitas, and V. A. Osipov, “Dense random packing with a power-law size distribution: The structure factor, mass–radius relation, and pair distribution function,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 158, no. 4, 2023.
- [23] J. S. Andrade, H. J. Herrmann, R. F. S. Andrade, and L. R. da Silva, “Apollonian networks: Simultaneously scale-free, small world, euclidean, space filling, and with matching graphs,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 94, p. 018702, Jan 2005.
- [24] J. P. Doye and C. P. Massen, “Self-similar disk packings as model spatial scale-free networks,” *Physical Review E*, vol. 71, no. 1, p. 016128, 2005.
- [25] Z. Zhang, L. Rong, and F. Comellas, “High-dimensional random apollonian networks,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 364, pp. 610–618, 2006.

- [26] J. S. Andrade, H. J. Herrmann, R. F. S. Andrade, and L. R. da Silva, “Apollonian networks: Simultaneously scale-free, small world, euclidean, space filling, and with matching graphs,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 94, p. 018702, Jan 2005.
- [27] A. Bruen, J. Fisher, and J. Wilker, “Apollonius by inversion,” *Mathematics Magazine*, vol. 56, no. 2, pp. 97–103, 1983.
- [28] J. Marro and R. Dickman, “Nonequilibrium phase transitions in lattice models,” *Nonequilibrium Phase Transitions in Lattice Models*, 2005.
- [29] P. Meakin, *Fractals, scaling and growth far from equilibrium*, vol. 5. Cambridge university press, 1998.
- [30] A. Amon, P. Born, K. E. Daniels, J. A. Dijkstra, K. Huang, D. Parker, M. Schröter, R. Stannarius, and A. Wierschem, “Preface: Focus on imaging methods in granular physics,” *Review of Scientific Instruments*, vol. 88, no. 5, 2017.
- [31] D. Benamara, B. Mezghiche, and M. F. Zohra, “The deformability of a high performance concrete (hpc),” *Physics Procedia*, vol. 55, pp. 342–347, 2014. 8th International Conference on Material Sciences, CSM8-ISM5.
- [32] M. T. Gastner and G. Ódor, “The topology of large open connectome networks for the human brain,” *Scientific reports*, vol. 6, no. 1, p. 27249, 2016.
- [33] M. Barthelemy, *Morphogenesis of spatial networks*. Springer, 2018.
- [34] M. A. Sanjuán, “Nonequilibrium statistical physics: a modern perspective,” 2018.
- [35] R. B. Griffiths, “Nonanalytic behavior above the critical point in a random ising ferromagnet,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 23, pp. 17–19, Jul 1969.
- [36] S. G. Alves, T. J. Oliveira, and S. C. Ferreira, “Universal fluctuations in radial growth models belonging to the KPZ universality class,” *EPL (Europhysics Lett.)*, vol. 96, p. 48003, nov 2011.
- [37] S. Alves, S. Ferreira Jr, and M. Martins, “Strategies for optimize off-lattice aggregate simulations,” *Brazilian Journal of Physics*, vol. 38, pp. 81–86, 2008.
- [38] W. Cota and S. C. Ferreira, “Optimized gillespie algorithms for the simulation of markovian epidemic processes on large and heterogeneous networks,” *Computer Physics Communications*, vol. 219, pp. 303–312, 2017.
- [39] R. Dickman, “Reweighting in nonequilibrium simulations,” *Phys. Rev. E*, vol. 60, pp. R2441–R2444, Sep 1999.

- [40] E. Ravasz and A.-L. Barabási, “Hierarchical organization in complex networks,” *Phys. Rev. E*, vol. 67, p. 026112, Feb 2003.
- [41] D. J. Watts and S. H. Strogatz, “Collective dynamics of ‘small-world’ networks,” *nature*, vol. 393, no. 6684, pp. 440–442, 1998.
- [42] W. Cota, S. C. Ferreira, and G. Ódor, “Griffiths effects of the susceptible-infected-susceptible epidemic model on random power-law networks,” *Physical review E*, vol. 93, no. 3, p. 032322, 2016.

# Apêndice A

## Definição das redes de contato

Neste apêndice discutiremos os critérios considerados para a construção das redes a partir dos agregados. A fim de obter redes sem nós de grau zero ou elementos da rede que não estejam conectados com os demais, Fig.A.1, utilizamos diferentes tolerâncias de separação para cada modelo e razão.

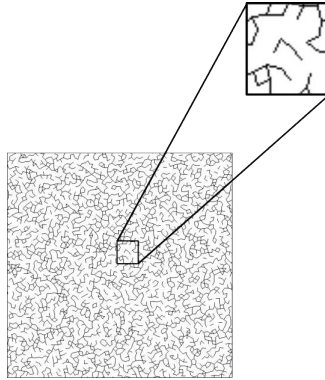


Figura A.1: Exemplo de rede com elementos desconectados dos demais.

Para o modelo de Eden, a construção da rede foi feita utilizando uma de separação permitida de  $\Delta_{\text{sep}} = r_{\text{min}}/10$ , pois, pela forma que o agregado é construído, não precisamos de uma tolerância alta para construir uma rede que satisfaça aos requisitos.

Com o modelo de empacotamento aleatório de discos sem acomodação foi necessário realizarmos testes com diferentes separações,  $\Delta_{\text{sep}} = s/r$ , para obtermos a tolerância para a separação que satisfaz aos critérios. Na Fig.A.2 podemos observar que o final da cauda não sofre grandes alterações para as separações analisadas, apresentando, no entanto, um efeito significativo para os nós de grau baixo, podendo inclusive desaparecer com nós de grau zero. Deste modo, a fim de impedir que existam nós de grau zero, adotamos  $s = 1.5$  para  $r = 1$ ,  $s = 1.7$  para  $r = 10$  e  $100$ .

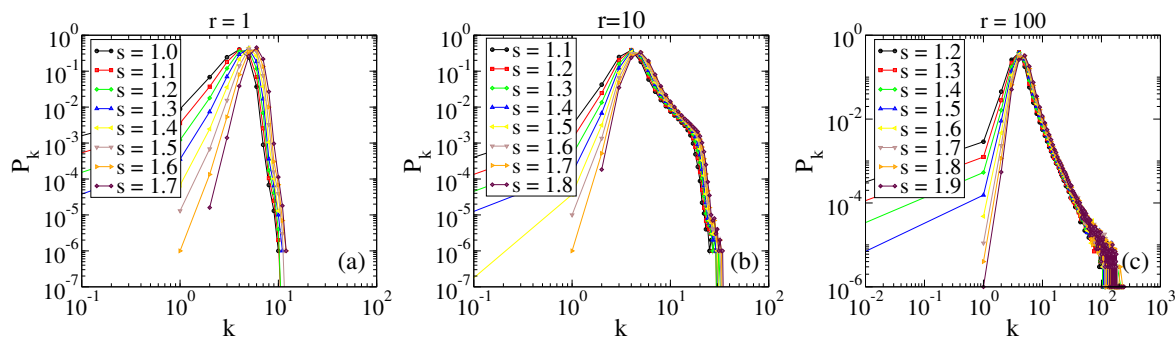


Figura A.2: Distribuição de grau para diferentes separações para as redes extraídas dos agregados com razões a)  $r = 1$ , b)  $r = 10$  e c)  $r = 100$ .

Na Fig. A.3 mostramos a análise para empacotamento aleatório com acomodação, na qual podemos observar que valores baixos de  $s$ , se comparado com o modelo anterior, já produzem uma rede sem nós de grau zero. Entretanto, para evitar o aparecimento de componentes desconectadas do restante da rede foi necessário aumentar o valor de  $s$  os valores mais baixos de  $s$  são:  $r = 1$  e  $s = 0.9$ ;  $r = 10$  e  $s = 0.7$ ;  $r = 100$  e  $s = 0.7$ .

Com isso, retornando ao gráfico da Fig.A.3, novamente, o final da cauda não sofre grandes alterações para as tolerâncias analisadas, porém, mesmo com uma mudança sutil nas distribuições para valores de  $s$  abaixo dos escolhidos observamos elementos não conectados com os demais e para valores acima o mesmo efeito não ocorre.

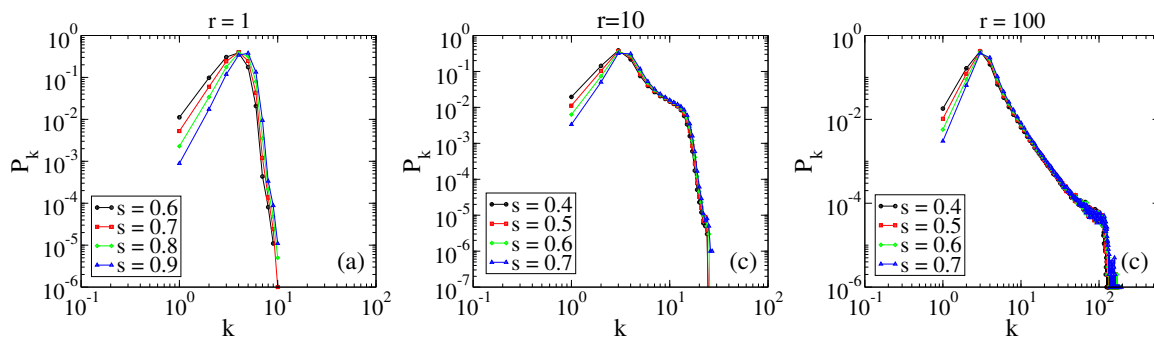


Figura A.3: Distribuição de grau para diferentes separações para as redes extraídas dos agregados com razões a)  $r = 1$ , b)  $r = 10$  e c)  $r = 100$ .

Além disso, para os dois últimos modelos estudados, realizamos uma análise de tamanho finito para a distribuição de grau. Na Fig.A.4 temos as curvas da distribuição de grau dos dois modelos para  $r = 100$  com o valor  $s$  escolhido para a definição da rede. Nestes gráficos temos que as curvas apresentam o mesmo comportamento para diferentes tamanhos de rede, sendo assim o comportamento observado na cauda da distribuição de grau não é devido ao tamanho da rede.

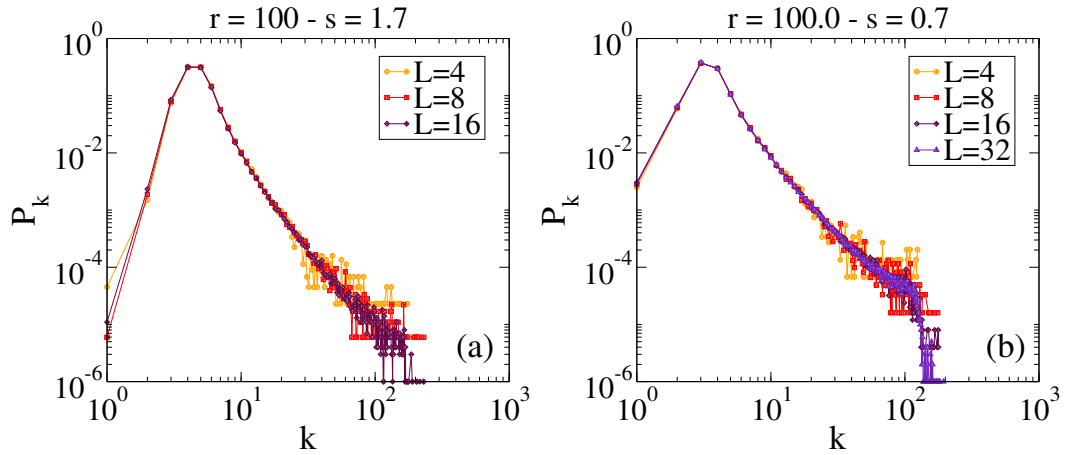


Figura A.4: Distribuição de grau para diferentes tamanhos de redes com razão  $r = 100$  para os modelos a) de empacotamento aleatório de discos sem acomodação e  $s = 1.7$  e b) de empacotamento aleatório de discos com acomodação e  $s = 0.7$ .

Por fim, também realizamos uma comparação entre os dois modelos de agregação aleatória considerando o mesmo valor de  $s$ , Fig.A.5, no qual podemos observar que o comportamento da curva para o modelo sem acomodação não se assemelha ao do modelo com acomodação, mesmo quando consideramos a mesma tolerância para a construção das redes.

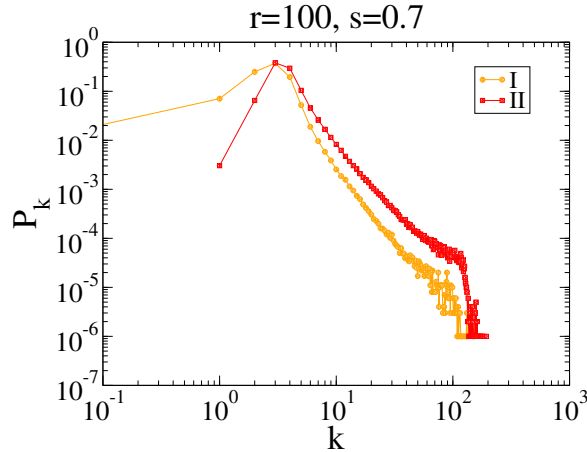


Figura A.5: Distribuição de grau para os dois modelos considerando os mesmos parâmetros,  $r = 100$  e  $s = 0.7$ .