

Charles Souza do Amaral

Monotonicidade do valor crítico em modelos de percolação e de Ising

Belo Horizonte - Brasil

14/09/2021

Charles Souza do Amaral

Monotonicidade do valor crítico em modelos de percolação e de Ising

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional do Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais como requisito parcial para obtenção do grau de Doutor em Modelagem Matemática e Computacional.

Área de concentração: Modelagem Matemática e Computacional.

Linha de pesquisa: Métodos Matemáticos Aplicados.

Orientador: Allbens P. F. Atman.

Coorientador: Bernardo N. B. de Lima.

Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais - CEFET-MG
Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional

Belo Horizonte - Brasil

14/09/2021

A485m Amaral, Charles Souza do
Monotonicidade do valor crítico em modelos de percolação e de Ising /
Charles Souza do Amaral. – 2021.
107 f.

Tese de doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em
Modelagem Matemática e Computacional.

Orientador: Allbens P. F. Atman.

Coorientador: Bernardo N. B. de Lima.

Tese (doutorado) – Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas
Gerais.

1. Percolação – Modelos matemáticos – Teses. 2. Insig, Modelo de – Teses.
3. Análise numérica – Teses. 4. Física matemática – Teses. I. Faria, Allbens
Atman Picardi. II. Lima, Bernardo Nunes Borges de. III. Centro Federal de
Educação Tecnológica de Minas Gerais. IV. Título.

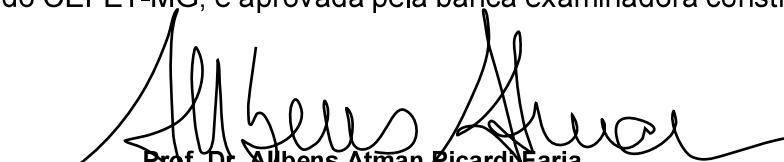
CDD 519.2

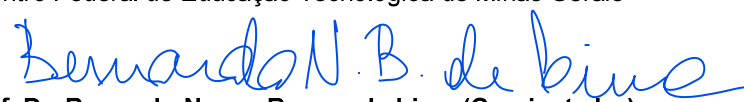


SERVIÇO PÚBLICO FEDERAL
MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
CENTRO FEDERAL DE EDUCAÇÃO TECNOLÓGICA DE MINAS GERAIS
COORDENAÇÃO DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL

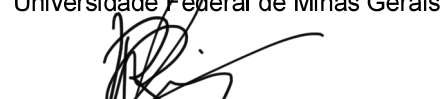
“MONOTONICIDADE DO VALOR CRÍTICO EM MODELOS DE PERCOLAÇÃO E DE ISING”.

Tese de Doutorado apresentada por **Charles Souza do Amaral**, em 14 de setembro de 2021, ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional do CEFET-MG, e aprovada pela banca examinadora constituída pelos professores:

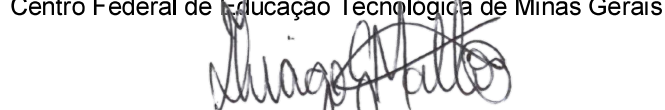

Prof. Dr. Albens Atman Picardi Faria
Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais


Prof. Dr. Bernardo Nunes Borges de Lima (Coorientador)
Universidade Federal de Minas Gerais


Prof. Dr. Ronald Dickman
Universidade Federal de Minas Gerais


Prof. Dr. Roger William Câmara Silva
Universidade Federal de Minas Gerais


Prof. Dr. Arthur Rodrigo Bosco de Magalhães
Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais


Prof. Dr. Thiago Gomes de Mattos
Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais

Visto e permitida a impressão,


Profª. Drª. Elizabeth Fialho Wanner
Presidenta do Colegiado do Programa de Pós-Graduação em
Modelagem Matemática e Computacional

Agradecimentos

Diversas pessoas merecem o meu agradecimento nesse momento tão importante, peço desculpas caso esqueça de citar alguém.

Os mais importantes: aos meus pais e minhas irmãs pelo carinho e apoio em todas as fases da minha vida. À minha esposa e às minhas lindas filhas, é imensurável o tamanho da importância de vocês para mim.

Vocês são a base de tudo. Muito obrigado!

Aos membros da minha família e aos meus amigos, que torceram para tudo dar certo.

A todos os meus amigos que fiz durante meus quase 7 anos na UFMG, em especial Fred, Humberto, Luiz e Jozelmo. Para mim sempre foi importante estar na presença de vocês.

Aos meus amigos Juninho e Sandrinho, obrigado pelo incentivo e pelos diversos momentos de descontração que tivemos nos últimos anos (**talvez** eu pague a conta na próxima saída).

Aos meus primos/amigos Charles, Marcela, Glauber e Priscila. Saibam que são pessoas importantes em minha vida e também fazem parte dessa conquista.

Aos meus amigos "do Inconfidentes": Glauber, Glauton, Marcelo, Renato, Stanley, Thiago Cruz e Thiago Lima. Vocês participaram de forma positiva em grande parte da minha trajetória até esse momento.

Aos meus professores Marcelo e Wanderley, que durante o EM sempre me apoiaram.

Agradeço aos membros da banca examinadora, pelo tempo despendido na leitura da Tese e pelas sugestões apresentadas.

Ao professor Allbens, que aceitou ser meu orientador e me incentivou durante o curso. Obrigado por toda ajuda e paciência durante os últimos quatro anos.

Aos professores Allbens, Bernardo e Ronald Dickman, pela paciência, ensinamentos e parceria na produção dos artigos publicados durante o curso.

A todos os meus colegas do Departamento de Matemática e do Departamento de Física do CEFET-MG.

A todos os professores do Departamento de Matemática da UFMG e do PPGMMC que contribuíram para minha formação.

Ao professor Bernardo por ter me apoiado em **todos** os momentos bons e ruins que passei na UFMG, por ter aceitado ser meu orientador no mestrado e coorientador no doutorado. Você contribuiu de forma marcante na minha formação como pesquisador/professor. Muito obrigado por tudo!

Ao CEFET-MG pelo apoio e suporte para que eu pudesse concluir esse projeto.

Muito obrigado a todos!

*“The whole problem with the world is that
fools and fanatics are always so certain of
themselves, but wiser people so full of doubts.”
(Bertrand Russell)*

Resumo

Modelos de percolação e de Ising possuem aplicações em diversas áreas das ciências e estão entre os modelos mais estudados na Mecânica Estatística. Eles exibem uma transição de fase e a determinação do valor crítico no qual ela ocorre é uma das principais questões relacionadas a esses modelos. O presente trabalho tem como objetivo estudar três modelos, dois de percolação e um de Ising, em que o valor crítico varia em função de algum parâmetro. O primeiro modelo apresentado é o Modelo de Percolação com Múltiplos Alcances (MPMA). Nele consideramos o modelo clássico de percolação na rede hipercúbica $\mathbb{L}^d$ e adicionamos elos de tamanhos $m_1, m_2, \dots, m_n$, paralelos a cada eixo coordenado, de forma que os tamanhos dos elos maiores sejam múltiplos dos menores e $m_i > 1$ para todo i . Há resultado analítico mostrando que o ponto crítico desse modelo converge para o do modelo clássico na rede hipercúbica $\mathbb{L}^{d(n+1)}$ quando $m_i \rightarrow \infty$ para todo i . Nós encontramos evidências numéricas de que, se $d = 2$, essa convergência é monótona e segue uma lei de potência quando $n = 1$ e $n = 2$. Com o intuito de verificar se a convergência relacionada ao ponto crítico no MPMA também ocorre em outros modelos que exibem transição de fase, estudamos o Modelo de Ising com Múltiplos Alcances, que é definido de forma similar ao MPMA. Nós verificamos que, se analisarmos a temperatura crítica ao invés do ponto crítico, também ocorrerá a convergência para as mesmas situações estudadas no MPMA. Por fim, também estudamos o Modelo de Percolação com Grau Restrito (MPGR). Nele, tentamos abrir os elos do grafo em uma ordem aleatória que é definida previamente. Cada elo é aberto se satisfizer uma determinada restrição que depende de um parâmetro k . Esse modelo possui aplicações no estudo de dímeros e polímeros e o simulamos na rede hipercúbica $\mathbb{L}^d$ para $d \in \{2, 3, 4\}$. Através de uma análise numérica, nós mostramos que o valor crítico do modelo decresce em função da restrição k . Além disso, encontramos evidências de que o MPGR está na mesma classe de universalidade que o modelo clássico de percolação.

Palavras-chaves: Modelo de Percolação; Modelo de Ising; Modelo de Percolação com Múltiplos Alcances; Modelo de Ising com Múltiplos Alcances; Modelo de Percolação com Grau Restrito; Transição de Fase.

Abstract

Percolation and Ising models have applications in several areas of science and are among the most studied models in Statistical Mechanics. They exhibit a phase transition and determining the critical value at which it occurs is one of the main issues related to these models. The aim of this work is to study three models, two percolation and one Ising, in which the critical value varies as a function of some parameter. The first model presented is the Multirange Percolation Model (MPM), in which we consider the classic model of percolation in the hypercubic lattice $\mathbb{L}^d$ and add bonds of sizes $m_1, m_2, \dots, m_n$, parallel to each coordinate axis, so that the sizes of the larger bonds are multiples of the smaller ones, and $m_i > 1$ for all i . There is an analytical result showing that the critical point of this model converges to that of the classical model in the hypercubic lattice $\mathbb{L}^{d(n+1)}$ when $m_i \rightarrow \infty$ for all i . We find numerical evidence that, if $d = 2$, this convergence is monotonous and follows a power law when $n = 1$ and $n = 2$. In order to verify whether the convergence related to the critical point in the MPM also occurs in other models that exhibit phase transition, we studied the Multirange Ising Model, which is defined similarly to the MPM. We verified that, if we analyze the critical temperature instead of the critical point, convergence will also occur for the same situations studied in the MPM. Finally, we also study the Constrained-Degree Percolation Model (CDPM). In it, we try to open the bonds of the graph in a random order that is previously defined. Each bond is opened if it satisfies a certain constraint that depends on a parameter k . This model has applications in the study of dimers and polymers and we simulate it in the hypercubic lattice $\mathbb{L}^d$ for $d \in \{2, 3, 4\}$. Through a numerical analysis, we show that the critical value of the model decreases as a function of the constraint k . Furthermore, we found evidence that the CDPM is in the same universality class as the classical Ising model.

Keywords:: Percolation Model; Ising Model; Multirange Percolation Model; Multirange Ising Model; Constrained-degree Percolation Model; Phase Transition.

Lista de Figuras

Figura 1 – Rede hipercúbica $\mathbb{L}^2$	27
Figura 2 – Grafos I_1 e I_2	28
Figura 3 – Rede quadrada com condição periódica de contorno.	29
Figura 4 – Modelo de percolação em $\mathbb{L}^2$. Configuração para um valor de p e gráfico da função $\theta(p)$	32
Figura 5 – Exemplo da ocorrência do <i>cluster de empacotamento</i>	34
Figura 6 – Parte do grafo $G_2^{k^n}$ em que $n = 1$	38
Figura 7 – Vizinhança de um sítio s no grafo com elos de alcances 1 e $k = 2$	42
Figura 8 – Identificação e localização dos elos na rede quadrada de tamanho $L = 3$ com condição periódica de contorno.	44
Figura 9 – Vizinhança dos elos do tipo h_1	45
Figura 10 – Configurações a serem analisadas para estimar $\psi_L(p, q)$	46
Figura 11 – Configurações a serem analisadas para estimar $\psi_L(p, q)$ quando utilizamos o <i>Algoritmo Padrão</i>	48
Figura 12 – Configurações a serem analisadas para estimar $\psi_L(p, q)$ quando utilizamos o <i>Algoritmo Modificado</i>	50
Figura 13 – Gráficos com as estimativas do ponto crítico no modelo de percolação com múltiplos alcances.	52
Figura 14 – Comportamento do ponto crítico no MPEMA com elos de tamanhos 1, k e u	54
Figura 15 – Comparação entre o gráfico obtido simulando o MPEMA e o obtido através da heurística proposta.	55
Figura 16 – Gráfico da função $\psi_L(p, q)$ e sua projeção no plano cartesiano.	55
Figura 17 – Curvas críticas $q_c^k(p)$ para todos os valores de k estudados.	56
Figura 18 – Parte do grafo $\mathbb{L}^2$ com a ordem dos 12 primeiros elos que poderão ser abertos.	59
Figura 19 – Parte do grafo $\mathbb{L}^3$ com a ordem dos 13 primeiros elos que poderão ser abertos.	60
Figura 20 – Gráficos da função $\psi_L(t; k)$ quando $k = 3$ e $d = 2, 3, 4$	64
Figura 21 – Gráficos obtidos para $k = 3$, considerando $d = 2, 3, 4$, para determinar t_c e $\frac{1}{\nu}$	65
Figura 22 – Gráficos de x_k em função de k	66
Figura 23 – Representação de duas configurações do modelo de Ising.	69
Figura 24 – Gráfico utilizado na estimativa de $K_c(2)$ quando $n = 2$	78
Figura 25 – Análise dos valores de $K_c(m)$, em função de m , obtidos através da função χ	79

Figura 26 – Inverso da temperatura crítica no modelo com elos de tamanhos 1, m e u .	81
Figura 27 – Parte do grafo $G_1^{\vec{k}_1}$ em que o tamanho do maior elo é k	87
Figura 28 – Representação alternativa de parte do grafo $G_1^{\vec{k}_1}$ em que o tamanho do maior elo é k	88
Figura 29 – Vizinhança dos elos do tipo v_1	90
Figura 30 – Vizinhança dos elos do tipo h_k	91
Figura 31 – Vizinhança dos elos do tipo v_k	92

Lista de tabelas

Tabela 1	– Representação de cada vizinho de um sítio i quando $n = 1$.	41
Tabela 2	– Identificação do número de cada vizinho dos elos do tipo h_1 .	45
Tabela 3	– Parâmetros obtidos no ajuste de curvas realizado através da Equação 4.9.	51
Tabela 4	– Comparação entre as estimativas dos pontos críticos do MCP.	51
Tabela 5	– Estimativas de $\frac{1}{\nu}$ e t_c .	63
Tabela 6	– Estimativas de x_k .	66
Tabela 7	– Incertezas $\Delta K_{c,\chi}(m)$ e $\Delta K_{c,U'}(m)$ obtidas para os casos do GRUPO I.	77
Tabela 8	– Estimativa do inverso da temperatura crítica para os casos $n = 1$ e $n = 2$.	79
Tabela 9	– Parâmetros obtidos em cada ajuste de curvas realizado através da Equação (7.3).	80
Tabela 10	– Comparação entre as estimativas de $K_c(\mathbb{L}^4)$ e $K_c(\mathbb{L}^6)$.	80
Tabela 11	– Correspondência entre os elos dos grafos nas Figuras 27 e 28.	87
Tabela 12	– Identificação dos elos do tipo v_1 .	90
Tabela 13	– Identificação dos elos do tipo h_k .	91
Tabela 14	– Identificação dos elos do tipo v_k .	92

Lista de abreviaturas e siglas

AM	Algoritmo Modificado
AP	Algoritmo Padrão
MCI	Modelo Clássico de Ising
MCP	Modelo Clássico de Percolação
MCPE	Modelo Clássico de Percolação de Elos
MCPS	Modelo Clássico de Percolação de Sítios
MIMA	Modelo de Ising com Múltiplos Alcances
MMC	Método de Monte Carlo
modelo FK	Fortuin-Kastelyn Random Cluster Model
MPEMA	Modelo de Percolação de Elos com Múltiplos Alcances
MPGR	Modelo de Percolação com Grau Restrito
MPMA	Modelo de Percolação com Múltiplos Alcances
MPSMA	Modelo de Percolação de Sítios com Múltiplos Alcances
RSA	Random Sequential Adsorption
TETF	Teoria de Escala de Tamanho Finito
PM	Passo de Metrópolis
PW	Passo de Wolff

Lista de símbolos

$\exists!$	Existe um, e somente um,
d	Dimensão do grafo
p, q	Probabilidade de um sítio/elo ser aberto
$\mathbb{L}^d$	Rede hipercúbica d -dimensional
$\lfloor x \rfloor$	Maior número inteiro menor ou igual a x
p_c	Ponto crítico do modelo de percolação
$p_c(G)$	Ponto crítico do modelo de percolação no grafo G
T_c	Temperatura crítica do modelo de Ising
$T_c(G)$	Temperatura crítica do modelo de Ising no grafo G
K_c	Inverso da temperatura crítica T_c
θ	Probabilidade da origem percolar
ψ	Probabilidade de ocorrer percolação
ψ_L	Probabilidade de ocorrer percolação no grafo finito de comprimento L
L	Comprimento do grafo
N	Número de sítios/elos no grafo
M	Número de elos de cada tamanho no grafo
$\bar{p}_L$	Ponto crítico efetivo no grafo de comprimento L
C_x	Cluster que contém o sítio x
$ C_x $	Tamanho do cluster C_x
$a \bmod (b)$	resto da divisão de a por b
$\mathcal{C}$	complexidade de tempo computacional do modelo de percolação com múltiplos alcances.
$a_n \rightarrow b$	a sequência $\{a_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ converge para b .
$a_n \nrightarrow b$	a sequência $\{a_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ não converge para b .
$\sup A$	supremo do conjunto A

Sumário

1	Introdução	23
2	Convergência de Grafos	27
	2.1 Convergência de grafos e o modelo de percolação	29
3	Modelo Clássico de Percolação	31
	3.1 Definição do Modelo na Rede Hipercúbica $\mathbb{L}^d$	31
	3.2 Simulação Numérica - Algoritmo de Newmann-Ziff	33
4	Modelo de Percolação com Múltiplos Alcances em $\mathbb{L}^d$	37
	4.1 Definição e Principais Resultados	37
	4.2 Algumas Questões	39
	4.3 Simulação Numérica	40
	4.4 Resultados	50
5	Modelo de Percolação com Grau Restrito	57
	5.1 Definição e Principais Resultados	57
	5.2 Algumas Questões	59
	5.3 Simulação Numérica	61
	5.4 Resultados	63
6	Modelo Clássico de Ising	67
	6.1 Definição do Modelo na Rede Hipercúbica $\mathbb{L}^d$	67
	6.2 Simulação Numérica - Algoritmo de Wolff	70
7	Modelo de Ising com Múltiplos Alcances	73
	7.1 Definição e Principais Resultados	73
	7.2 Simulação Numérica	74
	7.3 Resultado - Monotonicidade da Temperatura Crítica	78
8	Perspectivas de Trabalhos Futuros	83
9	Conclusão	85
	Apêndice A – Convergência de $G_d^{k^n}$ para $\mathbb{L}^d$	87
	Apêndice B – Vizinhança dos elos no MPMA	89
	Referências	93

1 Introdução

Um grande desafio para a ciência ao longo dos anos foi o de descrever propriedades físicas de um sistema macroscópico em função de seus constituintes microscópicos. A *Mecânica Estatística* é uma área da física, que começou a ser desenvolvida no século *XIX*, que utiliza métodos estatísticos, probabilísticos e leis da física para realizar tal descrição. Dois importantes modelos dessa área são o de Percolação e o de Ising. O primeiro está historicamente relacionado ao estudo da estrutura macroscópica de um material poroso formado por um número infinito de partes microscópicas. Já o segundo refere-se ao estudo de propriedades magnéticas de materiais em função dos momentos magnéticos de cada um de seus átomos.

O primeiro modelo de percolação foi proposto em 1957 por Broadbent e Hammersley [11] para modelar o fenômeno do transporte de um fluido através de um meio poroso. Nele, cada elo de um grafo estará *aberto* ou *fechado* com probabilidades p e $1 - p$, respectivamente. Quando um elo está *aberto*, o fluido pode passar através dele. Caso ele esteja *fechado*, a passagem do fluido não é permitida. Os autores mostraram que o modelo exibe uma *transição de fase geométrica* [71], que é caracterizada pelo surgimento de um conjunto infinito de elos ou sítios *abertos* conectados. O fluido e o meio poroso podem ter outras interpretações como, por exemplo, o transporte de corrente elétrica (“fluido”) através de uma rede composta por um grande número de resistores (“meio poroso”) [68]. O modelo de Ising foi proposto em 1920 por Wilhelm Lenz [45] para modelar interações magnéticas entre partículas de um sistema. Ele exibe uma *transição de fase ordem-desordem* [65] que separa duas fases; uma em que a orientação de cada *spin* é fortemente influenciada pela orientação dos *spins* que estão próximos a ele (fase ordenada) e outra fase em que essa influência é pequena (fase desordenada). O modelo recebe esse nome devido ao fato de ter sido proposto como tema de estudo para o aluno de doutorado de Lenz, Ernest Ising, que descreveu suas principais propriedades para o caso unidimensional. Vamos nos referir aos modelos citados como *Modelo Clássico de Percolação* (MCP) e *Modelo Clássico de Ising* (MCI).

Uma das principais questões sobre esses modelos é a determinação do valor crítico no qual ocorre a transição de fase. Geralmente, é extremamente difícil realizar essa tarefa de forma analítica, por isso métodos aproximativos são bastante úteis para estimar o valor crítico e estudar outras propriedades importantes dos modelos. Técnicas como *Grupos de Renormalização*, *Método de Monte Carlo* (MMC) e *Expansão em Séries* são utilizadas com frequência para esse propósito [6]. Nossa pesquisa é baseada no MMC, que consiste basicamente em realizar várias simulações numéricas do modelo, analisar o parâmetro de interesse em cada uma delas e, por fim, através de médias, obter a estimativa desse

parâmetro. Nós utilizamos o *Algoritmo de Newmann-Ziff* [57] e o *Algoritmo de Wolff* [81] para simular os modelos de percolação e de Ising, respectivamente. Na análise numérica realizada através desses algoritmos, é necessário gerar números distribuídos de forma uniforme no intervalo $[0, 1]$ e que pareçam ser aleatórios. Dessa forma, conseguimos obter configurações pseudoaleatórias do sistema para estudarmos propriedades do modelo. Existem diversos algoritmos, denominados geradores pseudoaleatórios, que utilizam ferramentas matemáticas para realizar essa tarefa. Em nosso trabalho utilizamos o *pcg32_fast* [59] que foi desenvolvido em 2014 e pertence à classe dos geradores PCG (Permuted Congruential Generator).

O Algoritmo de Newmann-Ziff foi proposto no ano 2001 [57] e trouxe um grande avanço em relação ao tempo de simulação na estimativa dos parâmetros do modelo. Ele possui *complexidade de tempo computacional*¹ $\mathcal{O}(N)$, em que N é a quantidade de elos, ou sítios, do grafo. Para efeito de comparação, a fim de se obter a mesma acurácia em termos estatísticos e realizar uma análise completa do modelo, os algoritmos anteriores possuem complexidade $\mathcal{O}(N^2)$ [57]. O Algoritmo de Wolff foi proposto em 1989 [81] e até hoje é bastante utilizado pelos pesquisadores na simulação de modelos de Ising, ele trouxe um grande avanço em relação ao *Algoritmo de Metrópolis* [56], proposto em 1953, na estimativa da temperatura crítica do modelo de forma eficiente. Discutiremos esse assunto com mais detalhes na Seção 6.2.

Esses modelos possuem inúmeras aplicações em diversas áreas como, por exemplo, geologia [12, 43, 54], biologia [14, 63], química [17, 41], economia [18, 67, 83], computação [60] e medicina [5, 62]. Além disso, podem ser derivados de um modelo mais geral denominado *Fortuin-Kastelyn Random Cluster Model* (modelo FK) [16].

Em todos os modelos estudados por nós, o grafo considerado foi a rede hipercúbica d -dimensional $\mathbb{L}^d$ ou então $\mathbb{L}^d$ incluindo elos com múltiplos alcances. Estudamos duas versões do modelo de percolação denominadas Modelo de Percolação com Múltiplos Alcances (MPMA) e Modelo de Percolação com Grau Restrito (MPGR). O primeiro possui aplicações no estudo do modelo clássico em dimensões altas [4, 47] e o último em problemas relacionados ao estudo de dímeros e polímeros [25, 69, 80]. Analisamos também o Modelo de Ising com Múltiplos Alcances (MIMA), com o intuito de verificar se ele possui propriedades semelhantes ao MPMA. A seguir comentamos sobre cada um desses três modelos.

O MPMA é similar ao MCP em $\mathbb{L}^d$, porém, além dos elos de tamanho 1 (que são os únicos existentes na rede hipercúbica $\mathbb{L}^d$), nós incluímos elos, paralelos a cada eixo coordenado, de tamanhos inteiros e fixados previamente $m_1, m_2, \dots, m_n$ (com m_i sendo múltiplo de m_{i-1} para $2 \leq i \leq n$). Cada elo (sítio) é aberto de forma independente com probabilidade p . Uma vez fixada a quantidade de tamanhos de elos e o valor de cada um deles, o modelo também exhibe uma transição de fase quando $p = p_c$ em que p_c é denominado *ponto crítico*.

¹ Ordem de grandeza do número de operações que são realizadas para executar o algoritmo.

Foi provado em 2011 [47] que a sequência de pontos críticos desse modelo converge, quando $m_i \rightarrow \infty$ para todo $i \geq 1$, para o ponto crítico do modelo clássico em $\mathbb{L}^{d(n+1)}$, em que d é a dimensão estudada no MPMA e $(n+1)$ é a quantidade de tamanhos de elos. Os autores conjecturaram que essa convergência é monótona. Em nossa pesquisa encontramos evidências numéricas de que isso ocorrerá e que a convergência segue uma lei de potência. Com esse resultado, é possível estimar o ponto crítico do MCP em dimensões altas ($d = 4$ e $d = 6$, por exemplo) simulando o MPMA em dimensão $d = 2$ [4]. Dessa forma, obtém-se um ganho em relação ao tempo de execução do algoritmo e à memória necessária para armazenar os dados durante as simulações, já que ambos crescem exponencialmente com a dimensão.

Também estudamos uma variação do MPMA em que são considerados apenas elos de dois tamanhos (1 e k) e atribuímos parâmetros diferentes relacionados à probabilidade de cada tipo de elo ser aberto, p para os de tamanho 1 e q para os de tamanho k . Nesse caso, a probabilidade de ocorrer percolação depende desses dois parâmetros e, ao invés de um ponto crítico, haverá uma curva crítica no espaço de fase $[0, 1] \times [0, 1]$ que delimita os valores de p e q em que ocorre ou não a percolação. Simular esse modelo é mais difícil do que o modelo clássico devido ao tempo de execução do algoritmo. Se adaptarmos o Algoritmo de Newmann-Ziff de forma direta para simular esse modelo, a complexidade de tempo computacional é elevada. Para $d = 2$, por exemplo, a complexidade é $\mathcal{O}(L^4)$ em que L é o comprimento da rede quadrada, ou seja, o número de operações para realizar uma simulação cresce com L^4 . Através de modificações nesse algoritmo, propomos um mais eficiente que é capaz de simular o modelo com complexidade de tempo computacional menor do que $\mathcal{O}(L^{2.834})$ (considerando os tamanhos de elos estudados por nós).

O MPGR foi simulado na rede hipercúbica d -dimensional para $d = 2, 3, 4$. Nesse modelo, um dos parâmetros é o tempo (t) e sorteamos um número aleatório com distribuição uniforme em $[0, 1]$ para cada um dos elos. Esse número está relacionado com o tempo em que o elo poderá ser aberto. Em seguida, iniciando o grafo com todos os elos fechados, tentamos abrir os elos em ordem crescente de tempo, porém o elo só poderá ser aberto se a quantidade de elos abertos adjacentes a cada uma de suas extremidades for menor que uma quantidade k (restrição) previamente fixada. Uma característica interessante desse modelo é que a probabilidade de um elo genérico ser aberto (ou fechado) depende da configuração de todos os elos do grafo, nesse caso dizemos que o modelo possui dependência de alcance infinito. Isso não ocorre no modelo clássico, já que o estado de cada elo não depende do restante do grafo. Através de simulações numéricas, investigamos alguns problemas relacionados ao comportamento do valor crítico do modelo em função da restrição k . O principal resultado obtido por nós foi ter encontrado evidências numéricas de que o ponto crítico decai monotonicamente em função da restrição k para $d \in \{2, 3, 4\}$ [2]. Além disso, estudamos o valor de um dos *expoentes críticos* do MPGR encontrando evidências de que ele é igual ao do MCP. Esse resultado sugere que provavelmente ambos os modelos estejam

na mesma *classe de universalidade*. Os expoentes críticos descrevem o comportamento de modelos, que exibem transição de fase contínua, perto do valor crítico. Acredita-se que eles dependam apenas do tipo de modelo e da dimensão [70]. Dizemos que modelos que possuem os mesmos expoentes críticos estão na mesma classe de universalidade.

O MIMA é similar ao MPMA em relação à estrutura do grafo. Nele consideramos a rede hipercúbica $\mathbb{L}^d$ com elos de múltiplos alcances, conforme foi descrito anteriormente, e as demais definições são iguais ao do modelo clássico de Ising. A ideia de estudar o MIMA surgiu na dúvida se um resultado análogo ao MPMA, em relação à convergência dos valores críticos, também valeria para ele. Nós encontramos evidências numéricas de que isso ocorrerá quando substituimos o ponto crítico do modelo de percolação pelo inverso da temperatura crítica do modelo de Ising [3]. Esperávamos encontrar esse resultado devido ao fato de que os dois modelos são derivados do modelo FK. Analisando nosso resultado, surge a dúvida se todo modelo que exibe uma transição de fase na rede hipercúbica d -dimensional possui propriedades similares ao MPMA e MIMA em relação à convergência do valor crítico para o do modelo clássico em dimensões maiores. Uma das propostas de trabalhos futuros é estudar um modelo, que não seja derivado do FK, e investigar essa questão.

Os resultados obtidos por nós foram publicados em três artigos: (i) “*Multi-range percolation model on the square lattice*” [4], (ii) “*On the monotonicity of the critical time in the Constrained-degree percolation model*” [2] e (iii) “*Multirange Ising model on the square lattice*” [3].

A Tese foi dividida em 9 capítulos e 2 apêndices. No Capítulo 2 apresentamos, de forma breve, alguns conceitos e resultados relacionados à convergência de grafos.

O Capítulo 3 é destinado à exposição dos conceitos básicos sobre o Modelo Clássico de Percolação e o Algoritmo de Newmann-Ziff. No Capítulo 4 definimos o MPMA e apresentamos resultados relacionados a esse modelo. Além disso, explicamos as modificações realizadas no Algoritmo de Newmann-Ziff para conseguirmos simular o MPMA. No Capítulo 5 definimos o MPGR, explicamos como foi realizada a simulação do modelo e apresentamos os resultados obtidos em nosso estudo.

O Capítulo 6 consiste na definição do Modelo Clássico de Ising e na discussão do Algoritmo de Wolff. No Capítulo 7 definimos o MIMA e apresentamos os resultados obtidos por nós acerca desse modelo.

No Capítulo 8 discutimos algumas propostas de trabalhos futuros e no Capítulo 9 apresentamos as nossas conclusões sobre o trabalho. O Apêndice A é dedicado a apresentar argumentos para explicar o motivo da convergência dos grafos com elos de múltiplos alcances para a rede hipercúbica $\mathbb{L}^d$ em dimensões mais altas. No Apêndice B é mostrado como foi definida a vizinhança de alguns tipos de elos no modelo de percolação de elos com múltiplos alcances.

2 Convergência de Grafos

Vamos iniciar esse capítulo definindo a rede hipercúbica d -dimensional $\mathbb{L}^d$ que será utilizada no decorrer da Tese. Temos que $\mathbb{L}^d = (\mathbb{Z}^d, E^d)$ é um grafo em que

$$\mathbb{Z}^d = \{(x_1, x_2, \dots, x_d), x_i \in \mathbb{Z}, i = 1, \dots, d\}$$

representa o conjunto de sítios e

$$E^d = \{(x, y) \in \mathbb{Z}^d \times \mathbb{Z}^d : \|x - y\| = 1\} \quad (2.1)$$

o conjunto de elos.

O símbolo $\|x - y\|$ denota a distância entre os sítios x e y . A letra d é um inteiro positivo e representa a dimensão de imersão do grafo. Quando $d = 2$ e $d = 3$ é comum nos referirmos a tais grafos apenas como redes quadrada e hipercúbica, respectivamente. Na Figura 1 representamos uma parte da rede quadrada $\mathbb{L}^2$.

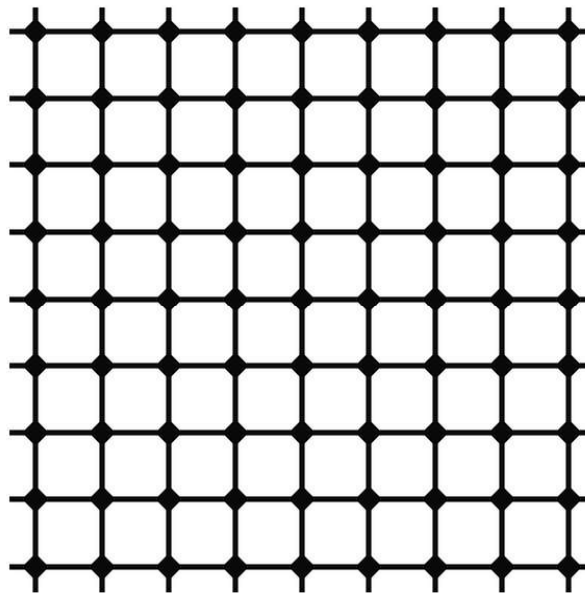


Figura 1 – Parte da rede quadrada $\mathbb{L}^2$. Os elos e sítios do grafo são representados pelos lados e vértices dos quadrados menores, respectivamente.

A noção original sobre convergência de grafos foi introduzida no trabalho de Benjamini e Schramm [8]. A teoria é relativamente avançada e foge do objetivo desta Tese. O que nós utilizamos foi apenas a intuição sobre o que significa uma sequência de grafos $\{G_n\}_n$

convergir para um grafo G . Nesse capítulo, apresentaremos, sem formalismo matemático, alguns exemplos e resultados sobre o assunto.

A seguir listamos três exemplos de sequências de grafos que convergem para alguma rede hipercúbica $\mathbb{L}^d$:

Exemplo 1:

Considere o grafo unidimensional $I_n = (V_n, E_n)$ em que $V_n = \{-n, -n+1, \dots, n-1, n\}$ e $E_n = \{(i, i+1), i = -n, \dots, n-1\}$. Na Figura 2 mostramos os grafos I_1 e I_2 . Definindo $G_n = I_n$, é razoável dizer que quando $n \rightarrow \infty$, $G_n \rightarrow \mathbb{L}$, em que $\mathbb{L}$ é a rede hipercúbica unidimensional. Ou seja, a sequência $\{G_n\}_n$ converge para $\mathbb{L}$.

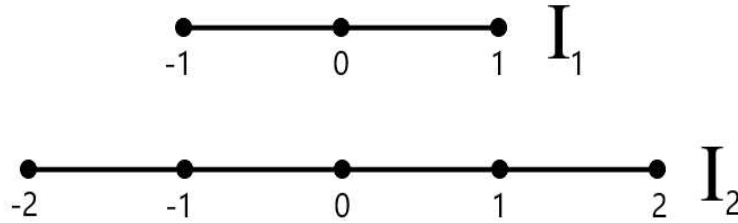


Figura 2 – Grafos I_1 e I_2 .

Exemplo 2:

Seja $G_n = I_n \times I_n$. Observe que G_n é o quadrado finito de comprimento n sem condição de fronteira. Quando $n \rightarrow \infty$, $G_n \rightarrow \mathbb{L}^2$.

Exemplo 3:

Considere novamente $G_n = I_n \times I_n$, porém agora vamos introduzir os elos que conectam os vértices da extremidade direita com os vértices correspondentes da extremidade esquerda. O mesmo será feito com os elos da extremidade superior e inferior. Na Figura 3 mostramos como isso é feito. Dizemos que G_n é o quadrado finito de lado n com condição periódica de fronteira. Quando $n \rightarrow \infty$, novamente temos que $G_n \rightarrow \mathbb{L}^2$.

A seguir damos algumas definições relacionadas à Teoria de Grafos.

Definição 1 (Automorfismo de Grafos). *Um automorfismo de $\mathcal{G} = (\mathbb{V}, E)$ é uma função bijetiva $\phi : V \rightarrow V$ tal que se $(\vec{u}, \vec{v}) \in E$, então $(\phi(\vec{u}), \phi(\vec{v})) \in E$.*

Definição 2 (Grafo Transitivo). *Dizemos que um grafo $\mathcal{G} = (\mathbb{V}, E)$ é **transitivo pelo vértice** se para quaisquer vértices $\vec{u}, \vec{v} \in \mathbb{V}$, existe um automorfismo ϕ de $\mathcal{G}$ tal que $\phi(\vec{u}) = \vec{v}$.*

Daqui em diante quando um grafo for transitivo pelo vértice diremos apenas que ele é *transitivo*. Observe que os grafos do Exemplo 1 não são transitivos. Por exemplo, no grafo

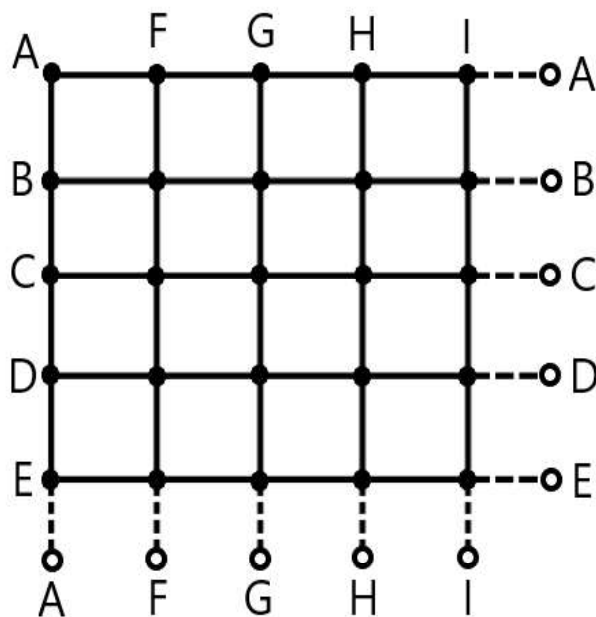


Figura 3 – Rede quadrada finita de comprimento 4 com condição periódica de fronteira. Os elos verticais pontilhados representam a ligação entre os sítios localizados na extremidade inferior com os da extremidade superior. A conexão entre os sítios localizados nas extremidades direita e esquerda é representada através dos elos horizontais pontilhados. Por exemplo, o sítio A é vizinho dos sítios E e I.

$I_1 = (V_1, E_1)$ temos que $E_1 = \{(-1, 0), (0, 1)\}$. Se escolhermos os vértices 0 e 1, então não existe automorfismo $\phi : V_1 \rightarrow V_1$ tal que $\phi(0) = 1$, pois deveríamos ter o vértice 1 como extremidade de dois elos do grafo. Raciocínio análogo pode ser usado para mostrar que os grafos G_n do Exemplo 2 também não são transitivos. Já os grafos do Exemplo 3 são transitivos, pois dados quaisquer vértices $\vec{u}, \vec{v} \in V_n \times V_n$ temos que $\phi(\vec{w}) = \vec{w} - \vec{u} + \vec{v}$ é um automorfismo de G_n com $\phi(\vec{u}) = \vec{v}$.

2.1 Convergência de grafos e o modelo de percolação

O modelo de percolação será definido no próximo capítulo de forma precisa. Para podermos relacioná-lo com o conceito de convergência de grafos, vamos descrevê-lo brevemente a seguir. No modelo de percolação atribuímos para cada elo de um grafo G uma probabilidade p dele estar *aberto* e $1 - p$ dele estar *fechado* ($p \in [0, 1]$). Dizemos que ocorre percolação quando surge um conjunto infinito de elos abertos conectados (*aglomerado infinito*). Para $p = 0$ não ocorre percolação, já que todos os elos estão fechados. Já para $p = 1$ ocorrerá percolação se o grafo for infinito e conexo, pois todos os elos estarão abertos. Observe que se o grafo for finito, não ocorrerá percolação para nenhum valor de p . Definimos o ponto crítico (p_c) do modelo como sendo o menor valor de $p \in [0, 1]$ tal que a probabilidade de ocorrer percolação assume um valor positivo, caso isso nunca ocorra, então definimos $p_c \equiv 1$. A notação $p_c(G)$ refere-se ao ponto crítico do modelo no grafo G .

Uma pergunta natural a se fazer quando pensamos em convergência de grafos no contexto da Teoria de Percolação é a seguinte:

Pergunta 1. *Seja $\{G_n\}_{n \geq 1}$ uma sequência de grafos com $G_n \rightarrow G$. Defina o modelo de percolação em cada um dos grafos G_n e em G . Será que a sequência de pontos críticos $\{p_c(G_n)\}_n$ converge para $p_c(G)$?*

Infelizmente a resposta é não. Considere o Exemplo 2 da seção anterior. Nele todos os grafos G_n são finitos, logo não ocorrerá percolação para nenhum valor de p e, portanto, $p_c = 1$. Já o ponto crítico para o modelo de percolação de elos em $\mathbb{L}^2$ é igual a $\frac{1}{2}$ [30]. Podemos aplicar o mesmo raciocínio para mostrar que na convergência dos grafos do Exemplo 3, $\{p_c(G_n)\}_n$ não converge para $p_c(G)$. Ou seja, mesmo se incluirmos a hipótese de que a sequência seja formada por grafos transitivos, teremos que nem sempre ocorrerá a convergência dos pontos críticos.

Os grafos G_n dos exemplos 1, 2 e 3 são finitos, vamos agora dar um exemplo de uma sequência de grafos transitivos infinitos que também mostra que a resposta para a Pergunta 1 é **não**. Considere $G_n = I_n \times \mathbb{L}$, em que $\mathbb{L}$ é a rede hipercúbica unidimensional, assim temos que G_n é um “retângulo” com comprimento infinito e altura n . Quando $n \rightarrow \infty$, temos que $G_n \rightarrow \mathbb{L}^2$. É simples provar que, para todo n , $p_c(G_n) = 1$. Como $G_n \rightarrow \mathbb{L}^2$, então $p_c(G_n) \nrightarrow p_c(\mathbb{L}^2) = \frac{1}{2}$.

Ainda em relação à Pergunta 1, Oded Schramm (comunicação pessoal citada em [7]) conjecturou que, além de considerar que os grafos são transitivos, se adicionarmos uma hipótese que limita o valor do ponto crítico nos grafos da sequência, então ela terá resposta positiva. Enunciamos a seguir a conjectura:

Conjectura 1 (Conjectura de Schramm). *Se $\{G_n\}_{n \geq 1}$ é uma sequência de grafos transitivos com $G_n \rightarrow G$ e $\sup_n(p_c(G_n)) < 1$, então $p_c(G_n) \rightarrow p_c(G)$.*

Em particular, devemos ter $p_c(G_n) < 1$ para todo n . Observe que todos os exemplos dados no início desse capítulo não satisfazem essa hipótese. No próximo capítulo, discutiremos o Modelo de Percolação com Múltiplos Alcances e veremos exemplos de sequências de grafos em que vale a conjectura.

A Conjectura de Schramm é tema de pesquisas recentes. Por enquanto, foram encontradas respostas positivas para classes específicas de grafos transitivos ou quando é considerada alguma hipótese adicional. Boa parte de nosso estudo baseia-se no resultado obtido em 2011 por de Lima, Sanchis e Silva [47], em que os autores provam que quando consideramos a rede hipercúbica $\mathbb{L}^d$ com elos de múltiplos alcances, então valerá a conjectura. Posteriormente, Martineau e Tassion [53] (2017) provaram que ela vale para uma classe mais geral de grafos. Em 2020, Hutchcroft mostrou que dependendo de como a sequência de grafos cresce, também valerá a conjectura [38].

3 Modelo Clássico de Percolação

O Modelo Clássico de Percolação foi proposto por Broadbent e Hammersley em 1957 [11], com a ideia de modelar o escoamento de um fluido determinístico através de um meio poroso aleatório. O meio é modelado através de um grafo infinito e conexo. Variações desse modelo e novas técnicas no estudo da Teoria da Percolação surgiram posteriormente com aplicações em diversas áreas da ciência como, por exemplo, reservatório de petróleo [12, 43, 54], proteínas [63], polímeros [69, 72, 80] e economia [67].

Nesse capítulo definimos o modelo quando o grafo é a Rede Hipercúbica $\mathbb{L}^d$ e discutimos alguns resultados relacionados a ele. Além disso, apresentamos as principais etapas do Algoritmo de Newmann-Ziff, que é um dos principais algoritmos utilizados em simulações numéricas envolvendo modelos de percolação.

3.1 Definição do Modelo na Rede Hipercúbica $\mathbb{L}^d$

Nesse modelo, o meio poroso é modelado através da rede hipercúbica $\mathbb{L}^d = (\mathbb{Z}^d, E^d)$ que foi definida no Capítulo 2. A probabilidade de cada elo ser aberto é independente do estado dos demais elos do grafo. A porosidade do meio é modelada atribuindo probabilidades p e $1 - p$, com $p \in [0, 1]$, para que cada elo esteja *aberto* ou *fechado*, respectivamente. Os estados **aberto** e **fechado** significam que **é permitida** ou **não permitida** a passagem de fluido pelo elo, respectivamente. Observe que para p próximo de zero é mais provável que encontremos configurações com poucos elos abertos. Já para p próximo de 1, a maior parte das configurações apresentará vários elos abertos conectados. No painel esquerdo da Figura 4, mostramos uma configuração de parte da rede hipercúbica $\mathbb{L}^2$ para um determinado valor de p . Os elos **abertos** estão na cor preta e os **fechados** foram excluídos do grafo (cor branca).

Definimos o *cluster* que contém o sítio x , que será denotado por C_x , como sendo o conjunto de todos os elos abertos conectados cuja extremidade de algum deles seja x . Vamos denotar por $|C_x|$ a quantidade de sítios que pertencem ao *cluster* C_x (tamanho do *cluster*). A seguir damos outras três definições importantes relacionadas ao modelo.

Definição 3 (Percolação de um sítio). *Dizemos que um sítio $x \in \mathbb{Z}^d$ percolou se $|C_x| = \infty$.*

Definição 4 (Percolação). *Dizemos que ocorreu percolação se $|C_x| = \infty$ para algum sítio $x \in \mathbb{Z}^d$.*

Definição 5 (Função $\theta(p)$). *Seja $\mathbb{P}_p$ a medida de probabilidade associada ao modelo quando atribuímos uma probabilidade p para cada elo ser aberto. Definimos a função*

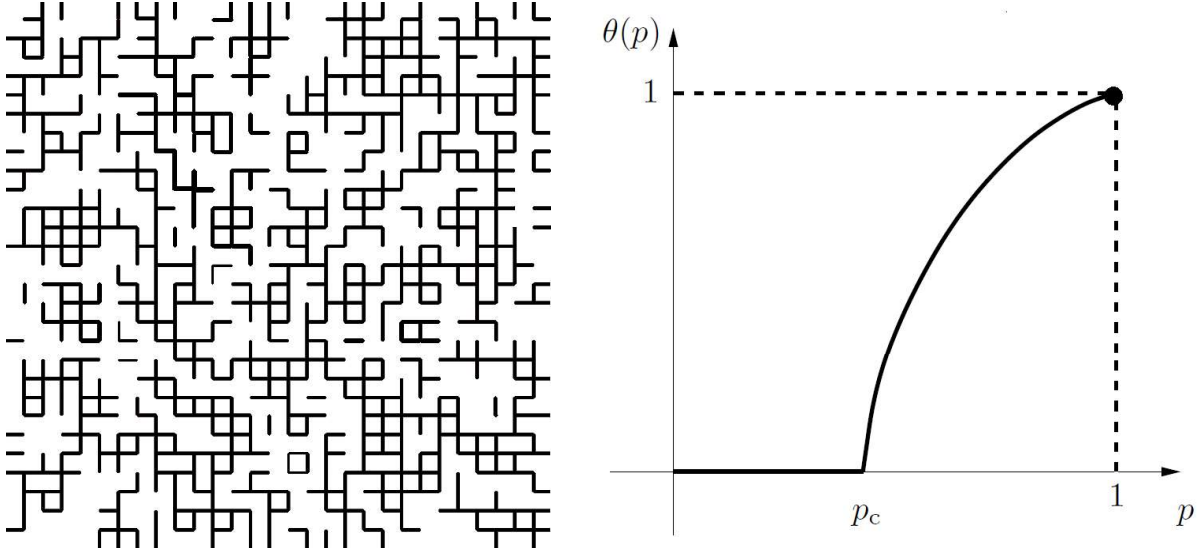


Figura 4 – Modelo de percolação de elos em parte do grafo $\mathbb{L}^2$. Configuração da rede para um valor fixo de p . Elos na cor preta estão **abertos** e os **fechados** foram excluídos do grafo (painel esquerdo). Gráfico da função $\theta(p)$, supondo que ela seja contínua em p_c (painel direito).

$\theta : [0, 1] \longrightarrow [0, 1]$ como sendo a probabilidade da origem $\mathbf{0} = (0, 0, \dots, 0)$ percolar, ou seja:

$$\theta(p) = \mathbb{P}_p(|C_{\mathbf{0}}| = \infty).$$

Denotaremos esse modelo por *Modelo Clássico de Percolação de Elos* (MCPE). Uma variação dele é o *Modelo Clássico de Percolação de Sítios* (MCPS), obtido mantendo-se os elos fixos e atribuindo probabilidades para que cada sítio esteja aberto ou fechado. As demais definições são feitas de forma análoga ao MCPE.

Uma importante questão relacionada aos modelos de percolação é a de conhecer o comportamento da função $\theta(p)$. Em $\mathbb{L}^d$, $d \geq 2$, sabe-se que $\theta(p)$ é contínua em $([0, 1] - \{p_c\})$ e possui duas fases distintas:

$$\theta(p) \begin{cases} = 0 & \text{se } p < p_c \text{ (fase subcrítica);} \\ > 0 & \text{se } p > p_c \text{ (fase supercrítica),} \end{cases}$$

em que $p_c \in (0, 1)$ é denominado *ponto crítico*. No painel direito da Figura 4 mostramos o gráfico da função $\theta(p)$ supondo que ela também seja contínua em $p = p_c$.

Duas perguntas importantes sobre a função θ nos modelos MCPE e MCPS são:

(1) qual o valor de p_c no grafo $\mathbb{L}^d$?

(2) $\theta(p)$ é contínua em $p = p_c$?

Quando a resposta para a segunda pergunta é positiva, dizemos que a transição de fase do modelo é contínua. Se $d = 1$, é simples provar que $p_c = 1$ e a transição de fase é descontínua para ambos os modelos. Para a questão (1), conhecemos respostas analíticas quando $d = 2$ no MCPE ($p_c = \frac{1}{2}$) [35]; já para a questão (2) sabe-se que a resposta é positiva para os dois modelos quando $d = 2$ ou $d \geq 11$ [24, 33–35, 64]. Nos demais casos, há apenas aproximações numéricas ou cotas (superior ou inferior) para o valor de p_c e conjectura-se que a transição de fase seja contínua. Em um recente trabalho, Gomes, Pereira e Sanchis [29] obtiveram, de forma analítica, cotas superiores para p_c quando $d \geq 3$.

3.2 Simulação Numérica - Algoritmo de Newmann-Ziff

Ao estudar o modelo de percolação computacionalmente, esbarramos na limitação de podermos trabalhar apenas com grafos finitos. Para resolver esse problema, podemos usar a *Teoria de Escala de Tamanho Finito* (TETF), que foi proposta por Fisher e Barber [23] e permite relacionar o comportamento de um sistema finito com o seu equivalente no *limite termodinâmico* (número de partículas N e volume V crescem indefinidamente com $\frac{N}{V}$ finito). A seguir descrevemos em etapas como isso pode ser feito em $\mathbb{L}^2$ para estimar o ponto crítico (p_c) no MCPS.

- **Etapa 1:** Definimos a rede quadrada finita de tamanho L , Λ_L , como sendo a parte de $\mathbb{L}^2$ constituída apenas pelos sítios $\{-\frac{L}{2}, -\frac{L}{2} + 1, \dots, \frac{L}{2} - 1, \frac{L}{2}\}^2$ (por questão de simetria, escolhemos L sendo um número par). Consideramos Λ_L com condição periódica de contorno. A rede é representada por uma matriz $nn[N][s]$, em que $N = L^2$ e $s = 4$ representam o número de sítios e a quantidade de vizinhos de cada um deles, respectivamente. Se formos simular o MPCE, então teremos $N = 2L^2$ (número de elos) e $s = 6$, pois cada elo possui 6 vizinhos. Também pode-se usar a rede quadrada sem a condição periódica de contorno, porém ela é necessária para utilizarmos o critério que nós escolhemos para identificar a ocorrência da percolação (ver *Etapa 2*).
- **Etapa 2:** Escolhemos algum critério para identificar a ocorrência da percolação em Λ_L que, no limite $L \rightarrow \infty$, seja compatível com a definição de percolação no grafo infinito. Em nosso trabalho, consideramos que a percolação ocorre quando há um *cluster de empacotamento*¹ (*wrap cluster*) em alguma das direções. Na Figura 5 nós mostramos exemplos em que há um cluster de empacotamento na direção horizontal (painel esquerdo) e em ambas as direções (painel direito). Além desse critério, podemos utilizar outros para definir percolação na caixa finita como, por

¹ O *cluster de empacotamento* ocorre se existir um cluster infinito quando consideramos infinitas cópias de Λ_L dispostas lado a lado em uma dada direção.

exemplo, o surgimento de um cluster que conecta as extremidades direita e esquerda ou extremidades superior e inferior. Todos esses critérios permitem estimar p_c , porém, quando fixamos a quantidade de amostras, o utilizado por nós fornece uma estimativa com maior precisão [57].

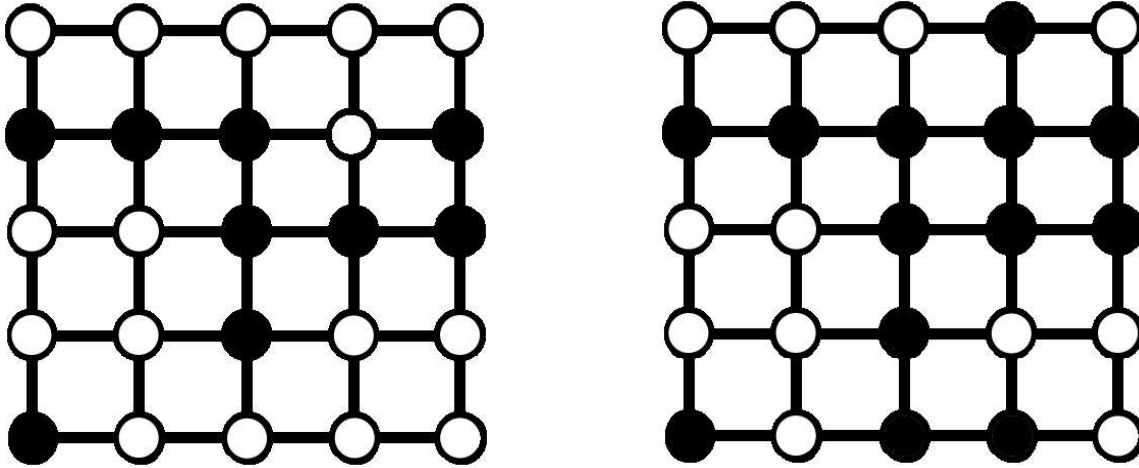


Figura 5 – Exemplo da ocorrência do cluster de empacotamento na direção horizontal (painel esquerdo) e em ambas as direções (painel direito). As cores preta e branca representam sítios abertos e fechados, respectivamente. Observe que, em ambos os grafos, se repetirmos indefinidamente o grafo na direção horizontal, obteremos um cluster infinito. Porém se fizermos essa análise na direção vertical, apenas no grafo da direita isso ocorrerá.

- **Etapa 3:** Escolhemos alguns valores crescentes de L , $L \in \{L_1, L_2, \dots, L_n\}$, com a condição de que L_i não seja próximo de L_{i-1} para que possamos perceber uma mudança no valor do parâmetro estudado. Para cada valor de L estimamos o valor médio do primeiro valor de p em que ocorre percolação. Esse valor é denominado *ponto crítico efetivo* e será denotado por $\bar{p}_L$.
- **Etapa 4:** Para obter uma estimativa para p_c , utilizamos a relação de escala, obtida através da TETF,

$$(\bar{p}_L - p_c) \propto L^{-\frac{1}{\nu}}, \quad (3.1)$$

em que $\nu > 0$ e p_c é o ponto crítico do modelo de percolação em $\mathbb{L}^2$ [70]. O termo ν é um dos *expoentes críticos* relacionado aos modelos de percolação e sabe-se que no MCP, quando $d = 2$, $\nu = \frac{4}{3}$ [70]. Observe que se não conhecemos esse expoente, podemos substituir $a = \frac{1}{\nu}$ na relação 3.1 e reescrevê-la como:

$$\bar{p}_L = p_c + A \cdot L^{-a}. \quad (3.2)$$

Dessa forma, realizamos um ajuste de curvas para determinar A , a e p_c . Como teremos uma variável livre a mais, em relação ao caso em que ν é conhecido, a estimativa obtida para p_c será menos precisa.

O problema no procedimento descrito está em como realizar a Etapa 3 de forma eficiente. Quando fixamos o valor de p , o *Algoritmo de Hoshen-Kopelman* [37] permite verificar em um tempo $\mathcal{O}(N)$ se ocorreu percolação em uma dada configuração, em que $N = L^2$ é a quantidade de sítios do grafo e $\mathcal{O}(N)$ significa que o número de operações necessárias para executar o algoritmo cresce linearmente com N . Porém, se quisermos obter uma estimativa para p_c com precisão até a m -ésima casa decimal, deveremos analisar se ocorre percolação, pelo menos, para cada valor de $p \in \{0, \Delta p, 2 \cdot \Delta p, \dots, s \cdot \Delta p\}$ com $\Delta p = 10^{-m}$ e $s = 10^m$. Dessa forma, a complexidade de tempo computacional será $\mathcal{O}(10^m \cdot N)$ que, para os valores de m e N que costumam ser utilizados para simular o modelo, quase sempre será maior do que $\mathcal{O}(N^2)$. Efetivamente podemos interromper a análise no momento em que ocorrer a percolação. Mesmo se isso for feito, o algoritmo ainda demandará um tempo elevado para estimar p_c .

Uma forma de otimizar o procedimento descrito anteriormente é utilizar o Teorema da Partição [32] para estimar $\psi_L(p)$, probabilidade de ocorrer percolação na caixa de comprimento L , para todos os valores de p através da expressão

$$\psi_L(p) = \sum_{j=0}^N \mathbb{P}_p(\tilde{N} = j) \cdot \overline{Q}_j = \sum_{j=0}^N \binom{N}{j} \cdot p^j (1-p)^{N-j} \cdot \overline{Q}_j \quad (3.3)$$

em que $\tilde{N}$ é o número de sítios abertos no grafo e $\overline{Q}_j$ a probabilidade de ocorrer percolação quando $\tilde{N} = j$. Como para cada j o tempo necessário para verificar se ocorreu percolação é $\mathcal{O}(N)$ e $j = 0, 1, \dots, N$, então o tempo necessário para estimar $\psi_L(p)$, utilizando uma amostra, é $\mathcal{O}(N^2)$. Observe que temos uma estimativa para $\psi_L(p)$ para todo valor de p e que podemos obter a sua derivada sem recorrer a outro método numérico (basta derivar 3.3). O parâmetro $\bar{p}_L$ pode ser estimado através de ψ_L utilizando a proposição a seguir:

Proposição 1. *Seja $\bar{p}_L$ o valor médio de p em que ocorre percolação pela primeira vez na caixa Λ_L . Se $\psi_L(p)$ é a probabilidade de ocorrer percolação em Λ_L , então*

$$\bar{p}_L = \int_0^1 p \cdot \frac{d\psi_L(p)}{dp} dp. \quad (3.4)$$

Demonstração: Considere o conjunto formado pelas sequências de variáveis aleatórias $\{X_s\}_{s \in \Lambda_L}$ independentes e com distribuição uniforme em $[0, 1]$. Para cada valor de $p \in [0, 1]$, dizemos que um sítio s está p -aberto se $X_s \leq p$ e, caso contrário, p -fechado. Fixada uma sequência de variáveis aleatórias, os sítios p -abertos e p -fechados correspondem aos elos abertos e fechados, respectivamente, de uma configuração do MCPS em que atribuímos uma probabilidade p para cada sítio ser aberto. A técnica descrita acima chama-se *acoplamento*

e permite comparar distribuições de variáveis aleatórias distintas (ver [31] para um estudo detalhado).

Vamos dividir o intervalo $[0, 1]$ em n subintervalos $[p_{i-1}, p_i]$ em que $i \in \{1, 2, \dots, l\}$,

$$\Delta p = \frac{1}{l} \quad \text{e} \quad p_i = i \cdot \Delta p \quad \text{para} \quad i = 0, 1, \dots, l. \quad (3.5)$$

Definimos m como o número de sequências aleatórias (configurações) analisadas para estimar $\psi_L(p)$ e $\bar{p}_L$. Seja m_{p_i} o número total de vezes em que a percolação ocorre quando consideramos os sítios p_i -abertos. Se analisarmos os sítios p -abertos para $p \in \{p_0, p_1, \dots, p_l\}$, então $m_{p_i} - m_{p_{i-1}}$ corresponde ao número total de vezes que a percolação ocorreu pela primeira vez quando $p = p_i$. Dessa forma, temos que:

$$\begin{aligned} \bar{p}_L &= \lim_{l \rightarrow \infty} \left[\sum_{i=1}^l p_i \cdot \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{(m_{p_i} - m_{p_{i-1}})}{m} \right] = \lim_{l \rightarrow \infty} \left[\sum_{i=1}^l p_i \cdot \lim_{m \rightarrow \infty} \left(\frac{m_{p_i}}{m} - \frac{m_{p_{i-1}}}{m} \right) \right] = \\ &= \lim_{l \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^l p_i \cdot (\psi_L(p_i) - \psi_L(p_{i-1})) = \lim_{l \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^l p_i \cdot \left(\frac{\psi_L(p_i) - \psi_L(p_{i-1})}{\Delta p} \right) \cdot \Delta p = \\ &= \int_0^1 p \cdot \frac{d\psi_L(p)}{dp} dp. \end{aligned}$$

■

Mesmo utilizando o Teorema da Partição o algoritmo ainda não é eficiente, pois a complexidade cresce com N^2 (ou seja, L^4). Mark Newmann e Robert Ziff escreveram o artigo *Fast Monte Carlo algorithm for site or bond percolation* [57], no qual propuseram um algoritmo capaz de realizar a mesma tarefa em tempo $\mathcal{O}(N)$. A ideia é, além de usar o Teorema da Partição, realizar a Etapa 3 da seguinte forma:

- (i) Atribua um número para cada um dos N sítios.
- (ii) Crie uma lista ordenada permutando os N números.
- (iii) Abra os sítios sequencialmente, seguindo a ordem da lista, até ocorrer percolação.
- (iv) Suponha que a percolação ocorra quando o c -ésimo sítio for adicionado, então temos que $\bar{Q}_j = 0$ para $j < c$ e $\bar{Q}_j = 1$ para $j \geq c$.
- (v) Agora basta usar a Equação 3.3 para obter uma estimativa de $Q_L(p)$.

Observe que os passos descritos acima são para executar apenas uma simulação do modelo (uma amostra); para obtermos uma boa estimativa do parâmetro de interesse é necessário realizarmos várias simulações. A vantagem do Algoritmo de Newmann-Ziff está no fato de que podemos aproveitar a análise realizada na estimativa de Q_j para estimar Q_{j+1} .

4 Modelo de Percolação com Múltiplos Alcances em $\mathbb{L}^d$

O Modelo de Percolação com Múltiplos Alcances (MPMA) em $\mathbb{L}^d$ possui relação com o estudo do MCP em dimensões maiores do que d . Nesse capítulo, veremos um resultado que relaciona esses dois modelos e mostraremos resultados numéricos, obtidos por nós, que permitem estimar o ponto crítico do modelo clássico em $\mathbb{L}^d$ para $d = 4$ e $d = 6$, simulando o modelo com múltiplos alcances em $\mathbb{L}^2$. Além disso, apresentaremos algoritmos para simular o modelo bidimensional com dois alcances e parâmetros distintos relacionados à abertura de cada tipo de elo.

4.1 Definição e Principais Resultados

O *Modelo de Percolação de Sítios com Múltiplos Alcances* (MPSMA) e o *Modelo de Percolação de Elos com Múltiplos Alcances* (MPEMA) são definidos a partir dos modelos clássicos de percolação de sítios e elos, respectivamente [46, 47]. A seguir, damos uma definição formal desses dois modelos. Denotaremos a i -ésima coordenada do vetor $\vec{u} \in \mathbb{Z}^d$ por u_i .

Definição 6. Fixados um inteiro positivo n e uma sequência $\vec{k}^n = (k_1, \dots, k_n)$, com $k_i \in \{2, 3, \dots\} \forall i \in \{1, \dots, n\}$, definimos o grafo $G_d^{\vec{k}^n} = (\mathbb{Z}^d, \mathbb{E}_1 \cup (\cup_{i=1}^n \mathbb{E}_{k_1 \times \dots \times k_i}))$, em que

$$\mathbb{E}_l = \{(\vec{v}, \vec{w}) \in \mathbb{Z}^d \times \mathbb{Z}^d; \exists! i \in \{1, \dots, d\} \text{ com } \|v_i - w_i\| = l \text{ e } v_j = w_j, \forall j \neq i\} \quad (4.1)$$

é o conjunto formado por todos os elos de tamanho l paralelos a cada eixo coordenado. Da forma como foi definido, temos que $G_d^{\vec{k}^n}$ é $\mathbb{Z}^d$ com a adição de todos os elos de tamanhos

$$1, k_1, (k_1 \times k_2), \dots, (k_1 \times k_2 \times \dots \times k_n)$$

paralelos a cada eixo coordenado.

Observe que o grafo possui elos de $n + 1$ tamanhos distintos e que não é necessário que as componentes do vetor $\vec{k}^n$ estejam em ordem crescente. Na Figura 6 mostramos parte do grafo $G_2^{\vec{k}^n}$, com $n = 1$ e $k_1 = 2$. Atribuímos probabilidades p e $1 - p$ para cada elo (sítio) ser aberto ou fechado, respectivamente. As definições de **percolação de um sítio**, **percolação**, **função** $\theta(p)$ e **ponto crítico** coincidem com as do MCP (Seção 3.1).

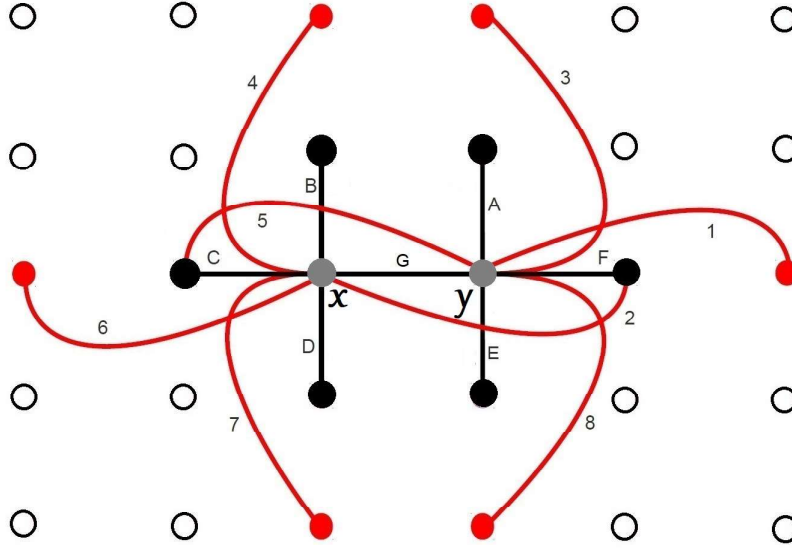


Figura 6 – Esquema mostrando parte do grafo $G_2^{\vec{k}^n}$, em que $n = 1$ e $k_1 = 2$, com todos os elos que têm alguma extremidade em um dos vértices x ou y . O tamanho dos elos designados com letras e números é igual a 1 e k_1 , respectivamente.

Um dos interesses nesse modelo está no fato de que o grafo $G_d^{\vec{k}^n}$ converge para $\mathbb{L}^{d(n+1)}$ quando os elos de tamanho maior do que 1 divergem. Formalmente temos que

$$\lim_{k_i \rightarrow \infty, \forall i} G_d^{\vec{k}^n} = \mathbb{L}^{d(n+1)}, \quad (4.2)$$

ou seja, a sequência de grafos $\{G_d^{\vec{k}^n}\}_{k_i}$, com n e d fixos, converge para a rede hipercúbica $\mathbb{L}^{d(n+1)}$. No Apêndice A damos uma ideia intuitiva para explicar essa convergência. Analisando 4.2, podemos perguntar se a sequência de pontos críticos $\{p_c(G_d^{\vec{k}^n})\}$ irá convergir para $p_c(\mathbb{L}^{d(n+1)})$. Em outras palavras, queremos saber se a Conjectura de Schramm (ver Capítulo 2) é válida para os grafos com elos de múltiplos alcances definidos aqui. Em [47], de Lima, Sanchis, e Silva demonstraram, através do Teorema 1 a seguir, que a resposta para essa questão é afirmativa:

Teorema 1. *Se $p_c(\mathbb{L}^{d(n+1)})$ é o ponto crítico do modelo clássico de percolação de elos (ou sítios) em $\mathbb{L}^{d(n+1)}$, então*

$$\lim_{k_i \rightarrow \infty, \forall i} p_c(G_d^{\vec{k}^n}) = p_c(\mathbb{L}^{d(n+1)}), \forall d \geq 2.$$

Para $n = 1$ o Teorema 1 diz que se adicionarmos elos de tamanho $k_1 = k$ no grafo $\mathbb{L}^d$, então, no limite $k \rightarrow \infty$, os novos elos comportam-se como elos de tamanho 1 em $\mathbb{Z}^{2d}$. O

aumento na dimensão de d para $2d$ é devido à existência de elos de tamanho k paralelos a cada um dos d eixos coordenados de $\mathbb{Z}^d$. O mesmo raciocínio pode ser aplicado para $n \geq 2$. Apesar da convergência ter sido demonstrada, não é conhecido se ela é monótona em função do tamanho dos elos. Os autores conjecturaram que isso ocorrerá. Na próxima seção discutiremos essa questão e outros problemas em aberto relacionados ao modelo.

No mesmo artigo em que foi provado o Teorema 1, foi demonstrado que vale um resultado mais geral quando consideramos números diferentes de alcances em cada direção, enunciamos ele a seguir.

Teorema 2. *Seja $\vec{k}^{n_i} = (k_{i,1}, k_{i,2}, \dots, k_{i,n_i})$ a sequência que define a quantidade de elos e o tamanho de cada um deles na direção i , $i \in \{1, \dots, d\}$. Caso $n_i = 0$, então há apenas elos de tamanho 1 da direção i . Temos que se $p_c(\mathbb{L}^d)$ é o ponto crítico do modelo clássico de percolação de elos (ou sítios) em $\mathbb{L}^d$, então*

$$\lim_{k_{i,j} \rightarrow \infty, \forall i,j} p_c(G_d^{\vec{k}^{n_i}}) = p_c\left(\mathbb{L}^{\sum_{i=1}^d (1+n_i)}\right), \forall d \geq 2.$$

Observe que se estivermos simulando o modelo com múltiplos alcances em $\mathbb{L}^2$, então o Teorema 1 o relaciona com o modelo clássico em dimensão $d = 2(n+1)$ em que $n+1$ é a quantidade de elos de tamanhos distintos. Dessa forma, d será sempre um número par. Já o Teorema 2 permite relacionar o modelo bidimensional com múltiplos alcances ao modelo clássico em qualquer dimensão. Por exemplo, se escolhermos introduzir elos de tamanho 1 e k na direção horizontal e apenas de tamanho 1 na direção vertical, teremos que o ponto crítico irá convergir para $p_c(\mathbb{L}^3)$.

4.2 Algumas Questões

Acredita-se que a função $\theta(p)$, para todo p , seja não decrescente em cada variável k_i quando consideramos o modelo no grafo $G_d^{\vec{k}^n}$ [47]. Caso isso ocorra, valerá também a seguinte conjectura:

Conjectura 2. *Se $p_c(G_d^{\vec{k}^n})$ é o ponto crítico do modelo clássico de percolação de elos (ou sítios) em $G_d^{\vec{k}^n}$, então $p_c(G_d^{\vec{k}^n})$ é monótono não crescente em cada variável k_i .*

Encontramos evidências numéricas de que a Conjectura 2 é verdadeira e mostramos que a convergência de $p_c(G_d^{\vec{k}^n})$ para $p_c(\mathbb{L}^d)$ segue uma lei de potência. Esse último fato é importante, pois permite estimarmos o ponto crítico do modelo clássico em dimensões altas simulando um modelo bidimensional. Dessa forma, haverá um ganho tanto em relação ao tempo de execução quanto à memória necessária para simular o modelo.

Além da situação em que o tamanho de um elo é múltiplo dos de tamanhos menores, também estudamos o comportamento do ponto crítico em $\mathbb{L}^2$ quando $n = 2$ (três alcances), com a condição de que os tamanhos do maior e menor elos, u e 1 , são fixos, e variamos o tamanho do elo de tamanho intermediário (m) entre 1 e u . Mostramos que o comportamento de p_c é não monotônico e propomos uma heurística capaz de explicá-lo. Esse fato reforça a necessidade da hipótese nos teoremas 1 e 2 relacionada à multiplicidade dos tamanhos dos elos.

Outro problema que desperta a atenção é o de determinar o comportamento da probabilidade de ocorrer percolação no MPEMA, com $n = 1$, considerando probabilidades diferentes para cada tipo de elo ser aberto, p para elos de tamanho k e q para elos de tamanho 1 . Iremos denotar esse modelo por “MPEMA com $p \neq q$ ” e a probabilidade de ocorrer percolação por $\psi(p, q)$. A sigla MPEMA, sem nenhuma informação adicional, denotará o modelo em que atribuímos a mesma probabilidade para cada tipo de elo ser aberto.

Como a função $\psi(p, q)$ assume apenas os valores 0 e 1 , para descrever o seu comportamento basta determinar a curva que separa as regiões:

$$\mathcal{A}_0 = \{(p, q) \in [0, 1] \times [0, 1]; \psi(p, q) = 0\} \quad \text{e} \quad \mathcal{A}_1 = \{(p, q) \in [0, 1] \times [0, 1]; \psi(p, q) = 1\} \quad (4.3)$$

que é definida formalmente por:

$$q_c^k(p) := \sup\{q; \psi(p, q) = 0\}. \quad (4.4)$$

Um artigo recente descreveu, de forma analítica, o comportamento de (4.4) para o modelo de percolação de elos com múltiplos alcances em uma árvore orientada [46]. A análise numérica para esse caso torna-se complexa, pois os elos são distinguíveis na estimativa de $\psi(p, q)$, diferente do caso quando $p = q$. Nós propomos um algoritmo eficiente para realizar essa tarefa em $\mathbb{L}^2$ e descrevemos a curva $q_c^k(p)$ para alguns valores de k .

Os resultados citados nesta seção foram publicados no artigo “*Multi-range Percolation Model on the Square Lattice*” [4] e serão detalhados no decorrer da Tese.

4.3 Simulação Numérica

A simulação dos modelos MPSMA e MPEMA é similar à do MCP, a diferença principal está na definição da vizinhança. Já no MPEMA em $\mathbb{L}^2$ com $p \neq q$, há a necessidade de realizar outras modificações no Algoritmo de Newmann-Ziff para ser possível estimar a função $\psi(p, q)$ de forma eficiente. Nesta seção iremos comentar sobre os algoritmos utilizados nas simulações desses modelos quando a dimensão é $d = 2$.

Os valores das *incertezas* nos parâmetros estimados no decorrer desse capítulo são devidos unicamente ao ajuste de curvas realizado para obtê-los (salvo quando especificarmos algo

diferente). Essa simplificação foi suficiente para os propósitos do nosso trabalho e decorre do elevado número de casos estudados. Ressaltamos que uma análise mais detalhada na determinação das incertezas pode ser realizada obtendo mais estimativas para cada parâmetro, como foi feito no estudo do modelo de Ising (Capítulo 7).

4.3.1 MPSMA

Para simular esse modelo, modificamos a vizinhança de cada sítio, que agora passa a ter $4(n + 1)$ vizinhos, e alteramos alguns comandos dentro do algoritmo que possuem relação direta com ela. Na Tabela 1 e no Algoritmo 1 definimos, através de uma lista de adjacência, a vizinhança de um sítio genérico i quando $n = 1$ e o tamanho do maior alcance é k . A posição de cada vizinho é representada na Figura 7. Os sítios são numerados de 0 a $N - 1$, em que $N = L^2$ e L é o comprimento da rede quadrada.

Tabela 1 – Vizinhança de cada sítio i do grafo. A letra l representa a posição do sítio vizinho, indicada na Figura 7, e $n_l(i)$ o número associado a ele.

l	$n_l(i)$
0	$(i + N - L) \pmod{N}$
1	$(i + 1) \pmod{N}$
2	$(i + L) \pmod{N}$
3	$(i + N - 1) \pmod{N}$
4	$(i + N - kL) \pmod{N}$
5	$(i + k) \pmod{N}$
6	$(i + kL) \pmod{N}$
7	$(i + N - k) \pmod{N}$

Para satisfazer a condição periódica de contorno que relaciona os lados direito e esquerdo, adicionamos os comandos do Algoritmo 1. As condições para conectar as partes superior e inferior são dadas diretamente pelos comandos da Tabela 1.

Quando a dimensão d for maior do que 2, cada sítio terá $2d(n + 1)$ vizinhos e a definição da vizinhança é feita de forma similar ao caso $d = 2$.

A estimativa de $\psi_L(p)$, $\bar{p}_L$ e p_c é obtida utilizando as fórmulas 3.3, 3.4 e 3.1, respectivamente, assim como é feito no modelo clássico.

4.3.2 MPEMA

A definição da vizinhança no MPEMA é mais complicada, pois, se considerarmos elos horizontais e verticais como sendo distintos, então temos $2(n + 1)$ tipos de elos. Para identificar o surgimento do cluster de empacotamento é necessário definir de forma precisa

Algoritmo 1: Relaciona os sítios das extremidades direita e esquerda a fim de satisfazer a condição periódica de contorno. A expressão $\lfloor x \rfloor$ denota o maior número inteiro menor ou igual a x .

```

1  para  $0 \leq i \leq N$  faça
2      se  $i \pmod{L} = 0$  então
3           $n_3(i) = i + L - 1$ 
4      fim
5      senão se  $(i + 1) \pmod{L} = 0$  então
6           $n_1(i) = i + L - 1$ 
7      fim
8      se  $(i - k) < L \cdot \lfloor \frac{i}{L} \rfloor$  então
9           $n_7(i) = i + L - k$ 
10     fim
11     senão se  $(i + k) \geq (\lfloor \frac{i}{L} \rfloor + 1) \cdot L$  então
12          $n_5(i) = i - L + k$ 
13     fim
14 fim

```

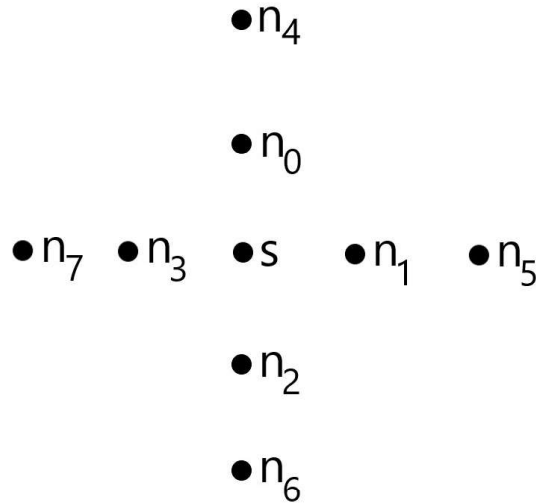


Figura 7 – Esquema mostrando a vizinhança de um sítio s no grafo com elos de alcances 1 e $k = 2$. Se o número associado ao sítio s for i , então os números de cada vizinho n_l são dados pela Tabela 1 e Algoritmo 1.

a posição e a vizinhança de cada elo no grafo. A seguir explicamos como isso foi feito para o caso $n = 1$.

Considere a rede quadrada de comprimento L e elos de tamanhos 1 e m . Temos então $4L^2$ elos separados em quatro tipos: *horizontal de tamanho 1*, *vertical de tamanho 1*, *horizontal de tamanho k* e *vertical de tamanho k* , um elemento genérico desses tipos será denotado por h_1 , v_1 , h_k e v_k , respectivamente. A cada elo é atribuído um número que depende do

seu tipo: $h_1 = 4k$, $v_1 = 4k + 1$, $h_k = 4k + 2$ e $v_k = 4k + 3$ com $k \in \{0, 1, \dots, (L^2 - 1)\}$, os números são atribuídos em ordem crescente iniciando da esquerda para a direita e de cima para baixo. Na Figura 8 é mostrado um exemplo com a identificação de alguns elos. Observe que os sítios do grafo estão dispostos em L linhas e L colunas. Para localizar a posição (linha e coluna) de cada elo, definimos $2L$ colunas de elos numeradas de 0 a $2L - 1$ da seguinte forma:

- (i) Elos verticais cujas extremidades estejam localizadas em uma mesma coluna de sítios formam uma coluna de elos.
- (ii) Seja $\tilde{S}$ uma coluna de sítios. Todos os elos horizontais cuja extremidade esquerda esteja localizada em $\tilde{S}$ formam uma coluna de elos.
- (iii) Numeramos as colunas em ordem crescente da esquerda para a direita alternando entre colunas do tipo (i) e do tipo (ii).

As linhas são definidas de forma análoga e numeradas em ordem crescente de cima para baixo. Na Figura 8 é indicada a localização dos elos das duas primeiras linhas e colunas quando o comprimento da rede é $L = 3$.

Como cada tipo de elo tem uma topologia de vizinhança distinta, temos que defini-la separadamente. Na figura 9 representamos a vizinhança e numeramos os vizinhos dos elos do tipo h_1 . Na Tabela 2 identificamos, através de uma lista de adjacência, o número atribuído a cada um de seus vizinhos; as letras i e j são definidas através das igualdades abaixo

$$i = \left\lfloor \frac{\tilde{r}}{4L} \right\rfloor \quad \text{e} \quad j = \left\lfloor \frac{\tilde{r} \pmod{4L}}{4} \right\rfloor \quad (4.5)$$

em que $\tilde{r}$ é o número atribuído ao elo. De forma similar, definimos a vizinhança dos elos do tipo v_1 , v_k e h_k no Apêndice B.

Como a probabilidade de cada tipo de elo ser aberto é a mesma, podemos estimar p_c utilizando o mesmo procedimento descrito no modelo clássico de percolação (Seção 3.2). Na expressão 3.3 temos que $N = 2d(n + 1)L^2$, pois N corresponde à quantidade total de elos do grafo.

4.3.3 MPEMA com $p \neq q$

Quando consideramos probabilidades distintas para cada tipo de elo ser aberto no MPEMA, a estimativa de p_c torna-se mais complexa, pois não podemos utilizar a expressão 3.3

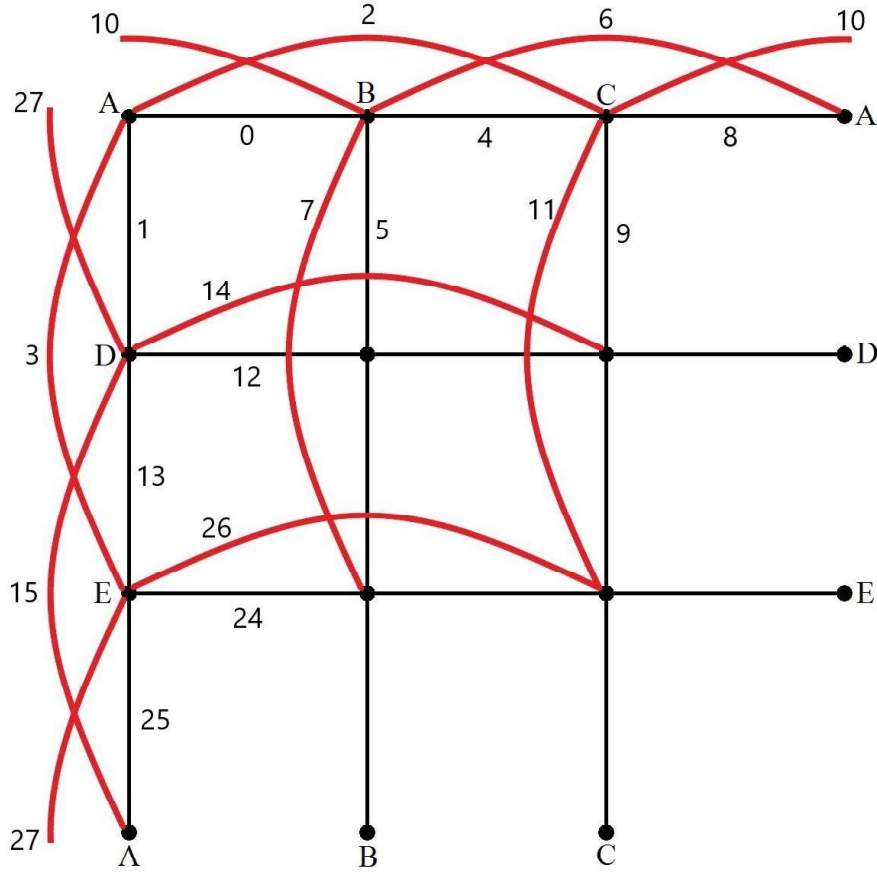


Figura 8 – Identificação e localização dos elos na rede quadrada de tamanho $L = 3$ com condição periódica de contorno. Consideramos $n = 1$ com elos de tamanhos 1 e $k = 2$. Na figura são representados apenas elos que estão localizados nas linhas e colunas 0 e 1. Os elos da coluna 0 são: $\{1, 3, 13, 15, 25, 27\}$; da coluna 1: $\{0, 2, 12, 14, 24, 26\}$; da linha 0: $\{0, 2, 4, 6, 8, 10\}$; da linha 1: $\{1, 3, 5, 7, 9, 11\}$. Elos representados através de segmentos de reta e de curvas têm tamanhos iguais a 1 e $k = 2$, respectivamente.

da mesma forma como foi feito no modelo com probabilidades iguais. Nós estudamos esse modelo considerando $n = 1$ (dois alcances) e elos de tamanhos 1 e k . Atribuímos probabilidades p e q para os elos de tamanhos 1 e k serem abertos, respectivamente.

Se $p = q$, a parte principal do algoritmo para simular uma amostra do modelo consiste em fixar uma lista ordenada, obtida por uma permutação de todos os elos, e abrir cada um deles, um por vez, até ocorrer percolação. Se ela ocorrer quando o c -ésimo elo for aberto, então $\overline{Q}_j = 0$ para $j < c$ e $\overline{Q}_j = 1$ para $j \geq c$, em que $\overline{Q}_j$ é a estimativa da probabilidade de ocorrer percolação quando há j elos abertos no grafo. Após simular várias amostras, a probabilidade de ocorrer percolação é estimada utilizando a Equação 3.3.

Vamos denotar por M a quantidade de elos de cada tipo, logo $M = \frac{N}{2} = 2L^2$. No MPEMA com $p \neq q$, temos que atribuir um número para os N elos de forma que seja fácil distinguir o tamanho de cada um deles a partir do seu número. Por exemplo, número ímpar para elos de tamanho 1 e par para elos de tamanho k . Em seguida, criamos duas listas ordenadas,

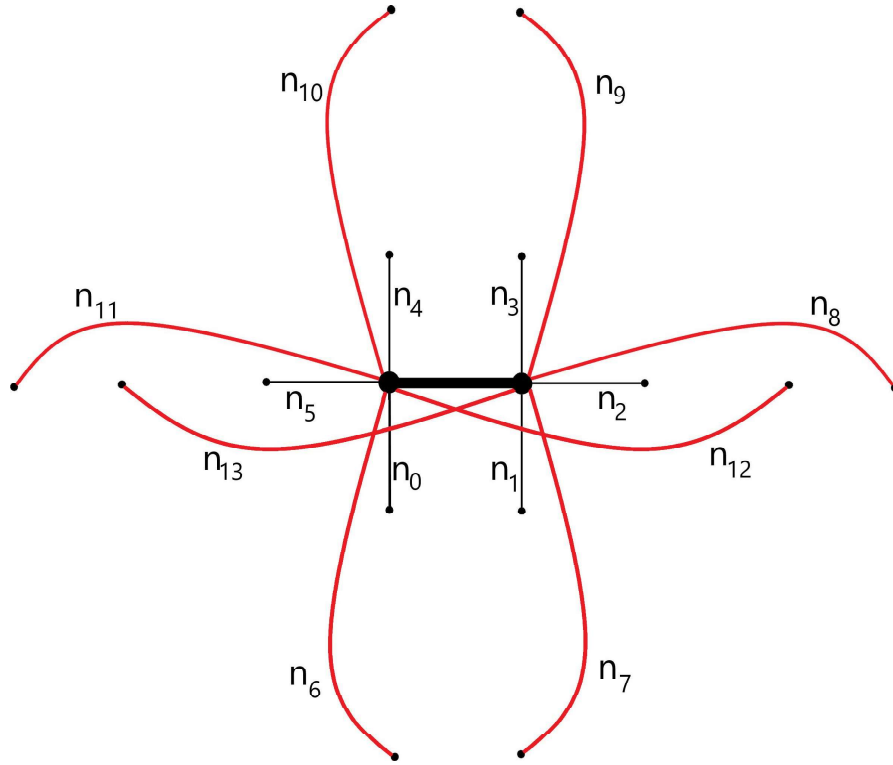


Figura 9 – Representação da vizinhança dos elos do tipo h_1 . Segmentos de reta e linhas curvas correspondem a elos de tamanhos 1 e k , respectivamente.

Tabela 2 – Identificação do número de cada vizinho dos elos do tipo h_1 .

r	$n_r (h_1)$
0	$4Li + 4j + 1$
1	$4Li + 4[(j + 1) \pmod{L}] + 1$
2	$4Li + 4[(j + 1) \pmod{L}]$
3	$4L[(i - 1 + L) \pmod{L}] + 4[(j + 1) \pmod{L}] + 1$
4	$4L[(i - 1 + L) \pmod{L}] + 4j + 1$
5	$4Li + 4[(j - 1 + L) \pmod{L}]$
6	$4Li + 4j + 3$
7	$4Li + 4[(j + 1) \pmod{L}] + 3$
8	$4Li + 4[(j + 1) \pmod{L}] + 2$
9	$4L[(i - k + L) \pmod{L}] + 4[(j + 1) \pmod{L}] + 3$
10	$4L[(i - k + L) \pmod{L}] + 4j + 3$
11	$4Li + 4[(j - k + L) \pmod{L}] + 2$
12	$4Li + 4j + 2$
13	$4Li + 4[(j - k + 1 + L) \pmod{L}] + 2$

uma para cada tamanho, permutando os M respectivos elos. Vamos denotar por $\langle m, r \rangle$ uma configuração em que somente os primeiros m e r elos das listas correspondentes aos tamanhos k e 1, respectivamente, estejam abertos. Assim como foi feito na Equação 3.3, utilizamos o Teorema da Partição [30] para estimar a probabilidade de ocorrer percolação

na rede quadrada de comprimento L , para cada $p, q \in [0, 1]$. Essa probabilidade será denotada por $\psi_L(p, q)$ e pode ser calculada da seguinte forma:

$$\psi_L(p, q) = \sum_{m=0}^M \sum_{r=0}^M \binom{M}{m} \cdot \binom{M}{r} \cdot p^m (1-p)^{M-m} q^r (1-q)^{M-r} \cdot \bar{Q}_{m,r}, \quad (4.6)$$

em que $\bar{Q}_{m,r}$ corresponde à probabilidade de ocorrer percolação em uma configuração $\langle m, r \rangle$ e os demais termos correspondem à probabilidade de ocorrer essa configuração. Para estimar $\bar{Q}_{m,r}$ é necessário, após fixar as listas de elos, testar se ocorreu ou não percolação para cada configuração $\langle m, r \rangle$, $m, r \in \{0, 1, \dots, M\}$. Nesse caso, teremos um algoritmo com complexidade de tempo computacional $\mathcal{O}(M^2) = \mathcal{O}(L^4)$, ou seja, ineficiente. O problema está no fato de que, para cada valor de m , é necessário reiniciar a abertura de todos os elos e verificar se ocorrerá ou não a percolação, pois após um elo ser aberto não é possível fechar somente ele e continuar a análise.

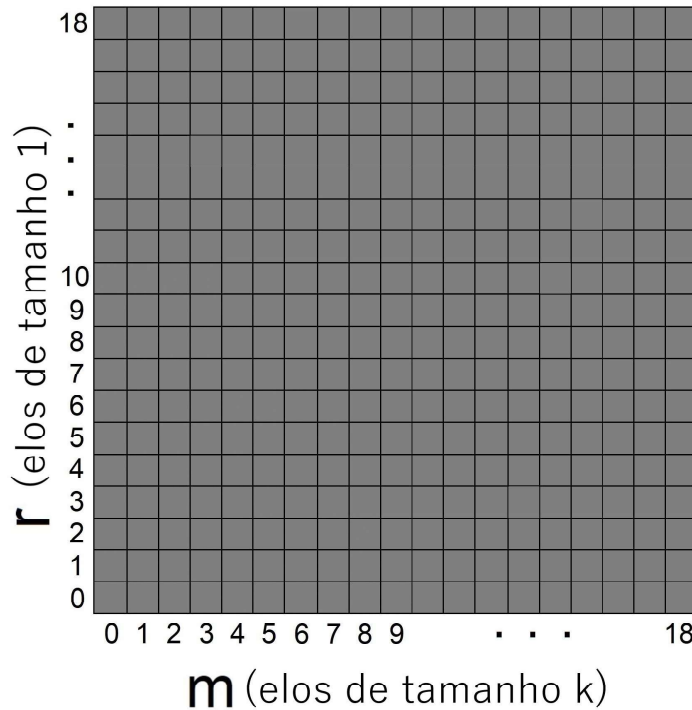


Figura 10 – Quantidade de configurações $\langle m, r \rangle$ que devemos verificar se ocorreu percolação quando consideramos a rede quadrada de comprimento $L = 3$ e elos de tamanhos 1 e k . O quadrado localizado na linha r e coluna m representa a configuração em que apenas os primeiros r e m elos de tamanhos 1 e k , respectivamente, são abertos.

Com o intuito de comparar a eficiência de algoritmos que simulam esse modelo, mostramos na Figura 10 um esquema em que cada quadrado cinza representa uma configuração $\langle m, r \rangle$, considerando uma rede quadrada de comprimento $L = 3$ (18 elos de cada tamanho).

O número de quadrados cinzas está diretamente relacionado à complexidade de tempo computacional do algoritmo, já que devemos analisar cada par $\langle m, r \rangle$ e verificar se ocorreu ou não a percolação. Em nosso estudo, simulamos o modelo considerando $512 \leq L \leq 1024$. A seguir, descrevemos dois algoritmos denominados *Algoritmo Padrão* e *Algoritmo Modificado* e esquemas similares ao da Figura 10 para ilustrar o ganho no tempo de execução em cada um deles. O primeiro é uma aplicação direta do Algoritmo de Newmann-Ziff e possui complexidade de tempo computacional elevada, o segundo, que foi desenvolvido por nós, é uma modificação do Algoritmo Padrão e é mais eficiente. Ambos são descritos no artigo “*Multi-range percolation model on the square lattice*” [4].

Algoritmo Padrão (AP): Vamos denotar por r_i o primeiro valor de r em que ocorre percolação quando $m = i$ ($i \in \{0, \dots, M\}$). A seguir descrevemos o AP:

- (i) Crie as duas listas com a ordem de abertura de cada tipo de elo.
- (ii) Para cada valor de $i \in \{0, \dots, M\}$, abra os i primeiros elos de tamanho k e, em seguida, os elos de tamanho 1, seguindo a ordem da lista, até ocorrer a percolação. Dessa forma, obtém-se o valor de r_i para todo i analisado.
- (iii) Na execução da Etapa (ii), se a percolação ocorrer durante a abertura dos elos de tamanho k , suponha que seja quando $i = m^*$, então $r_i = 0$ se $i \geq m^*$ e podemos interromper a execução do algoritmo.

Observe que conhecendo o valor de r_i , para todo i , saberemos se ocorre ou não percolação para cada uma das M^2 configurações $\langle m, r \rangle$.

Considere uma simulação do modelo em que fixamos a ordem de abertura dos elos de cada tipo. Na figura 11 mostramos um esquema com as configurações analisadas se usarmos o AP. Após explicarmos o próximo algoritmo, consideraremos essa mesma ordem de abertura dos elos para comparar a eficiência entre eles. Os quadrados na cor branca estão relacionados às configurações que não precisamos analisar, pois sabemos se ocorrerá percolação de forma indireta. Logo, representam um ganho de tempo na execução do algoritmo. Vamos agora obter uma estimativa do número médio de pares $\langle m, r \rangle$ que serão analisados, que iremos denotar por $\mathcal{C}(k, L)$, ao realizarmos várias simulações em uma rede quadrada de comprimento L considerando elos de tamanhos 1 e k . Essa estimativa é equivalente à complexidade de tempo computacional do algoritmo, pois no restante dele são realizadas operações simples que demandam bem menos tempo do que $\mathcal{C}(k, L)$.

Estimativa de $\mathcal{C}(k, L)$ no AP: Quando $r = 0$ a percolação ocorre, em média, quando $m = \frac{1}{2} \cdot M$, pois o ponto crítico do modelo de percolação em $\mathbb{L}^2$ é $\frac{1}{2}$. Para cada valor de m , o valor médio das $(m + r)$ configurações analisadas até ocorrer percolação satisfaz $(m + r) > p_c(\mathbb{L}^4) \cdot (2M)$, com $p_c(\mathbb{L}^4) \approx 0.16013122$ [55]. Na última

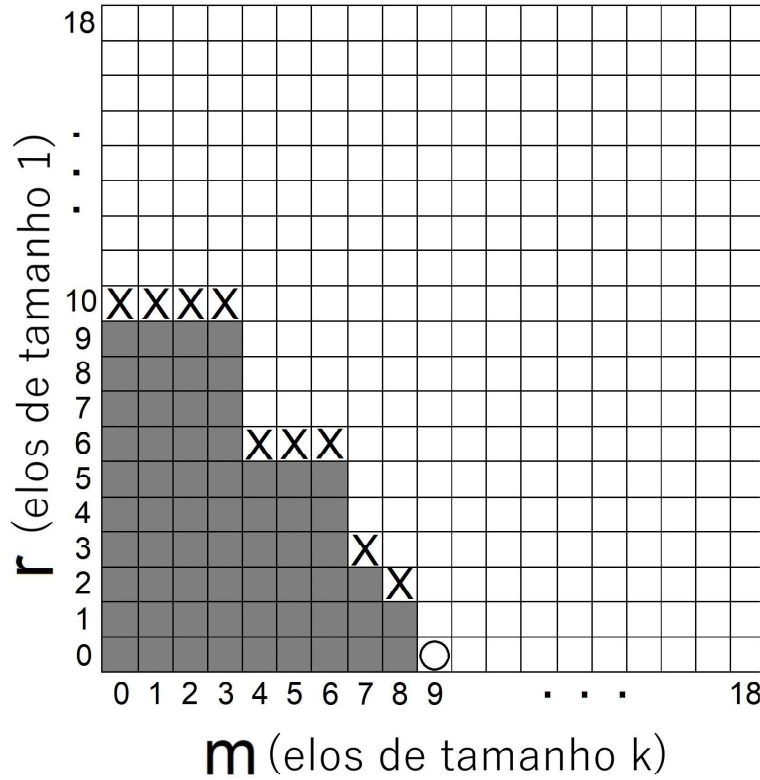


Figura 11 – Quantidade de configurações que devemos verificar se ocorreu percolação, quando utilizamos o AP, na rede quadrada de comprimento $L = 3$ e elos de tamanhos 1 e k . As configurações $\langle m, r \rangle$ representadas por quadrados brancos não precisam ser analisadas, pois é possível saber se ocorreu ou não percolação em cada uma delas apenas analisando as demais configurações (representadas por quadrados na cor cinza ou com símbolos). Os símbolos **X** e $\bigcirc$ indicam que a percolação foi identificada no momento da abertura dos elos de tamanhos 1 e k , respectivamente.

desigualdade estamos usando o fato de que o ponto crítico do MPMA convergirá para $p_c(\mathbb{L}^4)$ (Teorema 1) e de forma monótona decrescente (conjectura verificada por nós). Dessa forma, temos que:

$$\mathcal{C}(k, L) \geq \frac{M}{2} \cdot [2M \cdot p_c(\mathbb{L}^4)] \approx 0.64 \cdot L^4. \quad (4.7)$$

Observe que a complexidade de tempo computacional é da ordem de L^4 , tornando o algoritmo lento para L grande.

Algoritmo Modificado (AM): Assim como foi feito no AP, inicialmente criamos as listas com a ordem de abertura de cada tipo de elo e definimos r_i , para $i \in \{0, \dots, M\}$, como o primeiro valor de r em que ocorre percolação quando $m = i$. Denotamos por $s(k, L)$ o número médio de vezes em que $r_i \neq r_{i-1}$, considerando todos os valores de i . Na Figura 11, por exemplo, temos que $r_0 = 10$, $r_7 = 3$ e $s(k, L) = 5$. Descrevemos a seguir o algoritmo em sete etapas:

- (i) Defina $a = 0$. A variável a assume um novo valor toda vez que a etapa (vi) for executada.
- (ii) Abra a elos de tamanho k .
- (iii) Abra elos de tamanho 1 até ocorrer percolação, dessa forma obtemos o valor de r_a .
- (iv) Reinicie a abertura dos elos. Abra a elos de tamanho k e, em seguida, $(r_a - 1)$ elos de tamanho 1 (logo não ocorrerá percolação).
- (v) Abra elos de tamanho k até ocorrer percolação. Suponha que seja quando $m = w$, então teremos que $r_a = r_{a+1} = \dots = r_{w-1}$.
- (vi) Defina $a = w$. A variável w assumirá um novo valor quando repetirmos a etapa (v).
- (vii) Repita as etapas de (ii) a (vi) até determinar o valor de i em que $r_i = 0$.

Seguindo as etapas descritas no AM conseguiremos saber se ocorre ou não percolação para todo par $\langle r, m \rangle$. A grande vantagem dele é que evitamos reiniciar a todo momento a abertura de elos. Para podermos comparar a eficiência do AM com a do AP, vamos analisar $\mathcal{C}(k, L)$.

Estimativa de $\mathcal{C}(k, L)$ no AM: Para simplificar o cálculo, vamos supor que todos os elos abertos são de tamanho 1. Dessa forma, iremos estimar uma cota superior para $\mathcal{C}(k, L)$, pois abrir elos de tamanho k favorece mais a ocorrência da percolação e, portanto, diminui o valor de $\mathcal{C}(k, L)$.

Nas etapas (ii) e (iii), juntas, e na etapa (iv) são abertos, em média, M elos ($p_c(\mathbb{L}^2) = \frac{1}{2}$). Como as etapas (ii), (iii) e (iv) serão executadas $s(k, L)$ vezes, esses blocos correspondem a $2M \cdot s(k, L)$ operações. Juntando todas as vezes em que a etapa (v) é executada, temos que o número de elos abertos será, em média, $\frac{M}{2}$, novamente pelo fato de que $p_c(\mathbb{L}^2) = \frac{1}{2}$. Através de uma análise numérica, estimamos $s(k, L) \approx \lambda \cdot L^\theta$, para $k \in \{2, 3, 4, 5, 8\}$, com $\theta \leq 0.834$ e $\lambda \leq 0.982$. Dessa forma, temos que:

$$\mathcal{C}(k, L) \leq 2M \cdot s(k, L) + \frac{M}{2} \approx 4\lambda L^{2+\theta} + L^2. \quad (4.8)$$

Para os valores de k citados anteriormente, temos que $\mathcal{C}(k, L) \leq 3.928 \cdot L^{2.834}$.

Comparando as inequações 4.7 e 4.8, percebemos como o AM é mais eficiente do que o AP. Na Figura 12 mostramos o esquema com os casos analisados no mesmo exemplo relacionado ao esquema da Figura 11. Comparando essas duas figuras, percebemos a vantagem do AM em relação ao AP.

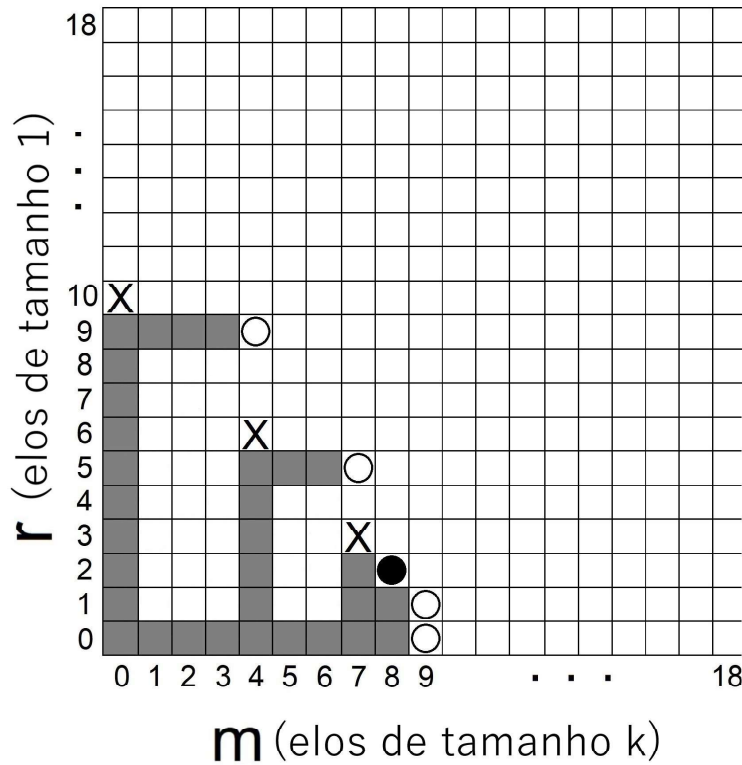


Figura 12 – Quantidade de configurações que devemos verificar se ocorreu percolação, quando utilizamos o AM, na rede quadrada de comprimento $L = 3$ e elos de tamanhos 1 e k . As configurações $\langle m, r \rangle$ representadas por quadrados brancos não precisam ser analisadas, pois é possível saber se ocorreu ou não percolação em cada uma delas apenas analisando as demais configurações (representadas por quadrados na cor cinza ou com símbolos). Os símbolos **X**, **O** e **●** indicam que a percolação foi identificada no momento da abertura dos elos de tamanhos 1, k e ambos os tamanhos, respectivamente.

4.4 Resultados

4.4.1 Monotonicidade do Ponto Crítico

Nos modelos de percolação de sítios e elos com $n = 1$ (dois alcances) e elos de tamanhos 1 e k , nós consideramos $k \in \{2, 3, \dots, 25\}$. No MPSMA também foi estudado o caso $n = 2$ com elos de tamanhos 1, k e $u = k \cdot (k + 1)$, em que $k \in \{2, 3, \dots, 7\}$. Para cada caso analisado, escolhemos entre 6 e 7 valores de L com $512 \leq L \leq 4096$ (sítios e $n = 1$), $512 \leq L \leq 1792$ (elos e $n = 1$) e $1024 \leq L \leq 5120$ (sítios e $n = 2$). O número de amostras variou entre 10000 ($L = 5120$) a 80000 ($L = 512$).

O tempo de execução do algoritmo depende da quantidade de *elementos* (elos ou sítios) do grafo, que por sua vez depende de L e da dimensão d . Observe que se estivermos trabalhando no modelo com $n + 1$ alcances na rede quadrada de comprimento L , então

teremos $2nL^2$ elos e L^2 sítios. Por esse motivo, escolhemos valores menores de L no MPMA e analisamos apenas o MPSMA quando $n = 2$ (já que o valor de n não influencia na quantidade de sítios do grafo).

Analisando os dados obtidos após as simulações, verificamos que o ponto crítico do modelo decresce à medida que os tamanhos dos elos aumentam. Na Figura 13 apresentamos os gráficos obtidos para cada situação estudada. Além de verificar a monotonicidade, encontramos evidências numéricas de que o ponto crítico decai, em função do tamanho dos elos, segundo uma lei de potência. Através de um ajuste de curvas da forma:

$$p_c(G_2^{\vec{k}^n}) = a \cdot k^b + c; \quad a, b, c \in \mathbb{R} \quad (4.9)$$

obtivemos os dados que constam na Tabela 3 que comprovam tal fato.

Tabela 3 – Parâmetros obtidos no ajuste de curvas realizado através da Equação 4.9 em cada situação analisada.

Situação	a	b	c	R-Square
sítio: $n = 1$	0.4072(16)	-1.5336(53)	0.19683(9)	0.99997
elo: $n = 1$	0.16580(55)	-1.4238(40)	0.15986(3)	0.99996
sítio: $n = 2$	0.2573(11)	-2.1317(66)	0.10902(5)	0.99999

Sob o ponto de vista numérico, o decaimento segundo uma lei de potência é um fato importante, pois nos permite obter estimativas para o ponto crítico do modelo clássico em $\mathbb{L}^d$ para dimensões altas simulando o modelo com múltiplos alcances bidimensional. O valor de c na Equação 4.9 é a estimativa de p_c , pois $b < 0$ e, portanto, o termo $a \cdot k^b$ converge para zero quando $k \rightarrow \infty$. De acordo com o Teorema 1, quando $n = 1$ e $n = 2$, o valor de c representa o ponto crítico do modelo clássico em $d = 4$ e $d = 6$, respectivamente. Para efeito de comparação, exibimos na Tabela 4 as estimativas de $p_c(\mathbb{L}^4)$ e $p_c(\mathbb{L}^6)$ encontradas na literatura (onde foi simulado o modelo clássico diretamente em $\mathbb{L}^d$) e as obtidas por nós através dos modelos com múltiplos alcances.

Tabela 4 – Comparação entre as estimativas dos pontos críticos do MCP obtidas por nós e as encontradas na literatura.

Situação	Nossa estimativa	Simulação direta em $\mathbb{L}^d$
$p_c(\mathbb{L}^4)$ - sítio	0.19683(9)	0.19688561(3) [55]
$p_c(\mathbb{L}^4)$ - elo	0.15986(3)	0.16013122(6) [55]
$p_c(\mathbb{L}^6)$ - sítio	0.10902(5)	0.109016661(8) [55]

A precisão em nossas estimativas foi menor, e para o caso “elo: $n = 1$ ” nosso resultado não é compatível, apesar de próximo, com o encontrado em [55]. Descrevemos no item (i)

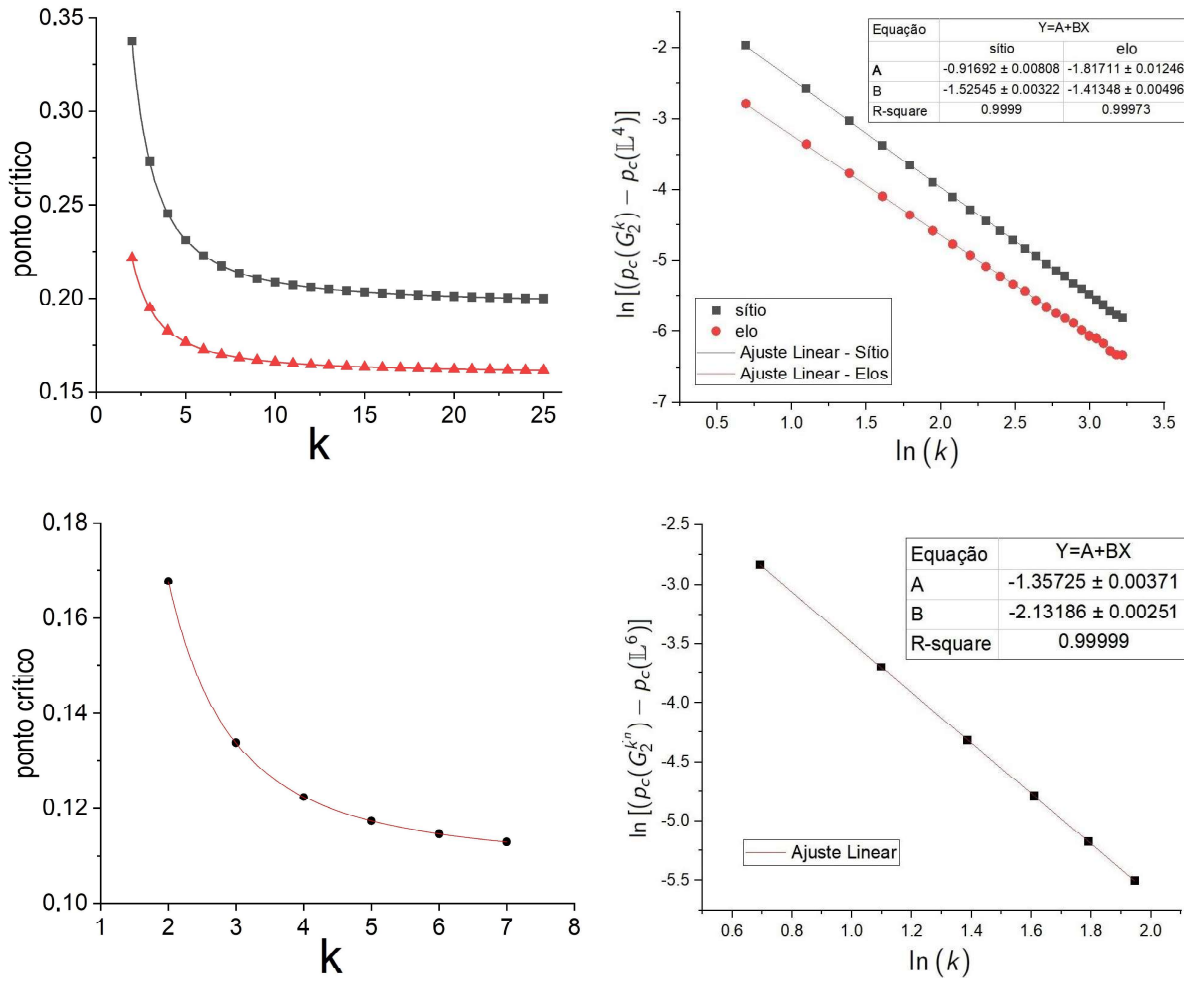


Figura 13 – No painel superior esquerdo apresentamos as estimativas do ponto crítico no modelo com elos de tamanhos 1 e k em função do maior tamanho (k). Os pontos marcados com quadrados e triângulos representam os modelos de sítios e elos, respectivamente. No painel superior direito apresentamos os mesmos dados em um gráfico log – log. No painel inferior esquerdo temos os valores dos pontos críticos obtidos no MPEMA com elos de tamanho 1, k e u , em função de k , em que $u = k \cdot (k+1)$. No painel inferior direito apresentamos os mesmos dados em um gráfico log – log. Em todos os casos verificamos que $p_c(G_2^{\vec{k}^n})$ é decrescente em k . A curva contínua apresentada em cada painel esquerdo corresponde ao ajuste de curvas realizado através da Equação 4.9. Os ajustes lineares realizados nos gráficos dos painéis direitos foram baseados na Equação 4.9 em que $A = \ln(a)$, $B = b$, $X = \ln(k)$ e $Y = \ln[p_c(G_2^{\vec{k}^n}) - p_c(\mathbb{L}^d)]$.

a seguir o provável motivo disso ter ocorrido e discutimos em (ii) uma vantagem do nosso método, em relação ao utilizado na referência citada, quando trabalhamos com modelos de percolação com dependência de longo alcance.

(i) Nós analisamos um número elevado de casos (48 para $n = 1$ e 6 para $n = 2$), cada um deles corresponde a um ponto em um dos gráficos da Figura 13 e é obtido simulando o modelo para cada valor de L escolhido. Por esse motivo, para podermos simular os modelos em um tempo não muito elevado, escolhemos realizar

um número menor de amostras. Logo, a precisão na estimativa de cada ponto crítico e, conseqüentemente, na de $p_c(\mathbb{L}^4)$ e $p_c(\mathbb{L}^6)$, foi afetada de forma negativa.

(ii) Devido à lentidão do Algoritmo de Newmann-Ziff para estimar o ponto crítico em dimensões altas, para obter as estimativas da Tabela 4 Mertens e Moore [55] utilizaram um algoritmo similar ao Algoritmo de Leath [44]. Ele baseia-se no crescimento de um único cluster para estimar p_c e, dessa forma, reduz a quantidade de memória e tempo para simular o modelo. Esse algoritmo tem a limitação de só poder ser utilizado em modelos de percolação independentes (a probabilidade de cada elo/sítio ser aberto independe da configuração do restante do grafo). Resultados preliminares sugerem que o método utilizado por nós também pode ser aplicado a modelos de percolação que não são independentes como, por exemplo, o Modelo de Percolação com Grau Restrito que será estudado no Capítulo 5. Se isso realmente ocorrer, o nosso método para estimar p_c será uma importante ferramenta para estudar o comportamento do ponto crítico em modelos de percolação com dependência de longo alcance.

4.4.2 Necessidade dos Tamanhos dos Elos serem Múltiplos

No Teorema 1 é necessário que o tamanho de cada elo seja múltiplo dos tamanhos dos elos menores. Nós analisamos qual o comportamento de p_c quando isso não ocorre. Escolhemos elos de tamanhos 1, k e u e analisamos o valor de p_c para cada valor de $k \in \{1, 2, \dots, u\}$. Consideramos três situações: $u = 27$ (número ímpar), $u = 31$ (número primo) e $u = 36$ (número par). Na Figura 14 apresentamos os resultados obtidos.

É natural pensarmos que quanto maior o valor de k , menor será o ponto crítico, pois elos maiores irão facilitar a ocorrência da percolação. Percebemos que isso não ocorre para nenhum valor de u estudado. Mesmo quando $k \leq k'$ e $u \leq u'$, não podemos afirmar que o ponto crítico com k' e u' será menor ou igual do que com k e u . Esse fato pode ser observado quando $k = 16, u = 31$ e $k' = 18, u' = 36$, pois p_c é maior no segundo caso.

Para explicar esse comportamento, propomos uma heurística considerando que o aumento na diversidade de conexões entre sítios, que podem ser feitas com um número fixo de elos, também favorece a ocorrência da percolação. A seguir damos uma explicação formal da heurística:

Heurística: Considere um passeio aleatório em $\mathbb{L}$ iniciando na origem e podendo dar passos de tamanhos 1, k e u . Vamos denotar por χ_ω^k o número de sítios distintos visitados pelo passeio após ω passos. Para $u \leq \omega \leq 10u$, o comportamento de $\left(1 - \frac{\chi_\omega^k}{\omega}\right)$ é similar ao do ponto crítico no MPEMA com elos de tamanhos 1, k e u , com k variando entre 1 e u . A condição $u \leq \omega \leq 10u$ foi obtida empiricamente.

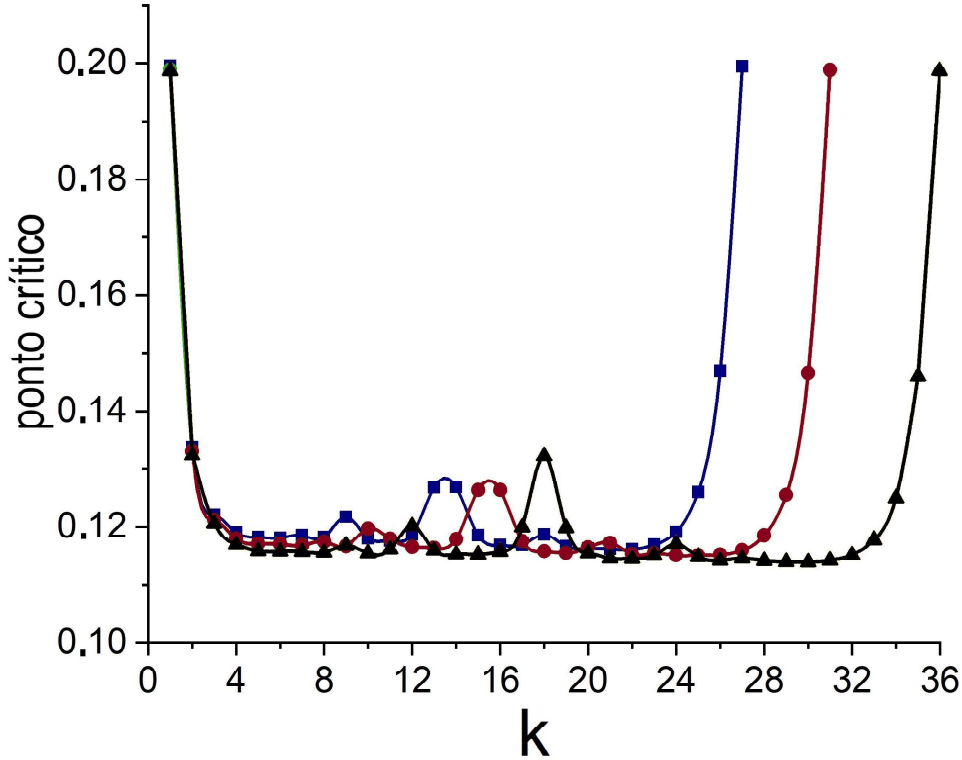


Figura 14 – Comportamento do ponto crítico no MPEMA com elos de tamanhos 1, k e u . Fixamos os valores 1 e u e variamos k entre eles. Triângulos correspondem a $u = 36$; círculos a $u = 31$ e quadrados a $u = 27$.

Na Figura 15 comparamos os dados obtidos através da heurística e da simulação do modelo para o caso $u = 36$. Observamos a similaridade no comportamento entre as curvas. Resultados análogos foram obtidos para $u = 27$ e $u = 31$, porém preferimos omiti-los.

4.4.3 Comportamento da Curva Crítica - Probabilidades p e q

No modelo de percolação com dois alcances, também estudamos o caso em que atribuímos probabilidades p e q para os elos de tamanhos 1 e k serem abertos, respectivamente. Nesse caso, a probabilidade de ocorrer percolação depende dos parâmetros p e q , e o comportamento crítico do modelo é descrito pela curva crítica $q_c^k(p)$ (definida em 4.4). Analisamos essa curva para $k \in \{2, 3, 4, 5, 8\}$ e consideramos apenas a rede de comprimento $L = 1024$, pois dessa forma já conseguimos ter uma noção sobre o comportamento de $q_c^k(p)$. Também é possível aplicar a TETF para estimarmos essa curva, porém devemos fixar alguns valores de p e para cada um deles estimar o ponto crítico q_c .

Na Figura 16, painel esquerdo, mostramos a estimativa da função $\psi_L(p, q)$ para todos os valores de $p, q \in [0, 1]$ quando $k = 2$. A projeção do gráfico dessa função no plano pq , onde é possível identificar $q_c^2(p)$, é apresentada no painel direito da mesma figura.

As curvas críticas $q_c^k(p)$, para cada valor de k estudado, são mostradas na Figura 17. Vamos

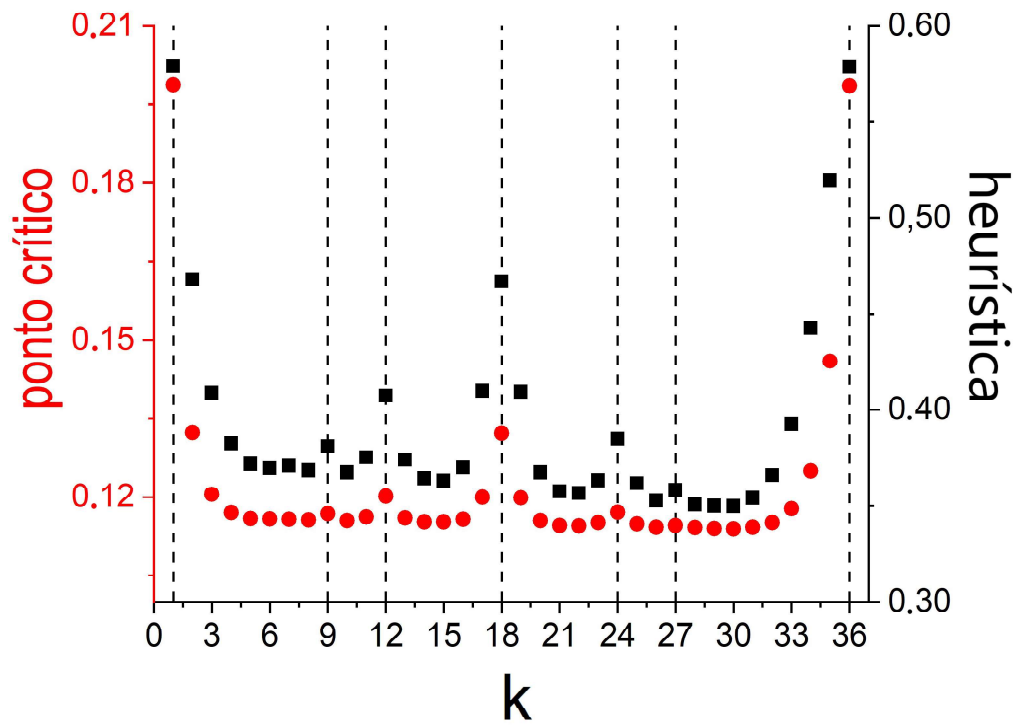


Figura 15 – Comparação entre o gráfico obtido simulando o modelo com alcances 1, k e $u = 36$, $1 \leq k \leq u$ (círculos), e o obtido através da heurística (quadrados).

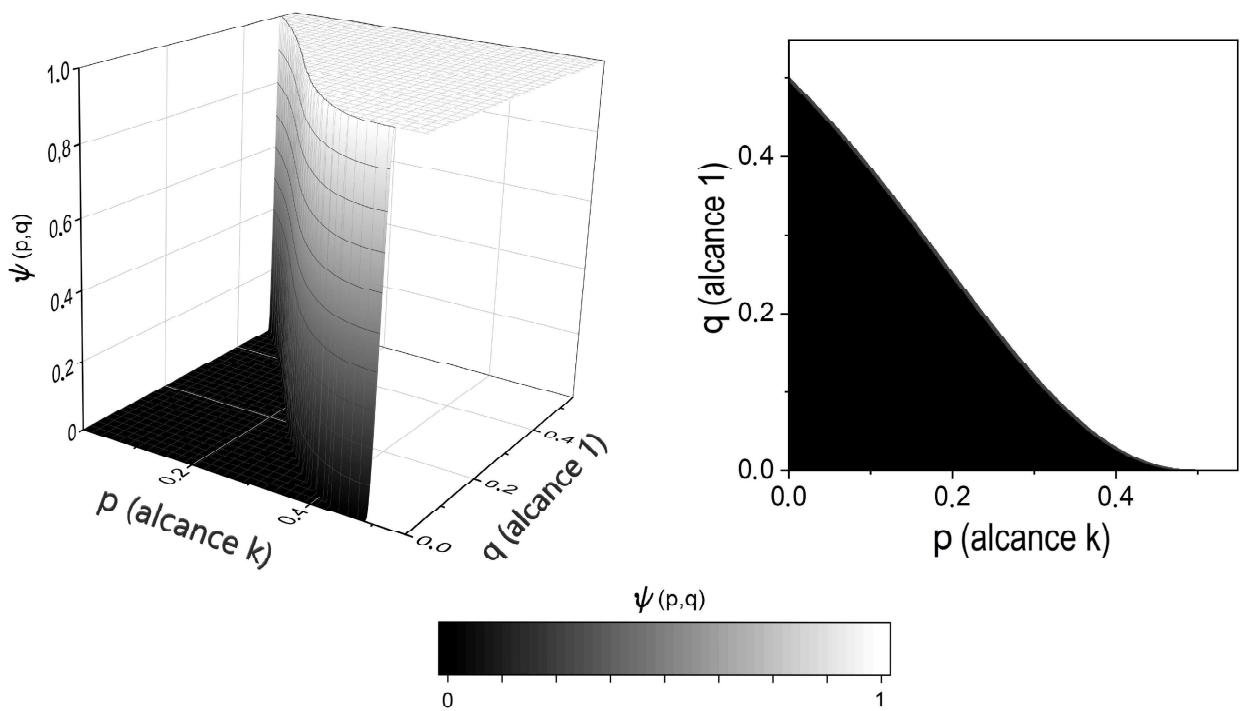


Figura 16 – Gráfico da função $\psi_L(p, q)$ (painel esquerdo) e a sua projeção no plano pq (painel direito) quando $k = 2$ e $L = 1024$.

definir $A := (p_c(\mathbb{L}^4), p_c(\mathbb{L}^4))$ e A_k como a interseção da curva $q_c^k(p)$ com a reta $p = q$. Enumeramos a seguir algumas observações feitas em relação aos gráficos da Figura 17:

- (i) Pelo Teorema 1, temos que a sequência $\{A_k\}_k$ converge para A . Esse comportamento pode ser observado na Figura 17.
- (ii) As curvas devem intersectar os eixos coordenados em $(0, \frac{1}{2})$ e $(\frac{1}{2}, 0)$ para todos os valores de k , já que quando $p = 0$ ou $q = 0$ o modelo é equivalente ao MCP em $\mathbb{L}^2$.
- (iii) À medida que o valor de k aumenta, a simetria do gráfico em relação à reta $p = q$ também aumenta. Isso ocorre pelo fato de que para $k \rightarrow \infty$, o grafo comporta-se como a rede hipercúbica $\mathbb{L}^4$ com todos os elos tendo tamanho 1. Dessa forma, p e q têm a mesma influência no valor da probabilidade de ocorrer percolação.

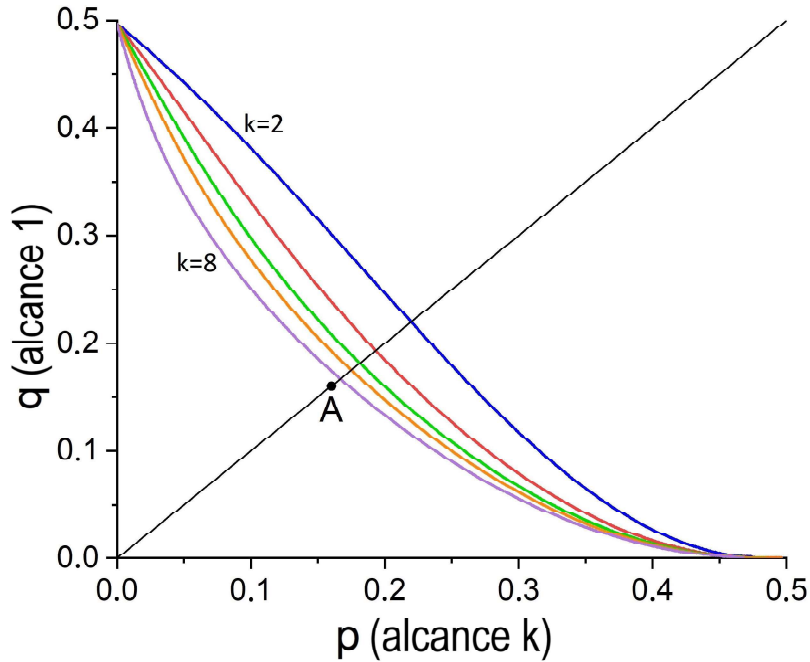


Figura 17 – Curvas críticas $q_c^k(p)$ para o modelo com dois alcances em que escolhemos parâmetros distintos, p e q , para cada tipo de elo ser aberto. Os valores de $k \in \{2, 3, 4, 5, 8\}$ correspondem aos gráficos em ordem crescente de cima para baixo.

5 Modelo de Percolação com Grau Restrito

O *Modelo de Percolação com Grau Restrito* (MPGR) foi proposto em 2014 na Tese de Doutorado *Constrained-degree percolation* [74] e é baseado no MCP. Nele, tentamos abrir elos em um grafo seguindo uma ordem aleatória que é definida *a priori*. Cada elo não será aberto se a quantidade de elos adjacentes a alguma de suas extremidades exceder uma quantidade k previamente fixada. Outros modelos que consideram algum tipo de restrição na abertura de elos foram estudados em [27, 36]. O MPGR possui relação com o modelo físico *Random Sequential Adsorption* (RSA) [19, 20] que é utilizado no estudo de dímeros e polímeros [26, 69, 79]. O RSA consiste em considerarmos um substrato vazio e ir adicionando objetos imóveis com a condição de que não haja interseção entre eles. A dinâmica termina quando não há mais espaço para a deposição dos objetos.

Em 1979, Gaunt propôs um modelo denominado *Percolation with restricted-valence* [28] que é similar ao MPGR, ele considerou percolação de sítios ao invés de elos. Posteriormente, Kertész, Chakrabarti e Duarte [42] estimaram o valor do ponto crítico desse modelo na rede hipercúbica $\mathbb{L}^d$ quando $d = 2, 3$, além de determinarem uma quantidade denominada *concentração máxima aleatória*, que será definida posteriormente, e o valor do *expoente crítico* ν para essas dimensões.

Nesse capítulo, iremos definir o MPGR e apresentar resultados numéricos relacionados a ele acerca do valor crítico (em função da restrição k), da concentração máxima aleatória e do valor de ν . Esses resultados foram publicados no artigo “*On the monotonicity of the critical time in the Constrained-degree percolation model*” [2]. Em nosso estudo, consideramos o grafo sendo a rede hipercúbica $\mathbb{L}^d$ para $d = 2, 3, 4$.

5.1 Definição e Principais Resultados

O MPGR é definido em um grafo infinito e conexo $\mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$ com *grau limitado*. Dizemos que essa última condição ocorre se existe uma constante $\Delta \in \mathbb{N}$ tal que $\deg(v) \leq \Delta$ para todo $v \in \mathcal{V}$, em que $\deg(v)$ denota o número de vizinhos do sítio v (*grau de v*). A descrição do modelo consiste das seguintes etapas:

- (i) Fixe uma sequência de números naturais $\{k_v\}_{v \in \mathcal{V}}$ em que k_v denotará a restrição relacionada ao vértice v .
- (ii) Defina uma sequência de variáveis aleatórias independentes $\{U_e\}_{e \in \mathcal{E}}$ com distribuição uniforme no intervalo $[0, 1]$.

(iii) Inicie o grafo com todos os elos fechados e defina o tempo inicial igual a zero ($t = 0$). A variável t cresce de forma contínua no intervalo $[0, 1]$ e U_e representa o valor do tempo em que o elo e poderá ser aberto.

(iv) Seja $e = (u, v)$ um elo genérico do grafo em que u e v denotam suas extremidades. Cada elo $e = (u, v)$ tentará abrir no tempo $t = U_e$, a abertura ocorrerá se $\overline{\deg}(u, U_e) < k_u$ e $\overline{\deg}(v, U_e) < k_v$, em que $\overline{\deg}(x, U_e)$ denota o grau do sítio x quando são considerados apenas os elos abertos até o tempo $t = U_e$.

(v) Dizemos que um sítio x percolou no tempo t se existir um conjunto infinito de elos abertos conectados cuja uma das extremidades de algum deles é x .

Observe que se $k_v \geq \deg(v) \forall v \in \mathcal{V}$, o MPGR reduz-se ao MCP de elos. Caso contrário, a probabilidade de cada elo ser aberto dependerá do estado dos demais elos do grafo e dizemos que há *dependência de alcance infinito*. Devido a essa última característica, algoritmos como o *Algoritmo de Leath* [44], que são eficientes para simular o MCP em dimensões maiores, não podem ser utilizados para simular o MPGR.

Como o nosso propósito é estudar o modelo na rede hipercúbica $\mathbb{L}^d$, iremos considerar, no restante do capítulo, apenas esse grafo. Além disso, vamos escolher $k_v = k$ para todo $k \in \mathcal{V}$, ou seja, a restrição será a mesma para todos os sítios do grafo. Há estudos em que os autores consideram distribuições de restrições diferentes para os sítios do grafo [26, 66].

Para facilitar o entendimento do modelo, apresentamos na Figura 18 exemplos de parte da rede hipercúbica $\mathbb{L}^2$ para os casos $k = 2$ e $k = 3$. Em ambos foi considerada a mesma sequência de variáveis aleatórias $\{U_e\}_{e \in \mathcal{E}}$.

Definimos a função $\theta^d(t; k)$ como a probabilidade da origem percolar no tempo t quando é considerada a restrição k . De forma similar, definimos $\psi^d(t; k)$ como a probabilidade de que pelo menos um sítio percole. Como a função $\theta^d(t; k)$ é monótona em t , podemos definir o *tempo crítico* $t_c^d(k)$ como:

$$t_c^d(k) = \sup\{t \in [0, 1]; \theta^d(t; k) = 0\}. \quad (5.1)$$

Quando $\theta^d(1; k) = 0$, não ocorre percolação para nenhum valor de t e nós definimos $t_c^d(k) = \infty$. Na definição do tempo crítico em 5.1 podemos substituir a função $\theta^d(t; k)$ por $\psi^d(t; k)$, pois $\theta^d(t; k) = 0$ se, e somente se, $\psi^d(t; k) = 0$.

Uma vez fixada uma configuração de tempos $\{U\}_{e \in \mathcal{E}}$, há uma quantidade máxima de elos que poderão estar abertos (que ocorrerá quando $t = 1$). A média desse valor, considerando todas as configurações possíveis, é denominada *concentração máxima aleatória*. Nós estimamos esse valor para todo k e $d \in \{2, 3, 4\}$, vamos denotá-lo por x_k . No modelo RSA, x_k é denominado *jammed* ou *cobertura de saturação* [26].

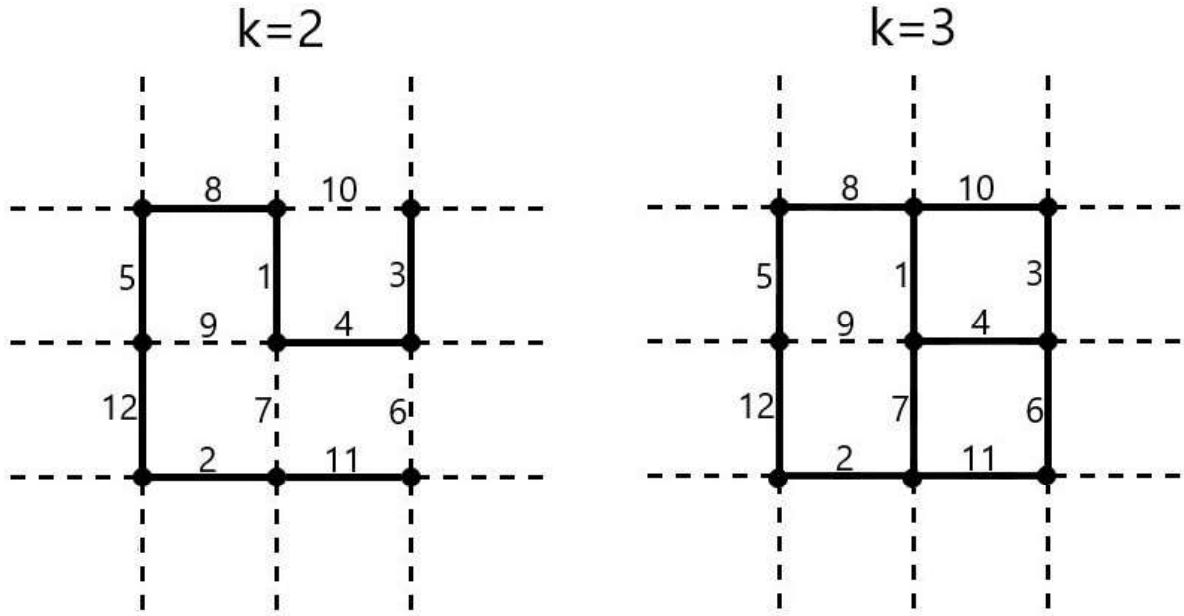


Figura 18 – Representação de parte do grafo $\mathbb{L}^2$ com a ordem dos 12 primeiros elos que poderão ser abertos. Linhas contínuas e tracejadas indicam elos abertos e fechados, respectivamente. Para a mesma distribuição de tempos $\{U_e\}_{e \in \mathcal{E}}$, apresentamos as situações em que as restrições consideradas são $k = 2$ (painel esquerdo) e $k = 3$ (painel direito). A configuração mostrada ocorre quando o décimo segundo elo é aberto.

Assim como no MCP, um dos principais problemas no MPGR é o de determinar, para cada valor de k , o valor crítico do modelo. Como foi dito anteriormente, quando $k \geq 2d$ o modelo reduz-se ao MCP, logo $t_c^d(k) = p_c(\mathbb{L}^d)$ para $k \geq 2d$. Se $k = 1$, é simples deduzir que haverão apenas elos isolados no grafo para todo $d \geq 1$ e, portanto, não ocorrerá percolação ($t_c^d(1) = \infty$). Os casos não triviais ocorrem quando $d \geq 2$ e $2 \leq k < 2d$. Quando $k = 2$, foi provado em [15] que não ocorre percolação para nenhum valor de t em qualquer dimensão $d \geq 2$. No mesmo artigo, os autores provaram que se $d = 2$ e $k = 3$ ocorrerá percolação com $t_c^2(3) \in (\frac{1}{2}, 1)$. Discutimos na próxima seção problemas em aberto relacionados a $t_c^d(k)$ que foram estudados por nós através de uma análise numérica.

5.2 Algumas Questões

Uma vez fixada a dimensão d , estamos interessados em responder à seguinte pergunta que está relacionada com o comportamento de $t_c^d(k)$ em função de k :

Pergunta 2. *Podemos afirmar que $t_c^d(k+1) \leq t_c^d(k)$ para todo $k \geq 2$?*

É razoável dizer que a resposta é **sim**, pois se o valor da restrição aumenta, estaríamos dando mais “liberdade” para cada elo ser aberto. Dessa forma, a ocorrência da percolação seria mais fácil e, portanto, o tempo crítico não aumentaria. Porém, há exemplos de

configurações em que um determinado elo está aberto para uma dada restrição k' e fechado se $k > k'$. Logo, não é tão simples responder à Pergunta 2. Na Figura 19 mostramos um exemplo, considerando $d = 3$, em que um elo, designado com o número 14, não será aberto quando $k = 5$ e será aberto se $k = 4$.

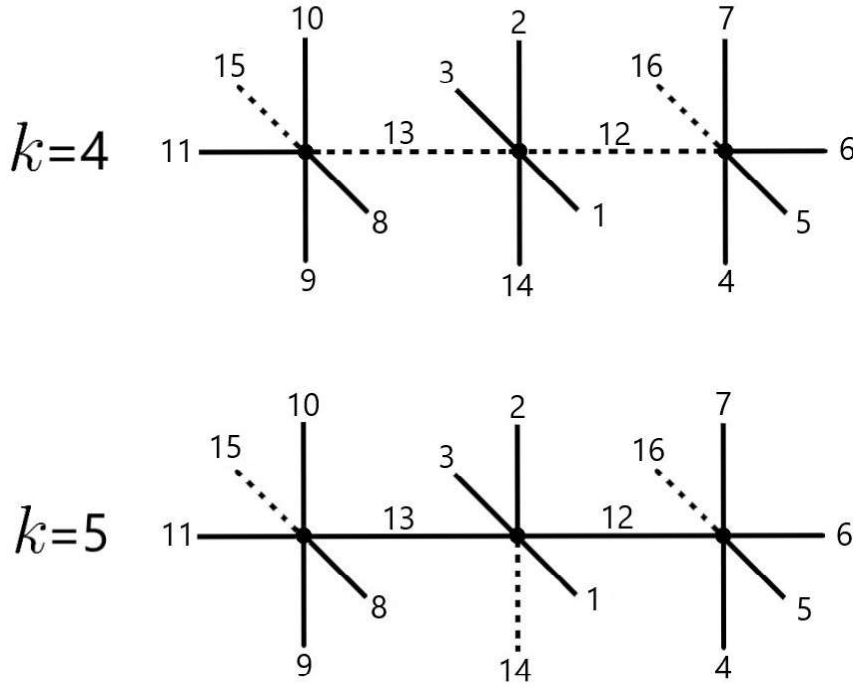


Figura 19 – Parte do grafo $\mathbb{L}^3$ com a ordem de tentativa de abertura dos 16 primeiros elos. Quando t for igual ao tempo de abertura do elo 14, temos que ele será aberto se $k = 4$ e fechado se $k = 5$.

Observe que para $d = 2$ a resposta para a Pergunta 2 é positiva, pois $t_c^2(1) = t_c^2(2) = \infty$, $t_c^2(4) = p_c(\mathbb{L}^2) = \frac{1}{2}$ e, de acordo com [15], $t_c^2(3) \in (\frac{1}{2}, 1)$. Caso o mesmo ocorra para $d \geq 2$, podemos definir:

$$k_c^d = \inf\{k; t_c^d(k) \leq 1\}, \quad (5.2)$$

ou seja, k_c^d é o menor valor de k para que o MPGR exiba transição de fase em $\mathbb{L}^d$. De acordo com os dados citados anteriormente, temos que $k_c^2 = 3$.

Nós realizamos uma análise numérica do modelo quando $d = 2, 3, 4$ e $3 \leq k \leq 2d$. Estimamos o valor do tempo crítico e, através dos resultados obtidos, encontramos evidências de que $k_c^d = 3$ e a resposta para a Pergunta 2 também é positiva quando $d = 3, 4$.

5.3 Simulação Numérica

Para simular o modelo de forma eficiente, principalmente para $d = 3, 4$, nós conseguimos adaptar o Algoritmo de Newmann-Ziff [57] para ser utilizado no MPGR. A seguir descrevemos como isso foi feito.

Para cada valor de d , simulamos o modelo na “caixa” de comprimento L com condição periódica de contorno. O critério para dizer que ocorreu percolação foi o *cluster de empacotamento* (o mesmo utilizado no MPMA - ver Seção 3.2). Com ele, dizemos que a percolação ocorre quando todos os elos de um cluster são conectados por um caminho contíguo à sua própria *imagem periódica* em, pelo menos, uma direção. Para simplificar a notação, iremos omitir d e k na notação de $t_c^d(k)$ quando ficar claro quais são esses valores de acordo com o contexto.

Vamos denotar por $\psi_L(t; k)$ a probabilidade da percolação ocorrer no tempo t quando o comprimento da caixa e a restrição forem L e k , respectivamente. Para cada configuração $\{U_e\}_{e \in \mathcal{E}}$, nós definimos o conjunto $\mathcal{O}_t$ como o número de elos que tentaremos abrir até o tempo t , ou seja:

$$\mathcal{O}_t = \#\{e \in \mathcal{E}; U_e \leq t\} \quad (5.3)$$

em que o símbolo $\#$ representa o número de elementos do conjunto. Como a probabilidade de um elo pertencer a $\mathcal{O}_t$ independe da configuração do restante do grafo, é possível estimar $\psi_L(t; k)$ como:

$$\psi_L(t; k) = \sum_{i=0}^N \mathbb{P}(\mathcal{O}_t = i) \cdot \overline{Q}_i = \sum_{i=0}^N \binom{N}{i} \cdot t^i \cdot (1-t)^{(N-i)} \cdot \overline{Q}_i. \quad (5.4)$$

em que $\overline{Q}_i$ é a probabilidade de ocorrer percolação no tempo t condicionada ao evento $\mathcal{O}_t = i$. Na expressão acima utilizamos o Teorema da Partição [30].

Quando é considerado o conjunto com todos os elos abertos até o tempo t , não é possível calcular a probabilidade de que haja exatamente i elos no conjunto (por causa da dependência de alcance infinito), portanto não seria possível estimar $\psi_L(t; k)$ de forma similar à feita em 5.4.

O valor de $\overline{Q}_i$ é estimado através de várias simulações do modelo. Uma única simulação é realizada da seguinte forma:

- (i) Crie uma lista com uma permutação de todos os $N = dL^d$ elos do grafo.
- (ii) Tente abri-los seguindo a ordem da lista e, cada vez que um elo for aberto, verifique se a percolação ocorreu. Quando um elo não satisfaz a restrição, ele permanece

fechado.

- (iii) Se a percolação ocorrer quando o i -ésimo elo for aberto, então nós definimos $Q_j = 1$ para $j \geq i$. Caso contrário, $Q_i = 0$.

O valor do tempo crítico (t_c) é estimado através da relação de escala

$$|\bar{t}_L - t_c| \sim L^a \quad (5.5)$$

em que

$$\bar{t}_L = \int_0^1 t \cdot \frac{d\psi_L(t; k)}{dt} dt \quad (5.6)$$

é o valor médio do tempo crítico na caixa de comprimento L e a é um parâmetro de ajuste [70]. A demonstração da igualdade 5.6 é similar à da Proposição 1.

Além de t_c , estimamos o valor do expoente crítico ν utilizando a relação de escala

$$\text{Max} \left[\frac{d\psi_L(t; k)}{dt} \right] \sim L^{-\frac{1}{\nu}}, \quad (5.7)$$

em que a expressão do lado esquerdo representa o valor máximo de $\frac{d\psi_L(t; k)}{dt}$ na caixa de comprimento L .

A derivada em 5.7 pode ser obtida diretamente de 5.4:

$$\frac{d\psi_L(t; k)}{dt} = \sum_{i=0}^N \binom{N}{i} \cdot (i - Nt) \cdot t^{i-1} \cdot (1 - t)^{(N-i-1)} \cdot \overline{Q_i}. \quad (5.8)$$

Para cada caso estudado (d e k fixados), nós escolhemos seis valores de L em que $32 \leq L \leq 1024$ ($d = 2$); $22 \leq L \leq 176$ ($d = 3$) e $18 \leq L \leq 46$ ($d = 4$). A quantidade de simulações variou entre 50000 ($L = 48$ e $d = 4$) e 10^6 ($L = 32$ e $d = 6$). Cada parâmetro foi estimado cinco vezes, seguindo os procedimentos descritos anteriormente, e o valor central é a média aritmética dos resultados obtidos. As incertezas foram estimadas utilizando o *desvio padrão da média*. Esse método de determinar o valor central de um parâmetro com sua respectiva incerteza é realizada da seguinte forma:

- Sejam $\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_l$ estimativas obtidas para um parâmetro γ .
- O valor central de γ é dado pela média aritmética das estimativas obtidas, ou seja:

$$\gamma = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^l \gamma_i. \quad (5.9)$$

Tabela 5 – Estimativas de $\frac{1}{\nu}$ e t_c . Quando $d = 4$, os valores centrais obtidos para $t_c(7)$ e $t_c(8)$, marcados com *, foram 0.16011996 e 0.16011964, respectivamente.

$d = 2$			$d = 3$			$d = 4$		
k	t_c	$\frac{1}{\nu}$	k	t_c	$\frac{1}{\nu}$	k	t_c	$\frac{1}{\nu}$
3	0.532393(15)	0.749(4)	3	0.277691(10)	1.15(2)	3	0.183205(30)	1.47(5)
			4	0.251319(6)	1.15(2)	4	0.162716(22)	1.46(5)
4	0.499994(16)	0.751(3)	5	0.248922(8)	1.14(2)	5	0.160348(15)	1.47(3)
						6	0.160131(14)	1.47(4)
			6	0.248810(7)	1.14(2)	7	0.160120(15)*	1.46(4)
						8	0.160120(15)*	1.47(4)

- A incerteza $\Delta\gamma$ é dada pelo desvio padrão:

$$\Delta\gamma = \sqrt{\frac{1}{l} \sum_{i=1}^l (\gamma - \gamma_i)^2}. \quad (5.10)$$

5.4 Resultados

Quando $k = 2d$, o MPGR reduz-se ao MCP e nós obtivemos os seguintes resultados: $t_c = 0.499994(16)$ ($d = 2$); $t_c = 0.248810(7)$ ($d = 3$) e $t_c = 0.160120(15)$ ($d = 4$); que são consistentes com os resultados encontrados para p_c na literatura onde foi estudado o MCP: $\frac{1}{2}$ ($d = 2$), em [32] há uma prova rigorosa desse resultado; 0.2488126(5) [49], 0.2488125(25) [13] e 0.24881182(10) [77] ($d = 3$); 0.1601310(10) [13], 0.16013122(6) [55] e 0.1601312(2) [82] ($d = 4$).

Apresentamos na Figura 20 os gráficos das funções $\psi_L(t; k)$ quando $k = 3$ e $d = 2, 3, 4$. Para esses mesmos casos, na Figura 21 são mostrados os ajustes de curvas realizados através das relações 5.5 e 5.7 para estimar os valores de $t_c(k)$ e ν , respectivamente. Para os demais valores de k os gráficos são similares, portanto preferimos omiti-los. Na Tabela 5 são mostrados todos os valores de t_c e ν .

Em relação à monotonicidade de $t_c(k)$ em função de k , os dados obtidos mostram que isso ocorre para $d = 3$. Já para $d = 4$, os valores centrais obtidos para o tempo crítico sugerem que a sequência $\{t_c(k)\}_k$ também será monótona para $3 \leq k \leq 8$, porém, quando consideramos as incertezas de cada parâmetro, podemos afirmar isso apenas para $k \leq 6$. Com o intuito de encontrar outro indicativo da monotonicidade, quando $6 \leq k \leq 8$, nós simulamos o modelo novamente na rede quadrada de comprimento $L = 46$, considerando $M = 2 \times 10^5$ configurações distintas $U^i = \{U_e^i\}_{e \in \mathcal{E}}$, $1 \leq i \leq M$. Uma vez fixada a configuração da rede, nosso objetivo é verificar quando ocorrerá a percolação se

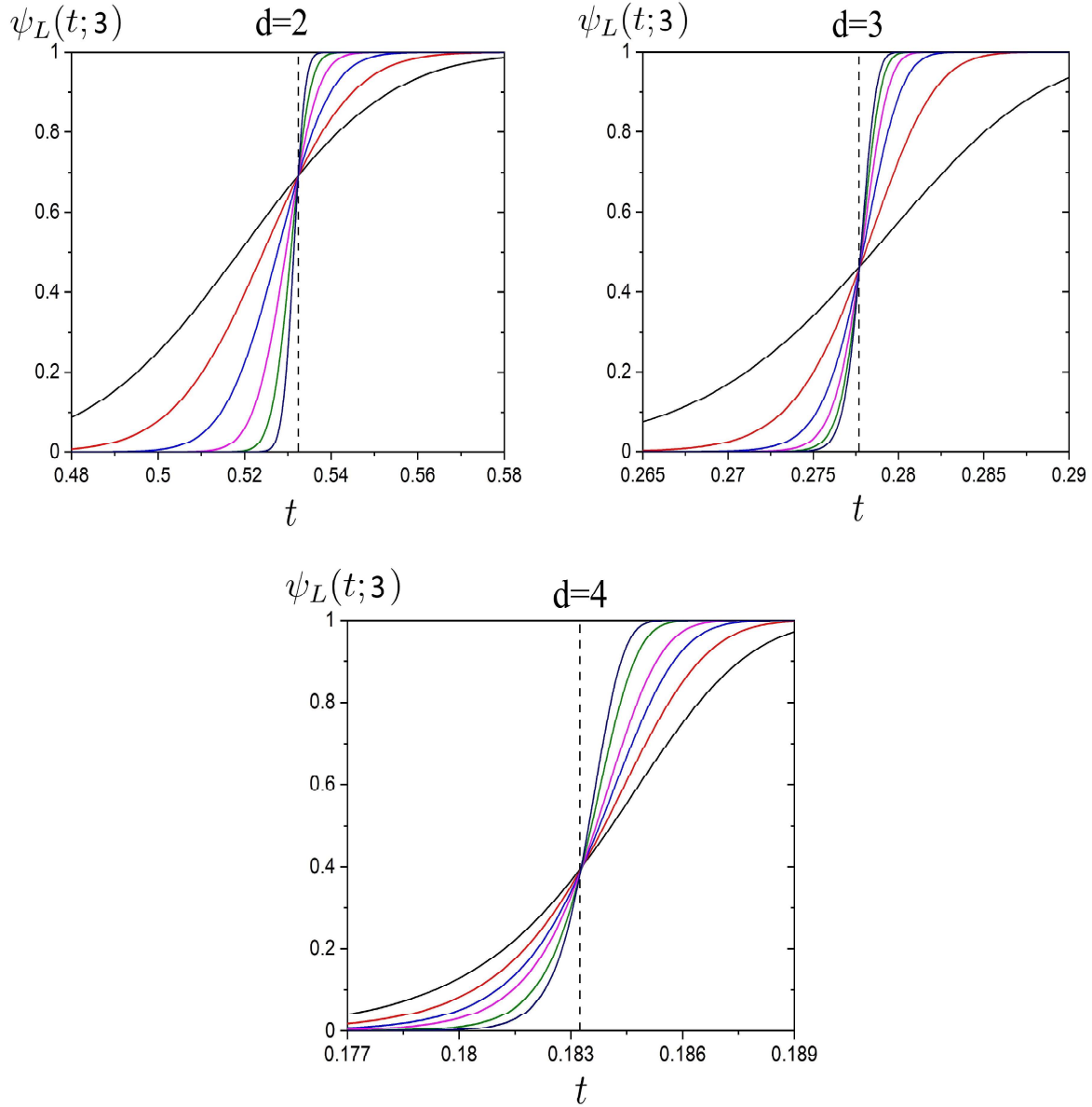


Figura 20 – Gráficos da função $\psi_L(t; k)$ quando $k = 3$ e $d = 2, 3, 4$. As linhas tracejadas indicam, no eixo das abscissas, o tempo crítico obtido utilizando a relação de escala (5.5). A identificação de qual valor de L está relacionado a cada curva pode ser feita sabendo que quanto maior o valor de L , maior é a inclinação do gráfico próximo do tempo crítico.

consideramos $k = 6, 7, 8$ e, dessa forma, encontrar indícios de que é mais fácil percolar quando k for maior.

Para cada configuração U^i , nós denotamos por $t(k; i)$ o tempo em que o sistema percolou quando foi considerada a restrição k . Analisando o resultado de todas as M simulações, obtivemos que:

- (i) $t(8; i) \leq t(7; i) \leq t(6; i)$ para todo i .
- (ii) $t(8; i) < t(7; i)$, $t(7; i) < t(6; i)$ e $t(8; i) < t(6; i)$ para 0.096%, 3.429% e 3.52% das

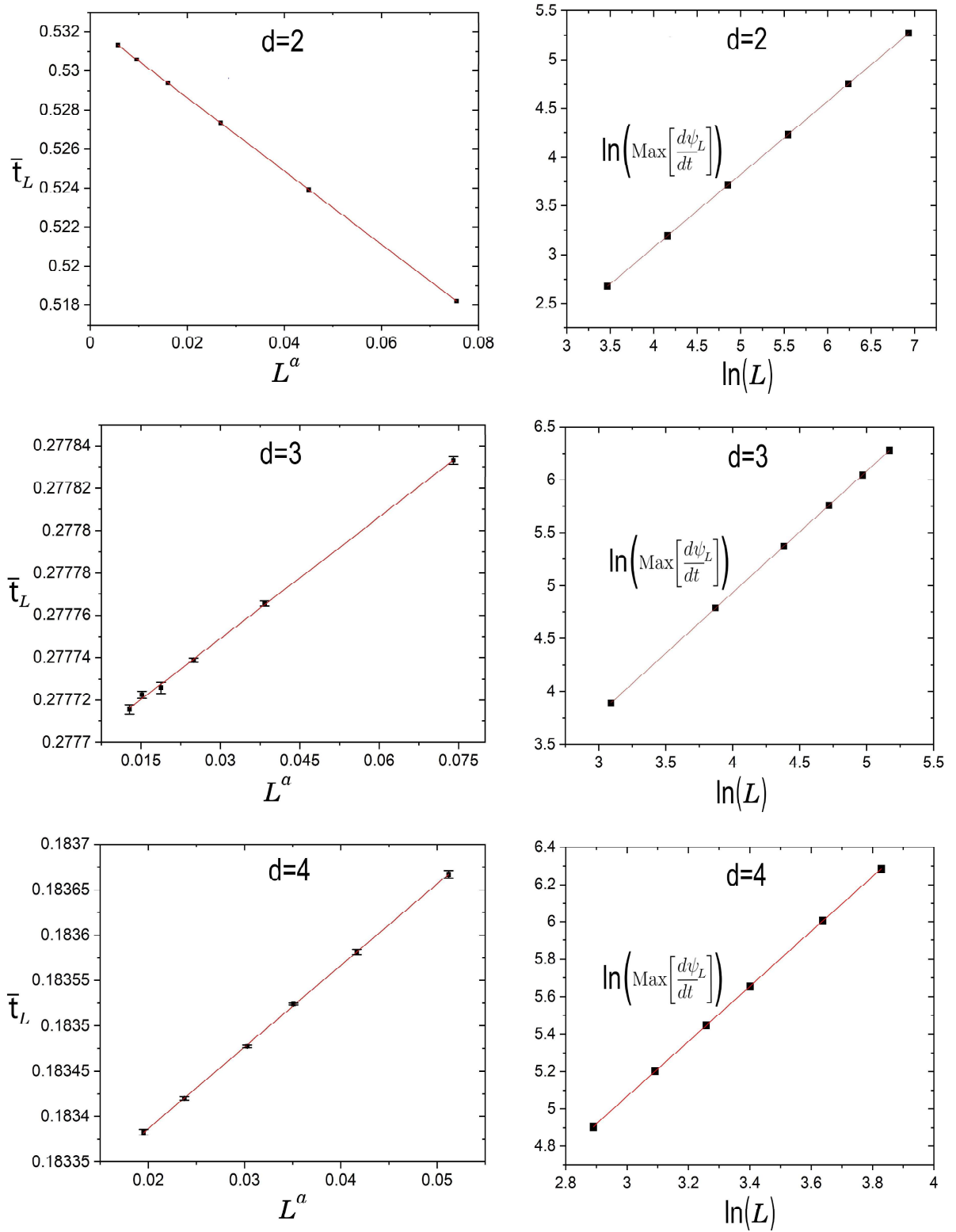


Figura 21 – Gráficos obtidos quando $k = 3$, considerando $d = 2, 3, 4$, para determinar t_c e $\frac{1}{\nu}$. Os painéis localizados aos lados esquerdo e direito referem-se às relações de escala 5.5 e 5.7, respectivamente. Nos gráficos onde as barras de erro não são mostradas, elas são menores do que os símbolos.

Tabela 6 – Estimativas da concentração máxima aleatória para todos os valores de k e d estudados.

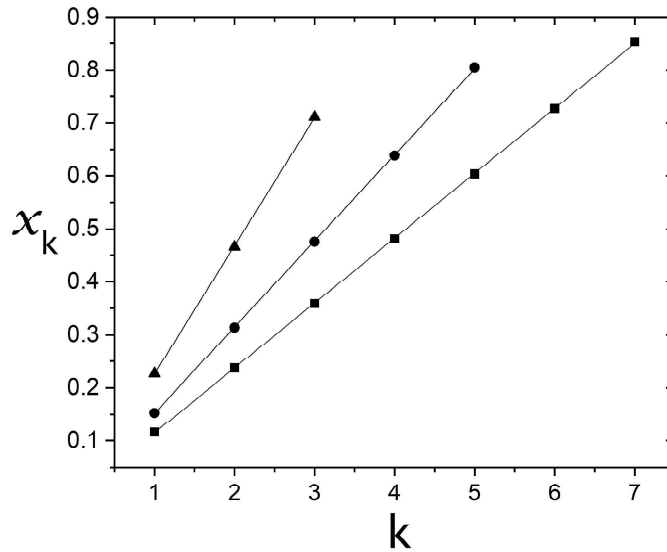
	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7
$d = 2$	0.22670(6)	0.46578(8)	0.71094(5)	-	-	-	-
$d = 3$	0.15307(2)	0.31346(2)	0.47511(3)	0.63817(3)	0.80474(3)	-	-
$d = 4$	0.11611(2)	0.23710(2)	0.35869(2)	0.48070(2)	0.60324(3)	0.72672(2)	0.85274(2)

configurações, respectivamente.

Esses resultados, junto com os valores centrais obtidos para $t_c(k)$, sugerem que o tempo crítico também é monótono não crescente em k quando $d = 4$.

Para estimar a concentração máxima aleatória (x_k), inicialmente verificamos qual o seu valor quando consideramos redes finitas de comprimento L e $d = 2$. Nós verificamos que x_k varia menos do que 0.009% quando comparamos $L = 32$ com $L = 1024$. Além disso, a incerteza obtida diminui de 3×10^{-3} ($L = 32$) para 8×10^{-5} ($L = 1024$). Por esse motivo, para cada valor de d , estimamos x_k como sendo o valor obtido na rede finita de comprimento igual ao maior valor de L utilizado por nós na estimativa de $t_c(k)$.

De acordo com a Tabela 6, onde são apresentados os valores obtidos para x_k , observamos que a concentração máxima aleatória cresce com o aumento de k . Na Figura 6, o gráfico mostra que x_k tem um comportamento linear, ou quase linear, em função de k .

**Figura 22** – Gráficos de x_k em função de k . Dimensão $d = 2$, triângulos; $d = 3$, círculos; $d = 4$, quadrados. Os coeficientes angulares dos gráficos obtidos são 0.2419(16), 0.1626(6), e 0.1225(3) para $d = 2, 3, 4$, respectivamente. As barras de erro são menores do que os símbolos.

6 Modelo Clássico de Ising

O *ferromagnetismo* é um fenômeno físico caracterizado pelo surgimento de uma magnetização espontânea, a baixas temperaturas, em certos tipos de materiais. Quando estes são expostos a um campo magnético externo, exibem uma magnetização que persiste mesmo na ausência do campo e, após aquecidos, a perdem quando a temperatura excede um dado valor T_c denominado *temperatura crítica* ou *temperatura de Curie* (que depende do tipo de material). O *Modelo de Ising* foi proposto em 1920 por Wilhelm Lenz [45] com a ideia de estudar o ferromagnetismo. Nele, o material é modelado através de um grafo em que cada sítio (ou elo) representa momentos magnéticos individuais denominados *spins*. Esse modelo exhibe uma transição de fase que é caracterizada pela mudança entre uma fase ordenada e outra desordenada. Ela ocorre quando a temperatura do sistema atinge uma temperatura $T = T_c$ (*temperatura crítica*).

Nesse capítulo definimos e discutimos o modelo proposto por Lenz quando o grafo é a rede hipercúbica $\mathbb{L}^d$ (Seção 6.1). Em seguida, na Seção 6.2, explicamos as principais etapas de um algoritmo utilizado para simulá-lo.

6.1 Definição do Modelo na Rede Hipercúbica $\mathbb{L}^d$

O modelo de Ising foi originalmente proposto na rede hipercúbica $\mathbb{L}^d$ em que os sítios representam os *spins*, iremos denominá-lo de *Modelo Clássico de Ising* (MCI). Ernest Ising, aluno de doutorado de Lenz, realizou um estudo completo desse modelo para $d = 1$ [39]. Para $d = 2$, Lars Onsager determinou o valor exato de T_c além de obter outras propriedades do modelo [58].

Cada *spin* na rede hipercúbica $\mathbb{L}^d$ pode assumir os valores $+1$ ou -1 , que indicam a orientação de seu momento magnético. O *spin* localizado no sítio i será representado por σ_i . Uma configuração genérica do sistema consiste do conjunto formado pelo valor assumido por cada *spin* e será denotada por σ , logo $\sigma = \{\sigma_i\}_{i \in \mathbb{Z}^d}$.

A energia do sistema associada a uma configuração σ é definida através do *Hamiltoniano*:

$$\mathcal{H}(\sigma) = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i, \quad (6.1)$$

em que J é uma constante denominada *constante de acoplamento*, $\langle i, j \rangle$ indica que i e j são primeiros vizinhos e h é uma constante relacionada ao *campo magnético externo*. Em todo o nosso trabalho consideramos $h = 0$.

Definimos $\beta = \frac{1}{k_B T}$, em que $k_B \approx 1.38 \times 10^{-23}$ é a *constante de Boltzmann* e T a temperatura. A probabilidade de encontrar o sistema em uma configuração σ quando a temperatura for T , que será denotada por $P_\beta(\sigma)$, é dada pela *distribuição de Boltzmann* [78]:

$$P_\beta(\sigma) = \frac{\exp(-\beta \mathcal{H}(\sigma))}{Z(\beta)}, \quad (6.2)$$

em que

$$Z(\beta) = \sum_{\sigma} \exp(-\beta \mathcal{H}(\sigma)) \quad (6.3)$$

é a *função partição* do modelo associada a β . O índice do somatório na definição 6.3 varia sobre todas as configurações σ que o sistema pode assumir.

Se $J > 0$ o modelo descreve o comportamento de um *material ferromagnético*¹. Para temperaturas baixas a orientação de cada *spin* será fortemente influenciada pela de seus vizinhos e, mesmo na ausência de um campo magnético externo ($h = 0$), o sistema exibe uma magnetização não nula. Nesse caso, é mais provável encontrar configurações com “ilhas” de *spins* que possuem a mesma orientação (Figura 23 - painel esquerdo). Já para temperaturas mais altas ($T > T_c$), a magnetização é nula e a orientação de cada *spin* é pouco influenciada pela de seus vizinhos. Logo, é provável que encontremos configurações desordenadas (Figura 23 - painel direito). Quando $J < 0$, o modelo descreve um fenômeno denominado *antiferromagnetismo*, que é caracterizado por apresentar magnetização nula para baixas temperaturas e não nula para altas temperaturas (ver [50] para um estudo sobre o modelo de Ising antiferromagnético). No restante desta Tese, consideraremos sempre o caso $J > 0$.

Definimos a *magnetização média* de um sistema com N *spins* como:

$$\langle M \rangle_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i. \quad (6.4)$$

Para obter a magnetização média do modelo em $\mathbb{L}^d$ (infinitos *spins*), tomamos um limite apropriado para que o índice do somatório percorra todos os sítios do grafo. Por exemplo, podemos escolher quadrados de comprimento L , denotados por Λ_L , e então

$$\langle M \rangle = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{|\Lambda_L|} \sum_{i=1}^{|\Lambda_L|} \sigma_i, \quad (6.5)$$

em que $|\Lambda_L|$ é o número de sítios no grafo.

¹ Material que apresenta o fenômeno do ferromagnetismo.

A *susceptibilidade magnética*, que está relacionada ao grau de magnetização do material quando ele é exposto a um campo magnético externo, é definida através da expressão:

$$\chi = \frac{1}{k_B T} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2). \quad (6.6)$$

O *Cumulante de Binder*, introduzido por Kurt Binder [9] para estimar a temperatura crítica T_c com maior precisão, é dado por

$$U = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3 \cdot \langle M^2 \rangle^2}. \quad (6.7)$$



Figura 23 – Modelo de Ising, com $J > 0$, na rede quadrada de comprimento $L = 100$ com condição periódica de contorno. Quadrados brancos e pretos representam *spins* com orientação $+1$ e -1 , respectivamente. O painel esquerdo apresenta a situação em que $T < T_c$, então os *spins* tendem a ficarem com a mesma orientação de seus vizinhos. No painel direito a orientação de um *spin* é pouco influenciada pela de seus vizinhos, caso em que $T > T_c$. Utilizamos os valores $J = 1$, $T = 2$ (painel esquerdo) e $J = 1$, $T = 2.7$ (painel direito) para gerarmos as configurações apresentadas nas figuras acima.

No MCI o sistema possui uma fase ordenada e outra desordenada que depende do valor da temperatura T . Quando o grafo é $\mathbb{L}^2$, foi mostrado por Peierls [61] que o sistema exibe uma transição de fase, separando essas duas fases, que ocorre em uma singularidade $T = T_c$ da função partição. O mesmo argumento dado por ele pode ser generalizado para mostrar que isso também ocorre quando $d > 2$ ($d \in \mathbb{N}$) [10]. Dois dos grandes problemas relacionados ao modelo de Ising são o de determinar se a transição de fase é contínua e o valor exato de T_c . Ising os resolveu para o caso $d = 1$ mostrando que o modelo não possui transição de

fase [39]. Para $d = 2$ e $h = 0$, Onsager [58] obteve uma expressão analítica para a função partição verificando que a transição é contínua e que o valor exato de T_c é dado por:

$$T_c = \frac{2J}{k_B \cdot \ln(1 + \sqrt{2})}. \quad (6.8)$$

Para alguns valores de $d \geq 3$, há apenas aproximações para o valor de T_c e acredita-se que a transição de fase seja contínua [1, 21, 22, 40, 48, 52, 76, 81].

6.2 Simulação Numérica - Algoritmo de Wolff

Assim como no modelo de percolação, simulações numéricas usando o Método de Monte Carlo podem ser utilizadas para obter informações sobre o MCI. Antes de descrever o algoritmo que foi utilizado em nosso trabalho (Algoritmo de Wolff), vamos comentar sobre um outro, com o qual ele possui relação, que é denominado *Algoritmo de Metrópolis* [56].

Uma vez fixado o valor de $\beta = \frac{1}{k_B T}$, para simplificar vamos considerar $k_B = 1$, esse algoritmo faz uso da distribuição de Boltzmann (6.2) para determinar as configurações mais prováveis do sistema. Descrevemos a seguir suas etapas principais.

- (i) Inicie o sistema com qualquer configuração.
- (ii) Escolha de forma aleatória um sítio s .
- (iii) Calcule a energia atual do sistema (E_a). Em seguida, troque a orientação do *spin* s e calcule o valor da nova energia (E_n). Defina $\Delta E = E_n - E_a$.
- (iv) Se $\Delta E \leq 0$, aceitamos a mudança na orientação do *spin* s . Caso contrário, sorteamos um número aleatório $\alpha \in [0, 1]$ e a aceitamos apenas se $\alpha < \exp(-\beta \Delta E)$.
- (v) Vamos nomear uma sequência de passos (ii), (iii) e (iv) por *passo de Metrópolis* (PM). Repetimos o PM diversas vezes até o sistema atingir o *estado estacionário* (flutuações pequenas no valor da magnetização média).
- (vi) Por fim, obtemos a estimativa do parâmetro de interesse através de uma média aritmética dos dados coletados durante vários PM.

Um problema no Algoritmo de Metrópolis é que para temperaturas próximas de T_c certas trocas de orientação, que deveriam ocorrer com probabilidade alta, ocorrem com probabilidade baixa. Por exemplo, se um sítio possui todos os vizinhos com orientação diferente da dele, a probabilidade de ocorrer a mudança de sua orientação é aproximadamente igual a 0.0294 se considerarmos o grafo $\mathbb{L}^2$ com $J = 1$ e $T \approx T_c - 0.001$. Porém, sabemos que para $T < T_c$ é de se esperar que a orientação de cada *spin* seja fortemente influenciada pelas

de seus vizinhos, logo a mudança deveria ocorrer com maior probabilidade. Esse comportamento, conhecido como *efeito slow down*, faz com que determinar estimativas precisas para T_c seja difícil. Esse efeito está relacionado à dificuldade na geração de configurações estatisticamente independentes para valores de T próximos de T_c [51].

Ulli Wolff propôs um algoritmo, baseado em um outro de Swendsen e Wang [73], para reduzir esse efeito. Esse algoritmo é conhecido como Algoritmo de Wolff [81]. Nele, ao invés de realizarmos modificações locais em cada etapa, trocamos a orientação de um conjunto de *spins*. Podemos sintetizá-lo nas seguintes etapas:

- (i) Inicie o grafo com qualquer configuração e defina um conjunto vazio $\mathcal{C}$.
- (ii) Escolha um *spin* c aleatoriamente na rede e o adicione a $\mathcal{C}$.
- (iii) Escolha um *spin* s do conjunto $\mathcal{C}$. Na primeira vez em que essa etapa for executada, temos que $s = c$.
- (iv) Analisamos a orientação de cada vizinho de s . Caso ela seja igual a de s , então adicionamos o vizinho ao conjunto $\mathcal{C}$ com probabilidade $p = 1 - \exp(-2\beta J)$.
- (v) Após todos os vizinhos de s terem sido analisados, o retiramos de $\mathcal{C}$ e ele não poderá mais fazer parte do conjunto (mesmo quando analisarmos outro *spin* do qual ele é vizinho).
- (vi) As etapas (iii), (iv) e (v) são repetidas até que o conjunto $\mathcal{C}$ fique vazio.
- (vii) Modificamos a orientação de todos os *spins* que pertenceram ao conjunto $\mathcal{C}$ durante as etapas anteriores (observe que eles formam um cluster de *spins* com a mesma orientação).
- (viii) Vamos nomear uma sequência formada pelas etapas de (ii) até (vii) por *passo de Wolff* (PW). Repetimos o PW inúmeras vezes até o sistema atingir o equilíbrio.
- (ix) Por fim, obtemos a estimativa do parâmetro de interesse através de uma média aritmética dos dados coletados durante vários PW.

Uma explicação detalhada desse algoritmo e porque ele reduz o efeito *slow down* pode ser encontrada nos artigos “*Introduction to cluster Monte Carlo algorithms*” [51] e “*An introduction to Monte Carlo methods*” [75].

Podemos aplicar a Teoria de Escala de Tamanho Finito para estimar $K_c = \frac{1}{T_c}$ no MCI, em $\mathbb{L}^2$, simulando-o em redes quadradas de comprimento L . Descrevemos a seguir um procedimento, similar ao proposto em [40], para estimar K_c de duas formas diferentes. Ele será utilizado no estudo do Modelo de Ising com Múltiplos Alcances no Capítulo 7.

Procedimento 1.

- (i) Escolha uma sequência de valores crescentes de L : $L_1, L_2, \dots, L_n$.
- (ii) Através do Algoritmo de Wolff, determine o cumulante de Binder, U_L , em função de $K = \frac{1}{T}$, para cada valor de L .
- (iii) Estime o inverso da temperatura crítica efetiva na rede quadrada de comprimento L , $K_c(L)$, que é dada pelo valor de K que maximiza $\frac{dU_L}{dK}$.
- (iv) Estime o expoente crítico ν através da relação de escala:

$$\left. \frac{dU_L}{dK} \right|_{max} \sim L^{\frac{1}{\nu}}, \quad (6.9)$$

em que o termo do lado esquerdo denota o valor máximo de $\frac{dU_L}{dK}$

- (v) Por fim, temos que K_c é obtido utilizando a relação de escala:

$$(K_c - K_c(L)) \propto L^{-\frac{1}{\nu}}. \quad (6.10)$$

- (vi) Na etapa (iii), $K_c(L)$ também pode ser estimada através do valor de K em que a função χ (6.6) atinge o seu valor máximo. Se utilizarmos esses dados na etapa (v), teremos outra estimativa de K_c .

7 Modelo de Ising com Múltiplos Alcances

Nosso estudo acerca do MPMA teve como base o Teorema 1 (ver Seção 4.1) que relaciona o ponto crítico desse modelo ao do MCP. Com o objetivo de investigar se um resultado análogo a esse teorema vale para o modelo de Ising, quando substituímos p_c por T_c , simulamos o Modelo de Ising com Múltiplos Alcances (MIMA) e encontramos evidências numéricas de que **sim**. O MIMA é similar ao MCI, porém o grafo onde estão localizados os *spins* é a rede hipercúbica $\mathbb{L}^d$ com múltiplos alcances.

Os resultados descritos no decorrer desse capítulo foram publicados no artigo “*Multirange Ising model on the square lattice*” [3] e, até a data de sua publicação, nós não encontramos estudos relacionados ao tema na literatura. A seguir, definimos o MIMA, discutimos como foram realizadas as simulações e apresentamos os resultados obtidos.

7.1 Definição e Principais Resultados

No MIMA, o grafo com múltiplos alcances $G_d^{\vec{k}^n}$ é definido da mesma forma como foi feito no MPMA (Definição 6, Seção 4.1). Consideramos o campo magnético externo sendo nulo. Dessa forma, de acordo com 6.1, temos que a energia do sistema associada a uma configuração σ é dada por

$$\mathcal{H}(\sigma) = -J \sum_{u=0}^n \sum_{\substack{\{i,j\} \\ (i,j) \in \mathbb{E}_{m_u}}} \sigma_i \sigma_j, \quad (7.1)$$

em que $\mathbb{E}_{m_u}$ é o conjunto de elos de tamanho m_u (definido em 4.1) e:

$$m_0 = 1, \quad m_1 = k_1, \quad m_2 = (k_1 \cdot k_2), \quad \dots, \quad m_n = (k_1 \cdot k_2 \cdot \dots \cdot k_n).$$

Os *spins* σ_i assumem valores em $\{-1, +1\}$ e J é a constante de acoplamento (nós consideramos $J = 1$). Todas as demais definições do MCI, vistas no Capítulo 6, valem para o MIMA.

Uma vez fixados a quantidade de tamanhos de elos $(n + 1)$ e o valor de cada um deles, podemos nos perguntar se o MIMA exhibe uma transição de fase e, em caso positivo, qual o valor da temperatura crítica em $G_d^{\vec{k}^n}$ ($T_c(G_d^{\vec{k}^n})$). Nós verificamos que, quando $d = 2$ e $n \in \{1, 2\}$, ocorrerá transição de fase. Além disso, encontramos evidências numéricas de que vale um resultado similar ao descrito no Teorema 1 quando substituímos o ponto crítico p_c pela temperatura crítica T_c . Enunciamos esse resultado a seguir:

Resultado 1. Se $T_c(\mathbb{L}^{d(n+1)})$ é a temperatura crítica do MCI em $\mathbb{L}^{d(n+1)}$, então

$$\lim_{k_i \rightarrow \infty, \forall i} T_c(G_d^{\vec{k}^n}) = T_c(\mathbb{L}^{d(n+1)}), \quad \text{para } d = 2 \text{ e } n \in \{1, 2\}.$$

Apesar de não termos simulado o MIMA para outros valores de d e n , provavelmente o mesmo resultado deve ser válido, pois isso ocorre com o MPMA. Além disso, tanto o MCP quanto o MCI podem ser derivados de um modelo mais geral denominado *Fortuin-Kastelyn random cluster model* (Modelo FK) [16].

Ao estudar como ocorre a convergência citada no Resultado 1, substituímos T_c por $K_c = \frac{1}{T_c}$, pois tanto K_c (MCI) quanto p_c (MCP) diminuem à medida que aumentamos a dimensão d . Nós verificamos que, assim como no modelo de percolação com múltiplos alcances, a convergência será monótona e seguirá uma lei de potência. Dessa forma, toda a discussão da utilidade desse resultado para estimar p_c no MCP em dimensões altas ($d \geq 4$) se aplica ao modelo de Ising.

7.2 Simulação Numérica

O Algoritmo de Wolff foi utilizado para simular o modelo para os dois casos estudados: $n = 1$ (dois alcances) e $n = 2$ (três alcances). A diferença entre os algoritmos que simulam o MCI e o MIMA está relacionada à definição da vizinhança de cada sítio, que agora passa a ter $4(n+1)$ vizinhos, e é simples de ser implementada.

Para $n = 1$, nós simulamos o modelo com $m_1 = m$ em que $m \in \{2, 5, 8, 10, 13, 16, 19\}$. Para $n = 2$, os tamanhos dos elos foram $m_1 = m$ e $m_2 = m^2$ em que $m \in \{2, 3, \dots, 6\}$. Inicialmente, escolhemos seis valores de L para cada situação estudada em que $768 \leq L \leq 2048$ e $1280 \leq L \leq 2560$ para $n = 1$ e $n = 2$, respectivamente. Caso o tamanho do maior elo seja igual a w , é como se estivéssemos simulando o modelo em uma rede quadrada de comprimento “efetivo” $\frac{L}{w}$. Quando essa razão assume valores baixos (≤ 48), observamos que os dados obtidos não satisfazem as relações de escala. Esse comportamento foi identificado para: (i) $L = 768$ nos casos ($n = 1, m = 16$) e ($n = 1, m = 19$); (ii) $L = 1280$ no caso ($n = 2, m = 6$). Descartamos esses dados e, para os valores de n e m citados, utilizamos cinco valores de L . Não foi estudado qual é o menor valor ideal de $\frac{L}{w}$ para simular o modelo, pois é um assunto técnico que foge do objetivo principal desta Tese e poderá ser estudado de forma aprofundada posteriormente.

O inverso da temperatura crítica, $K_c(m)$, foi estimada para cada valor de m através da derivada do cumulante de Binder em relação a K , $\frac{dU}{dK}$, e da susceptibilidade magnética, χ . Foi utilizado o Procedimento 1 descrito na Seção 6.2 com a inclusão de um termo de

correção $\propto L^{-2}$ na equação 6.10 que, dessa forma, pode ser reescrita como:

$$K_c(m) \approx K_c(m; L) + \lambda L^{-\frac{1}{\nu}} + \theta L^{-2} \quad (7.2)$$

em que λ e θ são constantes e $K_c(m; L)$ é o inverso da temperatura crítica efetiva na rede quadrada de comprimento L . O termo de correção foi incluído porque, sem ele, os resíduos exibiam uma tendência quadrática para determinados valores de m e n .

O número de passos de Wolff simulados variou entre 10^6 ($L = 2560$) e 2×10^6 ($L = 768$), sendo que $\frac{1}{5}$ deles foram utilizados para o sistema atingir o equilíbrio.

Fixado o valor de n , nós realizamos um ajuste de curvas da forma:

$$K_c(m) = a \cdot m^b + c, \quad (7.3)$$

em que $a, b, c \in \mathbb{R}$, para verificar a convergência de $K_c(m)$ para $K_c(\mathbb{L}^4)$ e $K_c(\mathbb{L}^6)$ quando $n = 1$ e $n = 2$, respectivamente.

A *incerteza* em cada estimativa foi calculada de forma diferente dependendo dos valores de m e n estudados. Como a quantidade de casos simulados foi elevada, os separamos em dois grupos:

GRUPO I - $n = 1$ com $m = 2$ e $m = 19$; $n = 2$ com $m = 2$ e $m = 6$.

GRUPO II - demais casos.

No GRUPO I, que compreende os valores extremos de m estudados para cada valor de n , realizamos a análise das incertezas de forma detalhada. Já no GRUPO II, elas foram estimadas a partir das obtidas no primeiro grupo. A seguir explicamos como isso foi feito.

Incerteza em $K_c(m; L)$ - GRUPO I

Vamos denotar por $\Delta K_{c,\chi}(m; L)$ e $\Delta K_{c,U'}(m; L)$ as incertezas na estimativa de $K_c(m; L)$ através das funções χ e $U' = \frac{dU}{dK}$, respectivamente. Descrevemos a seguir como elas foram estimadas.

- De forma independente, foram obtidas cinco amostras de χ e U , para cada valor de L , considerando 10 valores de K na vizinhança de $K_c(m; L)$.
- Com m e L fixos, foi realizada, para cada amostra, uma *interpolação com spline cúbico* para determinar a função χ em um intervalo contínuo.

- Em seguida, foi determinado o valor de K que maximiza χ na i -ésima amostra, denotado por $K_{c,\chi}^{(i)}(m; L)$.
- Por fim, a incerteza $\Delta K_{c,\chi}(m; L)$ foi estimada utilizando o *desvio padrão da média*.
- As estimativas de $K_{c,U'}^{(i)}(m; L)$ e $\Delta K_{c,U'}(m; L)$, para cada caso, foram obtidas de forma similar. A diferença está no ajuste de curvas, primeiro realizamos um ajuste de U utilizando uma *função logística com cinco parâmetros*, $a_1, \dots, a_5 \in \mathbb{R}$,

$$U = a_1 + \frac{a_2 - a_1}{[1 + (a_3/K)^{a_4}]^{a_5}}. \quad (7.4)$$

Em seguida, derivamos a Equação 7.4 diretamente para obter U' . O valor de $K_{c,U'}^{(i)}(m; L)$ é o valor de K que maximiza a derivada na i -ésima amostra simulada.

Incertezas em $K_c(m)$ - GRUPO I:

O valor de ν foi estimado através da relação 6.9. Para cada uma das funções χ e U' , utilizamos a relação 7.2 para realizar um ajuste de curvas com o objetivo de determinar o valor central de $K_c(m)$ e uma incerteza Δf devido ao ajuste. Para cada valor de $L = L_i$, nós calculamos a incerteza em $K_c(m)$ induzida por $\Delta K_{c,\bullet}(m; L_i)$, que será denotada por δ_{L_i} , da seguinte forma:

- Considere todos os símbolos $\bullet$ como sendo χ ou U' .
- Substituímos $K_{c,\bullet}(m; L_i)$ por $K_{c,\bullet}(m; L_i) + \Delta K_{c,\bullet}(m; L_i)$ e realizamos novamente o ajuste de curvas para determinar outro valor para $K_c(m)$, que iremos denotar por $\overline{K_c(m)}^{(i)}$. Os demais valores de $K_{c,\bullet}(m; L_i)$ assumem os seus valores centrais.
- Definimos $\delta_{L_i} = |K_c(m) - \overline{K_c(m)}^{(i)}|$.
- Por fim, a incerteza em $K_c(m)$ é dada pela expressão:

$$\Delta K_c(m) = \sqrt{(\Delta f)^2 + \sum_{i=1}^s \delta_{L_i}^2} \quad (7.5)$$

em que s representa a quantidade de valores de L analisados.

Incertezas em $K_c(m)$ - GRUPO II:

Nesse grupo, o valor central de $K_c(m)$ foi obtido da mesma forma que os casos do GRUPO I e, para cada n , m e L , estimamos $K_c(m; L)$ através de apenas uma amostra. A incerteza no valor de $K_c(m)$ foi estimada através das obtidas para os casos do GRUPO I de acordo com as observações e etapas descritas a seguir.

- Observamos que $\Delta K_c(m; L)$ cresce com o aumento de m , como pode ser observado na Tabela 7. Uma possível causa desse comportamento pode ser o fato de que quanto maior o valor de m , maior será o efeito da fronteira na obtenção dos dados (já que o comprimento efetivo da rede é $\frac{L}{m}$ e $\frac{L}{m^2}$ para $n = 1$ e $n = 2$, respectivamente).
- Como foram estimadas as incertezas para os valores extremos de m no primeiro grupo, então realizamos uma interpolação linear de $\Delta K_c(m)$ em função de m .
- Consideramos que $\Delta K_c(m)$, para os valores intermediários de m , é dada pela função obtida na interpolação.

Tabela 7 – Incertezas $\Delta K_{c,\chi}(m)$ e $\Delta K_{c,U'}(m)$ obtidas para os casos do GRUPO I.

n	m	$\Delta K_{c,\chi}(m)$	$\Delta K_{c,U'}(m)$
1	2	2.13×10^{-5}	2.37×10^{-5}
	19	3.35×10^{-5}	3.77×10^{-5}
2	2	1.62×10^{-5}	2.21×10^{-5}
	6	6.68×10^{-5}	6.20×10^{-5}

Incertezas em $K_c(\mathbb{L}^4)$ e $K_c(\mathbb{L}^6)$:

Descrevemos a seguir como foi estimada a incerteza em $K_c(\mathbb{L}^d)$, denotada por $\Delta K_c(\mathbb{L}^d)$.

- Através da Equação 7.3 estimamos o valor central $K_c(\mathbb{L}^d)$, que é dado pelo valor de c , e a incerteza Δf devido ao ajuste.
- Para cada valor de $m = m_i$, modificamos o valor de $K_c(m_i)$ para $K_c(m_i) + \Delta K_c(m_i)$ e repetimos a primeira etapa. O novo valor central obtido para $K_c(\mathbb{L}^d)$ será denotado por $\overline{K_c(\mathbb{L}^d)}^{(i)}$.
- Definimos $\delta_{m_i} = |K_c(\mathbb{L}^d) - \overline{K_c(\mathbb{L}^d)}^{(i)}|$.

- Por fim, $\Delta K_c(\mathbb{L}^d)$ é dada por:

$$\Delta K_c(\mathbb{L}^d) = \sqrt{(\Delta f)^2 + \sum_{i=1}^s \delta_{m_i}^2} \quad (7.6)$$

em que s denota a quantidade de valores de m estudados.

7.3 Resultado - Monotonicidade da Temperatura Crítica

Na Figura 24 mostramos os gráficos com os dados obtidos para $K_{c,\chi}(m; L)$ e $K_{c,U'}(m; L)$ quando $n = 2$ e $m = 2$. As curvas contínuas correspondem ao ajuste realizado utilizando a relação 7.2. Para os demais valores de n e m os gráficos são similares, por isso preferimos omiti-los. Todos os valores de $K_c(m)$ estimados são apresentados na Tabela 8.

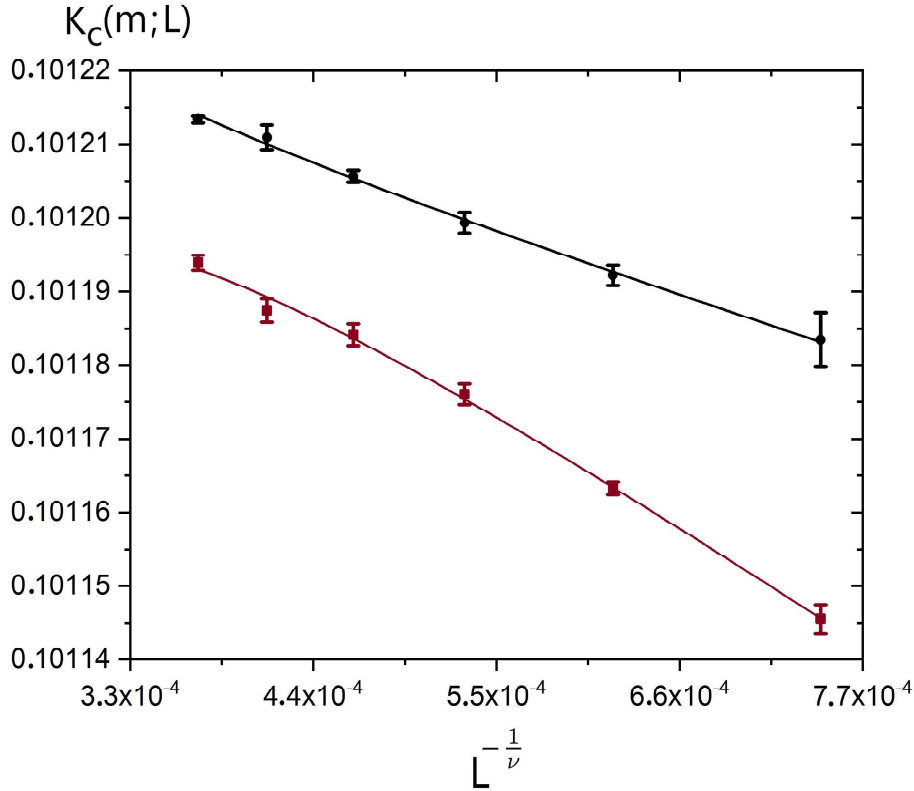


Figura 24 – Gráficos obtidos para $n = 2$ (três alcances) quando $m = 2$. Eles mostram o valor estimado de $K_c(m)$ utilizando a relação 7.2 considerando a função U' (quadrados - gráfico inferior) e χ (círculos - gráfico superior). As curvas correspondem aos gráficos das funções obtidas nos ajustes.

Com os dados da Tabela 8, plotamos os gráficos de m versus $K_c(m)$ para cada valor de n (Figura 25) e realizamos o ajuste de curvas descrito na Equação 7.3.

Tabela 8 – Estimativa do inverso da temperatura crítica para os casos $n = 1$ e $n = 2$.

n	m_1	$K_c(\chi)$	$K_c\left(\frac{dU}{dK}\right)$	n	m_1	m_2	$K_c(\chi)$	$K_c\left(\frac{dU}{dK}\right)$
1	2	0.173815(21)	0.173814(24)	2	2	4	0.101255(16)	0.101218(22)
	5	0.153280(23)	0.153295(26)		3	9	0.094619(29)	0.094591(32)
	8	0.150995(25)	0.151095(29)		4	16	0.093133(42)	0.093156(42)
	10	0.150501(28)	0.150528(31)		5	25	0.092596(54)	0.092642(52)
	13	0.150185(30)	0.150139(33)		6	36	0.092484(67)	0.092397(62)
	16	0.149941(32)	0.149975(36)					
	19	0.149888(34)	0.149896(38)					

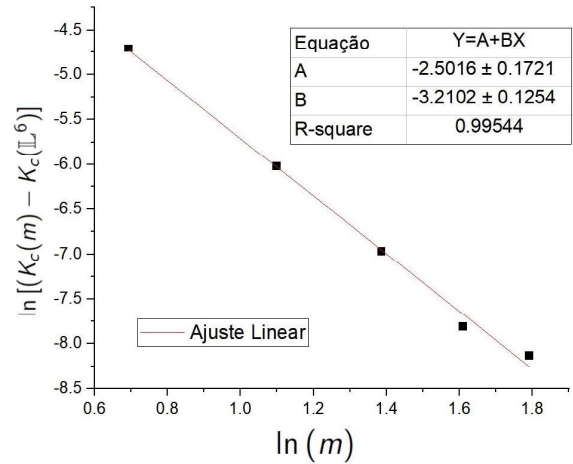
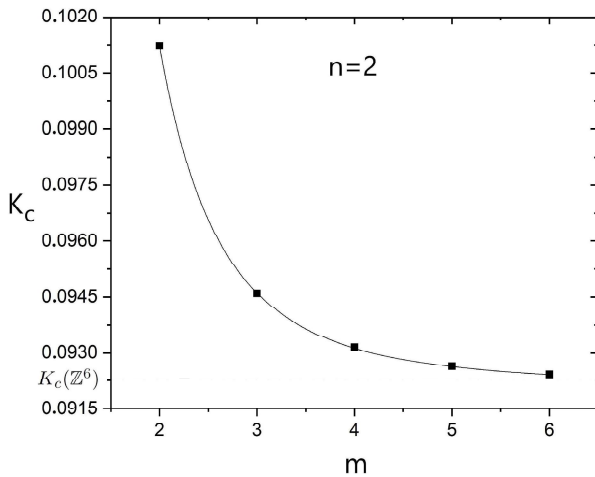
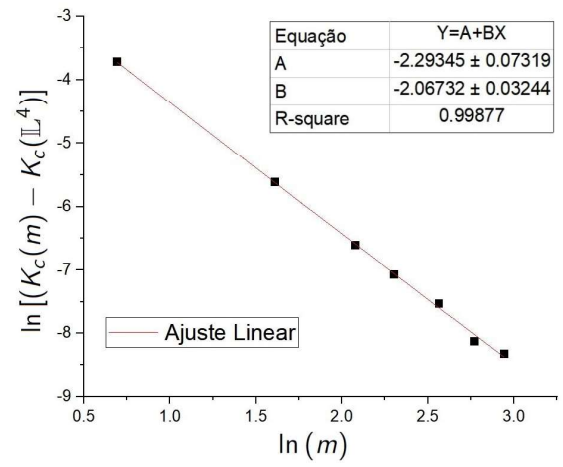
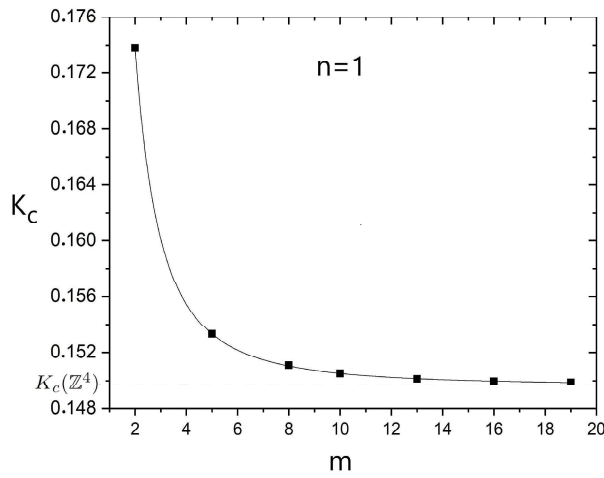


Figura 25 – Análise dos valores de $K_c(m)$, em função de m , estimados através da função χ . Painéis superiores: $n = 1$; painéis inferiores: $n = 2$. Nos painéis direitos apresentamos os dados em um gráfico log – log. Realizamos uma ajuste linear baseado na Equação 7.3 em que $A = \ln(a)$, $B = b$, $X = \ln(m)$ e $Y = \ln [K_c(m) - K_c(\mathbb{L}^d)]$. Os dados sugerem que o inverso da temperatura crítica converge de forma monótona para $K_c(\mathbb{Z}^4)$ ($n = 1$) e $K_c(\mathbb{Z}^6)$ ($n = 2$). As barras de erro são menores do que os símbolos.

Os dados obtidos para a , b , c e o R -square (coeficiente de determinação) são apresentados na Tabela 9. O R -square mede o quão próximo nossos dados se adequam à função escolhida para o ajuste. Ele varia entre 0 e 1 e quanto mais próximo de 1, maior é a qualidade do ajuste. Nossos dados sugerem que $K_c(m)$ converge para $K_c(\mathbb{L}^4)$ e $K_c(\mathbb{L}^6)$ quando $n = 1$ e $n = 2$, respectivamente, segundo uma lei de potência. Para efeito de comparação, listamos na Tabela 10 valores de $K_c(\mathbb{L}^4)$ e $K_c(\mathbb{L}^6)$ obtidos por outros pesquisadores que simularam o MCI diretamente nesses grafos e os valores estimados por nós. Observe que, de acordo com a Equação 7.3, c corresponde ao valor de $K_c(\mathbb{L}^d)$ no limite $m \rightarrow \infty$, pois $b < 0$.

Tabela 9 – Parâmetros obtidos em cada ajuste de curvas realizado através da Equação (7.3).

n	Função	a	b	c (K_c)	R-Square
1	χ	0.1015(12)	-2.070(19)	0.149646(46)	0.999990
	U'	0.1007(16)	-2.059(24)	0.149653(50)	0.999988
2	χ	0.0872(53)	-3.263(96)	0.092190(78)	0.999835
	U'	0.0854(39)	-3.233(74)	0.092162(63)	0.999934

Tabela 10 – Comparação entre as estimativas de $K_c(\mathbb{L}^4)$ e $K_c(\mathbb{L}^6)$ obtidas por nós e as encontradas na literatura.

Situação	Nossa estimativa (χ)	Nossa estimativa (U')	Simulação direta em $\mathbb{L}^d$
$K_c(\mathbb{L}^4)$	0.149646(46)	0.149653(50)	0.1496947(5) [52]
$K_c(\mathbb{L}^6)$	0.092190(78)	0.092162(63)	0.09229(4) [1]

Há uma pequena discrepância entre os dados obtidos por nós e os da literatura para $K_c(\mathbb{L}^4)$ e $K_c(\mathbb{L}^6)$ quando utilizamos as funções χ e U' , respectivamente. Os prováveis motivos para esse fato devem ser o número insuficiente de passos de Wolff e/ou a quantidade de valores de m considerados. Observe que conseguimos obter a mesma precisão da estimativa obtida em [1], mostrando a eficácia de nosso método para estimar K_c no MCI em dimensões maiores.

Assim como foi feito no modelo de percolação com múltiplos alcances, também verificamos o que ocorre com o valor crítico no MIMA quando consideramos elos de tamanhos 1, m e u e variamos m entre 1 e u . Nesse caso, por mais que m aumente, não é garantida a monotonicidade, pois a hipótese de que u seja múltiplo de m nem sempre é satisfeita. Na Figura 26 apresentamos o gráfico de $K_c(m)$ versus m para o caso $u = 15$ e verificamos que o seu comportamento é irregular e similar ao obtido para o ponto crítico no modelo de percolação (ver Figura 14).

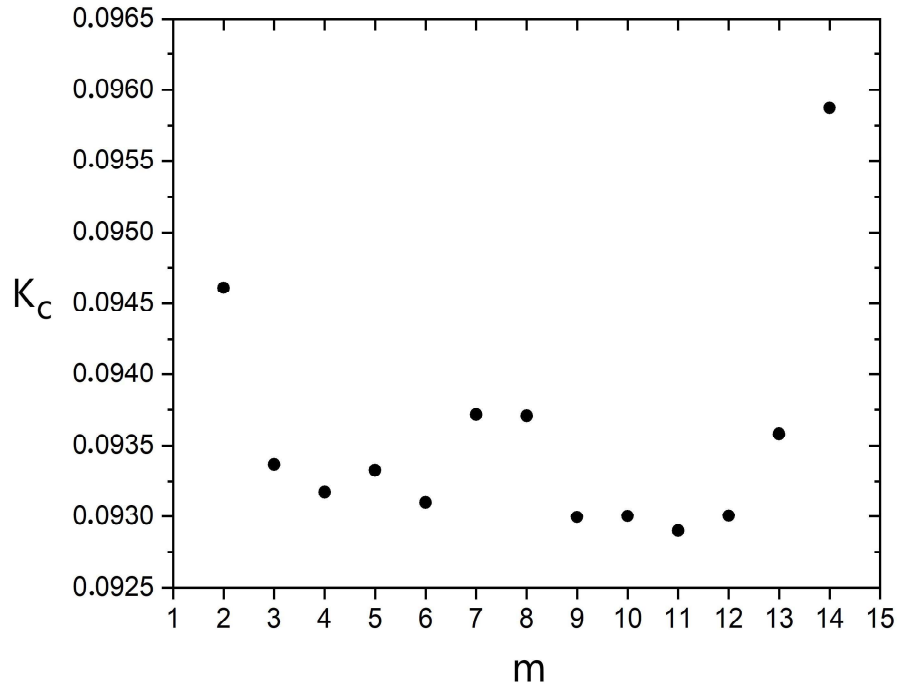


Figura 26 – Inverso da temperatura crítica, $K_c(m; L)$, obtido através da função χ , no modelo com elos de tamanhos 1, m e u , em que u é fixo e m varia entre 1 e u . A estimativa foi obtida simulando o modelo apenas na rede quadrada de comprimento $L = 1536$. As barras de erro são menores do que os símbolos.

Para obter esses dados, consideramos cinco amostras independentes e apenas a rede quadrada de comprimento $L = 1536$. Para o nosso propósito, que era apenas verificar a irregularidade em $K_c(m)$, considerar um único valor de L é suficiente. Porém, não é possível estimar $K_c(m)$ com precisão dessa forma.

8 Perspectivas de Trabalhos Futuros

Em relação ao modelos de percolação com múltiplos alcances, nós realizamos uma análise numérica e encontramos evidências de que o seu ponto crítico converge, de forma monótona e seguindo uma lei de potência, para o do modelo clássico quando o tamanho dos alcances divergem. Esse resultado está relacionado ao Teorema 1 e foi considerada a mesma quantidade de alcances em cada direção, pois é uma das hipóteses desse teorema. Nesse caso, se simularmos o modelo com múltiplos alcances em $d = 2$, apenas é possível estimar numericamente o valor de $p_c(\mathbb{L}^d)$ do modelo clássico quando d é par (nós fizemos isso para $d = 4$ e $d = 6$). O Teorema 2 é uma generalização desse resultado, nele se afirma que a convergência ocorre mesmo quando consideramos quantidades de alcances diferentes em cada direção. Uma vantagem desse resultado é que é possível obter a convergência do ponto crítico para o do modelo clássico mesmo quando d for ímpar. Por exemplo, para $d = 3$ basta considerarmos o modelo bidimensional com dois alcances em uma direção e apenas um alcance na outra. Apesar da convergência ser garantida pelo teorema, nós realizamos poucas simulações desse caso, em um estudo que ainda está em fase inicial, e os dados sugerem que, apesar de ser monótona em função do tamanho dos elos, a convergência não segue uma lei de potência. Pretendemos estudar esse caso com mais detalhes e investigar como é afetada a convergência em função do número de alcances em cada direção.

Outra proposta de trabalho, que foi comentada no Capítulo 1, está relacionada ao fato de que o Modelo de Ising apresenta comportamento similar ao Modelo de Percolação, em relação à convergência do valor crítico, quando os estudamos na rede hipercúbica $\mathbb{L}^d$ com elos de múltiplos alcances. Como ambos os modelos podem ser derivados de um modelo mais geral (modelo FK), pretendemos estudar um modelo que não possui essa característica e verificar o comportamento do valor crítico quando consideramos elos com múltiplos alcances.

Em relação ao MPGR, uma proposta de trabalho é estudar um modelo que está relacionado a ele e tem aplicações no estudo de dímeros e polímeros: o *Random Sequential Adsorption* [19, 20]. Em [26], há um estudo do RSA na rede hipercúbica $\mathbb{L}^d$, $d = 2$, no qual são consideradas distribuições de restrições distintas para os sítios do grafo (no nosso estudo, a restrição k foi a mesma para todos os sítios). Uma ideia é analisar distribuições de restrições que sejam interessantes sob o ponto de vista de aplicações e também estudar o modelo quando $d = 3$ e $d = 4$.

9 Conclusão

Foram apresentados nessa Tese estudos acerca da monotonicidade do valor crítico em modelos de percolação e de Ising. O primeiro modelo estudado foi o Modelo de Percolação com Múltiplos Alcances na rede hipercúbica $\mathbb{L}^2$. Existe um resultado analítico garantindo a convergência do ponto crítico desse modelo para o do Modelo Clássico de Percolação em dimensões $d > 2$ quando os tamanhos dos elos maiores do que 1 divergem. Nós, através de uma análise numérica, complementamos esse resultado mostrando que essa convergência será monótona decrescente e que segue uma lei de potência. Esse último fato é importante, pois permite obtermos estimativas do ponto crítico no modelo clássico em $\mathbb{L}^d$ através da simulação do modelo com múltiplos alcances em $\mathbb{L}^{d'}$ com $d' < d$. Dessa forma, há um ganho em relação à memória necessária para armazenar os dados do modelo e ao tempo de execução do algoritmo. Utilizamos o modelo com múltiplos alcances para estimar o ponto crítico do modelo clássico em $\mathbb{L}^d$ para $d = 4$ e $d = 6$, e os resultados foram satisfatórios quando comparados com os obtidos por pesquisadores que simularam o modelo diretamente nessas dimensões.

Também estudamos o Modelo de Percolação com Múltiplos Alcances quando temos elos de dois tamanhos e atribuímos probabilidades distintas para cada tipo de elo ser aberto. Nesse caso, a simulação numérica utilizando diretamente o Algoritmo de Newmann-Ziff torna-se difícil, pois o tempo de execução do algoritmo é elevado. Para realizar a simulação, propomos outro algoritmo, denominado Algoritmo Modificado, que foi baseado no Algoritmo de Newmann-Ziff e permite simular o modelo de forma mais eficiente. Ele é apresentado no Capítulo 3.2 e, através dele, analisamos o comportamento crítico do modelo quando $k \in \{2, 3, 4, 5, 8\}$, em que k é o tamanho do maior alcance.

Diferente do modelo de percolação, ainda não há para o Modelo de Ising resultado analítico relacionado à convergência da temperatura crítica para a do modelo clássico quando o estudamos na rede hipercúbica $\mathbb{L}^d$ com múltiplos alcances. Nós realizamos uma análise numérica e mostramos que um resultado análogo ao do modelo de percolação deve valer para o modelo de Ising. Também encontramos evidências numéricas de que o comportamento de T_c é monótono em função do tamanho dos elos e segue uma lei de potência. Assim como no modelo de percolação, esse fato tem utilidade na estimativa da temperatura crítica do modelo clássico de Ising em dimensões maiores.

Outro modelo estudado por nós foi o Modelo de Percolação com Grau Restrito quando o grafo é a rede hipercúbica $\mathbb{L}^d$ e $d \in \{2, 3, 4\}$. Nele, atribuímos um número aleatório com distribuição uniforme em $[0, 1]$ para cada elo. Esse número está relacionado ao tempo em que o elo poderá ser aberto. Iniciamos o grafo com todos os elos fechados e, em

seguida, tentamos abri-los em ordem crescente de tempo. O elo só poderá ser aberto se a quantidade de elos abertos adjacentes a cada uma de suas extremidades for menor que uma quantidade k (*restrição*), que é fixada previamente. Esse modelo possui dependência de alcance infinito, pois a probabilidade de um elo ser aberto depende do estado de cada elo do grafo. O principal resultado obtido por nós acerca desse modelo foi ter encontrado evidências numéricas de que o ponto crítico decai de forma monótona em função da restrição k . Também obtivemos estimativas para um dos expoentes críticos e o resultado sugere que esse modelo está na mesma classe de universalidade do modelo clássico de percolação. Por fim, estimamos o valor do número médio da maior quantidade de elos que podem ser abertos no grafo, que é denominada *concentração máxima aleatória*.

Apêndice A – Convergência de $G_d^{\vec{k}^n}$ para $\mathbb{L}^d$

A convergência da rede hipercúbica $\mathbb{L}^d$ com $(n + 1)$ alcances, $G_d^{\vec{k}^n}$, para $\mathbb{L}^{d(n+1)}$ é denotada pelo limite:

$$\lim_{k_i \rightarrow \infty, \forall i} G_d^{\vec{k}^n} = \mathbb{L}^{d(n+1)}. \quad (\text{A.1})$$

Por questão de simplicidade na visualização dos grafos, daremos uma ideia do porquê que o limite A.1 é válido quando $d = 1$. Na Figura 27 representamos parte do grafo $G_1^{\vec{k}^n}$ com $n = 1$ (dois alcances), em que o tamanho do maior elo é k . Omitimos os sítios denotados por números negativos para simplificar o seu esboço.

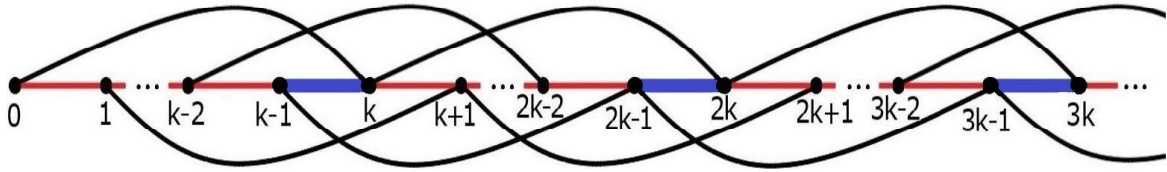


Figura 27 – Parte do grafo $G_1^{\vec{k}^n}$ com $n = 1$ em que o tamanho do maior elo é k . Segmentos de reta e curvas denotam elos de tamanhos 1 e k , respectivamente. Segmentos de reta com maior espessura representam elos cujas extremidades são sítios com números da forma $ak - 1$ e ak para $a \in \{1, 2, \dots\}$.

De acordo com o limite A.1, esse grafo deve convergir para a rede hipercúbica $\mathbb{L}^2$. Para entender o motivo dessa convergência, representamos na Figura 28 o mesmo grafo de uma outra forma. Na Tabela 11 indicamos a correspondência entre os elos dos grafos representados nas Figuras 27 e 28.

Tabela 11 – Correspondência entre os elos dos grafos representados nas Figuras 27 e 28.

Figura 27	Figura 28
Elos com menor espessura (segmentos de reta).	Elos verticais (segmentos de reta).
Elos com maior espessura (segmentos de reta).	Elos representados por curvas.
Elos representados por curvas.	Elos horizontais (segmentos de reta).

Se também considerarmos os sítios denotados por números negativos, o grafo obtido será similar a esse último. A diferença é que ele também crescerá indefinidamente para a esquerda.

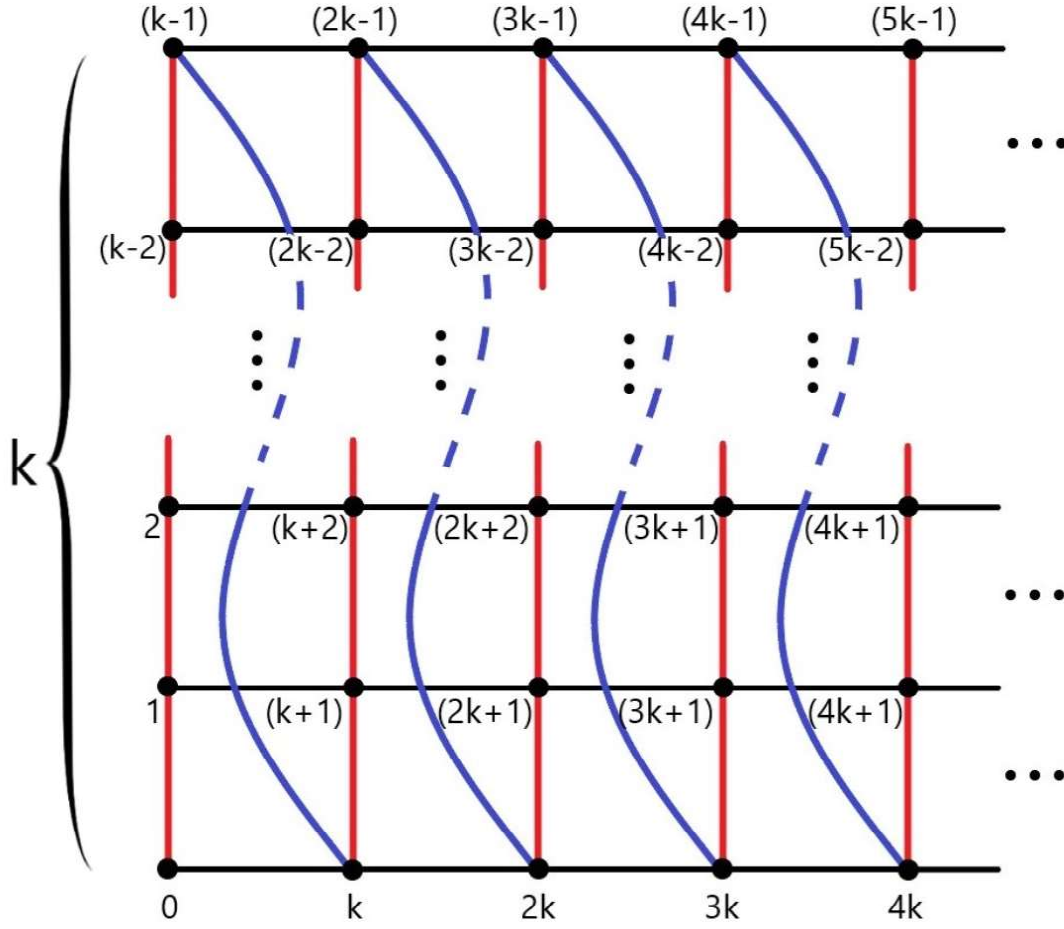


Figura 28 – Representação alternativa de parte do grafo $G_1^{\vec{k}^n}$ com $n = 1$ em que o tamanho do maior elo é k . Elos verticais e horizontais representam elos de tamanhos 1 e k , respectivamente. Linhas curvas representam elos de tamanho 1. Na Tabela 11 indicamos a relação entre os elos desse grafo com o da Figura 27.

Observe que se $k \rightarrow \infty$ os elos representados por curvas podem ser desconsiderados, pois conectam sítios localizados a uma distância $\sqrt{k^2 + 1}$ que diverge quando $k \rightarrow \infty$. Dessa forma, no limite $k \rightarrow \infty$, os demais sítios e elos representarão a rede hipercúbica $\mathbb{L}^2$.

Raciocínio análogo ao caso $n = 1$ pode ser realizado para o caso $n = 2$. Se considerarmos elos de tamanhos 1, k e m , conseguimos representar $G_1^{\vec{k}^2}$ através de uma figura tridimensional em que uma dimensão cresce de forma indefinida e as demais medem k e $\frac{m}{k}$. Nos limites $k \rightarrow \infty$ e $m \rightarrow \infty$, teremos elos que poderão ser desconsiderados, por conectar sítios a distâncias que irão divergir, e teremos a convergência para a rede hipercúbica $\mathbb{L}^3$.

Esse último exemplo é importante por também sugerir a necessidade de que o tamanho de cada elo seja múltiplo dos tamanhos dos elos menores. Pois a convergência para $\mathbb{L}^3$ é intuitiva quando k e $\frac{m}{k}$, que são os tamanhos de duas das dimensões da figura tridimensional obtida, são números inteiros. Logo, m deve ser múltiplo de k .

Apêndice B – Vizinhança dos elos no MPMA

Na Seção 4.3.2 detalhamos como foi representada a vizinhança dos elos horizontais de tamanho 1, denotados por h_1 , no Modelo de Percolação de Elos com Múltiplos Alcances (Figura 9 e Tabela 2). Detalhamos a seguir a representação dos elos verticais de tamanho 1, denotados por v_1 , e dos elos horizontais e verticais de tamanhos k , denotados por h_k e v_k , respectivamente.

A topologia da vizinhança dos elos é apresentada através das figuras: Figura 29 (elos v_1), Figura 30 (elos h_k) e Figura 31 (elos v_k). A identificação dos números de cada elo vizinho, considerando a rede quadrada de comprimento L , é mostrada nas tabelas: Tabela 12 (elo v_1), Tabela 13 (elo h_k) e Tabela 14 (elo v_k). Nas tabelas, as letras i e j são dadas por:

$$i = \left\lfloor \frac{\tilde{r}}{4L} \right\rfloor \quad \text{e} \quad j = \left\lfloor \frac{\tilde{r} \pmod{4L}}{4} \right\rfloor \quad (\text{B.1})$$

em que $\tilde{r}$ é o número associado ao elo.

Por questão de organização do texto, iniciamos a apresentação da vizinhança dos elos do tipo v_1 na próxima página. Dessa forma, cada página será dedicada a apenas um tipo de elo.

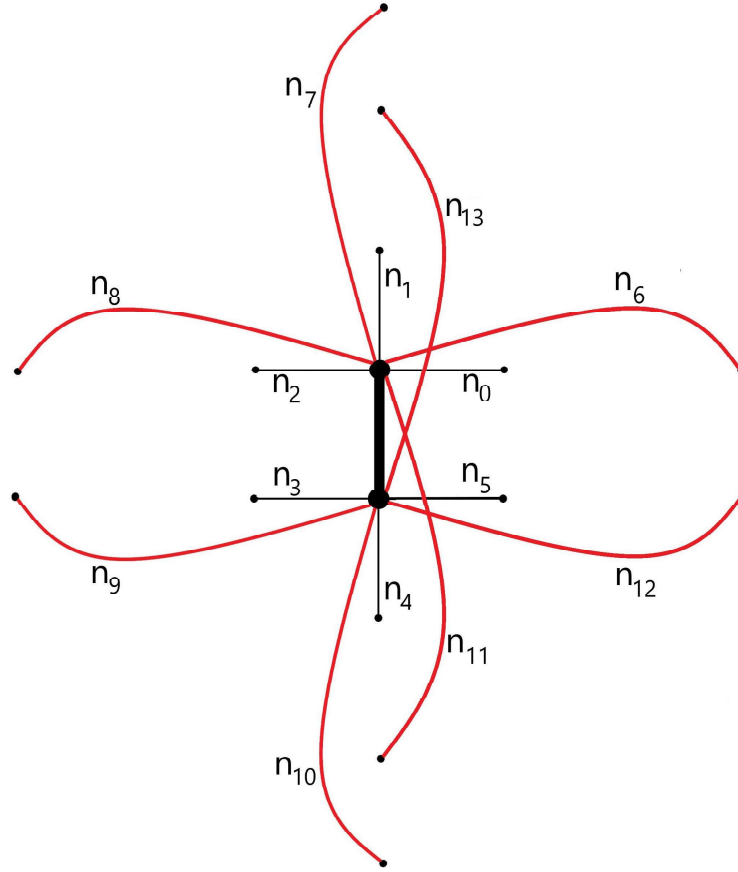


Figura 29 – Representação da vizinhança dos elos do tipo v_1 . Segmentos de reta e linhas curvas correspondem a elos de tamanhos 1 e k , respectivamente.

Tabela 12 – Identificação do número de cada vizinho dos elos do tipo v_1 .

r	$n_r (v_1)$
0	$4Li + 4j$
1	$4L[(i - 1 + L) \pmod{L}] + 4j + 1$
2	$4Li + 4[(j - 1 + L) \pmod{L}]$
3	$4L[(i + 1) \pmod{L}] + 4[(j - 1 + L) \pmod{L}]$
4	$4L[(i + 1) \pmod{L}] + 4j + 1$
5	$4L[(i + 1) \pmod{L}] + 4j$
6	$4Li + 4j + 2$
7	$4L[(i - k + L) \pmod{L}] + 4j + 3$
8	$4Li + 4[(j - k + L) \pmod{L}] + 2$
9	$4L[(i + 1) \pmod{L}] + 4[(j - k + L) \pmod{L}] + 2$
10	$4L[(i + 1) \pmod{L}] + 4j + 3$
11	$4L[(i + 1) \pmod{L}] + 4j + 2$
12	$4Li + 4j + 3$
13	$4L[(i - k + 1 + L) \pmod{L}] + 4j + 3$

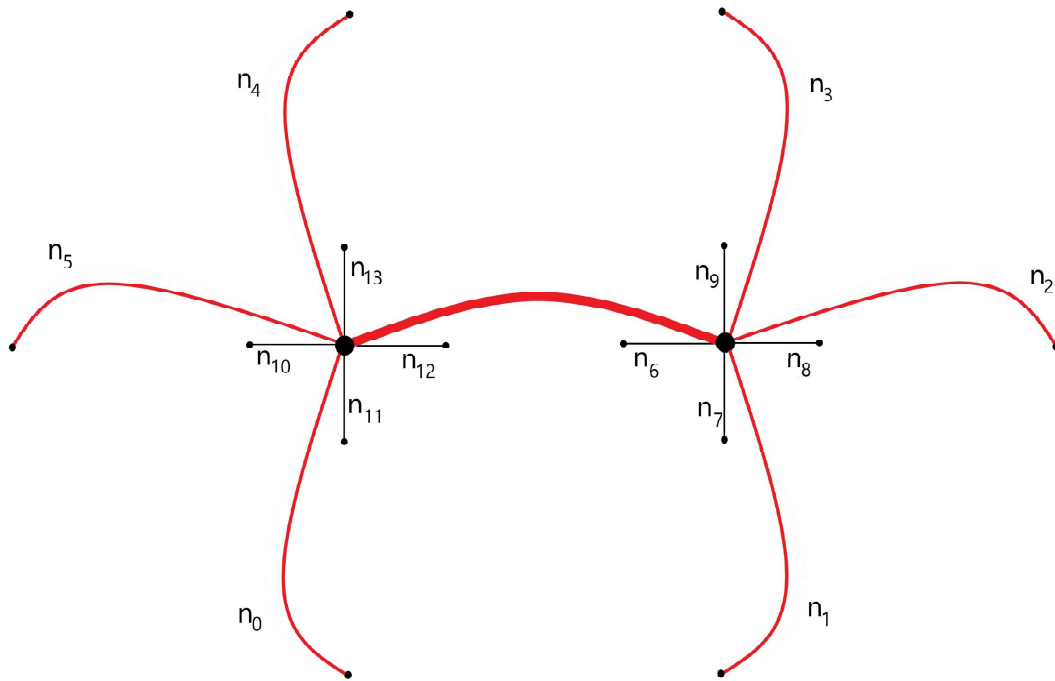


Figura 30 – Representação da vizinhança dos nós do tipo h_k . Segmentos de reta e linhas curvas correspondem a nós de tamanhos 1 e k , respectivamente.

Tabela 13 – Identificação do número de cada vizinho dos nós do tipo h_k .

r	$n_r(h_k)$
0	$4Li + 4j + 3$
1	$4Li + 4(j + k) \pmod{4L} + 3$
2	$4Li + 4(j + k) \pmod{4L} + 2$
3	$4L[(i - k + L) \pmod{L}] + 4(j + k) \pmod{4L} + 3$
4	$4L[(i - k + L) \pmod{L}] + 4j + 3$
5	$4Li + [4(L - k + j) + 2] \pmod{4L}$
6	$4Li + [4(j + k - 1)] \pmod{4L}$
7	$4Li + 4(j + k) \pmod{4L} + 1$
8	$4Li + 4(j + k) \pmod{4L}$
9	$4L[(i - 1 + L) \pmod{L}] + 4(j + k) \pmod{4L} + 1$
10	$4Li + 4(j - 1 + L) \pmod{4L}$
11	$4Li + 4j + 1$
12	$4Li + 4j$
13	$4L[(i - 1 + L) \pmod{L}] + 4j + 1$

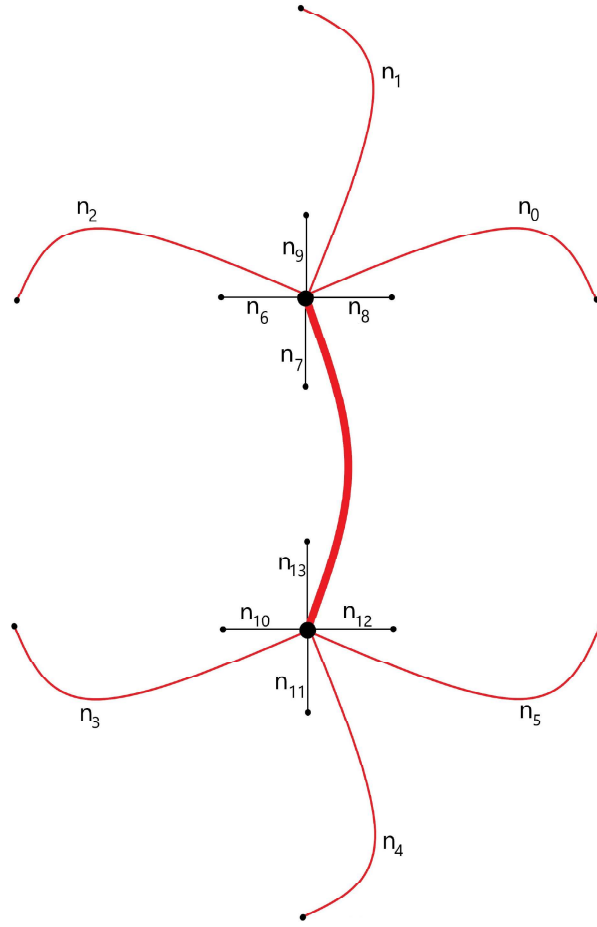


Figura 31 – Representação da vizinhança dos elos do tipo v_k . Segmentos de reta e linhas curvas correspondem a elos de tamanhos 1 e k , respectivamente.

Tabela 14 – Identificação do número de cada vizinho dos elos do tipo v_k .

r	$n_r (v_k)$
0	$4Li + 4j + 2$
1	$4L[(i + L - k) \pmod{L}] + 4j + 3$
2	$4Li + 4[(j - k + L) \pmod{L}] + 2$
3	$4L[(i + k) \pmod{L}] + 4[(j - k + L) \pmod{L}] + 2$
4	$4L[(i + k) \pmod{L}] + 4j + 3$
5	$4L[(i + k) \pmod{L}] + 4j + 2$
6	$4Li + 4[(j - 1 + L) \pmod{L}]$
7	$4Li + 4j + 1$
8	$4Li + 4j$
9	$4L[(i - 1 + L) \pmod{L}] + 4j + 1$
10	$4L[(i + k) \pmod{L}] + 4[(j - 1 + L) \pmod{L}]$
11	$4L[(i + k) \pmod{L}] + 4j + 1$
12	$4L[(i + k) \pmod{L}] + 4j$
13	$4L[(i + k - 1) \pmod{L}] + 4j + 1$

Referências

- [1] Aktekin, N. e Erkoç, Ş.: *The test of the finite-size scaling relations for the six-dimensional Ising model on the Creutz cellular automaton*. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 284(1-4):206–214, 2000.
Citado 2 vezes nas páginas 70 e 80.
- [2] Amaral, C.S. do, Atman, A. P. F. e Lima, B. N. B. de: *On the monotonicity of the critical time in the Constrained-degree percolation model*. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 561:125291, 2021, ISSN 0378-4371. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378437120306816>.
Citado 3 vezes nas páginas 25, 26 e 57.
- [3] Amaral, C.S. do, Lima, B. N. B. de, Dickman, R. e Atman, A. P. F.: *Multirange Ising model on the square lattice*. Phys. Rev. E, 101:052138, May 2020. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.101.052138>.
Citado 2 vezes nas páginas 26 e 73.
- [4] Amaral, C.S. do, Schnabel, M., Lima, B. N. B. de e Atman, A. P. F.: *Multi-range percolation model on the square lattice*. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 535:122383, 2019.
Citado 5 vezes nas páginas 24, 25, 26, 40 e 47.
- [5] Barradas-Bautista, D., Alvarado-Mentado, M., Agostino, M. e Cocho, G.: *Cancer growth and metastasis as a metaphor of Go gaming: An Ising model approach*. PloS one, 13(5):e0195654, 2018.
Citado na página 24.
- [6] Baxter, R. J.: *Exactly solved models in statistical mechanics*. Elsevier, 2016.
Citado na página 23.
- [7] Benjamini, I., Nachmias, A. e Peres, Y.: *Is the critical percolation probability local?* Probability theory and related fields, 149(1):261–269, 2011.
Citado na página 30.
- [8] Benjamini, I. e Schramm, O.: *Recurrence of Distributional Limits of Finite Planar Graphs*. Electronic Journal of Probability, 6(none):1 – 13, 2001. <https://doi.org/10.1214/EJP.v6-96>.
Citado na página 27.

- [9] Binder, K.: *Finite size scaling analysis of Ising model block distribution functions*. Zeitschrift für Physik B Condensed Matter, 43(2):119–140, 1981.
Citado na página 69.
- [10] Bonati, C.: *The Peierls argument for higher dimensional Ising models*. European Journal of Physics, 35(3):035002, 2014.
Citado na página 69.
- [11] Broadbent, S. R. e Hammersley, J. M.: *Percolation processes: I. Crystals and mazes*. Em *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, vol. 53, pp. 629–641. Cambridge University Press, 1957.
Citado 2 vezes nas páginas 23 e 31.
- [12] Coats, K. H., Dempsey, J. R., Henderson, J. H. et al.: *The use of vertical equilibrium in two-dimensional simulation of three-dimensional reservoir performance*. Society of Petroleum Engineers Journal, 11(01):63–71, 1971.
Citado 2 vezes nas páginas 24 e 31.
- [13] Dammer, S. M. e Hinrichsen, H.: *Spreading with immunization in high dimensions*. Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, 2004(07):P07011, 2004.
Citado na página 63.
- [14] Das, T., Abeyasinghe, P. M., Crone, J., Sosnowski, A., Laureys, S., Owen, A. e Soddu, A.: *Highlighting the structure-function relationship of the brain with the Ising model and graph theory*. BioMed research international, 2014, 2014.
Citado na página 24.
- [15] de Lima, B., Sanchis, R., dos Santos, D., Sidoravicius, V. e Teodoro, R.: *The Constrained-degree percolation model*. Stochastic Processes and their Applications, 130(9):5492–5509, 2020, ISSN 0304-4149. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304414919305265>.
Citado 2 vezes nas páginas 59 e 60.
- [16] Duminil-Copin, H.: *Geometric representations of lattice spin models*. Spartacus Graduate, Cours Peccot, Collège de France, 2015.
Citado 2 vezes nas páginas 24 e 74.
- [17] Dutta, S., Yun, Y., Widom, M. e Gellman, A. J.: *2D Ising Model for Adsorption-induced Enantiopurification of Racemates*. ChemPhysChem, 22(2):197–203, 2021.
Citado na página 24.

- [18] Dvořák, P.: *Ising model in finance: from microscopic rules to macroscopic phenomena*. 2012.
Citado na página 24.
- [19] Evans, J. W.: *Random and cooperative sequential adsorption*. Rev. Mod. Phys., 65:1281–1329, Oct 1993. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.65.1281>.
Citado 2 vezes nas páginas 57 e 83.
- [20] Feder, J.: *Random sequential adsorption*. Journal of Theoretical Biology, 87(2):237–254, 1980, ISSN 0022-5193. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0022519380903586>.
Citado 2 vezes nas páginas 57 e 83.
- [21] Ferrenberg, A. M. e Swendsen, R. H.: *New Monte Carlo technique for studying phase transitions*. Physical Review Letters, 61(23):2635, 1988.
Citado na página 70.
- [22] Ferrenberg, A. M. e Swendsen, R. H.: *Optimized Monte Carlo data analysis*. Computers in Physics, 3(5):101–104, 1989.
Citado na página 70.
- [23] Fisher, M. E. e Barber, M. N.: *Scaling theory for finite-size effects in the critical region*. Physical Review Letters, 28(23):1516, 1972.
Citado na página 33.
- [24] Fitzner, R., Hofstad, R. van der *et al.*: *Mean-field behavior for nearest-neighbor percolation in $d > 10$* . Electronic Journal of Probability, 22, 2017.
Citado na página 33.
- [25] Furlan, A. P., Santos, D. C. dos, Ziff, R. M. e Dickman, R.: *Jamming and percolation of dimers in restricted-valence random sequential adsorption*. Phys. Rev. Research, 2:043027, Oct 2020. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevResearch.2.043027>.
Citado na página 24.
- [26] Furlan, A. P., Santos, D. C. dos, Ziff, R. M. e Dickman, R.: *Jamming and percolation of dimers in restricted-valence random sequential adsorption*. Phys. Rev. Research, 2:043027, Oct 2020. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevResearch.2.043027>.
Citado 3 vezes nas páginas 57, 58 e 83.

- [27] Garet, O., Marchand, R. e Marcovici, I.: *Does Eulerian percolation on Z^2 percolate?* arXiv preprint arXiv:1607.01974, 2016.
Citado na página 57.
- [28] Gaunt, D. S., Guttmann, A. J. e Whittington, S. G.: *Percolation with restricted valence*. Journal of Physics A: Mathematical and General, 12(1):75–79, jan 1979. <https://doi.org/10.1088/0305-4470/12/1/019>.
Citado na página 57.
- [29] Gomes, P. A., Pereira, A. e Sanchis, R.: *Upper bounds for critical probabilities in Bernoulli Percolation models*. arXiv preprint arXiv:2106.10388, 2021.
Citado na página 33.
- [30] Grimmett, G.: *Percolation Springer-Verlag*. Berlin (Second edition), 1999.
Citado 3 vezes nas páginas 30, 45 e 61.
- [31] Grimmett, G. e Stirzaker, D.: *Probability and random processes*. Oxford university press, 2020.
Citado na página 36.
- [32] Grimmett, G. e Welsh, D.: *Probability: an introduction*. Oxford University Press, 2014.
Citado 2 vezes nas páginas 35 e 63.
- [33] Hara, T. e Slade, G.: *Mean-field critical behaviour for percolation in high dimensions*. Communications in Mathematical Physics, 128(2):333–391, 1990.
Citado na página 33.
- [34] Hara, T. e Slade, G.: *Mean-field behaviour and the lace expansion*. Probability and Phase Transition (G. Grimmett, ed.), 1994.
Citado na página 33.
- [35] Harris, T. E.: *A lower bound for the critical probability in a certain percolation process*. Em *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, vol. 56, pp. 13–20. Cambridge University Press, 1960.
Citado na página 33.
- [36] Holroyd, A. e Li, Z.: *Constrained percolation in two dimensions*, Será publicado em Annales de L’Institut Henri Poincaré D, 2021.
Citado na página 57.

- [37] Hoshen, J. e Kopelman, R.: *Percolation and cluster distribution. I. Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm*. Phys. Rev. B, 14:3438–3445, Oct 1976. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.14.3438>.
Citado na página 35.
- [38] Hutchcroft, T. *et al.*: *Locality of the critical probability for transitive graphs of exponential growth*. Annals of Probability, 48(3):1352–1371, 2020.
Citado na página 30.
- [39] Ising, E.: *Beitrag zur theorie des ferromagnetismus*. Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei, 31(1):253–258, 1925.
Citado 2 vezes nas páginas 67 e 70.
- [40] Ivaneyko, D., Ilnytskyi, J., Berche, B. e Holovatch, Y.: *Criticality of the random-site Ising model: Metropolis, Swendsen-Wang and Wolff Monte Carlo algorithms*. arXiv preprint cond-mat/0501291, 2005.
Citado 2 vezes nas páginas 70 e 71.
- [41] Kallikragas, D. T. e Svishchev, I. M.: *Percolation transitions of physically and hydrogen bonded clusters in supercritical water*. Journal of Molecular Liquids, p. 111213, 2019.
Citado na página 24.
- [42] Kertesz, J., Chakrabarti, B. K. e Duarte, J. A. M. S.: *Threshold and scaling in percolation with restricted valence*. Journal of Physics A: Mathematical and General, 15(1):L13–L18, jan 1982. <https://doi.org/10.1088/0305-4470/15/1/003>.
Citado na página 57.
- [43] Larue, D. K. e Hovadik, J.: *Connectivity of channelized reservoirs: a modelling approach*. Petroleum Geoscience, 12(4):291–308, 2006.
Citado 2 vezes nas páginas 24 e 31.
- [44] Leath, P. L.: *Cluster shape and critical exponents near percolation threshold*. Physical Review Letters, 36(16):921, 1976.
Citado 2 vezes nas páginas 53 e 58.
- [45] Lenz, W.: *Beitrag zum Verständnis der magnetischen Erscheinungen in festen Körpern*. Z. Phys., 21:613–615, 1920.
Citado 2 vezes nas páginas 23 e 67.
- [46] Lima, B. N. B. de, Rolla, L. T. e Valesin, D.: *Monotonicity and phase diagram for multirange percolation on oriented trees*. Random Structures & Algorithms, 55(1):160–172, 2019.

Citado 2 vezes nas páginas 37 e 40.

- [47] Lima, B. N. B. de, Sanchis, R. e Silva, R. W. C.: *Critical point and percolation probability in a long range site percolation model on $\mathbb{Z}^d$* . Stochastic processes and their applications, 121(9):2043–2048, 2011.

Citado 6 vezes nas páginas 24, 25, 30, 37, 38 e 39.

- [48] Liu, B. e Gitterman, M.: *The critical temperature of two-dimensional and three-dimensional Ising models*. American Journal of Physics, 71(8):806–808, 2003.

Citado na página 70.

- [49] Lorenz, C. D. e Ziff, R. M.: *Precise determination of the bond percolation thresholds and finite-size scaling corrections for the sc, fcc, and bcc lattices*. Physical Review E, 57(1):230, 1998.

Citado na página 63.

- [50] Lourenço, B. J.: *Modelo de Ising Antiferromagnético em um campo externo: Simulação por Amostragem Entrópica*. Tese de Doutorado, UFMG, 2011.

Citado na página 68.

- [51] Luijten, E.: *Introduction to cluster Monte Carlo algorithms*. Em *Computer Simulations in Condensed Matter Systems: From Materials to Chemical Biology Volume 1*, pp. 13–38. Springer, 2006.

Citado na página 71.

- [52] Lundow, P. H. e Markström, K.: *Critical behavior of the Ising model on the four-dimensional cubic lattice*. Physical Review E, 80(3):031104, 2009.

Citado 2 vezes nas páginas 70 e 80.

- [53] Martineau, S., Tassion, V. *et al.*: *Locality of percolation for abelian Cayley graphs*. The Annals of Probability, 45(2):1247–1277, 2017.

Citado na página 30.

- [54] Masihi, M., King, P. R., Nurafza, P. R. *et al.*: *Fast estimation of connectivity in fractured reservoirs using percolation theory*. SPE Journal, 12(02):167–178, 2007.

Citado 2 vezes nas páginas 24 e 31.

- [55] Mertens, S. e Moore, C.: *Percolation thresholds and Fisher exponents in hypercubic lattices*. Physical Review E, 98(2):022120, 2018.

Citado 4 vezes nas páginas 47, 51, 53 e 63.

- [56] Metropolis, N., Rosenbluth, A.W., Rosenbluth, M.N., Teller, A.H. e Teller, E.: *Equation of state calculations by fast computing machines*. The journal of chemical physics, 21(6):1087–1092, 1953.
Citado 2 vezes nas páginas 24 e 70.
- [57] Newman, M. E. J. e Ziff, R. M.: *Fast Monte Carlo algorithm for site or bond percolation*. Physical Review E, 64(1):016706, 2001.
Citado 4 vezes nas páginas 24, 34, 36 e 61.
- [58] Onsager, L.: *Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition*. Physical Review, 65(3-4):117, 1944.
Citado 2 vezes nas páginas 67 e 70.
- [59] O’Neill, M. E.: *PCG: A family of simple fast space-efficient statistically good algorithms for random number generation*. ACM Transactions on Mathematical Software, 2014.
Citado na página 24.
- [60] Pant, M., Towsley, D., Englund, D. e Guha, S.: *Percolation thresholds for photonic quantum computing*. Nature communications, 10(1):1070, 2019.
Citado na página 24.
- [61] Peierls, R.: *On Ising’s model of ferromagnetism*. Em *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, vol. 32, pp. 477–481. Cambridge University Press, 1936.
Citado na página 69.
- [62] Roberto, G. F., Neves, L. A., Nascimento, M. Z., Tosta, T. A., Longo, L. C., Martins, A. S. e Faria, P. R.: *Features based on the percolation theory for quantification of non-hodgkin lymphomas*. Computers in biology and medicine, 91:135–147, 2017.
Citado na página 24.
- [63] Rozenfeld, H. D., Gallos, L. K. e Makse, H. A.: *Explosive percolation in the human protein homology network*. The European Physical Journal B, 75(3):305–310, 2010.
Citado 2 vezes nas páginas 24 e 31.
- [64] Russo, L.: *On the critical percolation probabilities*. Zeitschrift für Wahrscheinlichkeitstheorie und verwandte Gebiete, 56(2):229–237, 1981.
Citado na página 33.
- [65] Ryabov, V. A.: *Phase transitions in the Ising model*. Em *Principles of Statistical Physics and Numerical Modeling*, 2053-2563, pp. 22–1 to 22–5. IOP Publishing, 2018, ISBN 978-0-7503-1341-4. <http://dx.doi.org/10.1088/978-0-7503-1341-4ch22>.

Citado na página 23.

- [66] Sanchis, R., Santos, D. C. d. e Silva, R. W.: *Constrained-degree percolation in a random environment*. arXiv preprint arXiv:2011.02060, 2020.

Citado na página 58.

- [67] Seyrich, M. G.: *Percolation Theory Applied to Financial Markets: A Cluster Description of Herding Behavior Leading to Bubbles and Crashes*. 2015.

Citado 2 vezes nas páginas 24 e 31.

- [68] Shklovskii, B. I. e Efros, A. L.: *Percolation theory and conductivity of disordered systems*. Uspekhi Fiz. Nauk, 117:401, 1975.

Citado na página 23.

- [69] Soteros, C. E., Narayanan, K. S. S., De'Bell, K. e Whittington, S. G.: *Polymers with restricted branching*. Phys. Rev. E, 53:4745–4753, May 1996. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.53.4745>.

Citado 3 vezes nas páginas 24, 31 e 57.

- [70] Stauffer, D. e Aharony, A.: *Introduction to percolation theory*. Taylor & Francis, 2018.

Citado 3 vezes nas páginas 26, 34 e 62.

- [71] Stevenson, J. D. e Weigel, M.: *Percolation and Schramm–Loewner evolution in the 2D random-field Ising model*. Computer Physics Communications, 182(9):1879–1882, 2011.

Citado na página 23.

- [72] Sun, K., Xin, J., Li, Y., Wang, Z., Hou, Q., Li, X., Wu, X., Fan, R. e Choy, K. L.: *Negative permittivity derived from inductive characteristic in the percolating Cu/EP metacomposites*. Journal of Materials Science & Technology, 35(11):2463–2469, 2019.

Citado na página 31.

- [73] Swendsen, R. H. e Wang, J. S.: *Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations*. Physical Review Letters, 58(2):86, 1987.

Citado na página 71.

- [74] Teodoro, R.: *Constrained-degree percolation*. Tese de Doutorado, IMPA, 2014.

Citado na página 57.

- [75] Walter, J. C. e Barkema, G. T.: *An introduction to Monte Carlo methods*. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 418:78–87, 2015.
Citado na página 71.
- [76] Wang, F. e Landau, D. P.: *Efficient, multiple-range random walk algorithm to calculate the density of states*. Physical Review Letters, 86(10):2050, 2001.
Citado na página 70.
- [77] Wang, J., Zhou, Z., Zhang, W., Garoni, T. M. e Deng, Y.: *Bond and site percolation in three dimensions*. Physical Review E, 87(5):052107, 2013.
Citado na página 63.
- [78] Widom, B.: *The Boltzmann distribution law and statistical thermodynamics*, p. 1–15. Cambridge University Press, 2002.
Citado na página 68.
- [79] Wilkinson, D. e Willemsen, J. F.: *Invasion percolation: a new form of percolation theory*. Journal of Physics A: Mathematical and General, 16(14):3365, 1983.
Citado na página 57.
- [80] Wilkinson, M. K.: *Branched polymers: exact enumeration study of three-dimensional lattice animals classified by valence distribution*. Journal of Physics A: Mathematical and General, 19(16):3431–3441, nov 1986. <https://doi.org/10.1088/0305-4470/19/16/038>.
Citado 2 vezes nas páginas 24 e 31.
- [81] Wolff, U.: *Collective Monte Carlo updating for spin systems*. Physical Review Letters, 62(4):361, 1989.
Citado 3 vezes nas páginas 24, 70 e 71.
- [82] Xun, Z. e Ziff, R. M.: *Bond percolation on simple cubic lattices with extended neighborhoods*. Physical Review E, 102(1):012102, 2020.
Citado na página 63.
- [83] Zhou, W. X. e Sornette, D.: *Self-organizing Ising model of financial markets*. The European Physical Journal B, 55(2):175–181, 2007.
Citado na página 24.