

## Raport științific

PN-III-P4-PCE-2016-0363

anul: 2018

### Structuri spațio-temporare emergente în sisteme fizice și socio-economice

#### Rezumat

În anul 2018 cercetările noastre s-au focusat în toate cele trei direcții de cercetare enunțate în proiect. S-au realizat studii pe sisteme de oscilatori cuplați și sisteme de metronoame căutând stări de sincronizări mai exotice, printre care și stări de tip chimera. În problematica mobilităților umane s-a elaborat un model nou care descrie bine fluxurile spațiale de navetiști observate în SUA, Italia și Ungaria. În tematica "dewetting" s-a realizat aparatura experimentală cu ajutorul căreia se vor efectua experimentele. Simulările computaționale noi au confirmat existența tranzițiilor de fază pe care urmează să le studiem experimental anul viitor. Rezultatele noastre s-au concretizat anul acesta în patru articole ISI publicate și nouă comunicări la conferințe internaționale.

#### Articole ISI

1. Tamás Sándor Biró, András Telcs and **Zoltán Néda**, *Entropic Distance for Nonlinear Master Equation*, Universe, vol. **4**, 10 (2018)
2. T.S. Biró, **Z. Néda**, *Unidirectional random growth with resetting*, Physica A, vol. **499**, 335–361, (2018)
3. Sándor Kajántó, **Zoltán Néda**, *Universality in the coarse-grained fluctuations for a class of linear dynamical systems*, Physica A, vol. **503**, 215–220 (2018)
4. Levente Varga, Geza Toth and **Zoltan Neda**, *Commuting patterns: the flow and jump model and supporting data*, EPJ Data Science, vol. **7**, 37 (2018)

#### Participări de conferințe

1. **K. Denes**, B. Sandor and **Z. Neda**, *Pattern selection in a ring of Kuramoto rotators*, AMCOS (Analysis and Modeling of Complex Oscillatory Systems), Barcelona, Spain, 19-23 March, 2018
2. **Z. Neda**, L. Varga and T. Biro, *A master equation approach to Science and Facebook popularity*, MECO 43 (43rd Conferences of the Middle European Cooperation in Statistical Physics), Krakow, Poland, 1-4 May, 2018
3. **K. Denes**, B. Sandor and **Z. Neda**, *Collective modes of identical Kuramoto rotators in a ring-like topology*, MECO 43 (43rd Conferences of the Middle European Cooperation in Statistical Physics), Krakow, Poland, 1-4 May, 2018
4. **I. Papp**, M. Afifi, L. Varga. I. Gere and **Z. Neda**, *Scaling in the space-time of the Internet*, MECO 43 (43rd Conferences of the Middle European Cooperation in Statistical Physics), Krakow, Poland, 1-4 May, 2018

5. L. Varga, G. Toth and **Z. Neda**, *An improved radiation model and its applicability for understanding commuting patterns in the USA*, MECO 43 (43rd Conferences of the Middle European Cooperation in Statistical Physics), Krakow, Poland, 1-4 May, 2018
6. T.S. Biro and **Z. Neda**, *Random growth with reset: complex systems in a new perspective*, MACS 12 (12th Joint Conference on Mathematics and Computer Science), Cluj, Romania, 14-17 June, 2018
7. L. Varga, G. Toth and **Z. Neda**, *Commuting patterns: a modified radiation model and supporting data*, MACS 12 (12th Joint Conference on Mathematics and Computer Science), Cluj, Romania, 14-17 June, 2018
8. **I. Papp**, M. Afifi, L. Varga, I. Gere and **Z. Neda**, *Nontrivial dynamical scaling in the Internet: experiments and a simple model*, MACS 12 (12th Joint Conference on Mathematics and Computer Science), Cluj, Romania, 14-17 June, 2018
9. **F. Járjai-Szabó**, **S. Boda** and **Z. Néda**, *On the KJMA lattice model with continuous nucleation*, MACS 12 (12th Joint Conference on Mathematics and Computer Science), Cluj, Romania, 14-17 June, 2018

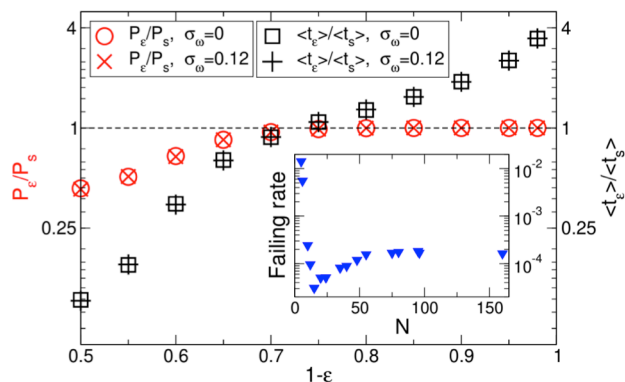
### **1. Stări de sincronizare "exotice" și stări de tip chimera.**

În acest an am continuat cercetările privind sisteme unidimensionale formate din oscilatori de tip Kuramoto. Ne-am concentrat mai ales pe sisteme având oscilatori identice cuplate cu vecini numai de ordinul întâi. Obiectivul nostru a fost să elaborăm și testăm diferite metode prin care putem prezice starea finală a sistemului inițiat cu faze aleatoare.

Ca prim pas am identificat stările colective (stări de sincronizare "exotice") stabile. Acest lucru a fost posibil prin redefinirea sistemelor ca sistem gradient [1], înseamnă că există o "energie potențială" în sistem care scade monoton pe parcursul dinamicii. Minimele acestei funcții multidimensionale (energia potențială în spațiul fazelor) corespunde la stările staționare a sistemului. Alături de stările deja cunoscute în literatură [1,2,3] am reușit să descoperim noi stări staționare, care apar în punctele de sa al potențialului.

Analizând dinamica sistemului s-a arătat că spațiul de fază a sistemului și geometria domeniilor de atracție devin mai complexe cu creșterea numărul oscilatorilor. Acesta înseamnă că pentru o predicție cât mai precisă trebuie să considerăm intervale tot mai lungi a dinamicii, deoarece în general bazându-ne pe imagini instantanee starea finală ordonată a sistemelor practic nu poate fi precisă. Am propus două metode simple pentru prezicerea stării colective finale, metode care sunt complementare din punct de vedere al preciziei și a timpului de rulare. Amândouă metode se bazează pe parametrii de ordine Kuramoto generalizate. În cazul primei metode am introdus o valoare de prag pentru parametrul de ordine. Dacă unul dintre parametrii de ordine depășește această valoare de prag, se oprește dinamica și afirmăm că starea a cărui parametru de ordine este mai mare decât acest prag va fi selectată. Această metodă poate funcționa cu precizie de 100% dacă alegem un prag suficient de mare (cât mai aproape de 1) însă pierdem foarte mult timp până se obține această stare. Dacă se alege un prag cu valoare mai scăzută, riscăm o predicție

incorectă asupra stării finale. A doua metodă pornește de la ipoteza că dinamica are două părți: prima parte unde se realizează selectarea stării finale iar în partea a doua se observă relaxarea sistemului către starea finală selectată. Presupunând că în procesul de relaxare numai parametrul de ordine a stării selectate crește, iar celelalte scad, avem un criteriu prin care se poate prezice starea finală a sistemului. Cu această metodă timpul de rulare a programelor computaționale devine semnificativ mai mic, însă o precizie de predicție de 100% nu poate fi realizată. S-a arătat că rata de eroare a metodei este între 1%-0,001% în funcție de numărul oscilatorilor din sistem. Aceste erori sunt cauzate de punctele de tip  $\phi$  din funcția de energie potențială. Punctele  $\phi$  sunt instabile, însă din anumite direcții ei se comportă ca atractori, deoarece matricea Jacobi aparținând acestor puncte au cel puțin o valoare proprie negativă alături de cele pozitive. Mișcându-se pe traiectorii care se găsesc în proximitatea direcțiilor stabile, punctul reprezentativ al sistemului se poate apropia de punctul  $\phi$ . Când sistemul se află în jurul unui punct fix de orice tip (nod,  $\phi$ ) valorile parametrilor de ordine seamănă cu valorile caracteristice pentru echilibrul respectiv, iar viteza punctului reprezentativ devine aproape zero. Deoarece punctele  $\phi$  nu reprezintă configurații aleatoare (sunt ordonate însă simetria lor este mai scăzută față de stările staționare stabile) este probabil că unul din parametrii de ordine să aibă o valoare mult mai mare comparat cu restul. Astfel se poate întâmpla faptul că un parametru de ordine crește iar celelalte scad, semnalând fals începutul fazei de relaxare. Acest efect și încetinirea punctului reprezentativ în spațiul fazelor este întotdeauna prezent în serii de timp simulate ale parametrilor de ordine în cazul când metoda dă predicții eronate. Mai mult, s-a arătat că erorile de predicție în metoda a doua apar pe traiectoriile care se află pe granița dintre diferite domenii de atracție. Punctele  $\phi$  fiind poziționate pe limitele domeniilor, avem un argument în plus pentru explicația dată referitor erorile de predicție la metoda a doua.



**Figura 1:** Comparația celor două metode de predicție. Pentru diferite valori de prag ( $1-\epsilon$ ) am calculat rata de succes  $P_\epsilon$  și timpul mediu de rulare  $\langle t_\epsilon \rangle$  pentru prima metodă și am comparat cu aceste valori calculate pentru cea de a doua metodă ( $P_s$ ,  $\langle t_s \rangle$ ). Când pragul este scăzut, prima metodă rulează mai repede, însă rata de succes este insuficientă. În cazul când pragul este ridicat metoda doi devine mai eficientă în timp. Procesul de comparație a fost repetat și pentru oscilatori neidentici. Figura din interior arată rata de eroare a metodei a doua.

Problematica privind balanța dintre eficiența în timpul de calcul și precizia celor două metode este prezentat în Figura 1. Comparație a fost extinsă și pentru sisteme cu oscilatori neidentici.

Alături de modelarea sistemelor oscilatorii abstracte de tip Kuramoto, bazându-ne pe studii anterioare [4,5] am inițiat și simularea computațională a ansamblelor de metronoame cuplate. Scopul nostru este observarea stării de tip chimera într-un sistem de metronoame plasate pe o platformă rotativă. În această configurație platforma asigură cuplarea metronoamelor. Stările chimera sunt stările stabile din punct de vedere dinamic, stări

în care o parte bine definită a sistemului oscilează în sincron, iar restul sistemul are o dinamică dezordonată. Factorii care conduc la formarea stărilor chimera momentan nu sunt clare, dar se știe că este necesar un fel de neomogenitate în cuplajul dintre elementele sistemului, Aceste care condiții se pot realiza în setupul experimental

propus. Simulările computaționale pentru studiul sistemului sunt inevitabile deoarece prin această metodă putem colecta informațiile necesare referitor la cum și unde să căutăm stări chimera în sistemul real. După reproducerea cu succes a rezultatelor anterioare, anul viitor urmează studiul efectelor induse de cuplajul neomogen și observarea stărilor chimera în sistem.

- [1] D. A. Wiley, S. H. Strogatz, and M. Girvan, *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, **16**, 015103 (2006).  
 [2] R. Dodla, A. Sen, and G. L. Johnston, *Phys. Rev. E*, **69**, 056217 (2004).  
 [3] A. L. T. K. Roy, *Chaos, Solitons & Fractals*, **45**, 888 (2012)  
 [4] Sz. Boda, L. Davidova, Z. Neda, *Eur. Phys. J. Special Topics* **223**(4), 649 (2014)  
 [5] Kapitaniak, Tomasz, et al. "*Imperfect chimera states for coupled pendula.*" *Scientific reports* **4** (2014): 6379.

## **2. Studiul mobilităților umane**

Un model simplu, numit modelul de "curgere și salt" (flow and jump model - FJM) [1] era folosit pentru descrierea fluxurilor de navetiști la distanțe diferite. Modelul se bazează pe o aproximație oferit de o ecuație master care permite un flux local de probabilitate netă și salturi nelocale. Modelul FJM este în principiu un model cu un parametru, similar cu modelul de radiație. S-a arătat printr-un studiu statistic riguros că modelul FJM oferă o descriere îmbunătățită pentru fluxurile de navetiști din SUA, Italia și Ungaria.

În studiul nostru noi am comparat modelul nostru cu cel gravitațional (gravity model - GM) [2], modelul de radiație (radiation model - RM) [3], modelul de radiație cu selecție (radiation model with selection - RMwS) [3] și modelul de radiație optimizat pe costurile de călătorie (travel cost optimized radiation model - TCORM) [4]. S-a arătat că în afara modelului gravitațional în toată celelalte modele se poate calcula analitic probabilitatea ca un navetist să aleagă o destinație care este în afara unui disc care conține o populație de mărime  $W$ . În cadrul modelelor precizate mai sus, această probabilitate este:

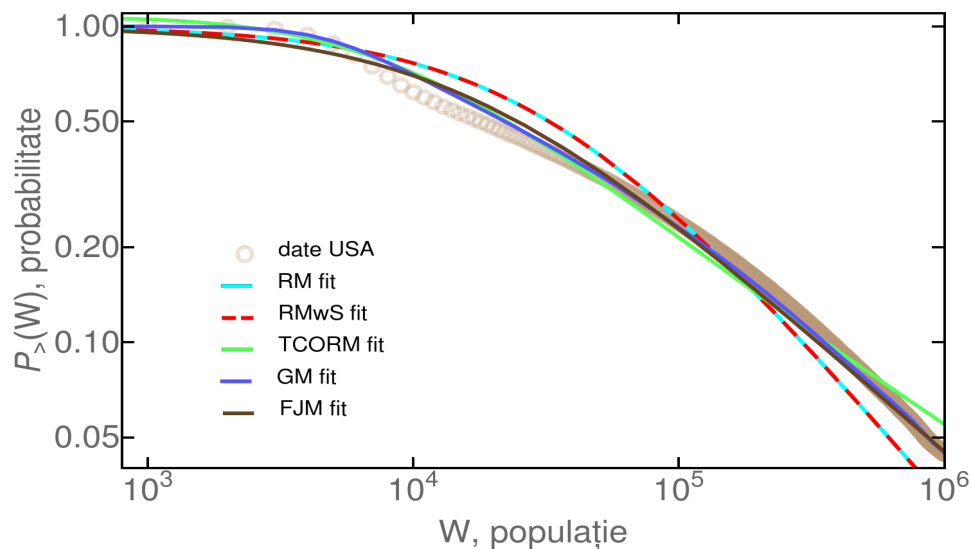
$$P_{>}(W)_{RM} = \frac{1}{\mu W + 1}, \quad P_{>}(W)_{RMwS} = \frac{1 - (1 - q)^{\mu W + 1}}{(\mu W + 1)q}, \quad P_{>}(W)_{TCORM} = \frac{1 + \lambda \sqrt{W}}{\mu W + 1},$$

$$P_{>}(W)_{FJM} = \frac{1}{(\mu W + 1)^{(a-1)}.$$

unde în afara lui  $W$  toate celelalte sunt parametrii de fitare. În cadrul modelului gravitațional această probabilitate se poate calcula doar numeric.

Pentru a compara puterea de predicție a modelelor de mai sus s-au procesat baze de date complete pentru navetiști și baze de date spațiale referitoare la populație pentru SUA, Italia și Ungaria. În cazul SUA s-au analizat datele recensământului populației între anii 2006 și 2010, folosind 73.803 de localități, 4.156.426 rute de naveta și 308.745.231 de locuitori. Date de recensământ din anul 2011 au fost folosiți pentru Italia: 8.093 localități, 556.120 rute de naveta, și 55.605.065 locuitori. În cazul Ungariei am lucrat cu 3.176 localități, 81.664 rute de naveta, și 9.972.000 de locuitori.

S-a arătat că modelul FJM cu alegerea universală  $a = 7/4$  oferă o fitare mult mai bună pentru datele reale de navetă decât toate celelalte modele anterioare. Acest rezultat s-a confirmat atât în cazul studiului pentru SUA, cât și în cazul studiului pentru Italia și Ungaria. În Figura 2 exemplificăm acest lucru pentru cazul calculelor efectuate pentru SUA. În Tabelul 1. oferim valoare  $R^2$  pentru calitatea regresiei și parametrii optimi ai regresiei pentru modelele menționate



**Figura 2.** Comparație între predicția modelelor pentru SUA. Cercurile maro reprezintă valorile experimentale calculate  $P_{>}(W)$  pentru SUA utilizând datele recensământului între anii 2006 și 2010. Aceste rezultate sunt comparate vizual cu cele mai bune rezultate obținute pentru modelul RM, modelul RMwS, modelul TCORM, modelul GM și modelul FJM. Sunt utilizate scări logaritmice pentru a ilustra mai bine abaterile.

|          | RM        | RMwS      | TCORM | GM       | FJM       |          |         |          |
|----------|-----------|-----------|-------|----------|-----------|----------|---------|----------|
| USA data | $\mu$     | $\mu$     | $q$   | $\mu$    | $\lambda$ | $\alpha$ | $\beta$ | $\mu$    |
| $R^2$    | 0.0000308 | 0.0000308 | 1.0   | 0.000119 | 0.0056    | 1.2      | 1.2     | 0.000062 |
|          | 0.971     | 0.971     | 0.992 | 0.993    | 0.993     | 0.993    | 0.993   | 0.993    |

**Tabelul 1.** Parametrii optimi ai regresiei pentru modelele studiate și calitatea regresiei caracterizat prin parametrul  $R^2$ .

- [1] Varga L, Tóth G, Néda Z (2018) *Commuting patterns: the flow and jump model and supporting data*. EPJ Data Science 7:37
- [2] Stefanouli M, Polyzos S (2017) *Gravity vs radiation model: two approaches on commuting in Greece*. Transp Res Proc 24:65–72
- [3] Simini F, Maritan A, Néda Z (2013) *Human mobility in a continuum approach*. PLoS ONE 8(3):e60069
- [4] Varga L, Tóth G, Néda Z (2017) *An improved radiation model and its applicability for understanding commuting patterns in Hungary*. Reg Statist 6(2):27–38

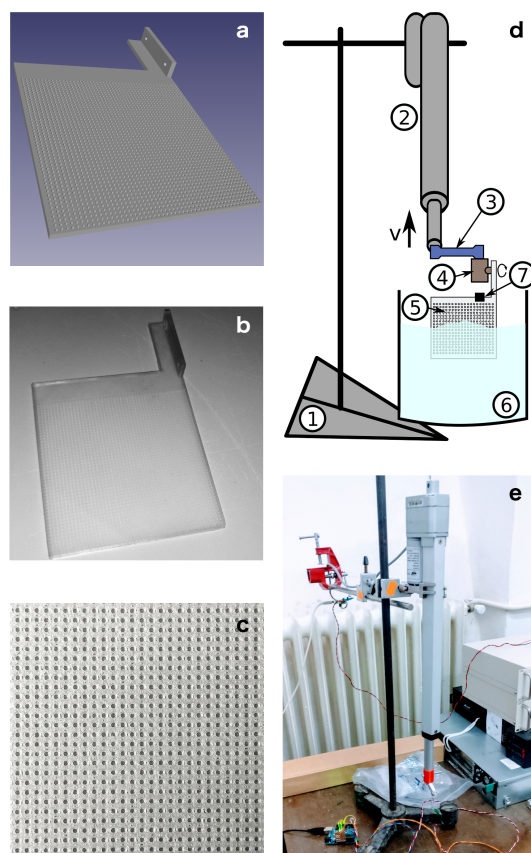
### 3. Problema de "dewetting"

Când o pelicula de lichid se contractă pe o suprafață solidă, linia triplă netedă a lichidului în general va deveni instabilă și va prelua o structură mult mai complexă, de structură fractală [1,2]. Fenomenul de retragere a peliculei, și formările de structuri spațiale asociate se pot înțelege prin balanța extrem de delicată a forțelor capilare și a celor de tip pinning datorită neomogenității suprafeței. Recent am arătat că în sisteme de acest tip poate apărea o tranziție de fază interesantă de tip "depinning" [3]. Tranziția de fază de tip "depinning" constă în faptul că pentru un grad de dezordine destul de ridicat și pentru forțe capilare destul de puternice retragerea peliculei de lichid se poate bloca. Unul din obiectele proiectului nostru este să arătăm existența acestei tranziții în condiții experimentale și să realizăm simulări computaționale pentru acest fenomen cu metoda propusă în [3].

În această etapă am început elaborarea experimentelor pe suprafețe cu microstructuri regulate pentru fenomenul "dewetting" controlat.

Primul pas în acest sens a fost realizarea suprafeței. Această suprafață cu microstructuri regulate a fost proiectat în programul FreeCAD, care ne dă posibilitatea de a crea aceste microstructuri în mod controlat printr-un macro programabil prin limbajul Python. Pe suprafața plană de dimensiune 70x70x2 mm s-a proiectat goluri de formă cilindrică plasate pe o rețea dreptunghiulară. Diametrul cilindrului  $d$  și constanta de rețea  $a$  sunt parametri caracteristici ale suprafeței rezultate. Modelul rezultat pentru valorile  $d=0.6\text{ mm}$  și  $a = 1.4\text{ mm}$  se poate vedea pe figura 1a. În continuare, plăcuța s-a realizat și fizic prin imprimare 3D din material PLA transparent, care este un material plastic, biodegradabil special conceput pentru imprimantele 3D. Această piesă printată este arătat pe figura 1b, iar imaginea mărită a suprafeței se găsește pe figura 1c.

Pentru experimentul "dewetting" controlat am realizat instalația schițată pe figura 1d. Această instalație constă dintr-un suport (1) pe care este fixat un motor linear (2). La capătul barei motorului se fixează un sensor de greutate sensibilă (3) pe care se pune un motor servo (4) care servește la orientarea suprafeței plane (5) care este parțial înfundat într-un vas cu lichid (6). Pe suprafața preparată se mai fixează un sensor de accelerație (7) care ne ajută la poziționarea exactă a aparatului precum și la măsurarea unghiului suprafeței cu verticala. Din această poziție inițială prin pornirea motorului linear se începe scoaterea lentă a plăcuței microstructurate din lichid cu o viteză

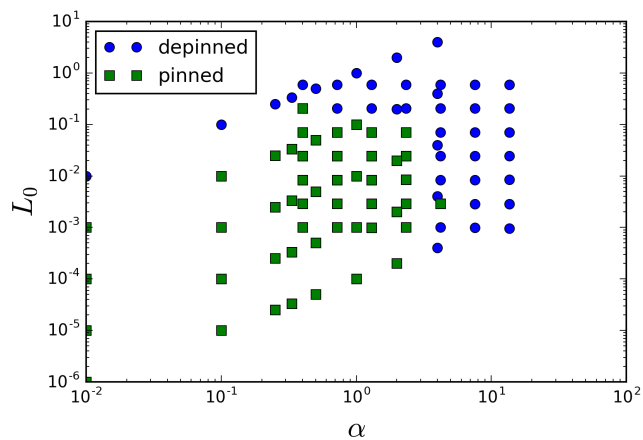


**Figura 3.** Suprafețele cu nemoginități controlate și printate cu imprimanta 3D, respectiv setupul experimental realizat pentru studiul tranziției de fază de tip depinning. Pentru o descriere completă a sistemului vezi textul.

constantă  $v$ . Mișcarea liniei de contact gaz-solid-lichid se detectează cu o cameră video. Imaginea aparaturii realizate este prezentată pe figura 1e.

Prin instalația realizată se poate detecta dependența de timp a forței totale care acționează asupra plăcuței în cursul procesului de scoatere lentă din lichid. Totodată, prin prelucrarea și procesarea înregistrărilor video printr-un program scris în Python se poate obține mișcarea și forma liniei de contact gaz-solid-lichid prin care putem studia și experimental fenomenul "dewetting".

Paralel cu perfecționarea aparaturii experimentale am realizat și simulări computaționale pentru tranziția de fază care se poate obține în sistem. Folosind metoda descrisă în [3] s-a studiat spațiul de fază bidimensional al parametrilor relevanți și s-a arătat posibilitatea de a obține tranziția de fază de tip "depinning" chiar din două direcții. Figura 3 sumarizează succint rezultatele simulărilor noastre computaționale. În funcție de



distanța caracteristică dintre neomogenități ( $L_0$ ) și tensiunea lineară a liniei triple (care depinde de grosimea peliculei de lichid) denotată aici cu  $\alpha$ , se poate obține sau o retragere continuă a peliculei de lichid sau o blocare a liniei triple. Cele două stări posibile ilustrate în Figura 3 cu diferite culori (depinned, respectiv pinned) sugerează că în funcție de parametrii relevanți trebuie să fie observabil tranziția de tip depinning. Experimentele noastre preliminare sugerează ca această tranziție există. Anul viitor prin experimente repetate în diferite condiții și pe diferite densități de neomogenități controlate vom încerca să confirmăm experimental predicțiile teoretice.

[1] B. N. J. Persson, U. Tartaglino, O. Albohr, and E. Tosatti, Phys. Rev. B **71**, 035428 (2005).

[2] G. Reiter, S. Al Akhrass, M. Hamieh, P. Damman, S. Gabriele, T. Vilmin, and E. Raphael, Eur. Phys. J. Special Topics **166**, 165 (2009).

[3] B. Tyukodi, Y. Brechet and Z. Neda, Phys. Rev. E. **90**, 052404 (2014)