

**PAULO HENRIQUE LORENZONI FILHO**

**PROPAGAÇÃO EPIDÊMICA EM MULTIGRAFOS**

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

Orientador: Silvio da Costa Ferreira Jr.

Coorientador: Wesley Francis Costa Cota

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

T

L869p  
2025 Lorenzoni Filho, Paulo Henrique, 1999-  
Propagação epidêmica em multigrafos / Paulo Henrique  
Lorenzoni Filho. – Viçosa, MG, 2025.  
1 dissertação eletrônica (59 f.): il. (algumas color.).

Inclui apêndice.

Orientador: Silvio da Costa Ferreira Junior.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Viçosa,  
Departamento de Física, 2025.

Referências bibliográficas: f. 56-59.

DOI: <https://doi.org/10.47328/ufvbbt.2025.449>

Modo de acesso: World Wide Web.

1. Teoria dos grafos. 2. Redes de computadores.  
3. Fenômenos críticos (Física). 4. Teoria do campo médio.  
I. Ferreira Junior, Silvio da Costa, 1976-. II. Universidade  
Federal de Viçosa. Departamento de Física. Programa de  
Pós-Graduação em Física. III. Título.

CDD 22. ed. 511.5

**PAULO HENRIQUE LORENZONI FILHO**

**PROPAGAÇÃO EPIDÊMICA EM MULTIGRAFOS**

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

APROVADA: 11 de abril de 2025.

Assentimento:

---

Paulo Henrique Lorenzoni Filho  
Autor

---

Silvio da Costa Ferreira Junior  
Orientador

# Agradecimentos

Agradeço à minha família.

Agradeço ao meu tio Antônio, que apoiou a minha ideia de ingressar na pós-graduação e me trouxe até Viçosa para que eu pudesse dar início a caminhada.

Agradeço à minha companheira, Rayra, por sua presença e apoio em minha vida.

Agradeço ao meu orientador, prof. Silvio Ferreira, por me ensinar a física das redes complexas e me conceder a possibilidade de me tornar um pesquisador.

Agradeço ao meu coorientador, prof. Wesley Cota, por me ensinar a parte computacional de redes complexas.

Agradeço ao Diogo da Silva por me ajudar no aprendizado das teorias de campo médio.

Agradeço ao Grupo de Investigação de Sistemas Complexos (GISC) por me receber e fazer de mim um estudante da área de Sistemas Complexos.

Agradeço as amigadas que fiz no GISC que me ajudaram durante os passos iniciais, em especial à Thainá e ao Jota.

Agradeço aos meus amigos da cidade de Alegre-ES.

Agradeço a todos aqueles que contribuíram para que eu pudesse chegar até aqui.

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

*É preciso dar um jeito, meu amigo.*

*Erasmu Carlos*

# Resumo

LORENZONI FILHO, Paulo Henrique, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, abril de 2025. **Propagação epidêmica em multigrafos.** Orientador: Silvio da Costa Ferreira Junior. Coorientador: Wesley Francis Costa Cota.

Multigrafos são redes que possuem múltiplas conexões entre vértices. Redes com distribuição de grau em lei de potência  $P(k) \sim k^{-\gamma}$  apresentam um corte natural  $k_N \sim N^{\frac{1}{\gamma-1}}$ . Problemas de conectividade podem surgir para redes heterogêneas que permitem apenas uma conexão única entre pares, ou seja, grafos simples. Por um lado, o algoritmo pode não completar todas as conexões, resultando em alto custo computacional. Por outro lado, permitir múltiplas conexões permite gerar redes sem tais problemas. Portanto, motivado por uma perspectiva metodológica, este estudo propõe a propagação de epidemias em redes simples e multigrafos com  $k_{max} \sim k_N$ . Realizou-se análise quase estacionária (QS) para medir o limiar epidêmico, a densidade de indivíduos infectados, a suscetibilidade dinâmica e a razão de participação inversa (RPI) usando o Algoritmo de Gillespie Otimizado (OGA). Assim, foram realizadas análises de tamanho finito a fim de comparar os expoentes de escala para o modelos Suscetível-Infectado-Suscetível (SIS), Suscetível-Infectado-Removido-Suscetível (SIRS) e Processo de Contato (PC) em grafos simples e multigrafos. Além disso, comparou-se o limiar epidêmico e a RPI previstos por teorias de campo médio com aqueles obtidos nas simulações estocásticas. Observou-se que o PC é invariante à presença de múltiplas conexões e que as previsões das teorias de campo médio concordam com os resultados obtidos nas simulações. O modelo SIRS não apresentou diferença no comportamento de escala para as grandezas mensuradas e os resultados concordam para simulações e campo médio para ambos tipos de grafos. Finalmente, as grandezas QS não mostraram diferença significativa no comportamento de escala para o modelo SIS com  $\gamma > 5/2$ . Para  $\gamma < 5/2$ , as grandezas apresentam diferenças no comportamento de escala, mas a física é preservada no limite termodinâmico. A implementação de multigrafos para a investigação de processos epidêmicos se mostrou adequada uma vez que não altera a física dos modelos epidêmicos nem a física das abordagens de campo médio.

**Palavras-chave:** redes complexas, fenômenos críticos, teorias de campo médio, fenômenos de localização.

# Abstract

LORENZONI FILHO, Paulo Henrique, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, April 2025.  
**Epidemic spreading in multigraphs.** Adviser: Silvio da Costa Ferreira Junior. Co-advisor: Wesley Francis Costa Cota.

Multigraphs are networks with multiple connections between vertices. Networks with a power-law degree distribution  $P(k) \sim k^{-\gamma}$  exhibit a natural cutoff  $k_N \sim N^{\frac{1}{\gamma-1}}$ . Connectivity issues can arise for heterogeneous networks that allow only a single connection between pairs, i.e., simple graphs. On one hand, the algorithm may fail to complete all connections, resulting in high computational cost. On the other hand, allowing multiple connections enables the generation of networks without these drawbacks. Therefore, motivated by a methodological perspective, this study investigates epidemic spreading on both simple networks and multigraphs with  $k_{max} \sim k_N$ . A quasi-stationary (QS) analysis was performed to measure the epidemic threshold, the density of infected individuals, dynamic susceptibility, and the inverse participation ratio (IPR) using the Optimized Gillespie Algorithm (OGA). Additionally, finite-size analyses were conducted to compare the scaling exponents for the Susceptible-Infected-Susceptible (SIS), Susceptible-Infected-Removed-Susceptible (SIRS), and Contact Process (CP) models on simple graphs and multigraphs. Furthermore, the epidemic threshold and inverse participation ratio predicted by mean-field theories were compared with those obtained from stochastic simulations. It was observed that the CP is invariant to the presence of multiple connections, and that the predictions of mean-field theories agree with the results obtained from the simulations. The SIRS model showed no difference in scaling behavior for the measured quantities, and the results agreed for both simulations and mean-field theory for both types of graphs. Finally, the QS quantities showed no significant difference in scaling behavior for the SIS model with  $\gamma > 5/2$ . For  $\gamma < 5/2$ , the quantities exhibit differences in scaling behavior, but the physics is preserved in the thermodynamic limit. The implementation of multigraphs for investigating epidemic processes proved to be feasible as it does not alter the physics of the epidemic models nor the physics of mean-field approaches.

**Keywords:** complex networks, critical phenomena, mean-field theories, localization phenomena.

# Sumário

<b>I</b>	<b>Introdução</b>	<b>8</b>
<b>II</b>	<b>Fundamentação teórica</b>	<b>10</b>
2.1	Redes complexas: conceitos básicos . . . . .	10
2.2	Modelos epidêmicos . . . . .	16
2.3	Teoria de campo médio heterogênea (HMF) . . . . .	22
2.4	Teoria de campo médio microscópica (QMF) . . . . .	23
2.5	Teoria de campo médio microscópica de pares (pQMF) . . . . .	24
2.6	Teoria de campo médio heterogênea de pares (pHMF) . . . . .	27
2.7	O fenômeno de localização . . . . .	28
<b>III</b>	<b>Metodologia</b>	<b>30</b>
3.1	Representação computacional . . . . .	30
3.2	Modelo de configurações . . . . .	31
3.3	Métodos quase estacionários . . . . .	33
3.4	Algoritmo de Gillespie otimizado . . . . .	35
3.5	Vetor de atividade normalizado . . . . .	37
<b>IV</b>	<b>Resultados e Discussões</b>	<b>38</b>
4.1	Processo de contato . . . . .	38
4.2	Suscetível-Infetado-Suscetível . . . . .	41
4.3	Suscetível-Infetado-Removido-Suscetível . . . . .	48
<b>V</b>	<b>Conclusões e Perspectivas</b>	<b>50</b>
<b>A</b>	<b>Teoria microscópica de pares para o modelo SIRS</b>	<b>52</b>
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>56</b>

# Capítulo I

## Introdução

Contemporaneamente, o avanço do poder computacional possibilitou a coleta e o tratamento de dados relativos à uma ampla gama de redes, fomentando a investigação detalhada de suas propriedades estruturais e funcionais [1]. Nesse sentido, a ciência de redes se mostra um campo de estudos multidisciplinar que contribui para o desenvolvimento de fármacos minimizando os efeitos colaterais, para o estudo de fenômenos de sincronização, processos epidêmicos, econofísica, dentre diversos outros exemplos de aplicações. [2–4].

Além de redes reais, é comum estudar redes sintéticas geradas por modelos computacionais com distribuição de contatos arbitrária. Diante disso, destacam-se as redes que seguem uma distribuição de contatos em lei de potência  $P(k) \sim k^{-\gamma}$ . O interesse nesse grupo de redes é será justificado em seções subsequentes. Em geral, utiliza-se com maior frequência o modelo de configurações não-correlacionado (UCM<sup>1</sup>) [5]. Este modelo possibilita a geração de redes descorrelacionadas a partir da introdução de um corte estrutural  $k_s \sim \sqrt{N}$  na distribuição de grau. Nesse contexto, diversos estudos foram conduzidos pelo Grupo de Investigação de Sistemas Complexos (GISC) da UFV [6–10].

Por outro lado, o modelo de configurações, proposto por Molloy e Reed, gera redes com distribuição de contatos arbitrária considerando além de conexões simples, ou seja, apenas uma conexão entre um par de indivíduos, múltiplas conexões e autoconexões [11]. Neste modelo, o corte da distribuição de contatos é o corte natural  $k_N$  da lei de potência, que escala com  $k_N \sim N^{1/(\gamma-1)}$ . A implementação do modelo de configurações permitindo somente uma conexão entre pares introduz correlações estruturais na rede. Ademais, obstáculos na criação das redes impedem o estudo nesses sistemas, uma vez que a depender do tamanho e da heterogeneidade é impossível completar as ligações da rede [5, 12]. Por outro lado, a permissão de múltiplas conexões elimina as correlações e suprime os obstáculos relativos à criação da rede supracitados. Com isso, o tratamento analítico via aproximações de campo médio é simplificado visto que não há correlação de grau na rede. Portanto, sob o ponto de vista computacional e matemático, os multigrafos se mostram

---

<sup>1</sup>Do inglês: *Uncorrelated Configuration Model*.

estruturas interessantes para o estudo de processos dinâmicos [7, 10, 13–15].

Sob motivação metodológica, investigou-se o efeito de múltiplas conexões na propagação epidêmica nos modelos Suscetível-Infetado-Suscetível (SIS), Suscetível-Infetado-Removido-Suscetível (SIRS) e Processo de Contato (PC) em redes com distribuição de contatos em lei de potência. Para tanto, realizou-se análises quase estacionárias a partir de simulações estocásticas de tempo contínuo. Diante disso, realizou-se análises de tamanho finito para cada modelo em redes simples e em redes com múltiplas conexões a fim de comparar os resultados. Além disso, comparou-se resultados obtidos nas simulações para ambos os tipos de redes com as previsões das teorias de campo médio.

Em relação ao processo de contato, observou-se que as múltiplas conexões não alteram os expoentes de escala da análise de tamanho finito para as grandezas mensuradas. Por outro lado, a presença do corte natural introduziu localização não extensiva no modelo. Observou-se concordância entre as teorias de campo médio e as simulações. Mostrou-se que a localização esperada para o PC em redes descorrelacionadas é, de fato, não extensiva.

No tocante ao modelo SIS, múltiplas conexões não alteram significativamente os expoentes da análise de tamanho finito para  $\gamma > 5/2$  e a teoria de campo médio heterogênea superestima o limiar para ambos os tipos de rede. Quando  $\gamma < 5/2$ , observa-se que a localização é maior em redes com múltiplas conexões. No entanto, observa-se concordância no comportamento de escala entre o limiar obtido nas simulações e as previsões das teorias de campo médio.

No modelo SIRS, o evento de imunização temporária atenua os efeitos de múltiplas conexões. Sendo assim, verificou-se que não há diferença nos expoentes da análise de tamanho finito para ambos tipos de redes. Embora a teoria de campo médio microscópica de pares estime o limiar epidêmico com maior acurácia para redes simples, o limiar das redes com múltiplas conexões também exhibe concordância no comportamento de escala.

De maneira geral, o uso de multigrafos se mostrou factível uma vez que não altera a natureza da transição de fase, a previsão das teorias de campo médio ou os resultados das simulações. Não observou-se nenhuma alteração na física dos modelos empregados, de maneira que o limiar e a densidade de infectados se mantêm nulo para os modelos SIS e SIRS no limite termodinâmico em ambos tipos de rede, ainda que redes com múltiplas conexões apresentem maior localização para esses modelos. Em concordância com o exposto, o processo de contato se mostrou invariante à presença de múltiplas conexões do ponto de vista de simulações e teorias de campo médio.

Em virtude da exposição, no Capítulo II consta a descrição dos conceitos básicos de redes complexas e dos modelos epidêmicos, a apresentação das teorias de campo médio e do fenômeno de localização. O Capítulo III apresenta o modelo de configurações e os detalhes computacionais para a implementação de simulações estocásticas de tempo contínuo. Os resultados e discussões para cada modelo são apresentados no Capítulo IV. Finalmente, no Capítulo V são apresentadas as considerações finais e as perspectivas futuras.

# Capítulo II

## Fundamentação teórica

### 2.1 Redes complexas: conceitos básicos

O estudo das redes fornece uma base teórica que possibilita a representação conceitual adequada das relações entre as componentes de um sistema complexo, de modo que a caracterização do sistema envolve o conhecimento das interações entre um grande número de indivíduos. Para o que se segue, é importante destacar que as redes complexas não têm relação direta com sistemas complicados. De acordo com [1], a complexidade das redes é caracterizada pela emergência de fenômenos e propriedades que se originam espontaneamente das interações diversas entre as partes constituintes, como a organização do sistema em estruturas emergentes específicas, por exemplo. Além disso, o estudo isolado de subconjuntos não permite a compreensão do sistema em sua totalidade, visto que princípios de auto-organização residem na interação coletiva e não supervisionada de muitos agentes. Nesse contexto, processos e interações diversas podem ser estudados em tais estruturas, interações sociais são um exemplo. Assim, a Figura 2.1 mostra diferentes interações sociais estruturadas em uma rede.

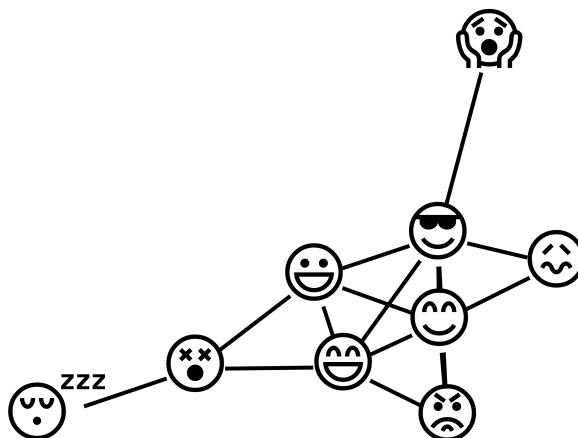


Figura 2.1: Ilustração esquemática de uma rede de interações entre pessoas.

Portanto, nesta seção será introduzida a teoria de grafos, utilizada para representar e

caracterizar estatisticamente tais estruturas, com base na referência [2].

Por definição, uma rede é um conjunto de vértices ou nós conectados por ligações diretas entre pares. Tal estrutura está alicerçada no objeto matemático conhecido por grafo. Um grafo simples possui apenas uma conexão entre pares de vértices, ao passo que no multigrafo são permitidas múltiplas conexões. A fim de exemplificar ambos, a Figura 2.2 exibe a comparação entre um multigrafo e um grafo simples.

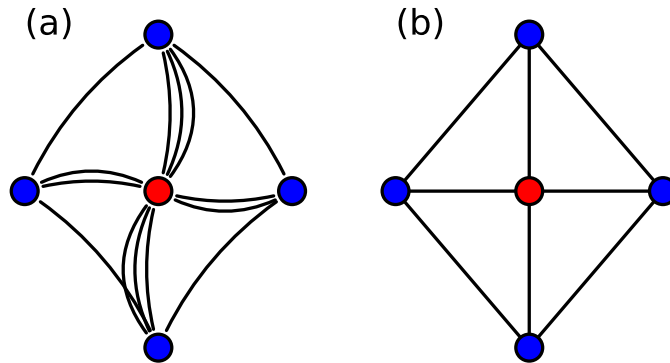


Figura 2.2: (a) Multigrafo e (b) grafo simples. Vértices representam indivíduos e as linhas a interação entre os pares. As cores indicam estados dos agentes representados por vértices.

O número de conexões de um determinado vértice é o seu grau  $k$ . Na Figura 2.2, o vértice do centro (em cor vermelho) tem grau  $k = 10$  para o multigrafo e grau  $k = 4$  para o grafo simples. Diante do exposto, três quantidades são introduzidas: o número de vértices  $N$ , o grau  $k_i$  de um vértice  $i$  e o grau médio  $\langle k \rangle$  definido por:

$$\langle k \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N k_i. \tag{2.1}$$

Além dos tipos de grafos já mencionados, existem outros diversos com as mais variadas topologias, sendo alguns exemplos o grafo regular, ponderado e direcionado. A Figura 2.3 ilustra as estruturas mencionadas.

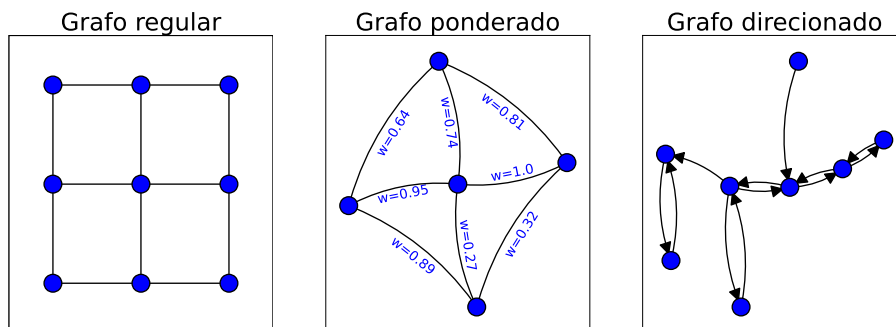


Figura 2.3: Exemplos de diferentes tipos de grafos: regular, ponderado e direcionado. O grafo ponderado possui pesos  $w$  nas conexões distribuídos arbitrariamente. No caso do grafo direcionado, as conexões não são necessariamente recíprocas.

### Matriz de adjacência

Matematicamente, grafos podem ser representados por uma matriz de adjacência com  $N \times N$  elementos. Para grafos simples, define-se uma matriz  $A$  simétrica tal que  $A_{ij} = 1$  se houver conexão entre os vértices  $i$  e  $j$ . Caso contrário,  $A_{ij} = 0$ . A diagonal é nula quando não são permitidas autoconexões. A Figura 2.4 exibe um grafo simples e não direcionado em conjunto com a matriz de adjacência  $A$  correspondente.

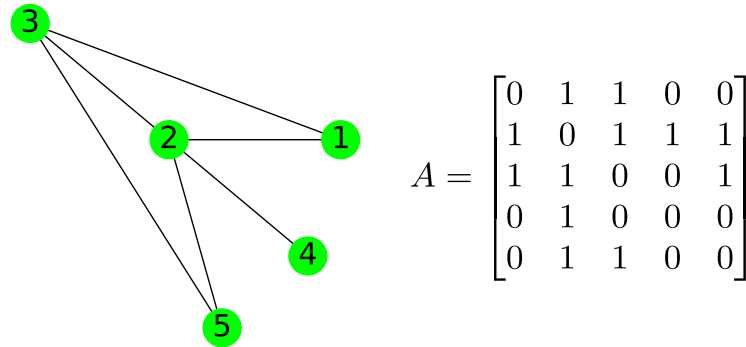


Figura 2.4: Representação de um grafo simples e não direcionado via matriz de adjacência.

De outra perspectiva, um multigrafo também pode ser representado pela matriz de adjacência. Nesse cenário, armazena-se o número de conexões  $n$  entre o par de vértices. Portanto,  $A_{ij} = n$  quando houver  $n$  conexões entre  $i$  e  $j$ , com  $i \neq j$ . Caso contrário, ou seja, se não houver nenhuma conexão entre  $i$  e  $j$ ,  $A_{ij} = 0$ . A Figura 2.5 exibe um multigrafo não direcionado e a matriz de adjacência  $A$  associada.

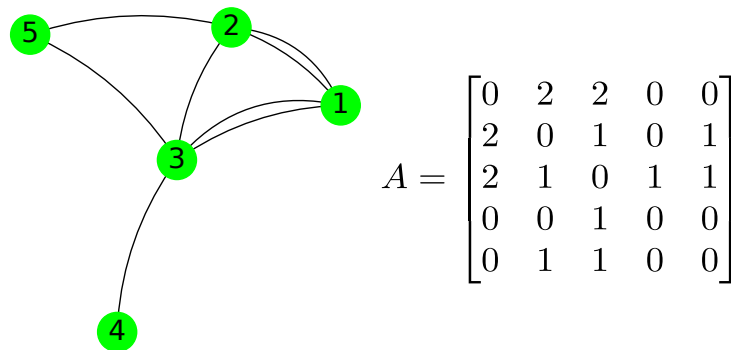


Figura 2.5: Representação de um multigrafo e não direcionado via matriz de adjacência.

Logo, observa-se que o grau  $k_i$  é dado pela expressão:

$$k_i = \sum_{j=1}^N A_{ij}. \quad (2.2)$$

Embora a matriz de adjacência ofereça vantagens no cálculo de quantidades relacionadas à rede, sua implementação se torna computacionalmente inadequada para sistemas muito

grandes, em virtude do uso excessivo de memória computacional que configura um obstáculo significativo à medida que o tamanho da rede aumenta.

### Distribuição de grau

Por definição, a distribuição de grau  $P_k$  é a probabilidade de um vértice escolhido aleatoriamente ter grau  $k$ . Nesse contexto, a expressão é definida como

$$P_k = \frac{N_k}{N}, \tag{2.3}$$

onde  $N_k$  é o número de vértices com grau  $k$ . Tratando-se de uma distribuição de probabilidades,  $P_k$  deve ser normalizada. Assim, a Figura 2.6 exibe a distribuição de grau para um grafo simples e para um multigrafo.

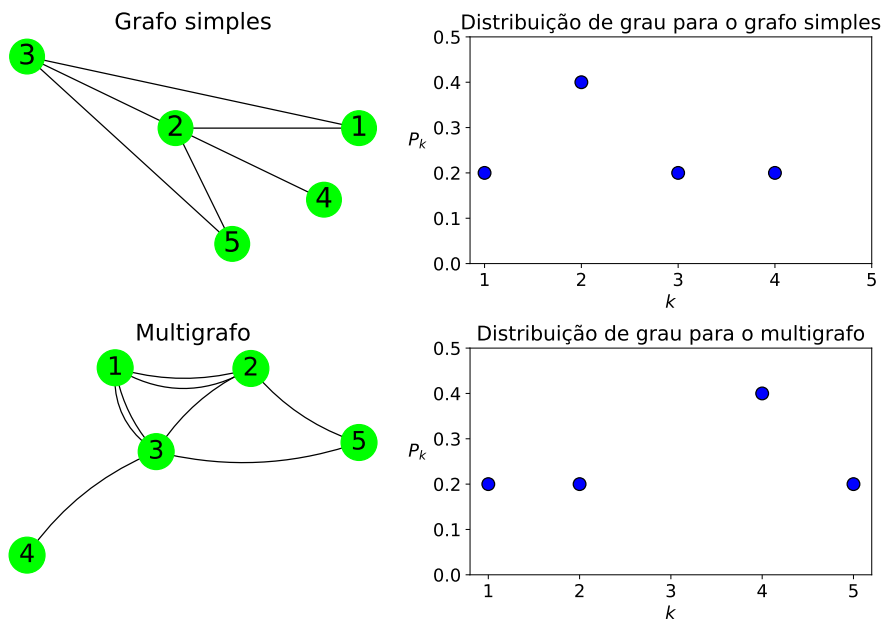


Figura 2.6: Distribuição de probabilidades  $P_k$  para um grafo simples (parte superior da figura) e para um multigrafo (parte inferior da figura). No caso do grafo simples, os vértices 1 e 5 possuem grau  $k_1 = 2$ ,  $k_5 = 2$  e  $P_2 = 2/5$ , o vértice 4 possui  $k_4 = 1$  e  $P_1 = 1/5$ , o vértice 3 possui  $k_3 = 3$  e  $P_3 = 1/5$ , o vértice 2 possui grau  $k_2 = 4$  e  $P_4 = 1/5$ . Em contrapartida, no multigrafo os vértice 1 e 2 possuem grau  $k_1 = 4$ ,  $k_2 = 4$  e  $P_4 = 2/5$ , o vértice 3 possui grau  $k_3 = 5$  e  $P_3 = 1/5$ , o vértice 4 possui grau  $k_4 = 1$  e  $P_1 = 1/5$ , o vértice 5 possui  $k_5 = 2$  e  $P_2 = 1/5$ .

As redes podem apresentar uma vasta quantidade de vértices, como por exemplo a rede social do *Twitter* com  $N \approx 4 \times 10^7$  vértices em 2009 ou a rede de transmissão de HIV com  $N \approx 3,5 \times 10^4$  vértices [16, 17]. Sendo assim, torna-se inviável analisar quantidades de interesse a partir de cada vértice individualmente. Portanto, faz-se necessário a caracterização estatística da rede. Dessa forma, informações relevantes sobre a estrutura

da rede são extraídas a partir dos momentos da distribuição de grau, definidos por

$$\langle k^x \rangle = \sum_k k^x P_k. \quad (2.4)$$

Observa-se que para  $x = 1$  a Equação 2.4 retorna o grau médio.

Dentre os diversos tipos de distribuição de grau, existem as redes com distribuição de grau em lei de potência  $P(k) \sim k^{-\gamma}$  que, por sua vez, apresentam propriedades singulares, por exemplo: presença de vértices com grande número de conexões (hubs) e divergência do segundo momento da distribuição de grau para  $\gamma \leq 3$  com  $N \rightarrow \infty$ . Tal divergência justifica o nome redes sem escala (em inglês: *scale-free networks*). Redes de interesse científico que contemplam escalas diversas apresentam a propriedade de ausência de escala, desde redes subcelulares até redes de *internet*, por exemplo. Além disso, a propriedade de livre escala é dita universal, pois não depende da origem da rede, seja ela de proteínas, computadores, cerebral, social ou qualquer outra. A Figura 2.7 mostra diferentes distribuições em lei de potência.

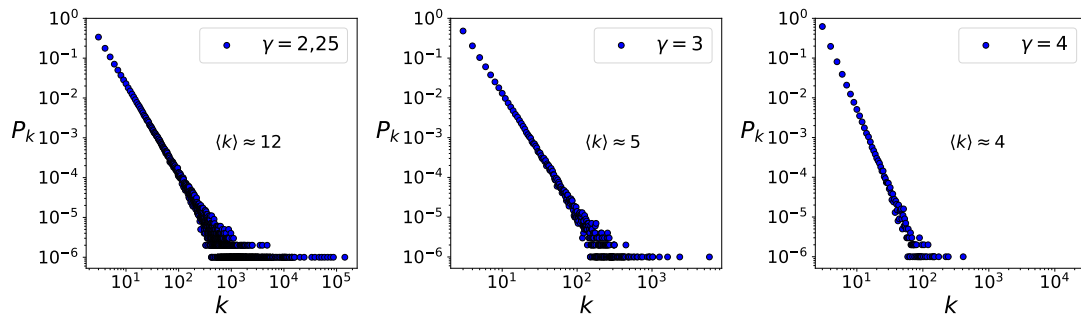


Figura 2.7: Exemplos de distribuição de grau em lei de potência  $P_k \sim k^{-\gamma}$  para redes com  $N = 10^6$  vértices e  $\gamma = \{2,25, 3, 4\}$ .

Observa-se que vértices com grau  $k \gg \langle k \rangle$  aparecem com baixa frequência e justificam o termo cauda pesada. Nomeia-se tais vértices como hubs. Embora os hubs apareçam com baixa probabilidade, não devem ser ignorados, pois possuem grande influência no processo dinâmico.

### Correlação de grau

Normalmente, as redes exibem tendências nas relações entre seus vértices, o que é chamado de correlação de grau. Quando vértices com grau elevado tendem a se conectar entre si, origina-se o regime associativo. Por outro lado, quando vértices de grau grande se conectam com vértices de grau pequeno, ocorre o regime desassociativo. Caso não haja tendências, diz-se que não há correlação de grau ou que a rede é descorrelacionada.

A correlação de grau pode ser calculada partindo-se do grau médio dos vizinhos de

cada vértice, via

$$k_{nn}(k_i) = \frac{1}{k_i} \sum_{j=1}^N k_j A_{ij} \quad (2.5)$$

e posteriormente

$$k_{nn}(k) = \frac{1}{N_k} \sum_{i=1}^N k_{nn}(k_i) \delta_{kk_i}. \quad (2.6)$$

Em outros termos, a função  $k_{nn}$  calcula para todo grau  $k$

$$k_{nn}(k) = \sum_{k'} k' P(k'|k), \quad (2.7)$$

de modo que  $P(k'|k)$  é referente a probabilidade condicional de um vértice de grau  $k'$  se conectar com um vértice de grau  $k$ . Para redes sem correlação de grau, a probabilidade condicional não depende de  $k$ . Pode-se calcular a probabilidade de qualquer aresta apontar para um grau  $k'$  pela expressão [1]

$$P(k'|k) = \frac{k' N_{k'}}{\sum_{k''} k'' N_{k''}} = \frac{k' N_{k'}}{\langle k \rangle N}. \quad (2.8)$$

Portanto,

$$k_{nn}(k) = \frac{1}{\langle k \rangle} \sum_{k'} k' k' P(k') = \frac{\langle k^2 \rangle}{\langle k \rangle}. \quad (2.9)$$

Por outra via, algumas redes apresentam correlação de grau que pode ser aproximada por  $k_{nn} \sim k^\mu$ , como por exemplo a rede de *internet* [18]. Dessa maneira, quando  $\mu < 0$  o regime é desassociativo e, quando  $\mu > 0$ , associativo. Quando  $\mu = 0$  não há correlação de grau. A Figura 2.8 exhibe o comportamento da correlação de grau  $k_{nn}$  para os casos desassociativo, neutro e associativo.

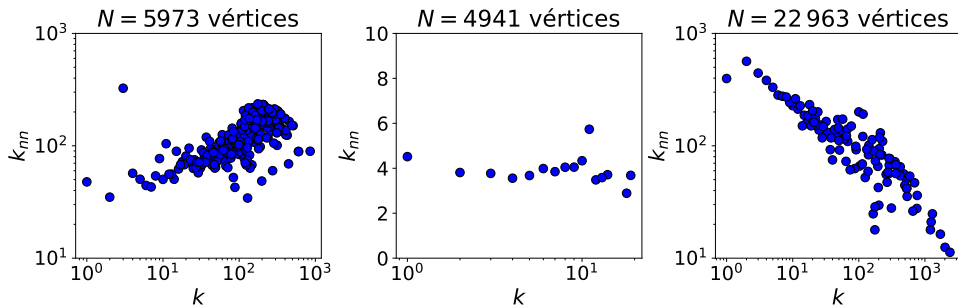


Figura 2.8: Da esquerda para a direita, exemplos de correlação de grau associativa na rede de interações entre proteínas em organismo humano, correlação de grau neutra para a rede de distribuição de energia dos estados do oeste estadunidense e correlação desassociativa na rede de sistemas autônomos de *internet* [19–21].

## 2.2 Modelos epidêmicos

Doenças contagiosas são caracterizadas pela transmissão de um indivíduo infectado para um indivíduo suscetível por meio de contatos físicos entre indivíduos que podem ser representados por redes complexas [22]. Com base em [23], os modelos epidêmicos são utilizados para compreender comportamentos em várias escalas ou, a partir de condições conhecidas, extrapolar a dinâmica para outros cenários. Dessa maneira, informações de longo prazo em nível populacional são obtidas a partir do conhecimento em nível individual dos fatores epidemiológicos. Cabe destacar que a função principal dos modelos epidêmicos é de previsão e compreensão do cenário epidêmico. Para o que se segue, as seções subsequentes são destinadas à descrição dos modelos: Processo de Contato (PC), Suscetível-Infectado-Suscetível (SIS), Suscetível-Infectado-Removido-Suscetível (SIRS) e do processo epidêmico como transição de fase com estado absorvente.

### Processo de Contato

Sob o panorama das interações de contato, o PC foi originalmente concebido como um modelo epidêmico por Harris [24]. Genuinamente, trata-se de um processo de reação-difusão. Logo, define-se o estado dos sítios (vértices) como infectado (ocupado) ou suscetível (vazio). Para tanto, utiliza-se a ideia da divisão da população em compartimentos, sendo  $S$  a quantidade de indivíduos suscetíveis e  $I$  a quantidade de infectados. No tocante a dinâmica populacional, indivíduos podem nascer e morrer. Sendo assim, taxas de mortalidade e natalidade foram desconsideradas. Em outras palavras, considerou-se a população fixa. Logo, define-se a densidade de suscetíveis como  $s = S/N$  e a densidade de infectados como  $\rho = I/N$ . Nota-se que  $S + I = N$  e  $\rho = 1 - s$ .

Vértices infectados transmitem a doença com taxa  $\lambda/k$  para cada vizinho. Com taxa  $\mu$ , vértices infectados ficam espontaneamente curados. Assumindo homogeneidade espacial, a densidade de vértices infectados  $\rho$  pode ser investigada pela expressão:

$$\frac{d\rho}{dt} = (\lambda - \mu)\rho - \lambda\rho^2, \quad (2.10)$$

com solução estacionária  $\rho = 1 - \mu/\lambda$ , além da solução trivial  $\rho = 0$ . Linearizando a Equação 2.10 para  $\rho \ll 1$ , obtém-se uma expressão simplificada de maneira que

$$\frac{d\rho}{dt} \approx (\lambda - \mu)\rho \quad (2.11)$$

implica em

$$\rho(t) \sim e^{(\lambda - \mu)t}. \quad (2.12)$$

Uma análise de estabilidade linear na Equação 2.11 revela que para  $\lambda > 1$  o estado absorvente perde estabilidade e o sistema evolui para  $\rho = 1 - \mu/\lambda$ . Verifica-se que  $\lambda_c = 1$

é o limiar de ativação da epidemia no processo de contato sob as condições supracitadas. Entende-se por limiar epidêmico a grandeza que separa a fase inativa ( $\rho = 0$ ) da fase endêmica com estado estacionário ativo ( $\rho > 0$ ). Somando-se a isso, a densidade de infectados, a partir da solução estacionária  $\rho = 1 - \mu/\lambda$ , escala com expoente  $\beta^{\text{PC}} = 1$  da seguinte forma:

$$\rho \sim (\lambda - \lambda_c)^{\beta^{\text{PC}}}. \quad (2.13)$$

### Suscetível-Infetado-Suscetível

O modelo SIS descreve a dinâmica de doenças as quais o indivíduo não desenvolve imunidade, por exemplo: doenças sexualmente transmissíveis, rotavírus e doenças ocasionadas por bactérias [23].

Indivíduos suscetíveis são infectados com taxa  $\lambda$  e, após um intervalo de tempo, são curados espontaneamente com taxa  $\mu$ . A Figura 2.9 ilustra a dinâmica local para o modelo SIS a partir de um vértice infectado.

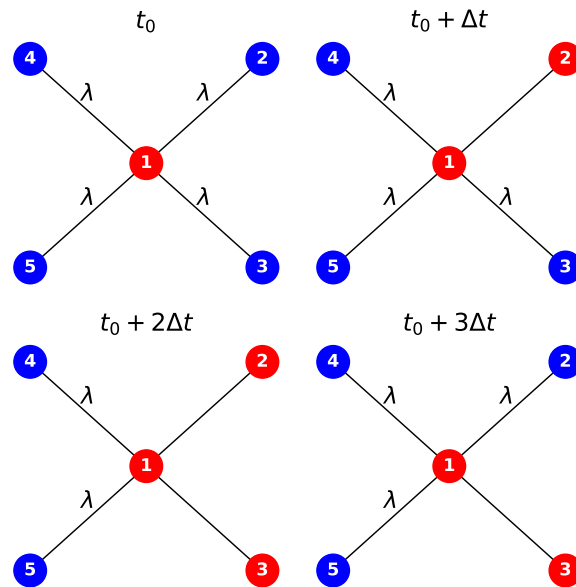


Figura 2.9: Ilustração da evolução temporal do estado dos vértices da rede no modelo SIS. Em  $t = t_0$  a dinâmica começa com um vértice infectado em cor vermelha e todos os vizinhos suscetíveis em cor azul. No instante  $t = t_0 + \Delta t$ , o vértice 1 infecta o vértice 2. Para  $t = t_0 + 2\Delta t$ , o vértice 1 infecta o vértice 3. Quando  $t = t_0 + 3\Delta t$ , o vértice 2 é curado espontaneamente.

Partindo do pressuposto de mistura homogênea, onde indivíduos de uma população interagem com igual chance, pode-se assumir que um indivíduo tenha  $\langle k \rangle$  contatos e que a doença pode ser transmitida de um sujeito infectado para um saudável com taxa  $\lambda \langle k \rangle$ . Em vista da descrição analítica, a evolução temporal da densidade de infectados  $\rho$  pode ser investigada pela expressão [2]:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\mu\rho + \lambda \langle k \rangle (1 - \rho)\rho. \quad (2.14)$$

A Equação 2.14 possui duas soluções para o estado estacionário. A primeira é a solução trivial  $\rho = 0$  e a segunda, considerando  $\mu = 1$ , é dada por:

$$\rho = \frac{\lambda \langle k \rangle - 1}{\lambda \langle k \rangle}. \quad (2.15)$$

Por outra via, uma linearização na Equação 2.14 mostra que

$$\frac{d\rho}{dt} = (\lambda \langle k \rangle - 1)\rho, \quad (2.16)$$

conduzindo a

$$\rho(t) \sim e^{(\lambda \langle k \rangle - 1)t}. \quad (2.17)$$

A partir da Equação 2.16 e de maneira análoga ao modelo anterior, verifica-se que para  $\lambda_c \langle k \rangle - 1 > 0$  o estado absorvente perde estabilidade. Portanto, define-se o limiar  $\lambda_c = 1/\langle k \rangle$ . Além disso, encontra-se a relação  $\rho = (\lambda - \lambda_c)/\lambda$  substituindo-se  $\lambda_c$  na Equação 2.15 e, com isso, verifica-se que a densidade de infectados, em torno do ponto crítico, escala da seguinte maneira:

$$\rho \sim (\lambda - \lambda_c)^{\beta^{\text{SIS}}}, \quad (2.18)$$

onde  $\beta^{\text{SIS}} = 1$ .

Contudo, a hipótese de mistura homogênea desconsidera a estrutura espacial de uma rede complexa. As equações apresentadas, a depender da situação, podem se tornar analiticamente intratáveis diante das considerações impostas sobre o sistema.

### Suscetível-Infetado-Removido-Suscetível

O modelo SIRS é fundamentado no fato de que o indivíduo fica imunizado por um determinado período de tempo e posteriormente volta ao estado suscetível com taxa  $\alpha$ . Nesse sentido, a Figura 2.10 exibe os estados e as taxas de transição entre estados para o modelo em questão.

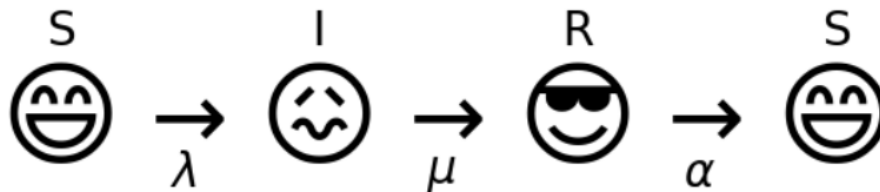


Figura 2.10: Um indivíduo suscetível (S) é infectado com taxa  $\lambda$ . Indivíduos infectados (I) são espontaneamente curados com taxa  $\mu$ . Com taxa  $\alpha$ , os indivíduos removidos (R) perdem imunidade e voltam a ser suscetíveis. Quando  $\alpha \rightarrow \infty$ , retoma-se o modelo SIS.

A evolução temporal da densidade de removidos  $r$  é investigada pela expressão

$$\frac{dr}{dt} = -\alpha r + \mu\rho. \quad (2.19)$$

Logo, no estado estacionário  $r = \mu\rho/\alpha$ . Além disso, pode-se investigar também a densidade de infectados de forma semelhante aos casos anteriores. Assim, verifica-se que densidade de infectados é governada pela equação

$$\frac{d\rho}{dt} = -\mu\rho + \lambda(1 - \rho - r)\rho. \quad (2.20)$$

Com isso, uma solução estacionária além da trivial  $\rho = 0$  é dada por

$$\rho = \left(1 - \frac{1}{\lambda k}\right) \frac{\alpha}{\alpha + \mu}. \quad (2.21)$$

Performando-se uma linearização na Equação 2.20 e uma análise de estabilidade linear, verifica-se que  $\lambda_c = 1/\langle k \rangle$  semelhante ao modelo SIS. Portanto,

$$\rho = \frac{\alpha}{\alpha + \mu} \rho^{\text{SIS}}. \quad (2.22)$$

Dessa forma, o modelo SIRS também obedece

$$\rho \sim (\lambda - \lambda_c)^{\beta^{\text{SIRS}}}. \quad (2.23)$$

com  $\beta^{\text{SIRS}} = \beta^{\text{SIS}} = 1$ .

### Transições de fase em modelos epidêmicos

Em conformidade com o exposto nas seções anteriores, o limiar epidêmico separa as fases inativa e ativa. Todavia, redes com estruturas heterogêneas não foram consideradas. Uma abordagem alternativa para encontrar o limiar de transição entre fases é possível fundamentando-se no formalismo da termodinâmica. Nesse contexto, fala-se sobre uma transição de fase.

Com base em [25], na termodinâmica de equilíbrio destacam-se dois grupos de transição de fase: descontínua e contínua. Em sistemas de uma componente, a transição de fase descontínua é definida como o deslocamento do estado de equilíbrio entre mínimos locais da energia livre, induzido por variações no parâmetro de ordem. Os estados de equilíbrio são distintos e ocupam regiões separadas no espaço termodinâmico de configurações. O termo descontínuo é devido à descontinuidade na derivada de primeira ordem da energia livre que descreve o sistema. Por exemplo, na transição de fase líquido-gás da água verifica-se uma descontinuidade na primeira derivada da energia de Gibbs em relação a pressão, isto é, no volume. Por outro lado, na transição de fase contínua, a descontinuidade é encontrada em derivadas de ordem superior da energia livre. Em alguns casos na derivada

de segunda ordem, conhecidas também por funções resposta. Suscetibilidade magnética e capacidade térmica são exemplos. Nesse cenário, uma transição contínua ocorre entre estados adjacentes no espaço termodinâmico de configurações.

Do ponto de vista fenomenológico, uma transição de fase contínua é caracterizada pelo parâmetro de ordem que, por sua vez, é nulo na fase desordenada e não nulo na fase ordenada, como se observa em sistemas ferromagnéticos, supercondutores, entre outros [26]. No cenário aqui estudado, a transição de fase é contínua e fora do equilíbrio com estado absorvente. Uma configuração absorvente impossibilita o espalhamento da doença, uma vez que o número de infectados é zero e infecções exógenas são desconsideradas.

O parâmetro de ordem que descreve o sistema epidêmico é a densidade de infectados  $\rho$ . Diante disso, a suscetibilidade  $\chi$ , função resposta, é definida como [27]:

$$\chi = N \frac{\langle \rho^2 \rangle - \langle \rho \rangle^2}{\langle \rho \rangle}. \quad (2.24)$$

No limite termodinâmico a referida função resposta diverge no ponto crítico. Todavia, o tamanho dos sistemas investigados é finito e, conseqüentemente, identifica-se o limiar de transição  $\lambda_c$  no pico da curva de suscetibilidade. Sendo assim, a Figura 2.11 apresenta as curvas de suscetibilidade e densidade de infectados para grafos simples e multigrafos.

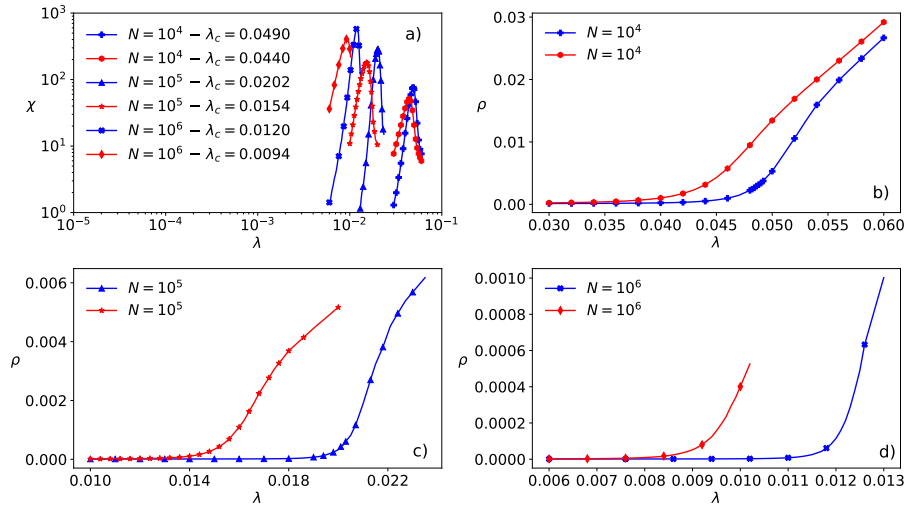


Figura 2.11: a) Suscetibilidade  $\chi(\lambda)$  para redes simples (azul) e multigrafos (vermelho) com distribuição de grau igual a priori,  $P(k) \sim k^{-2,6}$ . Em b), c) e d) observa-se para cada tamanho o parâmetro de ordem  $\rho$  nulo para  $\lambda < \lambda_c$  e  $\rho > 0$  para  $\lambda > \lambda_c$ .

Tais medidas são obtidas a partir de um estado quase estacionário, caracterizado pela inserção de perturbações na dinâmica original com a finalidade de evitar que o sistema visite uma configuração absorvente. As perturbações devem ser desprezíveis no limite termodinâmico [27]. Na Seção 3.3 consta a descrição dos métodos quase estacionários para impor a dinâmica perturbada ao sistema.

Diferentes regimes para a dinâmica epidêmica em função do tempo  $\rho(t)$  podem ser definidos de acordo com a fase em que o sistema se encontra. O primeiro regime é definido

como subcrítico, ocorre quando  $\lambda < \lambda_c$  e  $\rho(t)$  converge exponencialmente para zero, a taxa de infecção  $\lambda$  não é suficiente para que a epidemia seja espalhada para uma fração da população. Quando  $\lambda = \lambda_c$ , o sistema está na fase crítica e  $\rho(t) \sim t^\eta$ . No caso  $\lambda > \lambda_c$  diz-se que o sistema está na fase supercrítica, onde  $\rho(t)$  converge exponencialmente para um estado estacionário ativo. A Figura 2.12 exibe o comportamento de  $\rho(t)$  na dinâmica SIS em rede quadrada com condição de contorno periódica e  $N = 200^2$  vértices.

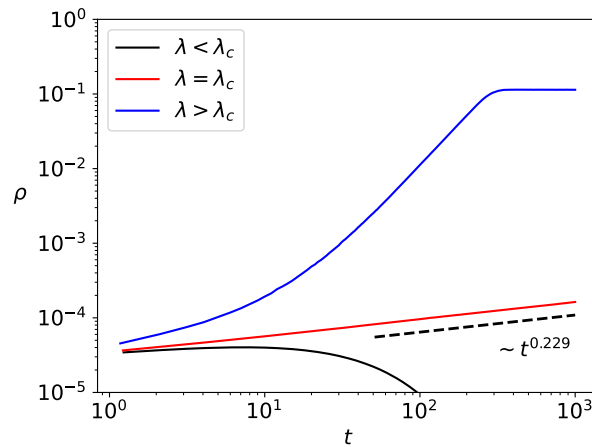


Figura 2.12: Densidade média de infectados em função do tempo para o regime subcrítico  $\lambda < \lambda_c$ , crítico  $\lambda = \lambda_c$  e supercrítico  $\lambda > \lambda_c$ . A reta tracejada em cor preta é um ajuste em lei de potência para  $\rho(t)$  no regime crítico, onde verifica-se o comportamento em lei de potência com  $\rho \sim t^{0.229}$  [28].

Utilizando-se da análise de tamanho finito, investiga-se o comportamento do limiar epidêmico, suscetibilidade e densidade de infectados quando o sistema tende ao limite termodinâmico. Para tanto, as leis de escala são apresentadas:

$$\lambda_c(N) - \lambda(\infty) \sim N^{-\phi}, \quad (2.25)$$

$$\chi(\lambda_c) \sim N^{\gamma^*}, \quad (2.26)$$

$$\rho(\lambda_c) \sim N^{-\beta^*}. \quad (2.27)$$

Em face disso, no Capítulo IV, compararam-se os expoentes de escala das grandezas mencionadas em ambos os tipos de grafos, a fim de verificar se múltiplas conexões alteram significativamente, ou não, o regime de escalonamento.

## 2.3 Teoria de campo médio heterogênea (HMF)

A evolução do número de indivíduos infectados, a existência de um limiar epidêmico e a existência de um estado estacionário podem ser descritos por abordagens matemáticas denominadas aproximações de campo médio [29]. Nesse contexto, a propagação epidêmica em redes com distribuição de grau arbitrária serve como base para comparações com abordagens teóricas, como as aproximações de campo médio [22].

Na teoria de campo médio heterogênea (HMF<sup>1</sup>) é considerada a hipótese de mistura heterogênea, de modo que um vértice de grau  $k$  pode interagir com um vértice de grau  $k'$  com uma probabilidade associada. Quantidades dinâmicas são previstas considerando apenas o grau dos vértices. Para tanto, considera-se a densidade relativa  $\rho_k$  de vértices infectados com grau  $k$ . Nota-se que a teoria pressupõe equivalência entre todos os vértices de grau  $k$ . Além disso, o estado do par suscetível-infectado é tal que  $[\rho_i, \rho_j] \approx \rho_i \rho_j$ , ou seja, o estado do vértice  $i$  independe do estado do vértice  $j$ . Logo, a evolução temporal da densidade de infectados no modelo SIS é governada por [13]

$$\frac{d\rho_k}{dt} = -\mu\rho_k + \lambda(1 - \rho_k) \sum_{k'} kP(k'|k)\rho_{k'}, \quad (2.28)$$

onde o primeiro termo é relativo aos vértices infectados sendo espontaneamente curados com taxa  $\mu$  e o segundo termo é referente aos vértices suscetíveis de grau  $k$  em contato com vértices infectados de grau  $k'$  com taxa  $\lambda$  proporcional a cada um dos  $k$  contatos.

Linearizando a Equação 2.28 em torno do ponto fixo trivial  $\rho_k = 0$ , encontra-se a seguinte relação:

$$\frac{d\rho_k}{dt} = \sum_{k'} L_{kk'} \rho_{k'}, \quad (2.29)$$

onde a jacobiana  $L_{kk'}$  do sistema, tomando  $\mu = 1$ , é dada pela expressão:

$$L_{kk'} = -\delta_{kk'} + \lambda kP(k'|k). \quad (2.30)$$

O termo de probabilidade condicional na relação  $C_{kk'} = kP(k'|k)$  refere-se à matriz de conectividade e pode não ser analiticamente tratável a depender da rede. Dessa forma, uma análise de estabilidade linear sugere que o estado absorvente é instável para  $-1 + \lambda\Lambda_1 > 0$ , onde  $\Lambda_1$  é o maior autovalor de  $C_{kk'}$ . Desse modo, o limiar epidêmico é definido como

$$\lambda_c = \frac{1}{\Lambda_1}. \quad (2.31)$$

O maior autovalor de  $C_{kk'}$  é positivo e não degenerado, tendo em vista que a matriz de conectividade atende os critérios do teorema de Perron-Frobenius [30]. Por outro lado, para redes neutras  $P(k'|k) = k'P(k')/\langle k \rangle$  [2]. Assim, calcula-se o maior autovalor de  $C_{kk'}$

<sup>1</sup>Do inglês: *Heterogeneous Mean-Field*.

via:

$$\Lambda_1 v_k = \sum_{k'} C_{kk'} v_{k'}. \quad (2.32)$$

Tomando o autovetor  $v_k = k$ , verifica-se que  $\Lambda_1 = \langle k^2 \rangle / \langle k \rangle$ . Portanto, para redes sem correlação o limiar previsto é dado por:

$$\lambda_c = \frac{\langle k \rangle}{\langle k^2 \rangle}. \quad (2.33)$$

Observa-se que o resultado previsto para o limiar tende a zero quando  $N \rightarrow \infty$  para redes sem escala. Em contrapartida, a teoria HMF prevê um limiar finito para  $\gamma > 3$  uma vez que o segundo momento da distribuição de grau é finito quando o sistema tende ao limite termodinâmico.

## 2.4 Teoria de campo médio microscópica (QMF)

Considerando-se a estrutura da rede codificada na matriz de adjacência e desprezando-se correlações dinâmicas via  $[\rho_i, \rho_j] \approx \rho_i \rho_j$ , investiga-se a evolução temporal da densidade de infectados no modelo SIS pela equação [29]

$$\frac{d\rho_i}{dt} = -\mu\rho_i + \lambda(1 - \rho_i) \sum_{j=1}^N A_{ij}\rho_j, \quad (2.34)$$

onde a primeira parcela é relativa aos vértices infectados ficando suscetíveis espontaneamente com taxa  $\mu$  e a segunda é referente à infecção de vértices suscetíveis em contato com vizinhos infectados.

Uma linearização na Equação 2.34 em torno de  $\rho_i = 0$  mostra que a jacobiana do sistema é dada por

$$L_{ij} = -\mu\delta_{ij} + \lambda A_{ij}. \quad (2.35)$$

Considerando uma análise de estabilidade linear e  $\mu = 1$ , verifica-se que o estado absorvente é instável para  $-1 + \lambda\Lambda_1 > 0$ , onde  $\Lambda_1$  é o maior autovalor da matriz de adjacência que, por sua vez, é simétrica e positiva. Sendo assim, o espectro de autovalores é real [31]. Ademais, o teorema de Perron-Frobenius garante que, nesse contexto, o maior autovalor é não-degenerado e positivo, de modo que o autovetor correspondente possui todas as componentes positivas [30]. Essa análise também é válida para a matriz de conectividade empregada na teoria HMF (Seção 2.3). Portanto, define-se o limiar epidêmico previsto pela teoria QMF<sup>2</sup> como

$$\lambda_c = \frac{1}{\Lambda_m}, \quad (2.36)$$

---

<sup>2</sup>Do inglês: *Quenched Mean-Field*

onde  $\Lambda_m$  é o maior autovalor da matriz de adjacência. Na referência [32], foram calculadas expressões analíticas para verificar o comportamento do limiar epidêmico previsto pela teoria QMF, de modo que

$$\lambda_c \simeq \begin{cases} 1/\sqrt{k_{max}}, & \gamma > 5/2, \\ \frac{\langle k \rangle}{\langle k^2 \rangle}, & 2 < \gamma < 5/2. \end{cases} \quad (2.37)$$

Diante disso, nota-se que a aproximação de campo médio microscópica estima um limiar epidêmico nulo para o sistema no limite termodinâmico para qualquer valor de  $\gamma$ , pois  $k_{max} \rightarrow \infty$  quando  $N \rightarrow \infty$  e o segundo momento diverge para  $\gamma < 5/2$ . Além do mais, observa-se que a teoria QMF prevê que o limiar escala com a razão entre o primeiro e segundo momento da distribuição de grau em concordância com a teoria HMF.

## 2.5 Teoria de campo médio microscópica de pares (pQMF)

A teoria de campo médio microscópica de pares (pQMF<sup>3</sup>) se mostra uma abordagem de maior acurácia em relação à QMF para investigar a dinâmica epidêmica, uma vez que considera toda a estrutura da rede e correlações dinâmicas em nível de pares [14].

### SIRS / SIS

Partindo-se do modelo SIRS com alicerce em [10], considera-se  $\sigma_i$  o estado do vértice  $i$ . Define-se  $\sigma_i = 0$  para suscetível,  $\sigma_i = 1$  para infectado e  $\sigma_i = 2$  para removido. As seguintes notações são apresentadas:  $[A_i]$  para a probabilidade do vértice  $i$  estar no estado  $A$ ,  $[A_i, B_j]$  para a probabilidade dos vértices  $i$  e  $j$  estarem nos estados  $A$  e  $B$  simultaneamente, de modo que convenção é estendida para  $[A_i, B_j, C_l]$  e assim por diante. Dessa forma, introduz-se a notação de pares  $\psi_{ij} = [1_i, 1_j]$ ,  $\phi_{ij} = [0_i, 1_j]$ ,  $\bar{\phi}_{ij} = [1_i, 0_j]$ ,  $\omega_{ij} = [0_i, 0_j]$ ,  $\theta_{ij} = [2_i, 1_j]$ ,  $\bar{\theta}_{ij} = [1_i, 2_j]$ ,  $\chi_{ij} = [2_i, 0_j]$ ,  $\bar{\chi}_{ij} = [0_i, 2_j]$  e  $v_{ij} = [2_i, 2_j]$ . Os pares  $v_{ij}$ ,  $\omega_{ij}$  e  $\psi_{ij}$  são invariantes a permutações. Com isso, a densidade de suscetíveis  $s$ , infectados  $\rho$  e removidos  $r$ , com  $s_i + \rho_i + r_i = 1$ , são expressadas por

$$\begin{aligned} s_i &= \omega_{ij} + \phi_{ij} + \bar{\chi}_{ij} \\ \rho_i &= \psi_{ij} + \bar{\theta}_{ij} + \bar{\phi}_{ij} \\ r_i &= \chi_{ij} + v_{ij} + \theta_{ij}. \end{aligned} \quad (2.38)$$

Em linhas gerais, a densidade de infectados é governada pela equação

$$\frac{d\rho_i}{dt} = -\mu\rho_i + \lambda \sum_j A_{ij}\phi_{ij}, \quad (2.39)$$

<sup>3</sup>Do inglês: *Pair Quenched Mean-Field*.

onde observa-se que se  $\phi_{ij} \approx s_i \rho_j$ , então a Equação 2.34 referente à teoria QMF é retomada.

A evolução temporal do par  $\phi_{ij}$  é matematicamente expressada por

$$\frac{d\phi_{ij}}{dt} = -(\mu + \lambda)\phi_{ij} + \alpha\theta_{ij} + \lambda \sum_{l \neq i} [0_i, 0_j, 1_l] A_{jl} - \lambda \sum_{l \neq j} [1_l, 0_i, 1_j] A_{il}, \quad (2.40)$$

onde o primeiro termo é referente a aniquilação do par  $[0_i, 1_j]$  por infecção de  $i$  com taxa  $\lambda$  e pela cura de  $j$  com taxa  $\mu$ . O segundo termo é referente à criação do par  $\phi_{ij}$  através da perda de imunidade de  $i$  com taxa  $\alpha$ . Os dois últimos termos são referentes, respectivamente, à criação e aniquilação do par  $\phi_{ij}$  via infecção pelo vizinho  $l$ .

Executando-se uma aproximação de pares nas Equação 2.40 da forma [26]

$$[A_i, B_j, C_l] \approx \frac{[A_i, B_j][B_j, C_l]}{[B_j]}, \quad (2.41)$$

obtém-se a seguinte relação

$$\frac{d\phi_{ij}}{dt} = -(\mu + \lambda)\phi_{ij} + \alpha\theta_{ij} + \lambda \sum_{l \neq i} \frac{\omega_{ij}\phi_{jl}}{s_j} A_{jl} - \lambda \sum_{l \neq j} \frac{\phi_{ij}\phi_{il}}{s_i} A_{il}. \quad (2.42)$$

Tomando  $\phi_{ij} \ll 1$ , realiza-se uma linearização na Equação 2.42. Assim, verifica-se que

$$\frac{d\phi_{ij}}{dt} = -(\mu + \lambda)\phi_{ij} + \alpha\theta_{ij} + \lambda \sum_l \frac{\omega_{ij}\phi_{jl}}{s_j} (A_{jl} - \delta_{il}). \quad (2.43)$$

Manipulando-se as relações de completeza e demais equações, encontra-se que

$$\phi_{ij} = \zeta \rho_j - \Theta \rho_i, \quad (2.44)$$

onde

$$\zeta(\lambda, \mu, \alpha) = \frac{2\mu(\lambda + \alpha + \mu) + \lambda\alpha}{2\lambda(\mu + \alpha) + 2\mu(\mu + \lambda + \alpha)} \quad (2.45)$$

e

$$\Theta(\lambda, \mu, \alpha) = \frac{\lambda(2\mu + \alpha)}{2\lambda(\mu + \alpha) + 2\mu(\mu + \lambda + \alpha)}. \quad (2.46)$$

O desenvolvimento analítico das expressões e as aproximações necessárias para chegar à Equação 2.44 é apresentado no Apêndice A.

Portanto, substituir a Equação 2.44 na Equação 2.39 revela a jacobiana  $L_{ij}$  definida por

$$L_{ij}^{SIRS} = -(\mu + \lambda k_i \Theta) \delta_{ij} + \lambda \zeta A_{ij}. \quad (2.47)$$

Sendo assim, o estado absorvente perde estabilidade quando o maior autovalor de  $L_{ij}$  é nulo via análise de estabilidade linear. Desse modo, caracteriza-se o limiar epidêmico  $\lambda_c$  previsto pela teoria de pares para o modelo SIRS. Quando  $\alpha \rightarrow \infty$ , a Equação 2.47

converge para a jacobiana do modelo SIS que, por sua vez, é dada por [14]

$$L_{ij}^{SIS} = -\left(1 + \frac{\lambda^2 k_i}{2\lambda + 2}\right) \delta_{ij} + \frac{\lambda(2 + \lambda)}{2\lambda + 2} A_{ij}. \quad (2.48)$$

### Processo de Contato

No que diz respeito ao processo de contato, investiga-se a densidade de indivíduos infectados pela equação

$$\frac{d\rho_i}{dt} = -\mu\rho_i + \lambda \sum_j \frac{\phi_{ij}}{k_j}. \quad (2.49)$$

Considerando  $\mu = 1$ , observa-se que a equação dinâmica para o par  $\phi_{ij}$  no processo de contato é dada pela expressão

$$\frac{d\phi_{ij}}{dt} = -\phi_{ij} - \lambda \frac{\phi_{ij}}{k_j} + \psi_{ij} + \lambda \sum_l \frac{1}{s_j k_l} [0_i, 0_j, 1_l] (A_{jl} - \delta_{il}) - \lambda \sum_l \frac{1}{s_i k_l} [1_l, 0_i, 1_j] (A_{il} - \delta_{jl}). \quad (2.50)$$

Além disso, as relações de completeza são dadas por

$$\begin{aligned} s_i &= \omega_{ij} + \phi_{ij} \\ \rho_i &= \psi_{ij} + \bar{\phi}_{ij} \\ s_j &= \omega_{ij} + \bar{\phi}_{ij} \\ \rho_j &= \psi_{ij} + \phi_{ij}, \end{aligned} \quad (2.51)$$

onde  $s_i = 1 - \rho_i$  e  $s_j = 1 - \rho_j$ . Sendo assim, realizando a aproximação de pares, seguida de linearização em torno de  $\phi_{ij} \ll 1$  na Equação 2.49, mostra que

$$\frac{d\phi_{ij}}{dt} = \rho_j - \left(2 + \frac{\lambda}{k_i} + \frac{\lambda}{k_j}\right) \phi_{ij} + \left(\rho_j - \rho_i\right) \frac{\lambda}{k_i} + \lambda \sum_l \frac{\phi_{jl}}{k_l} (A_{jl} - \delta_{il}). \quad (2.52)$$

Diante disso, tomando  $d\phi_{ij}/dt \approx 0$  em uma aproximação quase estática, pode-se escrever

$$\phi_{ij} = \frac{2\rho_j + (\rho_j - \rho_i)\lambda/k_i}{\lambda/k_j + \lambda/k_i + 2}. \quad (2.53)$$

De maneira semelhante aos casos anteriores, pode-se encontrar a jacobiana para o PC substituindo a Equação 2.53 na Equação 2.49, dada por

$$L_{ij}^{PC} = -(1 + \lambda^2 \Delta) \rho_i + \lambda(2k_i + \lambda) \sum_j \frac{A_{ij} \rho_j}{2k_i k_j + \lambda(k_i + k_j)}, \quad (2.54)$$

onde

$$\Delta = \sum_j A_{ij} / [2k_i k_j + \lambda(k_i + k_j)]. \quad (2.55)$$

As jacobianas apresentadas são analiticamente intratáveis para redes com distribuição de grau arbitrária. Dessa forma, o limiar epidêmico é encontrado numericamente. Portanto, analogamente ao modelo SIRS e SIS, o estado absorvente perde estabilidade quando o maior autovalor de  $L_{ij}^{PC}$  é nulo.

## 2.6 Teoria de campo médio heterogênea de pares (pHMF)

Tratando-se do processo de contato, as teorias HMF e QMF não apresentam precisão satisfatória na determinação do limiar epidêmico quando comparadas com simulações, visto que ambas preveem  $\lambda_c = 1$  [29]. Nesse contexto, é possível melhorar a acurácia das previsões levando em consideração as correlações dinâmicas em nível de pares.

Como a teoria HMF é fundamentada na relação entre vértices de grau  $k$  e  $k'$ , ajusta-se somente os índices das notações de pares apresentadas na Seção 2.5. Dessa forma, a seguinte alteração é realizada:  $i \rightarrow k$  e  $j \rightarrow k'$ , de modo que  $\psi_{kk'} = [1_k, 1_{k'}]$  é a probabilidade do par de vértices com grau  $k$  e  $k'$  estarem infectados simultaneamente. Assim, as relações de fechamento são dadas por

$$\begin{aligned} s_k &= \omega_{kk'} + \phi_{kk'} \\ \rho_k &= \psi_{kk'} + \bar{\phi}_{kk'} \\ s_{k'} &= \omega_{kk'} + \bar{\phi}_{kk'} \\ \rho_{k'} &= \psi_{kk'} + \phi_{kk'}. \end{aligned} \quad (2.56)$$

A evolução temporal da densidade de vértices infectados  $\rho_k$  com grau  $k$  é dada por

$$\frac{d\rho_k}{dt} = -\mu\rho_k + \lambda k \sum_{k'} \frac{\phi_{kk'}}{k'} P(k'|k). \quad (2.57)$$

Considerando  $\mu = 1$ , a equação dinâmica para o par  $\phi_{kk'}$  é expressada por

$$\begin{aligned} \frac{d\phi_{kk'}}{dt} &= -\phi_{kk'} + \psi_{kk'} - \lambda \frac{\phi_{kk'}}{k'} + \lambda(k' - 1) \sum_{k''} \frac{[0_k, 0_{k'}, 1_{k''}]}{k''} P(k''|k') \\ &\quad - \lambda(k - 1) \sum_{k''} \frac{[1_{k''}, 0_k, 1_{k'}]}{k''} P(k''|k). \end{aligned} \quad (2.58)$$

Com formalismo semelhante ao apresentado para a teoria pQMF, encontra-se a jacobiana do sistema [15]

$$L_{kk'} = -\delta_{kk'} + \frac{\lambda k(2k' - 1)}{(2k' + \lambda)k'} P(k'|k), \quad (2.59)$$

onde observa-se que para o maior autovalor de  $L_{kk'}$  positivo o estado absorvente é instável.

Para redes sem correlação de grau, o limiar pode ser encontrado resolvendo-se a equação transcendental dada por

$$\frac{\lambda_c}{\langle k \rangle} \sum_{k'} \frac{(2k' - 1)k'P(k')}{2k' + \lambda_c} = 1. \quad (2.60)$$

Por outro lado, para redes com correlação de grau, obtém-se o limiar  $\lambda_c$  resolvendo-se numericamente a Equação 2.59 valendo-se dos mesmos critérios de estabilidade.

## 2.7 O fenômeno de localização

No contexto epidêmico, os vértices apresentam diferentes contribuições para a dinâmica. Assim, é importante entender como as diferentes partes da rede influenciam a propagação ou a sustentação de uma epidemia. O fenômeno de localização está relacionado com a centralidade de um ou mais vértices.

A centralidade de um vértice é uma medida de sua importância dentro da rede, ou seja, o papel que exerce na comunicação entre suas diversas partes ou a quantidade de vértices que podem ser acessados a partir dele [31]. Portanto, a medida de localização reflete a relevância de um vértice ou um subgrafo<sup>4</sup> para o processo epidêmico.

Goltsev et al. utilizaram o autovetor principal da matriz de adjacência para quantificar a localização em redes heterogêneas. Dessa maneira, define-se a razão de participação inversa (RPI)  $Y_4$  da seguinte forma [33]:

$$Y_4(v^{(1)}) = \sum_{i=1}^N \left[ v_i^{(1)} \right]^4, \quad (2.61)$$

onde  $v_i^{(1)}$  são as componentes do autovetor principal normalizado da matriz de adjacência. Logo, com alicerce na teoria de campo médio microscópica, obtém-se uma medida baseada na estrutura da rede. Além disso, o autovetor principal obtido pelas teorias pHMF e pQMF também são empregados para se medir localização. Diante disso, verifica-se a seguinte lei de escala

$$Y_4 \sim N^{-\nu}, \quad (2.62)$$

de modo que a depender do expoente  $\nu$  a localização pode ser:

- extensiva para  $\nu = 1$ ;
- subextensiva para  $0 < \nu < 1$ ;
- não extensiva para  $\nu = 0$ .

---

<sup>4</sup>Um subgrafo é um conjunto de vértices que constitui uma fração da rede.

O caso não extensivo converge para um valor finito, indicando localização em uma fração finita da rede. Em contrapartida, os casos extensivo e subextensivo indicam localização nula no limite termodinâmico. Ademais, dois casos limites são apresentados: atividade totalmente não localizada quando  $Y_4 = 1/N$  e atividade totalmente localizada quando  $Y_4 = 1$ . No primeiro caso, todos os vértices contribuem de forma igual para o processo epidêmico, enquanto no segundo caso apenas um vértice é responsável por sustentar a atividade da rede. Também é possível realizar medidas de localização por meio de simulações. Nesse sentido, fala-se acerca do vetor de atividade normalizado baseado no tempo de atividade de cada vértice no estado estacionário [34]. Por fim, na Seção 3.5 consta uma proposta alternativa, com base na atividade de infecção, para o vetor de atividade normalizado.

# Capítulo III

## Metodologia

### 3.1 Representação computacional

Computacionalmente, uma rede pode ser construída utilizando-se três vetores unidimensionais. Decompor a rede em vetores ao invés de utilizar uma matriz de adjacência explícita oferece vantagens com relação ao uso de memória e tempo computacional. Logo, evita-se o armazenamento de conexões inexistentes, isto é, os zeros da matriz de adjacências. Os vetores utilizados são caracterizados da seguinte maneira:

- O vetor de grau  $u(1, 2, \dots, N)$  armazena o grau  $k_i$  do vértice  $i$  na posição  $i$  da seguinte forma  $u(i) = k_i$ .
- O vetor de adjacências  $v(i)$  é utilizado para armazenar os  $k_i$  vizinhos do vértice  $i$ .
- O vetor auxiliar  $\text{aux}(1, 2, \dots, N)$  é destinado a armazenar a informação da posição vizinhança do vértice  $i$  no vetor de adjacências  $v(i)$ . A informação da posição da vizinhança do vértice  $i$  começa em  $\text{aux}(i)$  e vai até  $\text{aux}(i) + k_i - 1$  no vetor de adjacências, por exemplo.

Para o que se segue, a Figura 3.1 exibe um grafo simples e exemplifica o uso dos vetores supracitados.

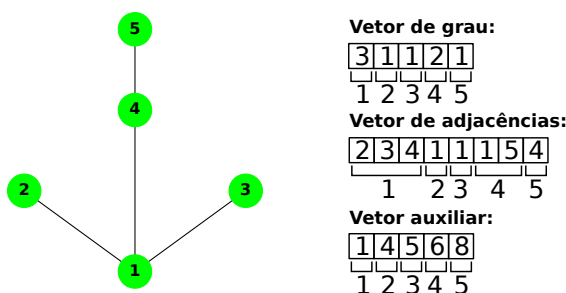


Figura 3.1: Representação computacional de um grafo simples e não direcionado. Os números abaixo de cada vetor marcam as informações sobre o grau, vizinhança e posição dos vizinhos.

## 3.2 Modelo de configurações

Concebido por Molloy e Reed, o modelo de configurações constitui uma sequência de passos computacionais para gerar uma rede sintética com distribuição de grau desejada. Originalmente, o modelo não proíbe nenhum tipo de conexão, ou seja, múltiplas conexões e autoconexões são permitidas [11]. A Figura 3.2 esquematiza os possíveis tipos de ligações.

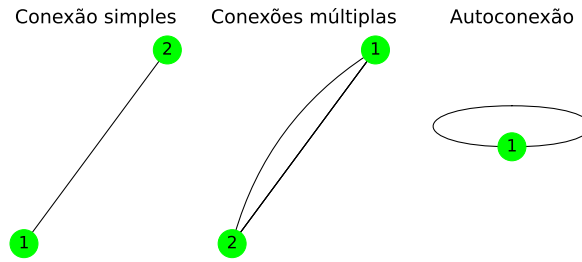


Figura 3.2: Tipos de conexões permitidas pelo modelo de configurações.

Nesta pesquisa, evitou-se autoconexões. Portanto, a implementação do modelo de configurações segue os passos seguintes:

- Gerar uma distribuição de grau, de modo que cada vértice  $i$  tenha um grau  $k_i$  associado. A distribuição de grau deve ter um corte inferior  $k_0$  e um corte superior  $k_c$ . A soma do vetor de grau deve ser par a fim de evitar conexões incompletas no caso de grafos simples.
- Uma aresta apontando para fora de um vértice é chamada *stub*. Um vetor de *stubs* deve ser criado da seguinte forma: os *stubs* do vértice  $i$  devem ser nomeados por  $i$  e são armazenados em  $k_i$  entradas do vetor. Supondo, por exemplo, que  $k_1 = 3$ ,  $k_2 = 2$  e  $k_3 = 1$ . O vetor de *stubs* correspondente é  $s = (1, 1, 1, 2, 2, 3)$ .
- Dois *stubs*  $i$  e  $j$  são sorteados aleatoriamente entre 1 e o total de *stubs*  $N_s$ . Se  $i = j$  então um novo sorteio é realizado. Caso  $i \neq j$ , a conexão é armazenada na lista de vizinhos. Caso múltiplas conexões sejam proibidas, deve-se verificar se a conexão entre o par é existente, caso sim, um novo sorteio é realizado.
- Se a conexão for concluída, o número de *stubs* é diminuído em duas unidades e os dois últimos *stubs* do vetor são remanejados para a posição dos dois *stubs* sorteados. Do exemplo acima, supõe-se que a posição 2 e 4 do vetor de *stubs* foi sorteada. Assim, o par de vértices  $[1,2]$  formam conexão. Computacionalmente:

$$\begin{cases} s(2) \leftarrow s(6) \\ s(4) \leftarrow s(5) \\ N_s \leftarrow N_s - 2 \end{cases} \quad (3.1)$$

- Uma estrutura condicional pode ser implementada para verificar alguns casos particulares para o sorteio de *stubs* das posições  $i$  e  $j$ ;
  - I. Se as duas últimas posições forem sorteadas, então o número de *stubs* é decrementado em duas unidades e nenhuma alteração é feita na lista  $s$ .
  - II. Se uma das posições sorteadas for a última, por exemplo  $j$ , então o número de *stubs* é decrementado em duas unidades e o vetor é atualizado de forma que  $s(i) \leftarrow s(N_s - 1)$ . Com isso, evita-se que um vértice faça mais conexões do que o seu grau permite.
- Verifica-se o número total de *stubs*  $N_s$ . Se  $N_s = 0$  a rede foi gerada com sucesso.
- Uma variável  $\tau$  é associada ao número de tentativas de conexões mal sucedidas. Dessa forma, se o número de tentativas exceder uma tolerância, o vetor  $s$  é reconstruído e as conexões descartadas, preservando somente a distribuição de grau.

Redes com distribuição de grau em lei de potência apresentam um corte natural  $k_N$  que escala de acordo com [2]:

$$k_N \sim N^{\frac{1}{\gamma-1}}. \quad (3.2)$$

Nesta pesquisa, utilizou-se o corte  $k_c \sim k_N$  de acordo com os casos:

$$k_c = \begin{cases} k_0 N^{\frac{1}{\gamma-1}}, & \gamma \geq 5/2 \\ N^{\frac{1}{\gamma-1}}, & \gamma < 5/2. \end{cases} \quad (3.3)$$

A escolha do pré fator igual a 1 quando  $\gamma < 5/2$  justifica-se no fato de que é computacionalmente impossível gerar redes muito grandes sem permitir auto e múltiplas conexões [5, 12]. Para cortes  $k_c$  com pré fator maior que 1, as conexões raramente são concluídas com sucesso no caso de redes simples e, conseqüentemente, a demanda computacional aumenta. O obstáculo é decorrente do fato de que ao final do processo, sobram somente os *stubs* de vértices que já foram conectados. Para multigrafos tais desafios não ocorrem. O valor utilizado para o corte inferior foi  $k_0 = 3$ , pois vértices com grau  $k < k_0$ , nesse contexto, não participam significativamente no processo epidêmico e para valores maiores de  $k_0$  diminui-se a heterogeneidade da rede. É importante destacar que multigrafos e redes simples, nesse estudo, possuem exatamente a mesma distribuição de grau, mudando apenas as conexões.

Sob outra perspectiva, a lei de formação, isto é, o que é permitido ou não, influencia diretamente em características estruturais da rede. Hubs tendem a se conectar mais de uma vez, pois a probabilidade de múltiplas conexões não é desprezível no limite de  $N \rightarrow \infty$  [2]. Rejeitar as conexões repetidas faz com que uma nova conexão surja com vértices de grau menor. Conseqüentemente, um regime de correlação desassociativa, denominado desassociatividade estrutural, é introduzido no sistema. Contudo, a permissão de múltiplas

conexões permite a conexão de quaisquer pares de vértices  $(i, j)$  com  $i \neq j$  e, portanto, elimina correlações na rede. A Figura 3.3 exibe a comparação entre a função de correlação de grau  $k_{nn}$  para o caso de dessassociatividade estrutural para redes simples e correlação neutra para multigrafos.

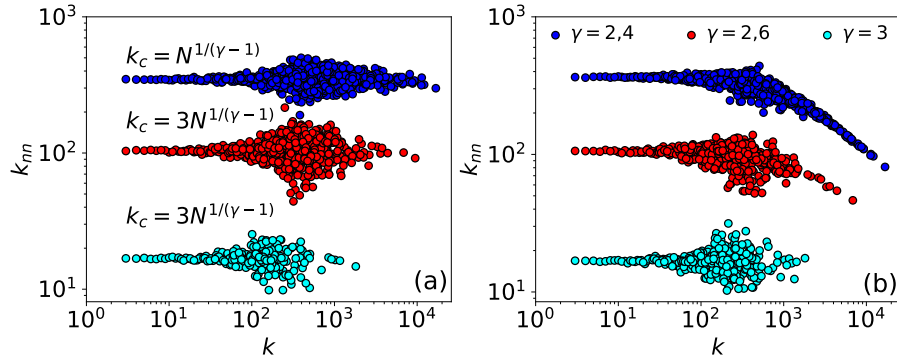


Figura 3.3: Correlação de grau  $k_{nn}$  para (a) multigrafos e (b) redes simples com  $\gamma = \{2,4, 2,6, 3\}$ . Multigrafos apresentam ausência de correlação de grau, redes simples exibem dessassociatividade estrutural. As redes possuem  $N = 10^6$  vértices. Os dados foram obtidos a partir de uma amostra de rede.

Ainda em relação aos multigrafos, o número de conexões repetidas é, por definição, a quantidade de ligações entre o par  $(i, j)$ . Logo, pode-se investigar o comportamento do número médio de múltiplas conexões em função do grau para diferentes distribuições de grau em lei de potência na Figura 3.4.

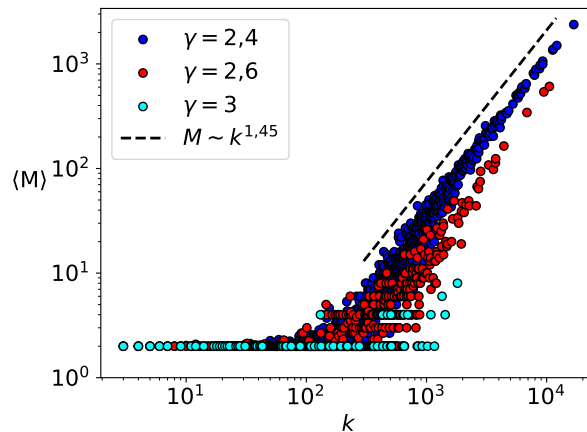


Figura 3.4: Número médio de múltiplas conexões  $\langle M \rangle$  em função do grau  $k$  para redes sintéticas com  $N = 10^6$  vértices,  $k_c = 3N^{1/(\gamma-1)}$  para  $\gamma > 5/2$  e  $k_c = N^{1/(\gamma-1)}$  para  $\gamma < 5/2$  geradas pelo modelo de configurações sem autoconexões. Utilizou-se uma amostra de rede para cada  $P(k) \sim k^{-\gamma}$ . A reta tracejada é um suporte para os olhos.

### 3.3 Métodos quase estacionários

Implementar um estado quase estacionário (QS) exige a perturbação da dinâmica original de modo a evitar o estado absorvente. Em vista disso, medidas quase estacionárias

são caracterizadas por médias sobre amostras que não visitaram o estado absorvente da dinâmica original. Conseqüentemente, a evolução da dinâmica original e a da dinâmica perturbada é similar exceto pelo fato de que a dinâmica perturbada não possui estado absorvente. As perturbações devem ser desprezíveis no limite termodinâmico, garantindo, portanto, a convergência das quantidades QS para os valores estacionários [27, 28]. Computacionalmente, quantidades quase estacionárias são calculadas após um tempo de relaxação  $t_{rlx}$  e durante o tempo de média  $t_{avg}$ .

Para esta pesquisa, considerou-se o método da reativação de hub e o método do campo externo. O primeiro consiste em reinfectar o vértice com maior número de conexões imediatamente após a cura do último vértice infectado. Para redes heterogêneas, é comum que apareça fases endêmicas ou, até mesmo, metaestabilidade em torno dos hubs [27]. Logo, a reativação de hub é uma técnica adequada para a investigação de tais cenários. Entretanto, a estratégia mencionada é inapropriada para medidas de localização, uma vez que sempre induzirá atividade na vizinhança do hub que foi reativado. Como resultado, obtém-se dados espúrios que não representam realidade física.

Por outra via, o método do campo externo é baseado numa fonte fraca que infecta vértices suscetíveis com taxa  $f$ . Nessa pesquisa, utilizou-se  $f = 10/N$ . No contexto da epidemiologia, trata-se da ação de uma infecção exógena. Evidentemente,  $f \rightarrow 0$  no limite termodinâmico. Desse modo, as medidas de localização estão isentas de tendências do método utilizado, posto que os vértices são escolhidos aleatoriamente para serem infectados. Contudo, o método do campo externo pode não revelar em totalidade o efeito de múltiplas conexões na rede, pois os vértices aleatoriamente infectados podem espalhar a infecção em uma fração da rede onde não há múltiplas conexões e, com isso, a comparação direta entre a atividade epidêmica em grafos simples e multigrafos torna-se imprecisa. Portanto, para garantir que a comparação seja, de fato, entre ambos tipos de rede, é necessário implementar o método da reativação de hub, pois os vértices de maior conectividade carregam o maior número de múltiplas conexões.

Assim, utilizou-se o método da reativação de hub para mensurar o limiar epidêmico  $\lambda_c$ , a suscetibilidade  $\chi$  e a densidade média de infectados  $\rho$ . As grandezas mencionadas foram obtidas a partir dos momentos da densidade de infectados QS, expressado pela equação:

$$\langle \rho^n \rangle_{\text{QS}} = \frac{1}{N^n} \sum_{\varphi=1}^N \varphi^n P_{\varphi}, \quad (3.4)$$

onde  $P_{\varphi}$  é a probabilidade do sistema ter  $\varphi$  infectados após o tempo de relaxação  $t_{rlx}$  [35]. O método do campo externo foi empregado para mensurar a localização  $Y_4$ , de modo que primeiramente encontra-se o limiar epidêmico e, posteriormente, mensura-se a localização no limiar epidêmico. Para realizar as simulações, utilizou-se tempos de relaxação  $t_{rlx} = \{10^5/\mu, 2 \times 10^6/\mu\}$  e tempos de média  $t_{avg} = \{10^6/\mu, 10^7/\mu\}$ .

### 3.4 Algoritmo de Gillespie otimizado

Processos markovianos são processos estocásticos sem memória. Em outros termos, a probabilidade condicional do sistema acessar a próxima configuração depende somente da configuração atual. Assim, a probabilidade do sistema assumir a configuração  $n$  no instante de tempo  $t$  é regida pela equação mestra [36]:

$$\frac{dP(n,t)}{dt} = \sum_m \{W(n,m)P(m,t) - W(m,n)P(n,t)\}, \quad (3.5)$$

onde  $W(n, m)$  é a taxa de transição do estado  $n$  para o estado  $m$  e  $P(m, t)$  a probabilidade do sistema assumir o estado  $m$  no instante  $t$ .

Almejando conduzir simulações de processos markovianos de tempo contínuo, concebeu-se algoritmo de Gillespie baseado em um vetor com todos os eventos possíveis, por exemplo: cura, infecção, perda de imunidade, entre outros. Todavia, tal implementação deu origem à uma alta complexidade computacional. Como resultado, as simulações consumiam tempos computacionais da ordem de dias [35, 37].

Tendo em vista a alta complexidade computacional do algoritmo de Gillespie, uma nova versão, o algoritmo de Gillespie otimizado (AGO), baseada em processo fantasma, foi proposta na referência [35]. Um processo fantasma ocorre quando um vértice infectado tenta espalhar a doença para outro vértice infectado ou removido. Assim, nenhum evento de infecção ocorre e o tempo de simulação é atualizado incrementando-se a variação de tempo  $\delta t$ . Nesta pesquisa, simulações estocásticas de tempo contínuo foram conduzidas empregando-se o AGO.

Computacionalmente, o AGO conta com dois vetores unidimensionais, além dos vetores necessários para representar a estrutura de uma rede (Seção 3.2). O primeiro vetor é utilizado para armazenar o estado  $\sigma_i$  de cada vértice da rede, de modo que o vetor de estados  $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$ . Adicionalmente, define-se o estado de cada vértice como segue:

$$\sigma_i = \begin{cases} 0, \text{ Suscetível} \\ 1, \text{ Infectado} \\ 2, \text{ Removido} \end{cases} \quad (3.6)$$

O segundo é o vetor de infectados  $\rho_{\text{inf}}$  e é utilizado para armazenar os vértices que estão com estado  $\sigma_i = 1$ . O vetor armazena os vértices infectados na posição  $\rho_{\text{inf}}(1)$  até a posição  $\rho_{\text{inf}}(N_{\text{inf}})$ , onde  $N_{\text{inf}}$  é o número de infectados. Logo, quando um vértice na posição  $j$  é curado espontaneamente, os seguintes passos computacionais são necessários:

1.  $\rho_{\text{inf}}(j) \leftarrow \rho_{\text{inf}}(N_{\text{inf}})$
2.  $N_{\text{inf}} \leftarrow N_{\text{inf}} - 1$

3.  $\sigma_j = 1$  é atualizado para  $\sigma_i = 0$  no caso da dinâmica SIS e  $\sigma_i = 2$  no caso da dinâmica SIRS.

Por outro lado, quando um vértice  $j$  é infectado ocorre a seguinte atualização:

1.  $N_{\text{inf}} \leftarrow N_{\text{inf}} + 1$
2.  $\rho_{\text{inf}}(N_{\text{inf}}) \leftarrow j$
3.  $\sigma_j = 0$  é atualizado para  $\sigma_j = 1$ .

Por conseguinte, define-se as probabilidades de cada evento. Para o modelo SIS, o evento de cura espontânea ocorre com probabilidade  $p$ :

$$p = \frac{\mu N_{\text{inf}}}{\mu N_{\text{inf}} + \lambda \sum_{i=1}^{N_{\text{inf}}} k_i + fN} \quad (3.7)$$

O termo  $fN$  é referente à taxa de infecção por campo fraco. Logo, a probabilidade  $w$  de um vértice suscetível ser infectado via campo fraco é dada por

$$w = \frac{fN}{\mu N_{\text{inf}} + \lambda \sum_{i=1}^{N_{\text{inf}}} k_i + fN} \quad (3.8)$$

Dessa maneira, o evento de infecção ocorre com probabilidade complementar  $q = 1 - p - w$ . No caso do método da reativação de hub,  $f = 0$

No caso do processo de contato, a taxa de infecção é independente do grau dos vértices infectados, levando a probabilidade de cura a ser descrita por:

$$p = \frac{\mu}{\mu + \lambda} \quad (3.9)$$

no caso em que  $f = 0$ . O evento de infecção ocorre com probabilidade complementar.

Para o modelo SIRS, há que se considerar mais um evento, que é o caso da perda de imunidade. Sendo assim, o evento de perda de imunidade, quando  $f = 0$ , ocorre com probabilidade  $\kappa$ :

$$\kappa = \frac{\alpha N_R}{\mu N_{\text{inf}} + \lambda \sum_{i=1}^{N_{\text{inf}}} k_i + \alpha N_R} \quad (3.10)$$

onde  $N_R$  é o número de removidos da dinâmica e  $\alpha$  a taxa de perda de imunidade.

Tratando-se de uma simulação de tempo contínuo, os incrementos de tempo  $\delta t$  para o modelo SIS ocorrem de acordo com:

$$\delta t = \frac{-\ln(1-y)}{\mu N_{\text{inf}} + \lambda \sum_{i=1}^{N_{\text{inf}}} k_i + fN} \quad (3.11)$$

onde  $y$  é um número aleatório pertencente a uma distribuição uniforme entre 0 e 1. A generalização para os outros modelos é direta.

### 3.5 Vetor de atividade normalizado

De maneira alternativa à referência [34], o vetor de atividade normalizado proposto nesta pesquisa é baseado no número de infecções que ocorre em um vértice durante o estado estacionário. Considera-se, pois, um vetor de atividade  $\varrho_i$  que armazena a quantidade de eventos de infecção que ocorreram no vértice  $i$  após o tempo de relaxação. Assim, pode-se associar uma probabilidade ao evento de infecção em cada vértice

$$P_{\text{inf}}(i) = \frac{\varrho_i}{\sum_{j=1}^N \varrho_j}, \quad (3.12)$$

onde  $P_{\text{inf}}(i)$  é a probabilidade do vértice  $i$  estar infectado no estado estacionário. Para o que se segue, define-se o vetor de atividade normalizado  $\phi$  como segue

$$\phi_i = \frac{\varrho_i}{\sqrt{\sum_{i=1}^N \varrho_i^2}}. \quad (3.13)$$

Nota-se que o vetor  $\phi$  guarda a informação da atividade local por vértice. Com isso, define-se a razão de participação inversa  $Y_4$

$$Y_4(\phi) = \sum_{i=1}^N \phi_i^4. \quad (3.14)$$

Considerando que as medidas de localização provenientes de teorias de campo médio são isentas de flutuações estocásticas e correlações dinâmicas, torna-se relevante investigar o fenômeno de localização com medidas obtidas diretamente das simulações epidêmicas [34]. Diante disso, comparou-se a localização prevista pelas teorias de campo médio com a localização obtida via simulações estocásticas para grafos simples e multigrafos, a fim de verificar como as múltiplas conexões interferem na intensidade e regime de localização da rede.

# Capítulo IV

## Resultados e Discussões

### 4.1 Processo de contato

Remover as correlações de grau via permissão de múltiplas conexões não altera o comportamento assintótico do limiar epidêmico para o processo de contato no contexto de simulações estocásticas. A densidade de infectados escala com expoente  $\rho \sim N^{-0,65(2)}$  e a suscetibilidade com expoente  $\chi \sim N^{0,39(2)}$  para os dois tipos de grafos. Além disso, a localização se mostra não extensiva ao apresentar comportamento de convergência para um valor finito, em contraste com a localização subextensiva verificada para o PC em redes com  $k_c \sim \sqrt{N}$  [34]. A Figura 4.1 mostra a análise de tamanho finito para as quantidades QS.

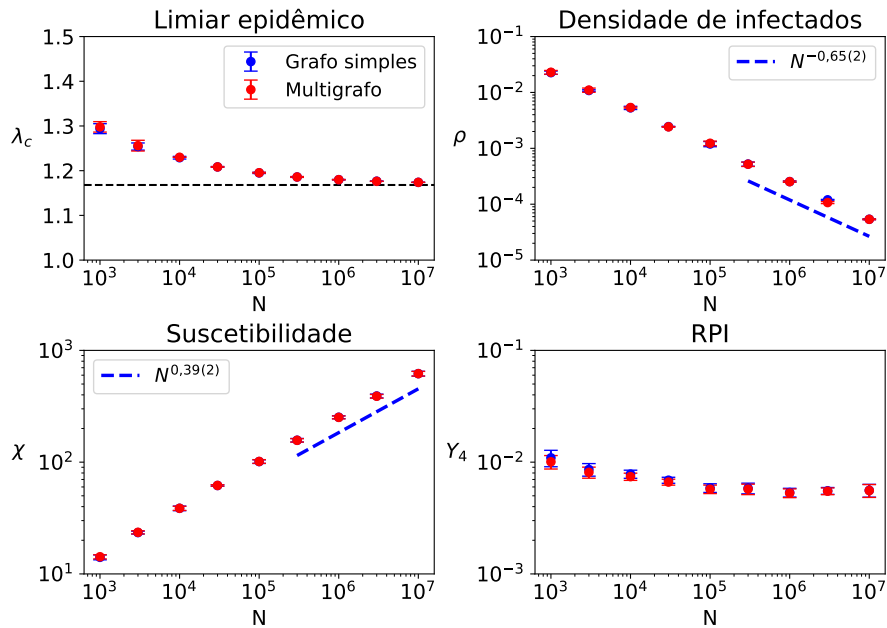


Figura 4.1: Análise de tamanho finito para grafos simples e multigrafos com distribuição de grau em lei de potência  $P(k) \sim k^{-\gamma}$  com  $\gamma = 2,6$ . As linhas tracejadas em azul são regressões em lei de potência. A linha preta tracejada marca o valor assintótico do limiar epidêmico.

Por outra via, pode-se investigar o efeito de múltiplas conexões na rede a partir da probabilidade de infecção de cada vértice durante o tempo de média. Logo, observando a Figura 4.2, a atividade local é expressivamente semelhante em grafos simples e multigrafos.

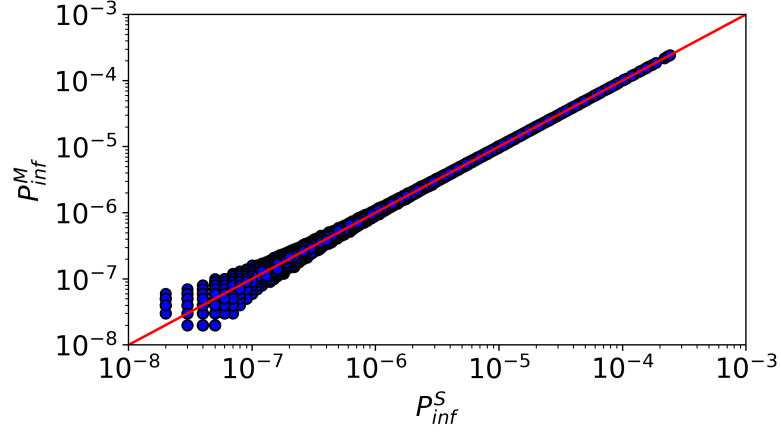


Figura 4.2: Probabilidade de infecção em multigrafos  $P_{\text{inf}}^M$  em função da probabilidade de infecção em redes simples  $P_{\text{inf}}^S$  (abscissa). As redes possuem  $P(k) \sim k^{-\gamma}$  com  $\gamma = 2,6$ ,  $k_c = 3N^{1/(\gamma-1)}$  e  $N = 10^7$  vértices. A reta em vermelho é referente à  $y = x$ . Os resultados foram obtidos para uma amostra de rede.

No tocante à localização, comparou-se a RPI prevista pelas teorias de pares microscópica e heterogênea com aquelas obtidas via simulação, onde constatou-se a concordância para a não extensividade da localização observada, conforme mostra a Figura 4.3.

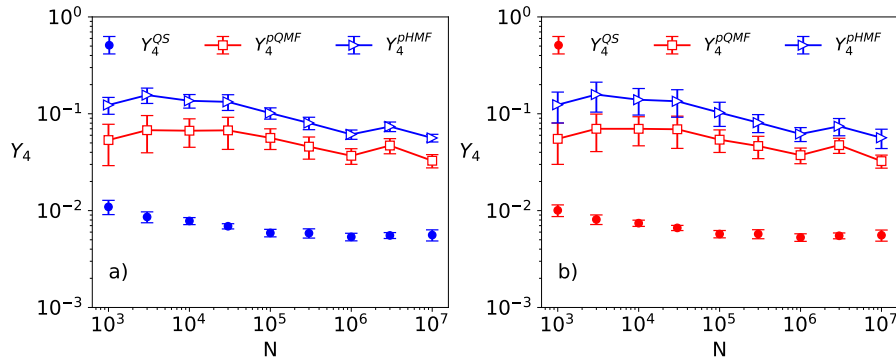


Figura 4.3: Comparação e concordância entre a localização obtida pela simulação e a localização prevista pelas teorias de campo médio para a) grafos simples e b) multigrafos.

Levando em consideração redes neutras, em virtude da simplificação do tratamento analítico, é conhecido que o autovetor principal previsto pela teoria HMF e QMF é tal que  $v_k = k$  (Seção 2.3). Assim, a RPI pode ser calculada pela equação [34]

$$Y_4 = \frac{\langle k^4 \rangle}{N \langle k^2 \rangle^2}. \quad (4.1)$$

Diante disso, pode-se demonstrar que a localização esperada é, de fato, não extensiva

quando  $k_c \sim N^{1/(\gamma-1)}$ . Dessa forma, pode-se escrever que

$$\langle k^i \rangle \sim k_c^{i-\gamma+1} \quad (4.2)$$

para  $i - \gamma + 1 > 0$ . Caso contrário,  $\langle k^i \rangle \sim \text{constante}$ . Por conseguinte, observa-se que a razão de participação inversa escala de forma que

$$Y_4 \sim k_c^{\gamma-1}/N, \quad (4.3)$$

onde verifica-se que

$$Y_4 \sim \begin{cases} \text{constante}, & 2 < \gamma < 3 \\ N^{\frac{-2\gamma+6}{\gamma-1}}, & 3 < \gamma < 5 \\ N^{-1}, & \gamma > 5 \end{cases} . \quad (4.4)$$

Sendo assim, evidencia-se que a localização esperada para processo de contato em redes neutras é não extensiva. Entretanto, cabe destacar que o comportamento observado é decorrente da introdução de um corte  $k_c \sim k_N$  e não da multiplicidade de conexões entre pares.

Comparando-se o limiar epidêmico QS com o limiar previsto pelas teorias pHMF e pQMF, verifica-se que o comportamento de escala previsto pelas teorias concordam com o comportamento de escala observado na simulação, de maneira que ambas previsões convergem assintoticamente para  $\lambda^{QS}$  para grafos simples e multigrafos, conforme exhibe a Figura 4.4.

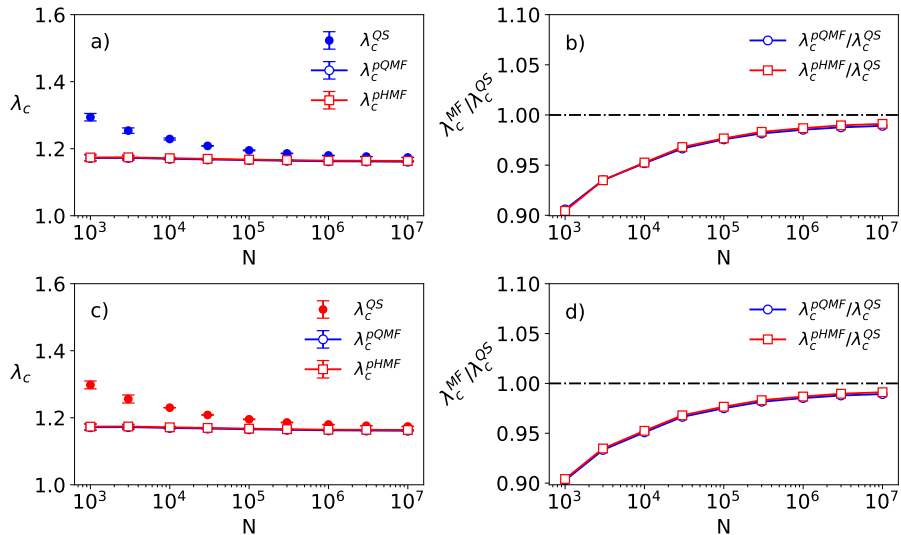


Figura 4.4: a) Comparação entre os limiares obtidos via simulação  $\lambda_c^{QS}$ , teoria de pares microscópica  $\lambda_c^{pQMF}$  e teoria de pares heterogênea  $\lambda_c^{pHMF}$  para grafos simples. Em b) a razão entre os limiares obtidos por campo médio  $\lambda_c^{MF}$  e  $\lambda_c^{QS}$ . Comparação entre os limiares  $\lambda_c^{QS}$ ,  $\lambda_c^{pQMF}$  e  $\lambda_c^{pHMF}$  para multigrafos em c). Em d) a razão entre os limiares obtidos por campo médio  $\lambda_c^{MF}$  e  $\lambda_c^{QS}$ .

## 4.2 Suscetível-Infetado-Suscetível

O caso  $\gamma = 3$  se mostra relevante pela possibilidade de contemplar redes com menor correlação de grau para grafos simples (Figura 3.3). Sendo assim, investiga-se o efeito de múltiplas conexões de forma mais genuína, isto é, com efeitos de correlação reduzidos. Nesse contexto, a Figura 4.5 mostra análise de tamanho finito para as quantidades QS.

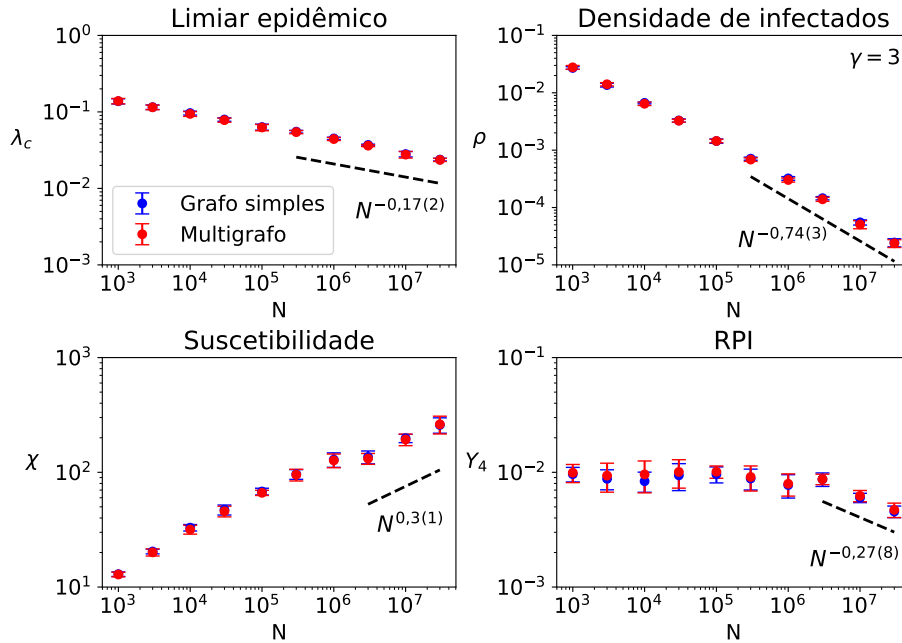


Figura 4.5: Análise de tamanho finito para grafos simples e multigrafos com distribuição de grau em lei de potência  $P(k) \sim k^{-\gamma}$ ,  $k_c = 3N^{1/(\gamma-1)}$  e  $\gamma = 3$ . As linhas tracejadas em preto são regressões em lei de potência.

Diante das investigações conduzidas, verificou-se que conexões repetidas não alteram o comportamento das grandezas QS quando o sistema tende ao limite termodinâmico. Observou-se que a suscetibilidade escala com expoente  $\chi \sim N^{-0,3(1)}$ , a densidade de infectados com expoente  $\rho \sim N^{-0,74(3)}$  e o limiar com expoente  $\lambda_c \sim N^{-0,17(2)}$  para ambos os tipos de grafos. A localização aparenta não extensividade para  $N \leq 10^6$  vértices. Entretanto, para tamanhos maiores as simulações revelam localização subextensiva com expoente  $Y_4 \sim N^{-0,27(8)}$ .

Comparando-se os limiares obtidos pelas simulações e teorias de campo médio, observa-se que a teoria HMF superestima o limiar epidêmico para ambos casos. As teorias QMF e pQMF concordam com a simulação no tocante a previsão de um limiar  $\lambda_c \rightarrow 0$  quando  $N \rightarrow \infty$ . Ademais, a Figura 4.6 sugere concordância entre o comportamento de escala previsto pela teorias e o comportamento observado nas simulações para  $N > 10^6$  vértices.

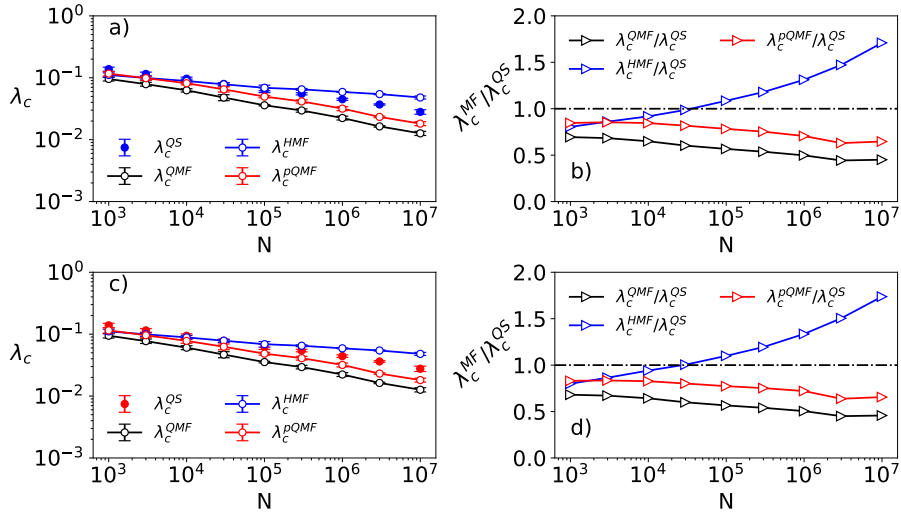


Figura 4.6: a) Análise de tamanho finito para os limiares epidêmicos obtidos pela simulação  $\lambda_c^{QS}$ , pela teoria de campo médio heterogênea  $\lambda_c^{HMF}$ , pela teoria de campo médio microscópica  $\lambda_c^{QMF}$  e pela teoria de campo médio microscópica de pares  $\lambda_c^{pQMF}$  para redes simples. Em b) comparação da razão entre limiares obtidos por campo médio  $\lambda_c^{MF}$  e  $\lambda_c^{QS}$  para redes simples. Em c) análise de tamanho finito para os limiares epidêmicos para multigrafos. Em d) comparação da razão  $\lambda_c^{MF}/\lambda_c^{QS}$  para multigrafos.

Dispondo-se do vetor de probabilidades  $P_{\text{inf}}$ , pode-se investigar a atividade epidêmica localmente em nível microscópico, uma vez que a atividade de cada vértice está armazenada no vetor. Para tanto, compara-se  $P_{\text{inf}}^M$  para multigrafos em função de  $P_{\text{inf}}^S$  para grafos simples em um gráfico de pontos marcado pela reta  $y = x$ . Na Figura 4.7 consta a comparação da probabilidade de infecção para ambos tipos de rede.

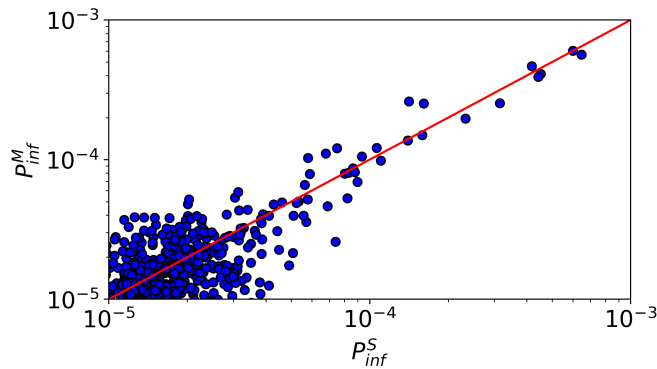


Figura 4.7: Probabilidade de infecção em multigrafos  $P_{\text{inf}}^M$  em função da probabilidade de infecção em redes simples  $P_{\text{inf}}^S$  (abscissa) no modelo SIS. As redes possuem  $N = 10^7$  vértices,  $P(k) \sim k^{-\gamma}$ ,  $k_c = 3N^{1/(\gamma-1)}$  e  $\gamma = 3$ . A reta em vermelho é referente à  $y = x$ . Os resultados foram obtidos para uma amostra de rede.

Pequenas diferenças são apreciadas, de maneira que vértices de maior atividade local  $P_{\text{inf}} \geq 10^{-4}$  não sentem, expressivamente, o efeito de múltiplas conexões, de maneira que a atividade epidêmica em ambos tipos de rede é similar.

Correlações desassociativas são evidenciadas para  $\gamma = 2,6$  quando não se permite conexões repetidas. Nesse contexto, a análise de tamanho finito mostra um deslocamento

no limiar epidêmico, porém ambos escalam com expoentes próximos,  $\lambda_c \sim N^{-0,26(1)}$  para grafos simples e  $\lambda_c \sim N^{-0,28(2)}$  para multigrafos. Outrossim, as grandezas relativas à densidade de infectados e suscetibilidade também tendem ao limite termodinâmico com expoentes próximos para os dois tipos de rede, a saber:  $\rho \sim N^{-0,64(1)}$  para grafos simples,  $\rho \sim N^{-0,66(1)}$  para multigrafos,  $\chi \sim N^{0,38(1)}$  para grafos simples e  $\chi \sim N^{0,37(1)}$  para multigrafos. Em relação à localização, observa-se que ambas se mostram comportamento subextensivo, escalando com expoentes próximos em ambos grafos, como observado na Figura 4.8.

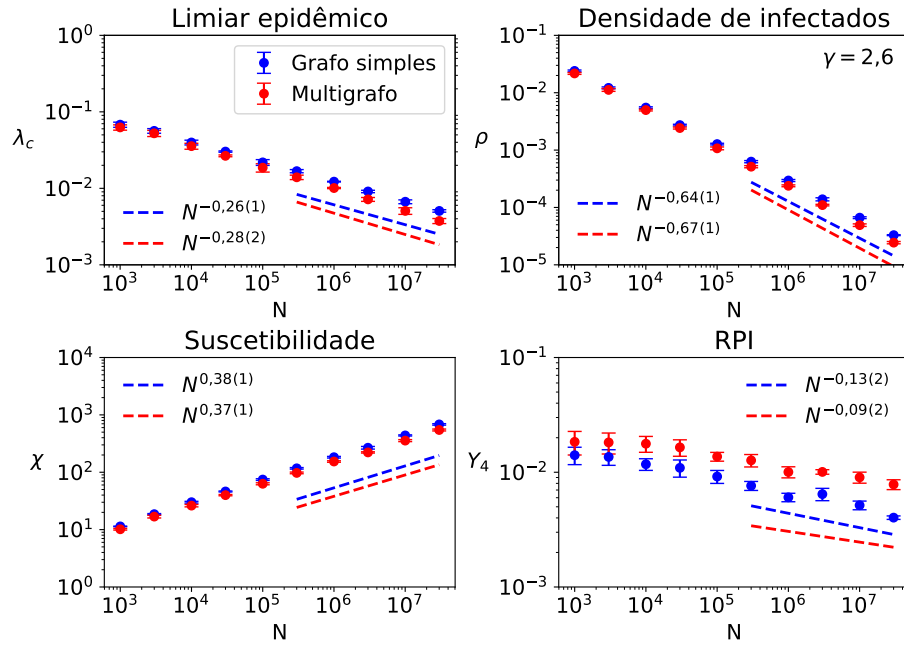


Figura 4.8: Análise de tamanho finito para grafos simples e multigrafos com distribuição de grau em lei de potência  $P(k) \sim k^{-\gamma}$ ,  $k_c = 3N^{1/(\gamma-1)}$  e  $\gamma = 2,6$ . As linhas tracejadas em azul são regressões em lei de potência para grafos simples e em vermelho para multigrafos.

Em relação ao limiar epidêmico, observa-se que as teorias QMF e pQMF apresentam concordância no comportamento de escala em relação ao limiar obtido nas simulações, para ambos os grafos. Destaca-se a superioridade na acurácia da teoria pQMF em relação à teoria QMF em ambos casos. Em contrapartida, a teoria HMF superestima o limiar para grafos simples. Além disso, observa-se que a teoria HMF aparenta comportamento de convergência assintótica para multigrafos, porém a tendência é que o limiar seja superestimado para tamanhos além de  $N = 3 \times 10^7$  vértices. A Figura 4.9 resume a discussão.

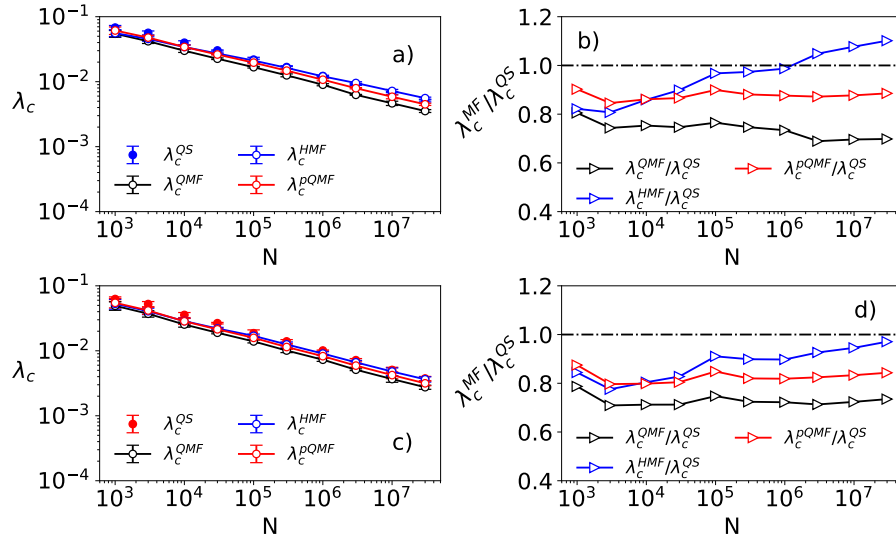


Figura 4.9: a) Análise de tamanho finito para os limiares epidêmicos obtidos pela simulação  $\lambda_c^{QS}$ , pela teoria de campo médio heterogênea  $\lambda_c^{HMF}$  e pela teoria de campo médio microscópica simples  $\lambda_c^{QMF}$  e de pares  $\lambda_c^{pQMF}$  para redes simples. Em b) comparação da razão entre limiares obtidos por campo médio  $\lambda_c^{MF}$  e  $\lambda_c^{QS}$  para redes simples. Em c) análise de tamanho finito para os limiares epidêmicos para multigrafos. Em d) comparação da razão  $\lambda_c^{MF}/\lambda_c^{QS}$  para multigrafos. O expoente da distribuição de grau é  $\gamma = 2,6$ .

Comparando-se a probabilidade de infecção, observa-se que os hubs, vértices mais localizados, apresentam maior atividade quando se tem múltiplas conexões. Essa ocorrência justifica o desvio observado no limiar epidêmico obtido por simulações. Uma vez que multigrafos permitem a conexão entre hubs diversas vezes, cria-se uma estrutura densamente conectada capaz de se manter ativa e espalhar a infecção para a vizinhança por meio do mecanismo de retroalimentação. A Figura 4.10 exibe a comparação.

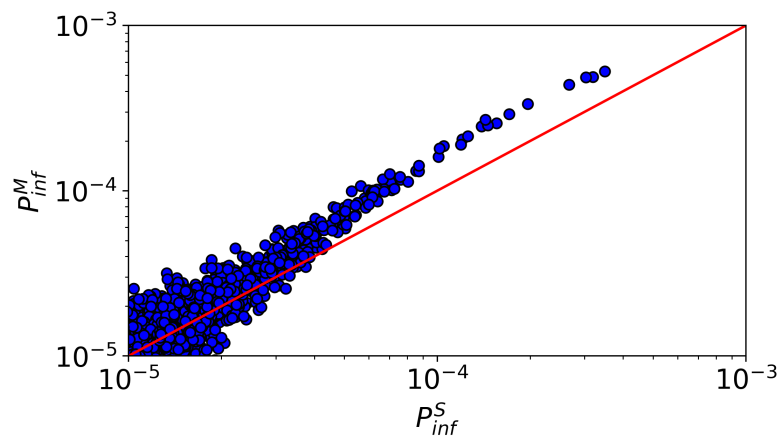


Figura 4.10: Probabilidade de infecção em multigrafos  $P_{inf}^M$  em função da probabilidade de infecção em redes simples  $P_{inf}^S$  (abscissa) no modelo SIS. As redes possuem  $N = 10^7$  vértices,  $P(k) \sim k^{-\gamma}$ ,  $k_c = 3N^{1/(\gamma-1)}$  e  $\gamma = 2,6$ . A reta em vermelho é referente à  $y = x$ . Os resultados foram obtidos para uma amostra de rede.

No cenário onde  $\gamma = 2,4$ , as correlações estruturais se mostram maiores do que nos casos anteriores para redes simples (Figura 3.3). Nesse contexto, a análise de tamanho

finito revelou que as grandezas quase estacionárias escalam com expoentes diferentes para redes simples e multigrafos, como exhibe a Figura 4.11.

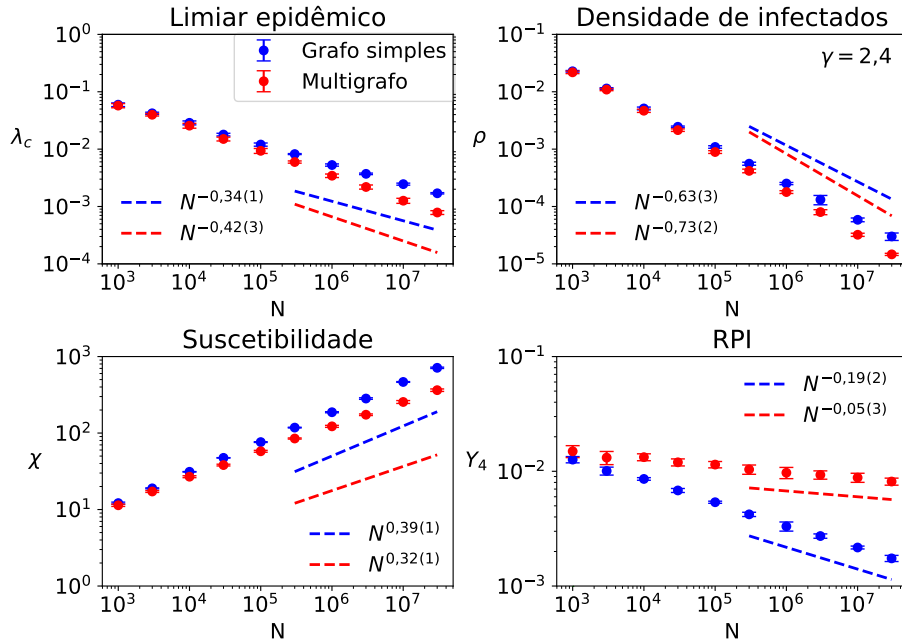


Figura 4.11: Análise de tamanho finito para grafos simples e multigrafos com distribuição de grau em lei de potência  $P(k) \sim k^{-\gamma}$ ,  $k_c = N^{1/(\gamma-1)}$  e  $\gamma = 2,4$ . As linhas tracejadas em azul são regressões em lei de potência para grafos simples e em vermelho para multigrafos.

O limiar epidêmico escala com expoente  $\lambda_c \sim N^{-0,34(1)}$  para grafos simples e  $\lambda_c \sim N^{-0,42(3)}$  para os multigrafos. O deslocamento evidenciado é decorrente das correlações na rede [38]. A densidade de infectados escala com  $\rho \sim N^{-0,63(3)}$  para grafos simples e  $\rho \sim N^{-0,73(2)}$  para multigrafos. A suscetibilidade escala com  $\chi \sim N^{0,39(1)}$  para grafos simples e  $\chi \sim N^{0,32(1)}$  para multigrafos. As medidas de localização exibem uma mudança significativa no comportamento de escala. Para grafos simples, a localização é subextensiva com  $Y_4 \sim N^{-0,19(2)}$ . No caso dos multigrafos, o comportamento observado para a localização sugere subextensividade com expoente muito próximo de zero. Confrontando os valores do limiar epidêmico obtidos via simulação  $\lambda_c^{QS}$  com os limiares previstos pelas teorias de campo médio  $\lambda_c^{MF}$ , observa-se que a teoria de campo médio heterogênea apresenta maior acurácia em relação as demais para o grafo simples. Não obstante, a teoria pQMF e microscópica QMF também apresentam concordância no comportamento de convergência assintótica. Por outro lado, as teorias QMF, pQMF e HMF preveem o mesmo limiar para  $N \rightarrow \infty$  para multigrafos e apresentam concordância no comportamento de escala em relação ao limiar obtido por simulações. A Figura 4.12 exhibe a comparação discutida.

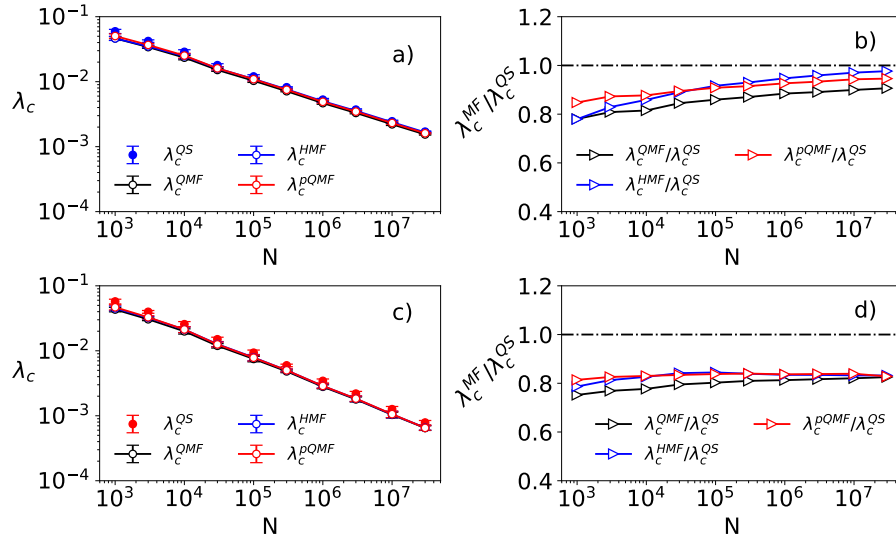


Figura 4.12: Análise de tamanho finito para os limiares epidêmicos obtidos pela simulação  $\lambda_c^{QS}$ , pela teoria de campo médio heterogênea  $\lambda_c^{HMF}$ , teoria de campo médio microscópica  $\lambda_c^{QMF}$  e teoria de pares  $\lambda_c^{pQMF}$  para a) redes simples e c) multigrafos. Em b) comparação da razão entre limiares obtidos por campo médio  $\lambda_c^{MF}$  e  $\lambda_c^{QS}$  para redes simples e d) multigrafos. O expoente da distribuição de grau é  $\gamma = 2,4$

Conforme reportado em [31, 34], redes com corte  $k_c \sim \sqrt{N}$  com  $\gamma < 5/2$  exibem localização subextensiva. Introduzir o corte natural  $k_N \sim N^{1/(\gamma-1)}$  e correlações desassociativas não altera o regime da localização para grafos simples. Por outro lado, eliminar as correlações via permissão de múltiplas conexões intensifica a localização. Em vista disso, comparou-se a razão de participação inversa obtida via simulação com a localização obtida via campo médio, nesse caso: QMF e pQMF. Sendo assim, observou-se que a localização prevista pelas aproximações de campo médio para multigrafos também exibem a diferença de comportamento de escala observada no caso das simulações.

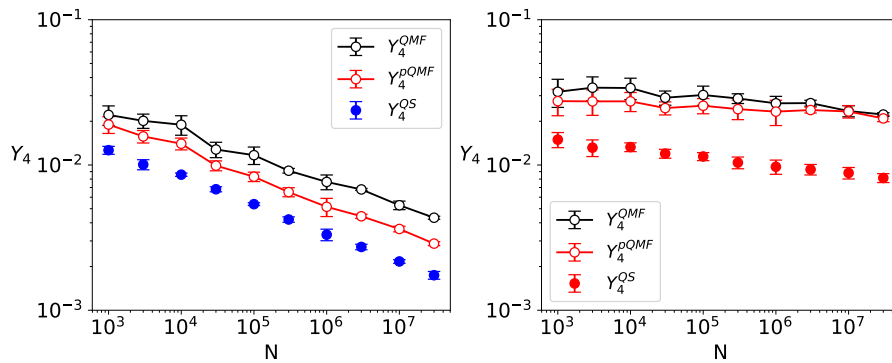


Figura 4.13: Comparação da razão de participação inversa obtida via simulação  $Y_4^{QS}$ , teoria de pares  $Y_4^{pQMF}$  e teoria de campo médio microscópica  $Y_4^{QMF}$ . A esquerda aborda-se grafos simples e a direita multigrafos. O expoente da distribuição de grau é  $\gamma = 2,4$ .

Tendo em vista o comportamento da localização dependendo do valor de  $\gamma$  da distribuição de grau, investigou-se as propriedades espectrais de  $Y_4$  para redes simples e multigrafos via QMF com  $2,2 \leq \gamma \leq 3,2$ . Para grafos simples, o valor mínimo foi  $\gamma = 2,4$ ,

em decorrência da impossibilidade de gerar redes simples com corte  $k_c = k^{1/(\gamma-1)}$  para  $\gamma < 2,4$ . Sendo assim, a Figura 4.14 exibe a comparação das propriedades espectrais para ambos os tipos de rede.

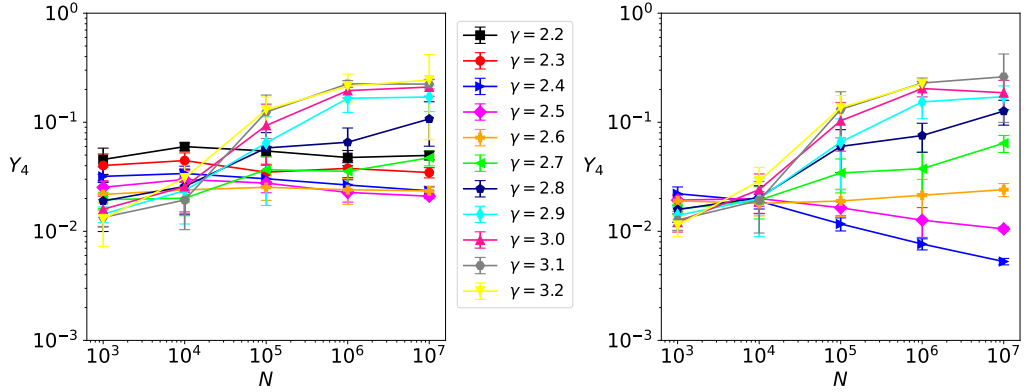


Figura 4.14: a) Comparação da razão de participação inversa  $Y_4(v^{(1)})$  em função do tamanho, calculada a partir da matriz de adjacências, para multigrafos (esquerda) redes simples (direita) com  $k_c = k^{1/(\gamma-1)}$ , as cores são referentes aos valores de  $\gamma$ , cores iguais significam valores de  $\gamma$  iguais.

Verifica-se que redes simples apresentam a mudança de regime de localização na vizinhança de  $\gamma = 5/2$ , ao passo que para os multigrafos essa mudança não é explicitamente observada para os tamanhos investigados.

Quanto a probabilidade de infecção, identificou-se que os vértices que dominam a dinâmica apresentam maior atividade nos multigrafos, como exibido na Figura 4.15.

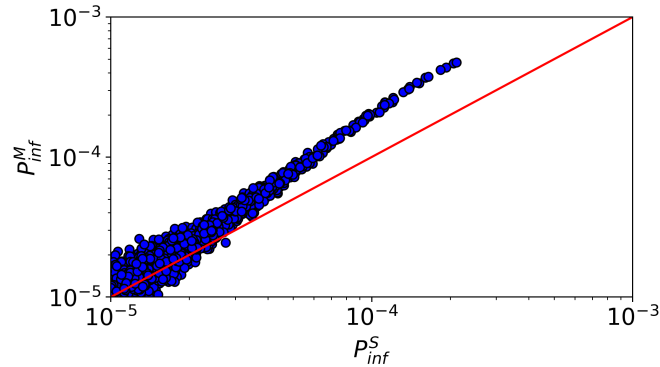


Figura 4.15: Probabilidade de infecção em multigrafos  $P_{inf}^M$  em função da probabilidade de infecção em redes simples  $P_{inf}^S$  (abscissa) no modelo SIS. As redes possuem  $N = 10^7$  vértices,  $P(k) \sim k^{-\gamma}$ ,  $k_c = N^{1/(\gamma-1)}$  e  $\gamma = 2,4$ . A reta em vermelho é referente a  $y = x$ . Os resultados foram obtidos para uma amostra de rede.

Resumidamente, a análise de tamanho finito revela que, no contexto de duas redes sem correlação de grau, múltiplas conexões não alteram a forma com que as grandezas quase estacionárias escalam para o modelo SIS com expoente  $\gamma = 3$  da distribuição de grau. Por outro lado, quando correlações são introduzidas nas redes simples no caso  $\gamma = 2,6$ , as grandezas QS escalam com expoentes ligeiramente diferentes, mas ainda muito próximos. No caso  $\gamma = 2,4$ , redes simples são mais correlacionadas em comparação com os

casos anteriores e, com isso, apreciou-se maior diferença nos expoentes das grandezas QS relativas a grafos simples e multigrafos.

### 4.3 Suscetível-Infetado-Removido-Suscetível

Os efeitos de imunização temporária em redes com múltiplas conexões são testados implementando-se o modelo SIRS. Nesse caso, remover os vértices da dinâmica durante um intervalo de tempo resulta na atenuação dos efeitos de múltiplas conexões e correlações de grau. Nesse sentido, a análise de tamanho finito mostra que não há diferença na forma com que o limiar epidêmico, densidade de infectados e suscetibilidade escalam para grafos simples e multigrafos. Quanto à localização, verifica-se que o comportamento subextensivo é observado com comportamento de escala similar, conforme se observa na Figura 4.16.

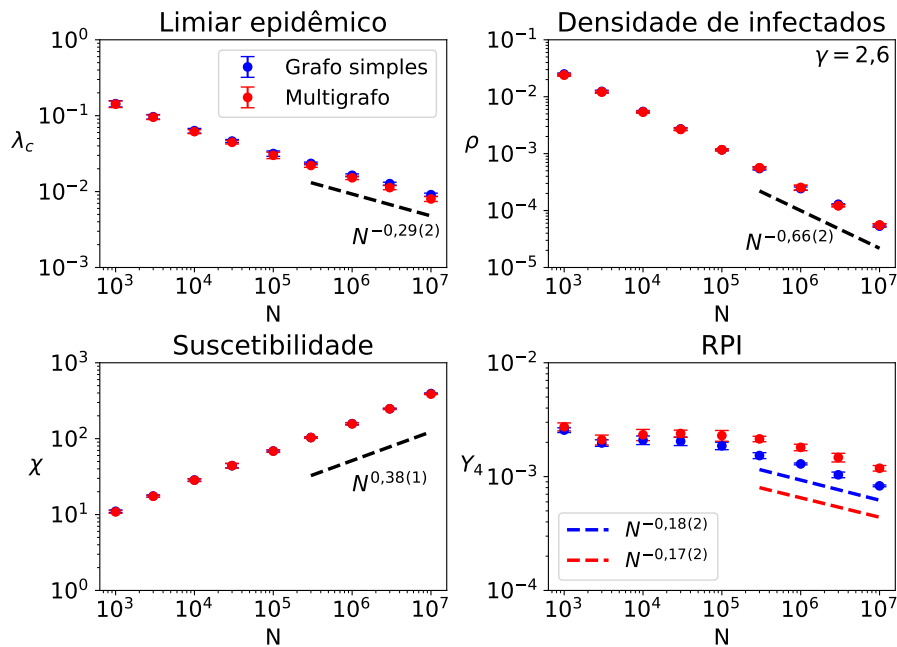


Figura 4.16: Análise de tamanho finito para grafos simples e multigrafos com distribuição de grau em lei de potência  $P(k) \sim k^{-\gamma}$ ,  $k_c = 3N^{1/(\gamma-1)}$  e  $\gamma = 2,6$ . As linhas tracejadas em preto são regressões em lei de potência.

No que diz respeito a teoria pQMF para o SIRS, observa-se que para redes simples a acurácia do limiar epidêmico é maior quando a rede é simples. No entanto, em ambos os casos o comportamento de escala das teorias de campo médio concorda com o comportamento de escala observado para o limiar obtido nas simulações. Para  $\gamma > 5/2$  espera-se localização em torno do maior hub [10]. Entretanto, para ambos grafos o valor assintótico não foi atingido nos tamanhos investigados. A Figura 4.17 exhibe as comparações entre resultados obtidos nas simulações e campo médio.

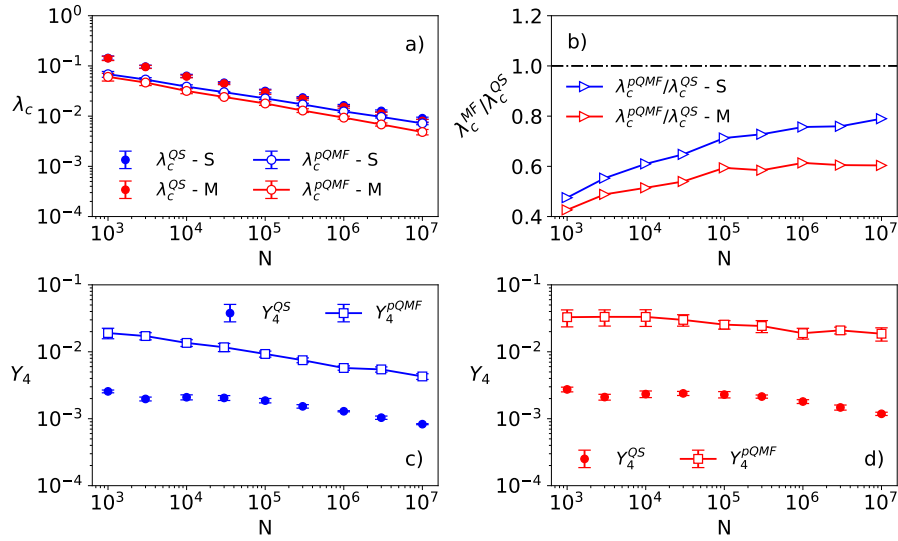


Figura 4.17: a) Comparação entre os limiares obtidos via simulação e a previsão da teoria de pares para grafos simples (S) e multigrafos (M). Em b) consta a comparação da razão  $\lambda_c^{MF}/\lambda_c^{QS}$ . A comparação entre a razão de participação inversa obtida via teoria e simulação é exibida para c) grafos simples e d) multigrafos. O expoente da distribuição de grau é  $\gamma = 2,6$ .

Multigrafos apresentam maior atividade epidêmica local para os vértices que dominam a dinâmica. Entretanto, verifica-se que essa atividade é atenuada em consequência da imunização temporária, conforme exhibe a Figura 4.18.

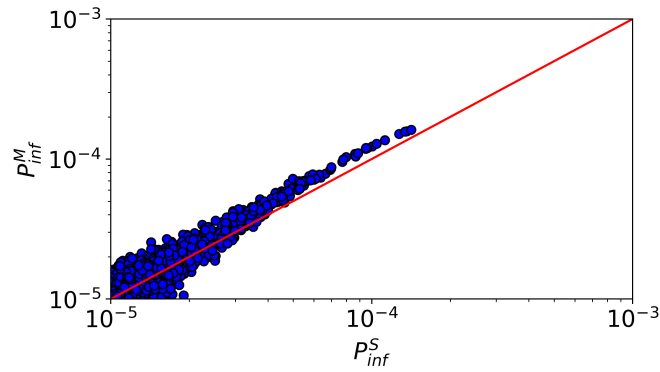


Figura 4.18: Probabilidade de infecção em multigrafos  $P_{\text{inf}}^M$  em função da probabilidade de infecção em redes simples  $P_{\text{inf}}^S$  (eixo x) no modelo SIRS. As redes possuem  $N = 10^7$  vértices,  $P(k) \sim k^{-\gamma}$ ,  $k_c = 3N^{1/(\gamma-1)}$  e  $\gamma = 2,6$ . A reta em vermelho é referente a  $y = x$ . Os resultados foram obtidos para uma amostra de rede.

# Capítulo V

## Conclusões e Perspectivas

A investigação da propagação epidêmica em multigrafos configura uma potencial alternativa para dirimir obstáculos computacionais que impedem a geração de redes grandes, heterogêneas e com  $k_c \sim k_N$  quando se permite apenas uma conexão entre pares. Somando-se a isso, a ausência de correlação de grau torna-se um atrativo para comparações com abordagens de campo médio configurando, portanto, um incentivo à implementação de multigrafos.

Os resultados mostraram que múltiplas conexões não afetam o processo de contato. As grandezas quase estacionárias escalam com o mesmo expoente para grafos simples e multigrafos. No entanto, a presença do corte natural na distribuição de grau introduziu localização não extensiva no modelo. As teorias pQMF e pHMF apresentam localização não extensiva, concordando com a localização observada nas simulações. Para redes neutras, demonstrou-se que a localização esperada é, de fato, não extensiva. Em relação ao limiar epidêmico, observou-se convergência assintótica entre as previsões da teoria pHMF e pQMF o limiar obtido via simulações.

No que diz respeito ao modelo SIRS, verificou-se que as múltiplas conexões não alteram o comportamento de escala das grandezas quase estacionárias. A localização observada nas simulações concorda com as previsões da teoria pQMF. Para grafos simples, observou-se maior acurácia na estimativa do limiar epidêmico pela teoria pQMF. Todavia, o comportamento de escala previsto para o multigrafo concorda com o comportamento de escala observado nas simulações também.

Tratando-se do modelo SIS, observou-se que para  $\gamma > 5/2$  não se aprecia diferença considerável nos expoentes da análise de tamanho finito para as grandezas quase estacionárias. Para  $\gamma = 3$ , em ambos tipos de grafo a teoria HMF se mostrou inadequada uma vez que superestima o limiar. As teorias QMF e pQMF concordam com a simulação no que diz respeito a previsão de um limiar epidêmico nulo no limite termodinâmico e também sugerem concordância no comportamento de escala para o limiar quando  $N \geq 10^6$  vértices. No tocante à localização, observa-se que apesar das flutuações decorrentes de efeitos de tamanho finito, o mesmo comportamento subextensivo é observado para as simulações em

ambos tipos de grafos.

Quando  $\gamma = 2,6$ , as teorias QMF e pQMF preveem um comportamento de escala que concorda com o comportamento do limiar obtido nas simulações estocásticas no modelo SIS. Em contraste, a teoria HMF superestima o limiar para grafos simples e mostra tendência a superestimar o limiar para multigrafos. Além disso, as simulações apresentam localização subextensiva com comportamento de escala similar para grafos simples

Para  $\gamma = 2,4$ , verifica-se que os expoentes mensurados a partir da análise de tamanho finito apresentam maior diferença entre si. A localização observada nas simulações se mostra subextensiva para grafos simples e aparenta subextensividade para multigrafos, escalando com expoente próximo de zero. A mudança no comportamento de escala da localização também é prevista pelas teorias QMF e pQMF. As teorias HMF, QMF e pQMF preveem limiar epidêmico concordante com as simulações para ambos grafos, apresentando maior acurácia para grafos simples.

Sob uma perspectiva geral, múltiplas conexões não alteram a física do processo epidêmico, a transição de fase preserva sua natureza contínua, as teorias de campo médio preservam a previsão dos comportamentos de escala para ambos tipos de grafos, embora com maior acurácia para grafos simples na maior parte dos casos, pois a localização interfere na concordância entre teoria e simulação [34]. Além disso, as simulações apresentam comportamento de escala semelhantes para  $\gamma > 5/2$  para todos os modelos. Embora para  $\gamma < 5/2$  o modelo SIS apresente maior localização em se tratando de multigrafos, as teorias de campo médio concordam com os resultados obtidos nas simulações. Por fim, mostrou-se que o uso de multigrafos é viável na investigação de processos epidêmicos nos modelos SIS, SIRS e PC com distribuição de grau em lei de potência.

Futuramente, pretende-se controlar a distribuição de múltiplas conexões em função do grau a fim de investigar se efeitos distintos na análise de tamanho finito podem ocorrer nos demais modelos.

# Apêndice A

## Teoria microscópica de pares para o modelo SIRS

Este apêndice é destinado a apresentar o tratamento analítico e aproximações consideradas no desenvolvimento da teoria pQMF para o modelo SIRS. Considerando a notação de pares apresentada na Seção 2.5, pode-se expressar a densidade de suscetíveis  $s$ , infectados  $\rho$  e removidos  $r$ , com  $s_i + \rho_i + r_i = 1$  por

$$\begin{aligned} s_i &= \omega_{ij} + \phi_{ij} + \bar{\chi}_{ij} \\ \rho_i &= \psi_{ij} + \bar{\theta}_{ij} + \bar{\phi}_{ij}. \\ r_i &= \chi_{ij} + v_{ij} + \theta_{ij} \end{aligned} \tag{A.1}$$

A densidade de removidos é governada por

$$\frac{dr_i}{dt} = -\alpha r_i + \mu \rho_i. \tag{A.2}$$

Por outro lado, a evolução da densidade de infectados é dada por

$$\frac{d\rho_i}{dt} = -\mu \rho_i + \lambda \sum_j A_{ij} \phi_{ij}. \tag{A.3}$$

A evolução temporal do par  $\phi_{ij}$  é dada por

$$\frac{d\phi_{ij}}{dt} = -(\mu + \lambda)\phi_{ij} + \alpha\theta_{ij} + \lambda \sum_{l \neq i} [0_i, 0_j, 1_l] A_{jl} - \lambda \sum_{l \neq j} [1_l, 0_i, 1_j] A_{il}. \tag{A.4}$$

De maneira semelhante, pode-se expressar a evolução temporal do par  $\bar{\phi}_{ij}$  como

$$\frac{d\bar{\phi}_{ij}}{dt} = -(\mu + \lambda)\bar{\phi}_{ij} + \alpha\bar{\theta}_{ij} + \lambda \sum_{l \neq j} [0_j, 0_i, 1_l] A_{il} - \lambda \sum_{l \neq i} [1_i, 0_j, 1_l] A_{jl}. \tag{A.5}$$

Adicionalmente, a dinâmica do par  $\theta_{ij}$  é regida por

$$\frac{d\theta_{ij}}{dt} = \mu\psi_{ij} - (\alpha + \mu)\theta_{ij} + \lambda \sum_{l \neq i} [2_i, 0_j, 1_l] A_{jl} \quad (\text{A.6})$$

e a do par  $\chi_{ij}$  é dada por

$$\frac{d\chi_{ij}}{dt} = \mu\bar{\phi}_{ij} + (v_{ij} - \chi_{ij})\alpha - \lambda \sum_{l \neq i} [2_i, 0_j, 1_l] A_{jl}. \quad (\text{A.7})$$

Executando-se uma aproximação de pares nas Eqs. A.4, A.5, A.6 e A.7 da forma [26]

$$[A_i, B_j, C_l] \approx \frac{[A_i, B_j][B_j, C_l]}{[B_j]}, \quad (\text{A.8})$$

obtêm-se as respectivas relações

$$\frac{d\phi_{ij}}{dt} = -(\mu + \lambda)\phi_{ij} + \alpha\theta_{ij} + \lambda \sum_{l \neq i} \frac{\omega_{ij}\phi_{jl}}{s_j} A_{jl} - \lambda \sum_{l \neq j} \frac{\phi_{ij}\phi_{il}}{s_i} A_{il}, \quad (\text{A.9})$$

$$\frac{d\bar{\phi}_{ij}}{dt} = -(\mu + \lambda)\bar{\phi}_{ij} + \alpha\bar{\theta}_{ij} + \lambda \sum_{l \neq j} \frac{\omega_{ji}\phi_{il}}{s_i} A_{il} - \lambda \sum_{l \neq i} \frac{\bar{\phi}_{ij}\phi_{jl}}{s_j} A_{jl}, \quad (\text{A.10})$$

$$\frac{d\theta_{ij}}{dt} = \mu\psi_{ij} - (\alpha + \mu)\theta_{ij} + \lambda \sum_{l \neq i} \frac{\chi_{ij}\phi_{jl}}{s_j} A_{jl}, \quad (\text{A.11})$$

e

$$\frac{d\chi_{ij}}{dt} = \mu\bar{\phi}_{ij} + (v_{ij} - \chi_{ij})\alpha - \lambda \sum_{l \neq i} \frac{\chi_{ij}\phi_{jl}}{s_j} A_{jl}. \quad (\text{A.12})$$

Tomando  $\omega_{ij} \approx 1$  e  $\rho_i \ll 1$  conseqüentemente, realiza-se uma linearização na equação A.9 e verifica-se que

$$\frac{d\phi_{ij}}{dt} = -(\mu + \lambda)\phi_{ij} + \alpha\theta_{ij} + \sum_l \frac{\omega_{ij}\phi_{jl}}{s_j} (A_{jl} - \delta_{il}) \quad (\text{A.13})$$

e, portanto

$$\frac{d\phi_{ij}}{dt} = -(\mu + \lambda)\phi_{ij} + \alpha\theta_{ij} + \lambda \sum_l \frac{(s_j - \chi_{ij} - \bar{\phi}_{ij})\phi_{jl}}{s_j} (A_{jl} - \delta_{il}). \quad (\text{A.14})$$

Resolvendo a Eq. A.3 para o estado estacionário, observa-se que

$$\mu\rho_i = \lambda \sum_j A_{ij}\phi_{ij}. \quad (\text{A.15})$$

Além disso, considerando-se o estado estacionário da Eq. A.11, verifica-se que

$$\lambda \sum_l \frac{\chi_{ij} \phi_{jl}}{s_j} (A_{jl} - \delta_{il}) = (\mu + \alpha) \theta_{ij} - \mu \psi_{ij}. \quad (\text{A.16})$$

Substituindo as Eqs. A.15 e A.16 na Eq. A.14, tem-se que:

$$-2\mu \theta_{ij} = \lambda \bar{\phi}_{ij} + 2\mu \phi_{ij} - 2\mu \rho_j + \lambda \phi_{ij}. \quad (\text{A.17})$$

A Eq. A.10 no estado estacionário é dada por

$$-(\mu + \lambda) \bar{\phi}_{ij} + \alpha \bar{\theta}_{ij} + \lambda \sum_l \frac{s_j - \bar{\phi}_{ij} - \theta_{ij}}{s_i} (A_{il} - \delta_{jl}) = 0. \quad (\text{A.18})$$

Com isso, obtém-se a relação para o par  $\bar{\theta}_{ij}$

$$\alpha \bar{\theta}_{ij} = (\mu + \lambda) \bar{\phi}_{ij} + \lambda \phi_{ij} - \mu \rho_i, \quad (\text{A.19})$$

onde a substituição de  $\bar{\theta}_{ij}$  leva à equação

$$\alpha(\rho_i - \psi_{ij} - \bar{\phi}_{ij}) = (\mu + \lambda) \bar{\phi}_{ij} + \lambda \phi_{ij} - \mu \rho_i. \quad (\text{A.20})$$

Substituindo  $\psi_{ij} = \rho_j - \theta_{ij} - \phi_{ij}$ , encontra-se a seguinte relação para o par  $\theta_{ij}$ :

$$\alpha \theta_{ij} = (\mu + \alpha + \lambda) \bar{\phi}_{ij} + (\lambda - \alpha) \phi_{ij} - (\mu + \alpha) \rho_i + \alpha \rho_j. \quad (\text{A.21})$$

Substituindo-se a Eq. A.21 na Eq. A.17, obtém-se que

$$\bar{\phi}_{ij} = \frac{2\mu(\alpha + \mu)\rho_i - \lambda(\alpha + 2\mu)\phi_{ij}}{\lambda\alpha + 2\mu(\mu + \lambda + \alpha)}. \quad (\text{A.22})$$

O par  $\omega_{ij}$ , considerando-se a aproximação de pares e  $d\omega_{ij}/dt = 0$ , é governado por:

$$\alpha(\chi_{ij} + \bar{\chi}_{ij}) - \lambda \sum_l \phi_{jl} (A_{jl} - \delta_{il}) - \lambda \sum_l \phi_{il} (A_{il} - \delta_{jl}) = 0. \quad (\text{A.23})$$

Com isso, pode-se reorganizar os termos de modo que

$$\alpha(\chi_{ij} + \bar{\chi}_{ij}) - \mu(\rho_j + \rho_i) + \lambda(\bar{\phi}_{ij} + \phi_{ij}) = 0. \quad (\text{A.24})$$

Das relações de fechamento, sabe-se que  $\bar{\chi}_{ij} = r_j - r_i - \bar{\theta}_{ij} + \theta_{ij} + \chi_{ij}$  e  $\theta_{ij} - \bar{\theta}_{ij} = \rho_j - \rho_i - \phi_{ij} + \bar{\phi}_{ij}$ . Além disso, o estado estacionário da Eq. A.12 é expressado por

$$2\alpha\chi_{ij} = \alpha r_i - 2(\mu + \alpha)\theta_{ij} + \mu\rho_j + \mu\bar{\phi}_{ij} - \mu\phi_{ij}. \quad (\text{A.25})$$

---

Assim, substituir as três expressões acima na Equação A.24 leva a seguinte expressão

$$-2(\mu + \alpha)\theta_{ij} + (\lambda - \mu - \alpha)\phi_{ij} + (\lambda + \mu + \alpha)\bar{\phi}_{ij} + (\mu + \alpha)(\rho_j - \rho_i) = 0. \quad (\text{A.26})$$

Dessa forma, ao substituir as Eqs. A.21 e A.22 na Equação A.26, encontra-se que

$$\phi_{ij} = \zeta\rho_j - \Theta\rho_i, \quad (\text{A.27})$$

onde

$$\zeta(\lambda, \mu, \alpha) = \frac{2\mu(\lambda + \alpha + \mu) + \lambda\alpha}{2\lambda(\mu + \alpha) + 2\mu(\mu + \lambda + \alpha)} \quad (\text{A.28})$$

e

$$\Theta(\lambda, \mu, \alpha) = \frac{\lambda(2\mu + \alpha)}{2\lambda(\mu + \alpha) + 2\mu(\mu + \lambda + \alpha)}. \quad (\text{A.29})$$

Portanto, assumindo uma aproximação quase estática com  $t \rightarrow \infty$  onde a Eq. A.27 é substituída na Equação A.3 revela a jacobiana  $L_{ij}$  definida por

$$L_{ij}^{SIRS} = -(\mu + \lambda k_i \Theta)\delta_{ij} + \lambda\zeta A_{ij}. \quad (\text{A.30})$$

# Referências Bibliográficas

- [1] A. Barrat, M. Barthélemy, and A. Vespignani, *Dynamical Processes on Complex Networks*. Cambridge University Press, 2008.
- [2] A.-L. Barabási and M. Pósfai, *Network science*. Cambridge: Cambridge University Press, 2016.
- [3] A. L. Hopkins, “Network pharmacology,” *Nature Biotechnology*, vol. 25, no. 10, pp. 1110–1111, 2007.
- [4] A. Arenas, A. Díaz-Guilera, J. Kurths, Y. Moreno, and C. Zhou, “Synchronization in complex networks,” *Physics Reports*, vol. 469, no. 3, pp. 93–153, 2008.
- [5] M. Catanzaro, M. Boguñá, and R. Pastor-Satorras, “Generation of uncorrelated random scale-free networks,” *Physical Review E*, vol. 71, p. 027103, 2 2005.
- [6] G. S. Costa, W. Cota, and S. C. Ferreira, “Outbreak diversity in epidemic waves propagating through distinct geographical scales,” *Physical Review Research*, vol. 2, p. 043306, 12 2020.
- [7] S. C. Ferreira, C. Castellano, and R. Pastor-Satorras, “Epidemic thresholds of the susceptible-infected-susceptible model on networks: A comparison of numerical and theoretical results,” *Physical Review E*, vol. 86, p. 041125, 10 2012.
- [8] S. C. Ferreira, R. S. Sander, and R. Pastor-Satorras, “Collective versus hub activation of epidemic phases on networks,” *Physical Review E*, vol. 93, p. 032314, 3 2016.
- [9] D. H. Silva, F. A. Rodrigues, and S. C. Ferreira, “High prevalence regimes in the pair-quenched mean-field theory for the susceptible-infected-susceptible model on networks,” *Physical Review E*, vol. 102, p. 012313, 7 2020.
- [10] J. C. M. Silva, D. H. Silva, F. A. Rodrigues, and S. C. Ferreira, “Comparison of theoretical approaches for epidemic processes with waning immunity in complex networks,” *Physical Review E*, vol. 106, p. 034317, 9 2022.
- [11] M. Molloy and B. Reed, “A critical point for random graphs with a given degree sequence,” *Random Structures & Algorithms*, vol. 6, no. 2, pp. 161–180, 1995.

- 
- [12] M. Boguñá, R. Pastor-Satorras, and A. Vespignani, “Cut-offs and finite size effects in scale-free networks,” *The European Physical Journal B - Condensed Matter*, vol. 38, pp. 205–209, 3 2004.
- [13] M. Boguñá and R. Pastor-Satorras, “Epidemic spreading in correlated complex networks,” *Phys. Rev. E*, vol. 66, p. 047104, Oct 2002.
- [14] A. S. Mata and S. C. Ferreira, “Pair quenched mean-field theory for the susceptible-infected-susceptible model on complex networks,” *Europhysics Letters*, vol. 103, p. 48003, sep 2013.
- [15] A. S. Mata, R. S. Ferreira, and S. C. Ferreira, “Heterogeneous pair-approximation for the contact process on complex networks,” *New Journal of Physics*, vol. 16, p. 053006, may 2014.
- [16] H. Kwak, C. Lee, H. Park, and S. Moon, “What is twitter, a social network or a news media?,” in *Proceedings of the 19th International Conference on World Wide Web, WWW '10*, (New York, NY, USA), p. 591–600, Association for Computing Machinery, 2010.
- [17] M. Morris and R. Rothenberg, “Hiv transmission network metastudy project: An archive of data from eight network studies, 1988–2001,” 2011. Accessed: 2025-03-17.
- [18] R. Pastor-Satorras, A. Vázquez, and A. Vespignani, “Dynamical and correlation properties of the internet,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 87, p. 258701, Nov 2001.
- [19] G. Joshi-Tope, M. Gillespie, I. Vastrik, P. D’Eustachio, E. Schmidt, B. de Bono, B. Jassal, G. Gopinath, G. Wu, L. Matthews, S. Lewis, E. Birney, and L. Stein, “Reactome: a knowledgebase of biological pathways,” *Nucleic Acids Research*, vol. 33, pp. D428–D432, 01 2005.
- [20] D. J. Watts and S. H. Strogatz, “Collective dynamics of ‘small-world’ networks,” *Nature*, vol. 393, pp. 440–442, jun 1998.
- [21] B. Karrer, M. E. J. Newman, and L. Zdeborová, “Percolation on sparse networks,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 113, p. 208702, Nov 2014.
- [22] R. Pastor-Satorras, C. Castellano, P. V. Mieghem, and A. Vespignani, “Epidemic processes in complex networks,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 87, pp. 925–979, 8 2015.
- [23] M. J. Keeling and P. Rohani, *Modeling Infectious Diseases in Humans and Animals*. Princeton University Press, Dec. 2008.

- 
- [24] T. E. Harris, “Contact Interactions on a Lattice,” *The Annals of Probability*, vol. 2, no. 6, pp. 969 – 988, 1974.
- [25] H. B. Callen, *Thermodynamics and an introduction to thermostatistics; 2nd ed.* New York, NY: Wiley, 1985.
- [26] M. Henkel, H. Hinrichsen, and S. Lübeck, *Non-Equilibrium Phase Transitions: Volume 1: Absorbing Phase Transitions*. Theoretical and Mathematical Physics, Springer Netherlands, 2008.
- [27] R. S. Sander, G. S. Costa, and S. C. Ferreira, “Sampling methods for the quasistationary regime of epidemic processes on regular and complex networks,” *Physical Review E*, vol. 94, p. 042308, Oct. 2016.
- [28] J. Marro and R. Dickman, “Nonequilibrium phase transitions in lattice models,” *Nonequilibrium Phase Transitions in Lattice Models*, 2005.
- [29] A. S. Mata, “An overview of epidemic models with phase transitions to absorbing states running on top of complex networks,” *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, vol. 31, Jan. 2021.
- [30] M. E. J. Newman, *Networks: an introduction*. Oxford; New York: Oxford University Press, 2010.
- [31] R. Pastor-Satorras and C. Castellano, “Distinct types of eigenvector localization in networks,” *Scientific Reports*, vol. 6, Jan. 2016.
- [32] F. Chung, L. Lu, and V. Vu, “Spectra of random graphs with given expected degrees,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 100, no. 11, pp. 6313–6318, 2003.
- [33] A. V. Goltsev, S. N. Dorogovtsev, J. G. Oliveira, and J. F. F. Mendes, “Localization and spreading of diseases in complex networks,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 109, p. 128702, Sep 2012.
- [34] D. H. Silva and S. C. Ferreira, “Dissecting localization phenomena of dynamical processes on networks,” *Journal of Physics: Complexity*, vol. 2, p. 025011, mar 2021.
- [35] W. Cota and S. C. Ferreira, “Optimized gillespie algorithms for the simulation of markovian epidemic processes on large and heterogeneous networks,” *Computer Physics Communications*, vol. 219, pp. 303–312, Oct. 2017.
- [36] T. Tomé and M. J. d. Oliveira, *Dinâmica estocástica e irreversibilidade*. EDUSP, 2014.

- [37] D. T. Gillespie, “A general method for numerically simulating the stochastic time evolution of coupled chemical reactions,” *Journal of Computational Physics*, vol. 22, no. 4, pp. 403–434, 1976.
- [38] D. H. Silva, S. C. Ferreira, W. Cota, R. Pastor-Satorras, and C. Castellano, “Spectral properties and the accuracy of mean-field approaches for epidemics on correlated power-law networks,” *Phys. Rev. Res.*, vol. 1, p. 033024, Oct 2019.