

RONAN SILVA FERREIRA

PROCESSOS DINÂMICOS COM ESTADOS ABSORVENTES
EM REDES COMPLEXAS

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

VIÇOSA
MINAS GERAIS - BRASIL
2013

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

T

F383p
2013

Ferreira, Ronan Silva, 1980-

Processos dinâmicos com estados absorventes em redes complexas / Ronan Silva Ferreira. – Viçosa, MG, 2013. xiv, 94f. : il. (algumas color.) ; 29cm.

Inclui anexo.

Orientador: Sílvio da Costa Ferreira Júnior

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Viçosa.

Referências bibliográficas: f. 89-94

1. Física estatística. 2. Transformações de fase (Física estatística). 3. Fenômenos críticos. I. Universidade Federal de Viçosa. Departamento de Física. Programa de Pós-Graduação em Física. II. Título.

CDD 22. ed. 530.13

RONAN SILVA FERREIRA

PROCESSOS DINÂMICOS COM ESTADOS ABSORVENTES
EM REDES COMPLEXAS

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

APROVADA: 01 de março de 2013.

Marcelo Lobato Martins
(Co-orientador)

Márcio Santos Rocha

Suani Tavares Rubim de Pinho

Tânia Tomé Martins de Castro

Silvio da Costa Ferreira Junior
(Orientador)

Para minha família.

Agradecimentos

Meus sinceros agradecimentos ao meu orientador, Prof. Silvio da Costa Ferreira, pela oportunidade e a atenção dada à minha formação acadêmica e em pesquisa científica. Agradeço também aos pesquisadores: Prof. Marcelo L. Martins, Prof. Márcio S. Rocha, M.Sc. Angélica S. da Mata, M.Sc. Renan S. Sander, M.Sc. Priscila C. A. da Silva, M.Sc. Davidson R. Viana, Prof. Américo T. Bernardes, Prof. Romuel F. Machado, Dr. Nelson Yokomizo, Prof. Claudio Castellano, Prof. Romualdo Pastor-Satorras, Prof.^a Suani T. R. de Pinho e Prof.^a Tânia Tomé.

Por todo suporte dado ao desenvolvimento dessa tese e à minha formação acadêmica, gostaria de agradecer à Universidade Federal de Viçosa e a seu departamento de física, à Fapemig e ao CNPq.

Também gostaria de agradecer aos amigos de pós graduação do departamento de física da Universidade Federal de Viçosa e às famílias Silva Ferreira, Alves de Brito Bueno, Monteiro da Luz e a todos meus amigos.

Sumário

Lista de publicações	vii
Lista de abreviações	viii
Lista de Figuras	ix
Lista de Tabelas	xii
Resumo	xiii
Abstract	xiv
3 Introdução	1
4 Dos grafos às redes complexas	6
4.1 Representação de um grafo usando matrizes	7
4.2 Quantidades básicas em grafos	8
4.3 Modelo Erdős–Rényi	10
4.4 Redes complexas	11
4.4.1 Modelo Watts-Strogatz	12
4.4.2 Modelo Barabási-Albert	16
4.5 Efeitos de tamanho finito	18
4.5.1 Modelo de configurações	19
4.5.2 Modelo de configurações não correlacionadas	19

5	Processos dinâmicos com estados absorventes	21
5.1	O processo de contato	21
5.1.1	Campo médio heterogêneo	22
5.1.2	Escala de tamanho finito	23
5.2	O estado quase estacionário	26
6	Análises quase estacionárias do processo de contato em redes <i>annealed</i>	29
6.1	Introdução	29
6.2	Análise da equação mestra para o processo de contato em redes <i>annealed</i> . . .	30
6.3	Aproximação analítica na criticalidade	34
6.4	Propriedades de escala na criticalidade	36
6.5	Análise quase estacionária na fase super crítica	40
6.6	Conclusões sobre o processo de contato em redes <i>annealed</i>	43
7	Simulações quase estacionárias do processo de contato em redes <i>quenched</i>	44
7.1	Introdução	45
7.2	Determinação do ponto crítico	46
7.3	Determinação dos expoentes críticos	50
7.4	Impactos do corte natural na distribuição de conectividades	53
7.5	Conclusões sobre o processo de contato em redes <i>quenched</i>	55
8	Redes <i>quenched</i> sem escala revisitadas: ajuste fino para o processo de contato	57
8.1	Introdução	57
8.2	Correlações entre medidas estruturais de redes e quantidades QE	58
8.3	Validade das hipóteses da teoria de campo médio heterogêneo	62
8.4	Aproximação de pares heterogênea	65
8.5	Conclusões preliminares	69

9	Comportamento crítico do processo de contato em redes de mundo pequeno	70
9.1	Introdução	70
9.2	Determinação do ponto crítico para diferentes padrões de agregação	71
9.3	Determinação dos expoentes críticos	74
9.4	Conclusões	78
10	Processos dinâmicos em redes espaciais: uma perspectiva imediata	80
11	Conclusões finais	85
	Anexo A – Cortes na distribuição de graus	86
A.1	Corte natural	86
A.2	Corte estrutural	87
	Referências Bibliográficas	89

Lista de publicações

Os resultados desta tese veem sendo publicados e apresentados em congressos:

- Quasistationary analysis of the contact process on annealed scale-free networks
Silvio C Ferreira, Ronan S Ferreira, Romualdo Pastor-Satorras
Phys. Rev. E 83, 066113 (2011)
(Capítulo 6)
- Quasistationary simulations of the contact process on quenched networks
Silvio C. Ferreira, Ronan S. Ferreira, Claudio Castellano, and
Romualdo Pastor-Satorras
Phys. Rev. E 84, 066102 (2011)
(Capítulo 7)
- Quenched scale-free networks revisited: fine-tuning for the contact process
Ronan S. Ferreira and Silvio C. Ferreira
(em preparação)
(Capítulo 8)
- Critical behavior of the contact process on small-world networks
Ronan S. Ferreira and Silvio C. Ferreira
(em preparação)
(Capítulo 9)

Lista de abreviações

BA: Barabási-Albert

CM: modelo de configurações (*configuration model*)

DMF: excitação de gotículas (*droplet mean-field*)

EM: equação mestra

ER: Erdős-Rény

ETF: escala para tamanho finito

HMF: campo médio heterogêneo (*heterogeneous mean-field*)

WS: Watts-Strogatz

OCM: modelo de configurações ordenadas (*ordered configuration*)

PC: processo de contato

PL: lei de potência (*power law*)

QE: quase estacionário

RRN: rede regular aleatória (*random regular network*)

UCM: modelo de configurações não correlacionadas (*uncorrelated configuration model*)

Lista de Figuras

4.1	O desafio de Koenigsberg	6
4.2	Grafos simples	7
4.3	Grafo não direcionado	8
4.4	Quantidades básicas dos grafos	9
4.5	Correlação entre graus	10
4.6	Modelo Erdős-Rényi	10
4.7	Distribuição de conectividade - modelo ER	11
4.8	Modelo Watts-Strogatz	13
4.9	Interpolação entre comportamentos regular e aleatório - modelo WS	14
4.10	Distribuição de conectividade - modelo WS	15
4.11	Rede não correlacionada - modelo WS	15
4.12	Modelo Barabási-Albert	16
4.13	Distribuição de conectividade - modelo BA	17
5.1	Ilustração para o método quase-estacionário	27
6.1	Distribuição de probabilidades QE para o PC em redes <i>annealed</i>	33
6.2	Comparação entre resultados de simulações do PC em redes <i>annealed</i> e numéricos via EM	33
6.3	Comparação dos comportamentos assintóticos em simulações do PC e EM	35
6.4	Simulações e soluções numéricas para a densidade QE de partículas para o PC em rede <i>annealed</i> com corte estrutural	38
6.5	Tempo característico na transição do PC em redes sem escala do tipo <i>annealed</i> com corte natural para soluções numéricas da EM e simulações QE	38

6.6	Regressões em leis de potência para as densidades críticas QE para o PC em redes sem escala do tipo <i>annealed</i> com corte estrutural	39
6.7	Densidades supercríticas como funções do tamanho de redes com corte estrutural	40
6.8	Colapsos das soluções numéricas da EM usando a função de escala anômala . .	42
6.9	Verificação da ETF anômala com a iteração da EM na fase supercrítica do PC em redes <i>annealed</i> com corte estrutural	42
7.1	Razão entre momentos como função da distância ao ponto crítico para o PC em redes <i>annealed</i> com corte estrutural	48
7.2	Razão de segunda ordem entre momentos para o PC em redes UCM	48
7.3	Razão de terceira ordem entre momentos para o PC em redes UCM	50
7.4	Densidade de partículas em função do tamanho N de redes UCM e do termo gN dado pela hipótese de escala anômala	51
7.5	Tempo característico em função do tamanho N de redes UCM e do termo N/g dado pela hipótese de escala anômala	52
7.6	Expoentes críticos para o PC em redes UCM comparados com as previsões das aproximações HMF e DMF	52
7.7	Quantidades críticas em redes OCM com corte natural	54
7.8	Reescalas para tamanho finito de quantidades QE para o PC em redes OCM . .	54
8.1	Comportamento das estimativas de erro para quantidades QE do PC em redes UCM	59
8.2	Correlação entre propriedades estruturais e dinâmicas em redes UCM	60
8.3	Correlação entre a razão de momentos e a menor distância entre dois vértices .	61
8.4	Ponto crítico da transição do PC para tempos de média diferentes	63
8.5	A quantidade Φ_{QE} em função do grau k para redes UCM com $\gamma = 2,25$	64
8.6	Validação do pressuposto HMF de equivalência estatística para vértices em um mesmo compartimento k para o PC em redes sem escala	64
8.7	Comparação entre a aproximação de pares heterogênea, homogênea e simulações QE em redes UCM	68
9.1	Evolução do PC em redes WS	72

9.2	Critério de interseção de curvas para o PC em redes WS com $p = 0.01$ e $p = 0.10$	73
9.3	Critério de interseção de curvas para o PC em redes WS com $p = 1.00$ e RRN	74
9.4	Comportamento de escala para quantidades QE do PC em redes WS	76
9.5	Quantidades críticas QE do PC em redes WS e RRN	77
9.6	Densidade QE $\bar{\rho}$ de partículas em função de $\lambda - \lambda_c$ em RRN e redes WS.	77
10.1	Modelo de rede espacial sem escala	81
10.2	Exemplo de uma rede espacial com $\gamma = 2,50$	82
10.3	Exemplo de uma rede espacial com $\gamma = 3,00$	82
10.4	Exemplo de uma rede espacial com $\gamma = 5,00$	83
10.5	Distribuição de conectividade em redes espaciais sem escala	83
A.1	Construção geométrica do corte estrutural k_s	88

Lista de Tabelas

7.1	Pontos críticos e razões críticas entre momentos par a o PC em redes UCM . . .	49
7.2	Expoentes da HMF para o PC em redes UCM	51
9.1	Pontos críticos e razões críticas para o PC em redes WS e RRN	74
9.2	Expoentes críticos para o PC em redes WS e RRN	78

Resumo

FERREIRA, Ronan Silva, D.Sc., Universidade Federal de Viçosa, Março de 2013. **Processos dinâmicos com estados absorventes em redes complexas.** Orientador: Silvio da Costa Ferreira Junior. Co-orientadores: Ismael Lima Menezes Sobrinho e Marcelo Lobato Martins.

A teoria de redes complexas vem se consagrando no estudo de fenômenos que emergem da interação entre os constituintes de um sistema. Particularmente, os processos dinâmicos com estados absorventes (que cessam a evolução) tem sido alvo de controvérsias sobre as abordagens matemáticas para sua descrição. O protótipo para o estudo dessa classe é o *processo de contato*: o modelo mais simples com essas propriedades, que apesar de bem entendido em redes regulares, vem desafiando nossa compreensão para sua descrição em redes complexas. Para estudarmos a dinâmica do processo de contato nessas redes, combinamos o método quase estacionário com uma abordagem via equação mestra que desenvolvemos. Isso nos permitiu entender as correções necessárias para estudá-lo em sistemas com tamanhos finitos, que são alvo de uma longa discussão científica sobre a validade de teorias de campo médio em redes complexas. Nossos estudos mostraram que a teoria de campo médio heterogêneo descreve o processo de contato em redes complexas, ao contrário do que havia sido relatado na literatura. Nós identificamos que essa teoria fornece os expoentes críticos corretos, mas não é capaz de explicar correções para tamanhos finitos em redes fortemente heterogêneas. Para avançarmos nessa discussão, estudamos o papel das propriedades estruturais dessas redes sobre quantidades quase estacionárias do processo de contato e expando a teoria de campo médio heterogêneo a testes numéricos. Além disso, desenvolvemos uma aproximação de pares *heterogênea* inédita, capaz de explicar alguns pontos em que a teoria de campo médio heterogênea é imprecisa. Por fim, investigamos o processo de contato em diversas topologias de redes explorando características particularidades da classe de redes sem escala em que a distribuição de conectividade entre seus vértices segue uma lei de potência e a classe de redes de mundo pequeno, que apresenta uma distribuição com cauda exponencial. Dessa forma, a dinâmica do processo de contato foi investigada em substratos com características diversas e os resultados derivados nos ajudaram no desafio de compreender melhor sua dinâmica não trivial em redes complexas.

Abstract

FERREIRA, Ronan Silva, D.Sc., Universidade Federal de Viçosa, March, 2013. **Dynamical processes with absorbing states on complex networks.** Advisor: Silvio da Costa Ferreira Junior. Co-advisors: Ismael Lima Menezes Sobrinho and Marcelo Lobato Martins.

The complex network theory has been outstanding in the last decades in the study of emergent phenomena from the interaction among agents of a system. Particularly, dynamical processes with absorbing states (that cease their evolution) has been the subject of controversies about mathematical approaches to its description. The prototype for the study of this class is the *contact process*: the simplest model with these properties, that even though well understood on regular networks, it is challenging our understanding for its description on complex networks. To study the dynamics of the contact process on such networks, we combined the quasistationary method with a master equation approach that we developed. It allowed us to understand the necessary corrections for study it in finite systems, that are the subject of a long scientific debate about the validity of mean-field theories on complex networks. Our studies showed that the heterogeneous mean-field theory describes the contact process on complex networks, in contrast to what was reported in the literature. We verified that this theory provides correct critical exponents, but can not explain corrections for finite sizes on strongly heterogeneous networks. For advance in this debate, we studied the role of structural properties of networks on quasistationary quantities of the contact process and submitted this theory to numerical tests. Furthermore, we have developed a *heterogeneous* pairs approximation able to explain some points where the heterogeneous mean-field is inaccurate. Finally, we investigated the contact process in several network topologies exploiting particular features of the class of scale-free networks, in which the connectivity distribution among vertices follows a power-law and the class of small-world networks, which has a distribution with an exponential tail. Thus, the dynamics of the contact process was investigated on substrates with different characteristics and the results derived have helped us in the challenge to a better understand of its non-trivial dynamics on complex networks.

3 *Introdução*

Em 2009, foi noticiada a rápida evolução da epidemia do vírus H1N1, que se alastrou por todo o planeta, passando para o caráter de uma pandemia. Esse surto ganhou um papel especial na história das epidemias: foi a primeira pandemia, cujo curso e evolução temporal foram previstos meses antes de atingir o seu pico de espalhamento [1]. O impacto dessas previsões pode ser observado no programa “*Anatomy of a Pandemic*” exibido em Agosto de 2009 pelo canal *Discovery*. Essas previsões foram possíveis graças a compreensão dos padrões de viagens de pessoas pela rede internacional de aeroportos, que poderiam levar o vírus para diferentes partes do planeta em uma velocidade assustadora. Nesse sentido, a teoria de redes oferece um novo nível de previsibilidade de fenômenos epidêmicos [2].

Uma rede é um conjunto de vértices (ou nós) interligados por arestas de acordo com alguma distribuição de pesos estatísticos em que associamos interpretações físicas para seus elementos. Em um processo epidêmico, por exemplo, podemos interpretar os vértices como sendo os indivíduos de uma população e suas interações representadas pelas arestas. Na natureza, vários sistemas complexos apresentam-se na forma de redes em que seus agentes estão conectados segundo uma arquitetura que foge à descrição regular ou homogênea [3–6]. A heterogeneidade no padrão de conexão entre vértices possui princípios de organização que são comuns a diversos sistemas. A compreensão desses princípios, através da teoria de redes complexas, vem trazendo implicações importantes em vários setores desde o desenvolvimento de novos medicamentos [7], a partir do mapeamento de redes em biologia celular [8, 9], o controle epidemiológico [10–14], mesmo em âmbito global através de redes de mobilidade humana [1, 15–18], até a segurança em redes de computadores [10, 19, 20].

O modelo precursor de redes foi proposto na década de 1950 por Erdős e Rényi [21, 22]. Esse modelo assume que cada par de vértices em uma rede é aleatoriamente conectado com uma mesma probabilidade. Isso leva a uma distribuição de conectividade do tipo *Poisson* [23] em que cada vértice possui aproximadamente o mesmo número de conexões. Já no fim da década de 1990, em um estudo pioneiro realizado por Barabási e Albert [24], foi mostrado que diversos sistemas não são bem descritos por uma distribuição de conectividade do tipo *Poisson*,

mas por uma distribuição em lei de potência; uma consequência da adição contínua de novos vértices à rede, que por sua vez, se conectam, preferencialmente, a outros vértices já muito conectados [25–27]. É o que acontece, por exemplo, na *WWW* onde novas páginas surgem diariamente e se conectam aos grandes *sites* (como *Google* ou *Yahoo!*) a fim de ganharem uma visibilidade maior [28, 29].

Uma característica peculiar encontrada em redes complexas é a chamada “mundo pequeno” [30, 31]. Um exemplo desta propriedade pode ser encontrado nas redes sociais: em média, duas pessoas quaisquer estão separadas por um número muito pequeno de conhecidos [32, 33]. Esse fenômeno é também chamado popularmente de “seis graus de separação” [31]. Em outras palavras, essa propriedade nos diz que há um baixo grau de separação entre diferentes regiões em uma rede. Ela foi modelada de forma sistemática por Watts e Strogatz [30] no final da década de 1990. Desde redes em biologia celular, como por exemplo, redes de regulação gênica e interação proteica [34], a rede internacional de aeroportos e muitos outros exemplos [26, 35, 36] apresentam a propriedade de *mundo pequeno*. Em termos matemáticos essa propriedade caracteriza-se por um crescimento muito lento do valor médio da menor distância $\langle l \rangle$ entre vértices à medida em que o tamanho N da rede aumenta: tipicamente, $\langle l \rangle \sim \ln(N)$ ou mais lento. Para uma comparação, em uma rede regular onde todos os vértices possuem um mesmo número k de ligações $\langle l \rangle \sim N^{1/d}$ em que d caracteriza sua dimensão. Mesmo para um valor alto de d , o crescimento de $\langle l \rangle$ na relação logarítmica é mais lento. Por essa razão, as redes complexas possuem um caráter que se assemelha a um objeto com dimensionalidade infinita.

Em diversas redes reais, tais como a Internet, redes de colaborações científicas, redes metabólicas dentre outras, a distribuição de conectividade é encontrada proporcional a $1/k^\gamma$ [4]. Essa distribuição assume a forma funcional bem definida $P(k) = Ak^{-\gamma}$, em que o valor de γ (o expoente de conectividade) é, frequentemente, encontrado na faixa entre 2 e 3 [25, 36, 37]. Para essa faixa de valores, o valor médio do número de conexões $\langle k \rangle$ é bem definido, porém, a largura das flutuações em torno desse valor, relacionada ao segundo momento $\langle k^2 \rangle$ da distribuição de conectividade, diverge com o tamanho da rede deixando-a sem uma escala característica para o número médio de conexões. Essas redes apresentam uma grande heterogeneidade no número de ligações de seus elementos e são chamadas de redes *sem escala* [24, 26, 38, 39].

Particularmente, desde a última década [36, 40–43] a descrição de processos dinâmicos em redes complexas [26, 44, 45] tem atraído a atenção da comunidade científica. O caráter interdisciplinar [8, 9, 46] da modelagem de processos dinâmicos em redes desse tipo tem provocado uma avalanche de pesquisas permitindo a pesquisadores compreenderem a teoria de redes complexas como um paradigma comum a diferentes áreas [41]. Além disso, devido ao

grande volume de dados de que dispomos atualmente (desde bancos de dados de sequências de RNAs [47] a redes sociais [48]) e aliado ao desempenho computacional dos computadores atuais, tornou-se possível a investigação de sistemas complexos em larga escala. Com o mapeamento desses sistemas em redes, diversos processos vem sendo estudados por meio de modelos com regras dinâmicas microscópicas (levando em conta apenas cada vértice e seus vizinhos mais próximos) que com sua evolução temporal e interações entre muitos agentes do sistema, levam a padrões de auto-organização e propriedades emergentes interessantes, por vezes inesperadas, oferecendo desafios que vem alterando abordagens tanto matemáticas quanto conceituais desses processos [10, 35, 36].

Essas propriedades, que emergem das interações entre os vértices de uma rede, estão muitas vezes associadas a pontos críticos de transições de fase: mudanças abruptas de algumas propriedades físicas de um sistema. A abordagem analítica para o estudo de processos dinâmicos em redes complexas é frequentemente feita com a aplicação da teoria de campo médio heterogêneo [35] que se baseia em dois pressupostos: (i) de que todos os vértices com mesmo grau k compartilham das mesmas propriedades dinâmicas; e (ii) que flutuações dinâmicas não são relevantes, sendo possível conduzir estudos teóricos dentro de uma abordagem determinística. Apesar da simplicidade de aproximações de campo médio, elas descrevem, qualitativamente, a maioria das transições de fase de processos dinâmicos em sistemas regulares [49]. Além disso, cada sistema possui uma dimensionalidade crítica a partir da qual a descrição de transição de fases torna-se quantitativamente exata. Esta descrição quantitativa é feita a partir do cálculo de expoentes críticos que governam leis de invariância sobre escala no ponto crítico de transição. Esses expoentes podem assumir um mesmo valor na descrição de processos distintos que poderão ser compreendidos como de uma mesma *classe de universalidade* [50, 51]: uma espécie de “tabela periódica” dos fenômenos críticos agrupando modelos que compartilham um mesmo conjunto de expoentes [52, 53].

Como as redes complexas possuem um caráter de dimensionalidade infinita, a expectativa é de que aproximações de campo médio sejam genuinamente corretas nesse tipo de substrato. Entretanto, existem longas discussões científicas [54–57], entre elas o alvo de nossos estudos, sobre a validade de aproximações de campo médio em redes complexas para a descrição de processos dinâmicos, em particular aqueles com *estados absorventes*. Esses estados quando atingidos, proíbem a dinâmica do processo de transitar para qualquer outro. Essa classe de processos pode ser estudada pelo seu protótipo: o *processo de contato* (PC) [49, 58, 59]. Esse é um modelo de partículas interagentes [60] em que podem ocorrer dois tipos de eventos: a aniquilação ou a criação de partículas. Seu estado absorvente é marcado pela completa ausência de partículas no sistema, uma vez que é necessário ao menos uma delas para que uma nova

partícula seja criada. O PC apresenta um ponto crítico de transição da fase *ativa*, com a criação e aniquilação de partículas, para a fase absorvente.

A descrição dessa transição do PC por teorias de campo médio, no limite de um sistema infinito, revela um estado estacionário ativo. Do ponto de vista numérico essa é uma previsão delicada: em sistemas finitos (como os usados em simulações computacionais) o verdadeiro estado estacionário é o estado absorvente, porque o número de configurações disponíveis para a dinâmica do processo também é finito; eventualmente, a configuração absorvente será atingida. Por essa razão, é comum o emprego de uma teoria de *escala para tamanho finito* (ETF) [49, 50, 53] para tratar dessa finitude. Com isso, é possível verificar as previsões analíticas de campo médio por meio de testes numéricos. Por hipótese, a teoria de ETF assume que na transição, grandezas físicas intensivas dependem fortemente do tamanho do sistema. Essa dependência é esperada ter uma forma funcional do tipo lei de potência, governada por expoentes críticos universais. Os valores desses expoentes obtidos numericamente podem corroborar a validade de uma teoria de campo médio.

Surpreendentemente, em 2006, foi relatado na referência [54] uma aparente discordância acerca dos expoentes críticos entre o comportamento do PC em redes sem escala obtido por simulações numéricas e as previsões da teoria de campo médio heterogêneo, impulsionando novos estudos sobre o comportamento crítico do PC em redes desse tipo. Dentre eles, contribuimos com uma abordagem via equação mestra obtida a partir do mapeamento do PC em um processo de um passo proposto na referência [61]. Obtivemos a solução numérica dessa equação mestra no estado QE e confrontamos com simulações numéricas do PC em redes do tipo *annealed* (um modelo teórico em que as conexões entre vértices são refeitas a uma taxa muito mais alta do que as envolvidas na dinâmica de um processo), onde valem os pressupostos da teoria de campo médio heterogêneo. Com isso, investigamos os detalhes da ETF para o PC em redes sem escala previstos pela abordagem via equação mestra. Todos esses detalhes estão descritos no capítulo 6, onde também relatamos que os métodos comumente aplicados para a determinação de pontos críticos em redes regulares levam a medições equivocados em redes sem escala devido a particularidades encontradas em sua ETF.

Como consequência, a imprecisão na determinação de pontos críticos pode colocar em risco toda a análise da transição de fase. Nesse sentido, propusemos um novo critério (novo no sentido de sua aplicação em redes complexas) que se mostrou adequado para esse fim ao ser submetido a testes em redes do tipo *annealed* em que o ponto crítico é conhecido, exatamente, pela teoria de campo médio. Isso nos permitiu avançar para a análise do PC em um caso mais realístico de redes do tipo *quenched* (em que a vizinhança de um vértice permanece inalterada

durante a evolução) e com base em estudos anteriores [42,56,61,62], mostramos que o conjunto de expoentes críticos do PC é corretamente descrito pela teoria de campo médio heterogêneo. Os detalhes dessa investigação estão apresentados no capítulo 7, onde também apresentamos o modelo OCM que propusemos, o qual tornou possível o estudo dessas redes em larga escala.

Além disso, o método QE nos permitiu uma análise mais detalhada sobre a transição do PC em redes *quenched* com um padrão de conectividade fortemente heterogêneo à medida que o expoente de grau $\gamma \rightarrow 2$. Para essa faixa de γ ainda existe um ponto em aberto: existe uma discordância entre testes numéricos e as previsões fornecidas pela ETF do PC, a qual recebe um fator de correção provindo da teoria HMF. No capítulo 8 são discutidas as possíveis razões que levam a essa discrepância. Dentre elas, uma suposta violação das hipóteses da teoria HMF e o fato dessa teoria tratar apenas da interação entre um vértice e seus primeiros vizinhos. Com o objetivo de obter um novo fator de correção para a ETF, propomos nesse capítulo uma aproximação de pares heterogênea para levar em conta as interações externas à vizinhança imediata de um vértice, que até então ainda não havia sido desenvolvida. Além disso, nesse capítulo estão discutidas as investigações sobre a influência exercida por propriedades estruturais de uma rede sobre as quantidades QE do PC.

Além dos estudos do PC em redes sem escala, investigamos sua dinâmica também em redes complexas do tipo *mundo pequeno*. Para essas redes é possível ajustar o padrão de agregação entre seus vértices, interpolando entre uma estrutura regular e uma aleatória. Isso é interessante, uma vez que sistemas reais, em geral, apresentam uma alta agregação entre seus agentes [37]. A discussão do papel que a agregação de vértices desempenha sobre a transição do PC e uma comparação adicional com sua dinâmica em redes aleatórias homogêneas é feita no capítulo 9.

Há ainda uma outra investigação sobre a influência da ação combinada entre heterogeneidade e geografia sobre processos dinâmicos com estados absorventes, que deixaremos como uma perspectiva de trabalho. De fato, vários sistemas complexos possuem uma distribuição de conectividade sem escala e estão dispostos sobre um espaço com métrica euclidiana, que para fins práticos possui duas dimensões. As primeiras investigações para essa perspectiva estão apresentadas no capítulo final.

Mas antes, faremos uma breve introdução aos principais conceitos da teoria dos grafos e redes complexas no capítulo 4, seguido pelo capítulo 5, onde são abordados os detalhes do PC e o método quase estacionário.

4 *Dos grafos às redes complexas*

Neste capítulo, apresentamos os principais conceitos da teoria de redes complexas traçando sua evolução desde suas raízes na teoria de grafos. Por brevidade, trataremos apenas dos grafos não direcionados deixando os demais casos para serem aprofundados nas referências, sem perdas para a compreensão dos demais capítulos. Além disso, é oportuno dizer que todos os resultados apresentados neste capítulo de revisão (já relatados na literatura) foram reproduzidos para este texto e não apenas retirados das respectivas referências.

As propriedades estruturais de uma rede complexa podem ser estudadas pela *teoria dos grafos* [63, 64]. Essa teoria teve início com o matemático suíço Leonard Euler, quando estudava o “desafio de Koenigsberg”: como partir e retornar a um mesmo ponto dessa cidade, usando suas sete pontes sem repetir nenhuma delas (Figura 4.1). Em 1736, Euler mostrou que essa tarefa era impossível. Para isso ele redesenhou a cidade utilizando apenas dois símbolos: vértices e arestas. Assim o primeiro grafo foi a representação de Euler que é mostrada do lado direito da Figura 4.1, em que as arestas representam as pontes e os vértices as porções de terra. Se um vértice possui duas arestas, pode-se entrar por uma e sair pela outra e o mesmo vale para um número par de arestas maior do que dois. Já vértices com um número ímpar de arestas podem apenas iniciar ou terminar o caminho [65]. Note que no grafo de Euler todos os vértices possuem um número ímpar de arestas.

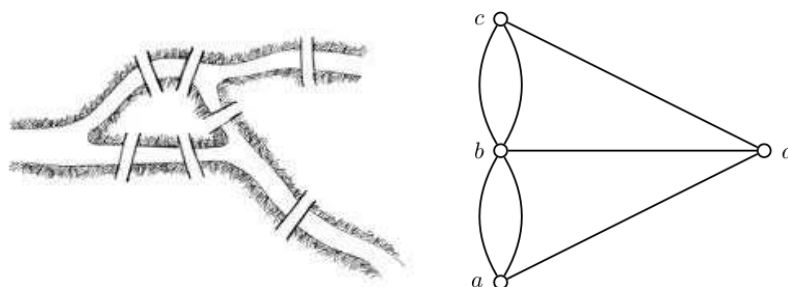


Figura 4.1: O desafio de Koenigsberg: como partir e retornar para um mesmo ponto da cidade cruzando apenas uma vez cada uma de suas sete pontes. Do lado direito está a representação abstrata das porções de terra (vértices a , b , c e d) e suas pontes (arestas).

As arestas de um grafo poderão indicar também um sentido para as ligações. Nesse caso, dizemos que se trata de um grafo *direcionado*, que podemos representar com uma flecha em uma das terminações de cada aresta. Teremos um grafo *não direcionado* se não houver uma orientação para suas ligações representando suas arestas sem flechas. As arestas podem ainda receber valores reais para representar o peso de uma ligação e, dessa vez, chamamos essa representação de *grafo ponderado*. Os vértices de um grafo também podem ser diferenciados, como mostra a Figura 4.2.

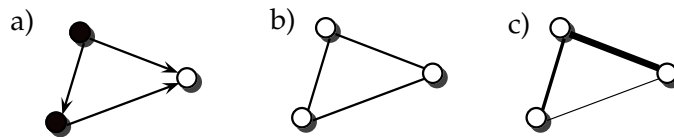


Figura 4.2: (a) Grafo direcionado com duas variedades de vértices; (b) grafo não direcionado; (c) grafo ponderado, com o peso de cada aresta diferenciado pela sua espessura.

4.1 Representação de um grafo usando matrizes

Podemos utilizar matrizes para representar um grafo do tipo $G(N, E)$, em que N é o número de vértices e E o número de arestas. Sua representação mais utilizada é a chamada *matriz de adjacências*. Essa é uma matriz do tipo $A : N \times N$, que podemos construir nomeando cada vértice com um número inteiro $i = 1, 2, 3, \dots, N$. Ela carrega a informação sobre a existência ou não de uma ligação entre quaisquer dois vértices de um grafo.

Para um grafo não direcionado, podemos escrever o conjunto de elementos da matriz $A : N \times N$ a partir de suas entradas a_{ij} :

$$a_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se uma ligação entre } i \text{ e } j \text{ existe;} \\ 0, & \text{se uma ligação entre } i \text{ e } j \text{ não existe.} \end{cases}$$

A diagonal dessa matriz guarda a entrada dos elementos a_{ii} e informa se um vértice está ligado a ele mesmo (*autoligação*). Como $a_{ij} = a_{ji}$, A é uma matriz simétrica. A matriz de adjacências para o grafo não direcionado da Figura 4.3 possui a seguinte forma:

$$a_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

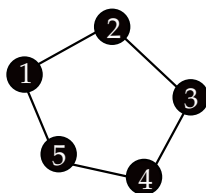


Figura 4.3: Representação de um grafo não direcionado.

O número máximo E_{max} de arestas em um grafo em que não são permitidas autoligações é dado por $N(N-1)$. Para contarmos o número total de arestas em um grafo não direcionado, acabaremos por contar duas vezes cada uma delas. Dessa forma, a expressão correta para esta contagem será:

$$E_{max} = \frac{N(N-1)}{2}, \quad (4.1)$$

em que o fator $1/2$ leva em conta a repetição dessa contagem. Um grafo em que cada vértice está ligado a todos os demais é chamado *grafo completo*. Nele, quaisquer dois vértices estão separados à distância de apenas uma aresta.

4.2 Quantidades básicas em grafos

A mais simples das quantidades estudadas em grafos é o *grau* de um vértice que é dado pelo número k de conexões que o vértice possui. A distribuição de graus $P(k)$, equivale à fração de vértices que possuem grau k

$$P(k) \equiv \frac{N_k}{N}, \quad (4.2)$$

uma vez que $\sum_k N_k = N$. Segue também, que o grau médio $\langle k \rangle$ (ou primeiro momento) pode ser obtido da distribuição de conectividade $P(k)$:

$$\langle k \rangle = \frac{1}{N} \sum_i k_i = \sum_k kP(k). \quad (4.3)$$

Uma outra quantidade de interesse é o número de arestas que ligam dois vértices quaisquer. O conjunto de arestas que ligam os vértices i e j , $\{l_{ij}\}$, define pelo menos um caminho entre eles:

$$\langle l \rangle = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{ij} l_{ij}. \quad (4.4)$$

Os vizinhos imediatos de um vértice são chamados de *primeiros vizinhos* e estão à distância de uma aresta ($l = 1$). Sucessivamente, seus *segundos vizinhos* (vizinhos dos primeiros vizinhos) estão a uma distância $l = 2$, os terceiros, $l = 3$ e assim por diante. Os *primeiros vizinhos* de um vértice formam sua *vizinhança* e uma medida do quanto ela é agregada pode ser feita a partir

do coeficiente de agregação c . A quantidade c_i , de um vértice i , é dada pela fração de seus primeiros vizinhos, que também são vizinhos entre si; é a razão entre o número de ligações que de fato existe entre os vizinhos de i , e o número máximo de ligações que é possível estabelecer entre esses vizinhos:

$$c_i = \frac{2e_i}{k_i(k_i - 1)}, \quad (4.5)$$

em que e_i é o número de arestas que existem entre os vértices vizinhos de i . Usando a matriz de adjacências de um grafo não direcionado é possível verificar que $c_i = (1/2) \sum_{j,m} a_{ij} a_{im} a_{jm}$. Uma ilustração para c , l e k é mostrada na Figura 4.4.

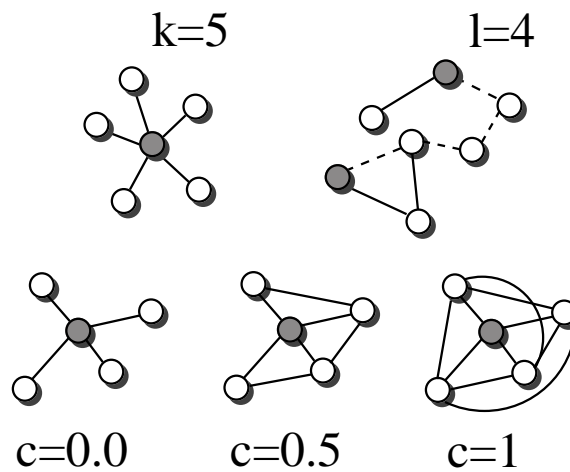


Figura 4.4: Quantidades básicas em grafos.

Existe ainda uma outra quantidade que nos diz o valor médio dos graus encontrados na vizinhança de um vértice de grau k [66] denotada por $k_{nn}(k)$. Essa medida está associada à correlação entre os graus dos vértices em um grafo. As correlações entre graus podem ser dadas pela probabilidade condicional $P(k'|k)$ de um vértice de grau k estar conectado a outro de grau k' . Podemos então definir o valor médio de k_{nn} a partir de $P(k'|k)$:

$$\langle k_{nn}(k) \rangle = \sum_{k'} k' P(k'|k). \quad (4.6)$$

Se $k_{nn}(k)$ é uma função crescente, o grafo apresenta uma correlação do tipo *associativa*. Nesse cenário, se associam os “iguais” em que vértices muito (pouco) conectados estão ligados com maior chance a outros que também são muito (pouco) conectados. Se por outro lado, $k_{nn}(k)$ for decrescente, a correlação é do tipo *desassociativa* em que vértices muito conectados estão ligados com maior chance a vértices com um valor pequeno de k . Quando k_{nn} independe de k , o grafo não apresenta correlações entre os graus de seus vértices e a probabilidade condicional

$P^{nc}(k'|k)$ é independente do grau k :

$$P^{nc}(k'|k) = \frac{k' P(k')}{\langle k \rangle}. \quad (4.7)$$

Isso resulta em um valor constante para $\langle k_{nn}^{nc} \rangle = \langle k^2 \rangle / \langle k \rangle$ - equação (4.6), em que $\langle k^2 \rangle$ é o segundo momento da distribuição de graus $P(k)$. Esses comportamentos de $\langle k_{nn}(k) \rangle$ são mostrados na Figura 4.5.

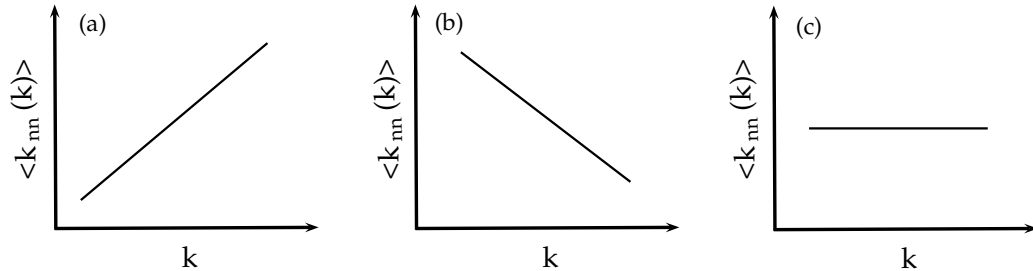


Figura 4.5: Ilustração dos comportamentos da função $k_{nn}(k)$. Em (a) é mostrada uma correlação associativa, em (b) desassociativa e em (c) temos um grafo não correlacionado.

4.3 Modelo Erdős–Rényi

O modelo criado nos anos de 1950 por P. Erdős e A. Rényi (ER) [22] para gerar grafos aleatórios é um clássico da literatura [37, 64, 67]. Nesse modelo, o grafo é gerado a partir de N vértices que são conectados aos pares com uma probabilidade p . Essas conexões são feitas por um total de $p[N(N-1)/2]$ arestas. A Figura 4.6 ilustra o modelo ER.

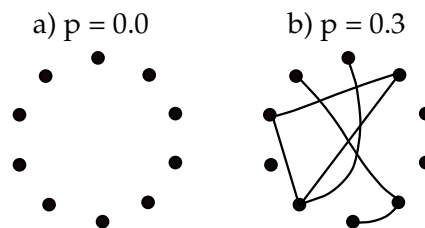


Figura 4.6: Ilustração do modelo ER para dois valores diferentes da probabilidade de conexão.

A distribuição de conectividade $P(k)$ no modelo ER é binomial,

$$P(k) = \binom{N-1}{k} p^k (1-p)^{N-1-k}, \quad (4.8)$$

que se reduz a uma distribuição de *Poisson* à medida em que $N \rightarrow \infty$

$$P(k) = \frac{(Np)^k e^{-np}}{k!} \quad (4.9)$$

com o termo Np assumindo um valor finito [36]. A Figura 4.7 mostra a distribuição de graus para um grafo *ER* com 1000 vértices. O valor médio dessa distribuição pode ser obtido observando que cada aresta adicionada contribui para o número de ligações de cada vértice do par:

$$\langle k \rangle = \frac{p[N(N-1)]}{N} \approx Np. \quad (4.10)$$

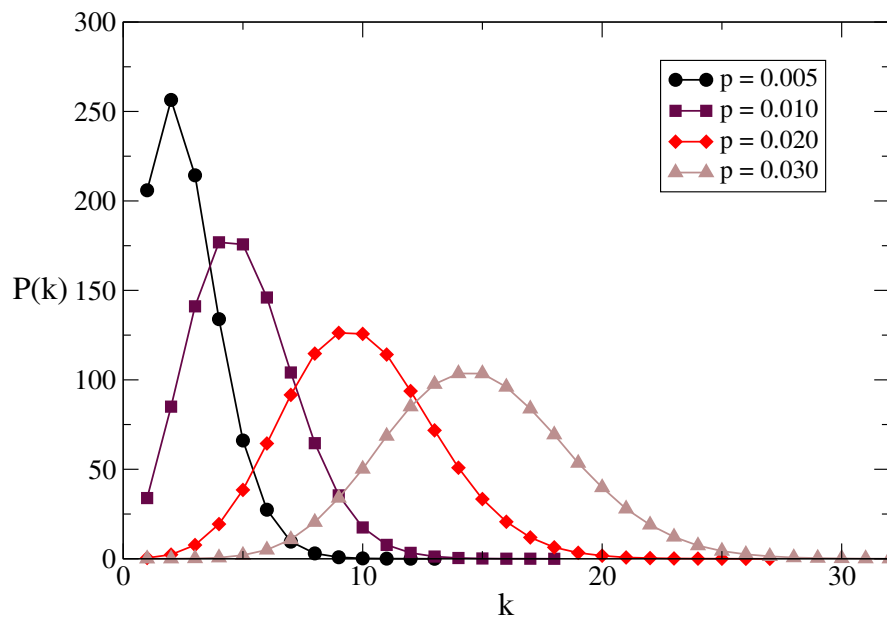


Figura 4.7: Distribuição de conectividade em um grafo *ER* com 1000 vértices.

Redes aleatórias foram muito empregadas no estudo de sistemas reais sem que se levassem em conta a alta agregação entre os seus constituintes, nem mesmo o alto padrão de heterogeneidade na distribuição de graus observada em diversos exemplos [36–38, 65]. Esses novos ingredientes foram adicionados dando início à teoria de redes complexas [24, 30, 39].

4.4 Redes complexas

Em 1999, a revista Science publicou o artigo “Emergence of scaling in random networks” de autoria de Barabási e Albert [24]. Este artigo inaugura todo um campo de investigação que hoje perpassa as mais diversas áreas de conhecimento: das ciências físicas e matemática, passando por ciências da saúde até ciências humanas e mesmo as artes. Este artigo já foi citado

7.407 vezes na base de dados Web of science até o final de 2012, vindo a se tornar um dos artigos mais citados em todas as áreas do conhecimento na última década. A força e atualidade desse campo de investigação podem ser observadas no número especial da revista *Nature Physics*, dedicada ao tema de Sistemas Complexos e publicada em janeiro de 2012. Nesta seção, iremos discutir os dois principais modelos da teoria de redes complexas.

4.4.1 Modelo Watts-Strogatz

Nos anos de 1960, o psicólogo Stanley Milgram [32] realizou uma experiência nos EUA que viria a ser conhecida por "seis graus de separação". Milgram havia solicitado a um grupo de pessoas que enviassem cartas a destinatários distantes e desconhecidos para esse grupo. O grupo de remetentes tentaria concluir a tarefa repassando as cartas através de seus conhecidos na expectativa de que fossem entregues aos seus destinatários. As cartas foram repassadas, em média, seis vezes até chegarem ao destino final. Em 2006, pesquisadores da Microsoft estudaram endereços eletrônicos de pessoas que enviaram um total de 30 bilhões de mensagens instantâneas usando o programa *MSN-Messenger*¹ durante um único mês [33]. Esses pesquisadores tentavam chegar ao menor número de ligações necessárias para conectar quaisquer dois usuários incluídos em seus bancos de dados e concluíram que a média era de 6,6 ligações, sendo que 78% dos pares poderiam ser conectados por sete ou menos pessoas.

Em redes sociais, além da característica dos "seis graus de separação" percebemos também que, em geral, nossos amigos também são amigos entre si. Essas duas características podem ser estudadas representando uma rede social por uma rede complexa em que os vértices fariam o papel dos indivíduos, enquanto que suas arestas representariam as relações de amizade entre eles. Além disso, para modelar essas duas características, tal rede precisaria apresentar um baixo valor para a menor distância $\langle l \rangle$ entre dois vértices e um alto valor para o coeficiente de agregação $\langle c \rangle$. O modelo ER não consegue capturar a alta agregação presente em redes sociais devido a seu caráter aleatório, apenas o curto caminho entre vértices.

Os pesquisadores Watts e Strogatz (WS) desenvolveram nos anos de 1990 um modelo [30] que apresenta essas duas características. Para construir uma rede WS, iniciamos com N vértices em uma configuração de anel em que cada um deles está ligado a seus K primeiros vizinhos como na Figura 4.8 (a), em que $K = 4$ ($K/2$ de cada lado). Como nessa situação todos os vértices possuem K vizinhos, essa é uma rede (ou grafo) regular. Em seguida, escolhemos uma ligação qualquer de um vértice também escolhido ao acaso e com probabilidade p , a outra ponta da aresta escolhida é redirecionada para qualquer outro vértice da rede evitando auto e

¹Programa para troca de mensagens de texto instantâneas pela Internet.

duplas conexões. Depois, o mesmo procedimento é feito para o próximo vértice do anel até completar uma volta. O processo é repetido para os segundos vizinhos do vértice inicialmente escolhido e assim por diante, caso $K > 4$.

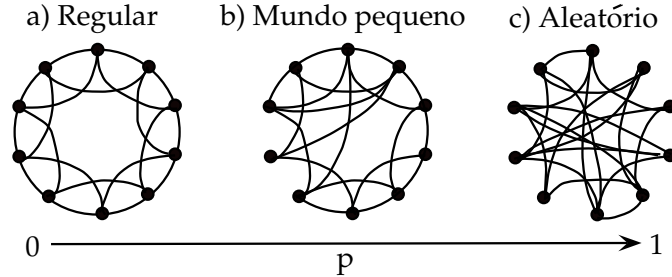


Figura 4.8: Ilustração para o modelo WS que permite transitar de uma estrutura regular para uma aleatória à medida em que a probabilidade de redirecionamento p vai de 0 para 1.

A exemplo do que ocorre em redes sociais, no modelo WS muitos dos primeiros vizinhos de um vértice são também vizinhos entre si. Isso deixa a rede muito agregada, como podemos ver na figura 4.8(a). Para $p = 0$, o coeficiente de agregação [36] é

$$c(0) = \frac{3(K-2)}{4(K-1)}, \quad (4.11)$$

o qual converge para $c(0) \sim 3/4$ no limite de K grande. No entanto, o menor caminho entre dois vértice também possui um valor muito alto: $l(0) \approx N/2K \gg 1$. Para uma rede com dimensão d , $\langle l \rangle \sim N^{1/d}$ aumenta rapidamente à medida em que $N \rightarrow \infty$. Para $p > 0$, a propriedade de *munho pequeno* emerge devido à introdução de vários atalhos na rede com mostra a Figura 4.8(b), mas sem desfazer a alta agregação. Já para $p \rightarrow 1$, o modelo converge para uma rede aleatória com $l(1) \sim \ln(N)/\ln(K)$ e $C(1) \sim K/N$. O comportamento dessas duas quantidades como funções da probabilidade de redirecionamento p em uma rede WS com 1000 vértices e $K = 10$ é mostrado na Figura 4.9. Existe uma faixa de valores para p que é caracterizada por uma queda do valor de l , em que $l(p)$ possui um valor próximo de $l(1)$. Por outro lado, o valor de c permanece praticamente inalterado, sendo $c(p) \gg c(1)$. Em 1999, foi mostrado na referência [31] que l não começa a decair até que pelo menos um atalho seja feito na rede. Isso só acontece segundo a relação $p \geq 2/NK$, o que implica que mesmo para um valor pequeno de p , existe a chance para a presença de atalhos desde que as redes usadas sejam suficientemente grandes [68–71].

A distribuição de conectividade na rede WS é dada por [72]:

$$P(k) = \sum_{n=0}^{\min(k-K/2, K/2)} C_{K/2}^n (1-p)^n p^{K/2-n} \frac{(pK/2)^{k-K/2-n}}{(k-K/2-n)!} e^{-pK/2} \quad (4.12)$$

para $k \geq K/2$. A homogeneidade na distribuição de graus na rede WS também implica que, em

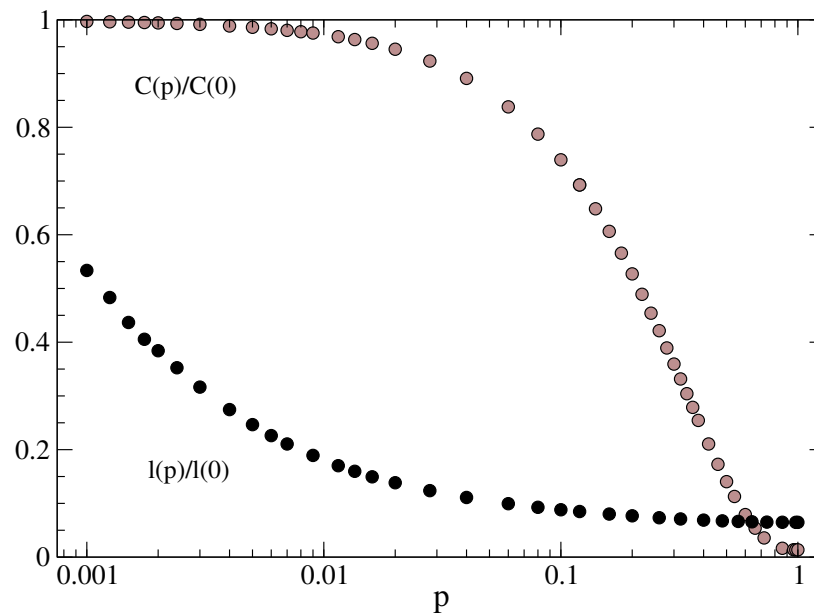
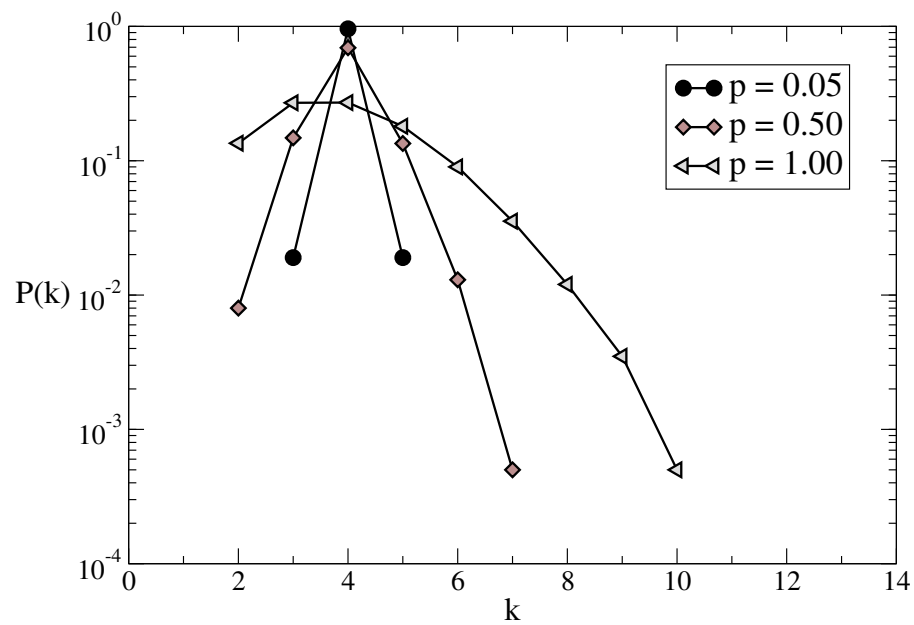
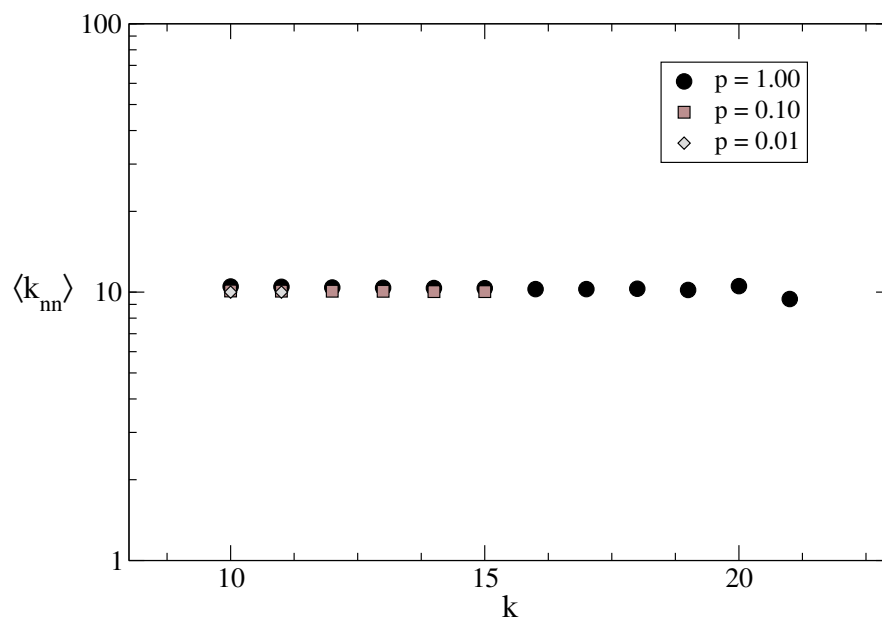


Figura 4.9: Dependência do coeficiente de agregação e do menor caminho entre dois vértices no modelo WS.

média, os vizinhos de um vértice de grau k também possuem k ligações. Isso leva a equação (4.6) a um valor independente de k que é verificado no resultado mostrado na Figura 4.11. Portanto, a rede WS não possui correlações entre graus.

Com a combinação de um alto valor de agregação mesmo em um regime com uma distância pequena entre dois vértices, o modelo WS permite a coexistência de características das redes regulares e de redes aleatórias em que está presente a propriedade de mundo pequeno. Essa propriedade também está presente em uma outra classe de redes complexas, que diferentemente de uma distribuição homogênea de conectividade, apresenta uma heterogeneidade dos graus. Esse padrão heterogêneo pode ser fruto da adição de um novo ingrediente: a conexão preferencial, emblematicamente encontrada na *WWW* onde novas páginas são adicionadas a cada dia e, preferencialmente, se conectam a outras já muito conectadas. Essas redes complexas são chamadas de redes *sem escala* e serão tema da próxima seção.

Figura 4.10: Distribuição de conectividade na rede WS com 1000 vértices e $K = 4$.Figura 4.11: Ausência de correlação entre graus na rede WS com 1000 vértices e $K = 10$.

4.4.2 Modelo Barabási-Albert

Nos modelos anteriores as arestas eram adicionadas ou redirecionadas entre um número fixo de vértices. Por outro lado, o que acontece em vários sistemas reais é a adição de novos vértices à rede. Além disso, como observado por Barabási [73], cada novo vértice que é adicionado à rede busca se conectar preferencialmente aos vértices com um alto grau. O crescimento da rede e a conexão preferencial são dois mecanismos responsáveis pela distribuição em lei de potência do tipo $P(k) \sim k^{-\gamma}$, em que γ é chamado de *expoente de conectividade*. O modelo Barabási-Albert (BA) é construído da seguinte maneira: inicia-se a rede com um número m_0 de vértices conectados e a cada passo de tempo é introduzido um novo vértice de grau $m \leq m_0$, que se liga a vértices já presentes na rede. Para o vértice adicionado estabelecer uma nova conexão, assume-se uma probabilidade $\Pi[k_i(t)]$ de que um vértice já existente e de grau k_i seja escolhido, tal que

$$\Pi[k_i(t)] = \frac{k_i}{\sum_j k_j(t)}. \quad (4.13)$$

Depois de t passos de tempo, a rede contará com $N = t + m_0$ vértices e $mt + m_0(m_0 - 1)$ arestas. Na Figura 4.12 está ilustrado o procedimento do modelo BA.

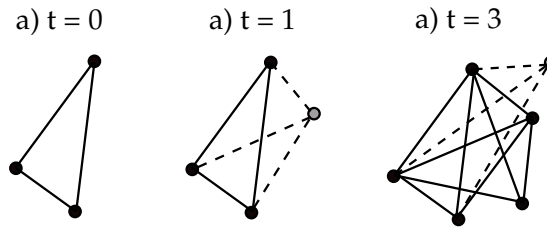


Figura 4.12: Ilustração para três estágios diferentes do modelo BA com $m_0 = m = 3$.

Uma aproximação contínua para a taxa de evolução temporal do grau k_i de um vértice i foi introduzida nas referências [24,36,73]: assumindo k_i como uma variável real, a taxa com que essa quantidade evolui deve ser proporcional à probabilidade $\Pi[k_i(t)]$ satisfazendo a equação

$$\frac{\partial k_i(t)}{\partial t} = m\Pi[k_i(t)] = m \frac{k_i(t)}{2mt + m_0\langle k \rangle_0}, \quad (4.14)$$

em que o denominador é o resultado da soma realizada sobre os graus de todos os vértices, exceto do vértice que será adicionado naquele instante de tempo t e $\langle k \rangle_0$ é a conectividade média do grupo de m_0 vértices inicialmente conectados. Com a condição inicial de que cada vértice i introduzido no tempo t_i tenha $k_i(t_i) = m$, a solução é dada por

$$k_i(t) = m \left(\frac{t}{t_i} \right)^\beta \quad (4.15)$$

com $\beta = 1/2$, indicando que o grau de todos os vértices evoluem da mesma maneira seguindo uma lei de potência. Considerando o limite contínuo, a distribuição de conectividade $P(k, t)$ é dada pela expressão [36]

$$P(k, t) = 2m^2 \frac{t + (m_0/2m)\langle k \rangle_0}{t + m_0} k^{-3}, \quad (4.16)$$

que no limite de $N \rightarrow \infty$ e $t \rightarrow \infty$ se reduz a

$$P(k) = 2m^2 k^{-3}. \quad (4.17)$$

A Figura 4.13 mostra a verificação do resultado analítico da equação (4.17) em simulações numéricas do modelo BA com $m_0 = 3$ e 10^4 passos de tempo.

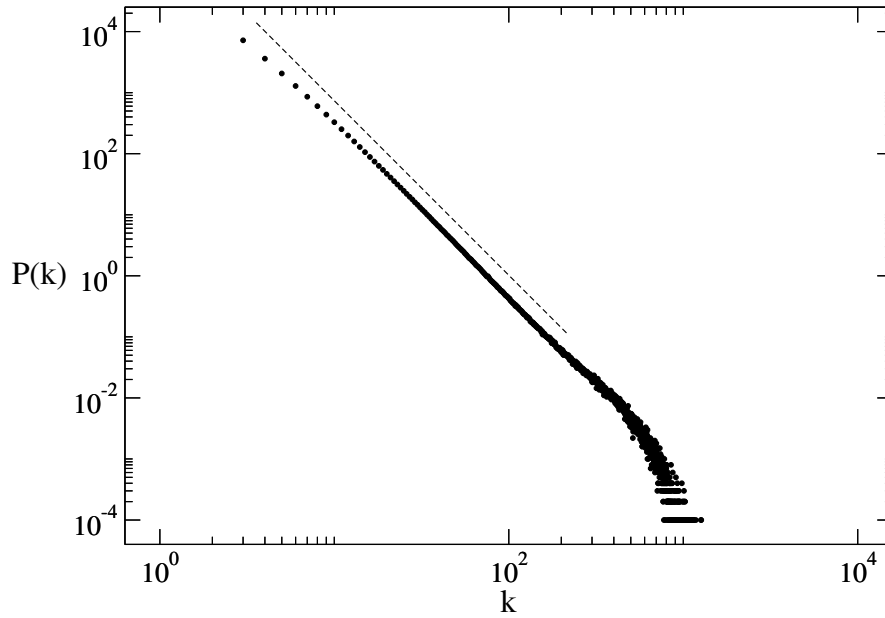


Figura 4.13: Distribuição de graus no modelo BA. A linha tracejada tem inclinação igual a -3.

De maneira geral, redes finitas com distribuição de graus em leis de potência possuem um corte superior $k = k_c(N)$. Esse corte superior tem profundas implicações para efeitos da finitude dos sistemas reais, exercendo grande influência em várias propriedades da rede por determinar os valores de momentos mais altos da distribuição de graus. O significado da heterogeneidade em distribuições $P(k) \sim k^{-\gamma}$ pode ser entendido olhando os dois primeiros momentos dessa distribuição que podem ser obtidos analiticamente. Tratando-se o grau k como uma variável real contínua, tem-se:

$$\langle k \rangle = \int_{m_0}^{k_c} kP(k)dk \sim k_c^{2-\gamma} \quad (4.18)$$

e

$$\langle k^2 \rangle = \int_{m_0}^{k_c} k^2 P(k) dk \sim k_c^{3-\gamma}. \quad (4.19)$$

Com isso, o primeiro momento é finito para valores do expoente de conectividade $\gamma > 2$. Por outro lado, tomando o limite assintótico de $N \rightarrow \infty$ o corte correspondendo ao maior valor possível ($k_c \rightarrow \infty$) diverge e então $\langle k^2 \rangle \rightarrow \infty$ e as flutuações em torno de $\langle k^2 \rangle$ divergem para valores de $\gamma < 3$. Portanto, na faixa $2 \leq \gamma < 3$, a distribuição não apresenta uma escala característica para as flutuações em torno de $\langle k \rangle$. Por essa razão, essas redes foram chamadas de *sem escala*.

4.5 Efeitos de tamanho finito

Redes sem escala apresentam uma divergência no segundo momento da distribuição com o tamanho N da rede, ao contrário daquelas com um perfil homogêneo. Em redes reais existe sempre um corte superior $k_c(N)$ para valores altos de k que determina os valores dos momentos de ordem superiores, influenciando várias propriedades da rede. Essa influência depende de dois fatores [35]: (i) da escala para $k_c(N)$ como uma função de γ e (ii) se existem correlações entre graus na rede. Vamos comentar agora brevemente sobre os dois tipos de cortes com os quais trabalhamos. Maiores detalhes sobre eles estão no Apêndice A.2.

A escala de $k_c(N, \gamma)$ pode ser obtida a partir da probabilidade de encontrarmos um grau $k > k_c$ para a distribuição $P(k) \sim k^{-\gamma}$:

$$N \int_{k_c}^{\infty} P(k) dk = 1 \implies k_c(N, \gamma) \sim N^{1/(\gamma-1)}, \quad (4.20)$$

que é chamado de corte *natural*. Para $\gamma \geq 3$, o segundo momento da distribuição $P(k)$ é finito e a presença de múltiplas conexões pode ser negligenciada no limite de $N \rightarrow \infty$ [74, 75]. Na faixa de valores para γ entre 2 e 3, o corte natural permite múltiplas ligações fazendo com que apareçam correlações entre graus [35].

Por outro lado, em redes sem escala não correlacionadas o corte superior k_c da distribuição $P(k)$ assume a escala $k_c(N) \sim (\langle k \rangle N)^{1/2}$, que independe do valor de γ . Esse resultado para k_c é chamado de *corte estrutural* [76] e é uma escolha de corte mais apropriada para $\gamma \geq 3$, pois o corte estrutural diverge mais rapidamente nessa faixa de γ [76].

Levando em conta o corte superior da distribuição $P(k)$, iremos discutir na próxima seção a construção de redes sem escala para depois estudarmos processos dinâmicos nesses substratos. A evolução dessas regras dinâmicas microscópicas pode levar a resultados interessantes

quando comparados aos resultados encontrados em redes regulares [35, 36] (Apêndice A.2).

4.5.1 Modelo de configurações

O modelo de configurações (CM), proposto por Molloy e Reed [77, 78] permite construir redes a partir de qualquer sequência (distribuição) de graus pré estabelecida. Para isso, primeiro atribui-se para cada vértice i um grau k_i com seu valor limitado pelos cortes inferior k_0 e superior k_c obtido a partir de uma distribuição de graus pré estabelecida. Depois, constrói-se uma lista em que se repete cada vértice i , k_i vezes, com o vínculo de que $\sum_i k_i$ seja par. Adicionam-se as $\sum_i k_i/2$ arestas ligando os vértices aos pares e escolhidos ao acaso dentro da lista anteriormente construída. Após efetuada uma ligação retira-se da lista uma das k_i cópias do vértice i e uma das k_j cópias do vértice j que foram sorteados, respeitando assim o grau de conectividade de cada um. Repete-se a adição de arestas até que a lista se esvazie e o resultado é uma rede aleatória com uma distribuição $P(k)$ já determinada.

Esse algoritmo funciona bem para distribuições de conectividade com uma escala característica, enquanto que para o caso em que $\langle k^2 \rangle$ diverge surge uma fração não negligenciável de múltiplas conexões [76]. Uma proposta para evitar essas estruturas na rede seria proibi-las diretamente no algoritmo, mas essa proibição acaba por introduzir correlações desassociativas entre graus [79].

4.5.2 Modelo de configurações não correlacionadas

O modelo de configurações não correlacionadas (UCM) foi proposto por M. Catanzaro, M. Boguñá e R. Pastor-Satorras [79] e vem sendo amplamente usado na modelagem matemática/computacional de processos dinâmicos em redes complexas. O problema do surgimento de múltiplas conexões no algoritmo CM para a geração de redes sem escala está associado a efeitos causados pelo corte superior que acaba por assumir a escala $k_c(N) \sim N^{1/(\gamma-1)}$ em que um número alto de arestas está presente, sendo inevitável o surgimento de correlações entre graus. Para distribuições segundo a forma $P(k) \sim k^{-\gamma}$ e tamanho N , devemos impor para a escala do corte superior ao menos $k_c(N) \sim N^{1/2}$ (corte estrutural) para evitar tais correlações.

O algoritmo para gerar redes sem escala não correlacionadas consiste nos seguintes passos: Primeiro, assinalá-se para cada vértice i de um conjunto de $i = 1, 2, \dots, N$ vértices inicialmente desconectados, um grau k_i a partir da distribuição $P(k) \sim k^{-\gamma}$ e sujeitos aos vínculos $k_0 \leq k_i \leq N^{1/2}$ e $\sum_i k_i$ par. Depois, escreve-se uma lista em que se repete cada vértice i , k_i vezes. Adicionamos as $\sum_i k_i/2$ arestas ligando os vértices ao pares evitando múltiplas e autoligações.

Após efetuada uma ligação, retira-se da lista uma das k_i e k_j cópias referentes aos vértices i e j que foram sorteados, respeitando assim o grau de conectividade de cada um e repetindo a adição de arestas até ser esvaziada toda a lista. Com isso, o modelo gera redes sem escala não correlacionadas.

5 *Processos dinâmicos com estados absorventes*

5.1 O processo de contato

O protótipo de um processo dinâmico com um estado absorvente é o processo de contato(PC) [48,57]: um sistema de partículas interagentes, em que sua dinâmica evolui a partir de uma fração de partículas depositadas nos vértices de uma rede. Um conjunto de regras microscópicas determina sua evolução temporal e consiste na aniquilação espontânea de partículas em vértices ocupados, com taxa unitária, e na criação de novas partículas geradas por vizinhos ocupados, com taxa $\lambda n_i/k_i$, em que n_i é o número de partículas na vizinhança de um vértice i , λ um parâmetro positivo e k_i o número de ligações do vértice i .

Em simulações numéricas, uma fração inicial de partículas é depositada em vértices escolhidos ao acaso. A cada passo de tempo t , um vértice i ocupado é aleatoriamente escolhido e com probabilidade $p = 1/(1 + \lambda)$ sua partícula é destruída. Por outro lado, com probabilidade $(1 - p) = \lambda/(1 + \lambda)$, é criada uma nova partícula em um de seus primeiros vizinhos escolhido ao acaso e que esteja vazio. Se o vizinho escolhido estiver ocupado, nada ocorre. Qualquer que seja o evento, a contagem do tempo é atualizada segundo $t \rightarrow t + 1/n(t)$, em que n é o número de partículas presentes no sistema no início do passo t . A dinâmica do PC pode levá-lo para uma fase *ativa* em que a criação de partículas persiste ou a uma fase sem partículas, na qual a dinâmica atinge o estado absorvente: uma vez atingindo esse estado, o processo permanece nessa configuração para qualquer tempo posterior.

A descrição da transição para o estado absorvente do PC pode ser feita por uma equação da taxa de evolução temporal da densidade ρ de partículas. Se $\rho > 0$, o processo encontra-se na fase ativa, sendo a fase absorvente caracterizada por $\rho = 0$. Essa equação deverá levar em conta características estruturais do substrato pois apesar do evento de aniquilação acontecer a uma taxa unitária, o evento de criação depende tanto do parâmetro λ quanto da distribuição de graus $P(k)$ e da vizinhança por ser contabilizado o número de vizinhos de um vértice. Isso se torna

complicado para um número grande de vértices, que a princípio, deveríamos levar em conta a influência que cada um deles exerce sobre todos os demais. Neste ponto, podemos trabalhar com uma teoria de campo médio que substitui a interação de cada vértice por um campo efetivo.

5.1.1 Campo médio heterogêneo

A teoria de campo médio tradicional assume que todos os vértices tem o mesmo grau [49]. Aqui desenvolveremos uma teoria de campo médio heterogênea (HMF) [36] que tem como caso particular a teoria homogênea quando $P(k) = \delta_{k,m}$. Para a HMF, a densidade ρ_k de partículas em vértices de grau k (ou dentro do compartimento k) pode diminuir, devido a aniquilação de partículas, com taxa unitária ou aumentar em um evento de criação de partículas com taxa (λ/k) pela replicação de uma partícula em um vértice de grau k' conectado a k . Portanto, a taxa de evolução temporal de ρ_k em uma rede caracterizada por uma distribuição de conectividade $P(k)$ e correlações entre graus dada pela probabilidade condicional $P(k'|k)$ pode ser dada por [54]:

$$\frac{d}{dt}\rho_k(t) = -\rho_k(t) + \lambda k [1 - \rho_k(t)] \sum_{k'} \frac{P(k'|k)\rho_{k'}(t)}{k'}. \quad (5.1)$$

O primeiro termo do lado direito representa o evento de aniquilação de partículas e é proporcional à densidade de partículas no compartimento k e ocorre a uma taxa unitária. Já o segundo termo descreve o evento de criação de partículas sendo proporcional à taxa λ , à probabilidade de um vértice de grau k estar vazio, dada pelo termo $[1 - \rho_k(t)]$. Além disso, esse termo de criação também leva em conta a probabilidade do vértice vazio de grau k esteja conectado à um vértice de grau k' que esteja ocupado por uma partícula. O fator $1/k'$ deve-se ao fato de que a partícula no vértice de grau k' é replicada para apenas um dos seus k' vizinhos.

O estado absorvente $\rho_k = 0$ é sempre solução da equação (5.1). Para uma solução estacionária ativa, podemos fazer uma análise de estabilidade [12] da equação (5.1). Para isso, iremos reescrever essa equação descartando termos de ordem $O(\rho_k^2)$:

$$\frac{d}{dt}\rho_k(t) \approx \sum_{k'} L_{kk'} \rho_{k'}(t) \equiv \sum_{k'} \left(-\delta_{kk'} + \lambda k \frac{P(k'|k)}{k'} \right) \rho_{k'}(t). \quad (5.2)$$

A matriz jacobiana $L_{kk'}$ possui um único autovetor $v_k = k$ e autovalor $\Lambda = \lambda - 1$. Usando o teorema de Perron-Frobenius [37], podemos mostrar que Λ é o maior autovalor de $L_{kk'}$. Para um estado estacionário ativo devemos ter $\Lambda > 0$, implicando em um limiar de criação de partículas igual a $\lambda_c = 1$.

Para redes sem correlação de graus, em que $P(k'|k) = k'P(k')/\langle k \rangle$, a equação (5.1) toma

a forma

$$\frac{d}{dt}\rho_k(t) = -\rho_k(t) + \lambda \frac{k}{\langle k \rangle} [1 - \rho_k(t)]\rho(t), \quad (5.3)$$

que impondo a condição estacionária $d\rho_k(t)/dt = 0$, temos que

$$\rho_k = \frac{\lambda k \rho / \langle k \rangle}{1 + \lambda k \rho / \langle k \rangle}. \quad (5.4)$$

Levando esse resultado na definição de ρ , obtemos também uma equação de autoconsistência para a densidade total de partículas:

$$\rho = \frac{\lambda \rho}{\langle k \rangle} \sum_k \frac{k P(k)}{1 + \lambda k \rho / \langle k \rangle}, \quad (5.5)$$

que depende da natureza da distribuição de graus $P(k)$. Para uma rede heterogênea, sua distribuição de graus em uma aproximação contínua pode ser escrita como sendo $P(k) = (\gamma - 1)m^{\gamma-1}k^{-\gamma}$, em que m é o menor grau encontrado e a solução da equação (5.5) dependerá do expoente de conectividade γ . No limite de uma rede infinita, com a substituição da soma por uma integração sobre o limite de $k = m \rightarrow \infty$, obtemos a expressão:

$$\rho = F \left[1, \gamma - 1, \gamma, -\frac{\langle k \rangle}{\lambda \rho m} \right], \quad (5.6)$$

em que $F[a, b, c, z]$ é a função hipergeométrica de Gauss [80]. É possível obter o comportamento de ρ no regime crítico e baixas densidades com a inversão dos termos obtidos da expansão assintótica da função hipergeométrica [80]. Com isso, obtemos $\rho(\lambda) \sim (\lambda - \lambda_c)^\beta$, com $\beta = 1/(\gamma - 2)$ para $2 < \gamma < 3$ e $\beta = 1$ para $\gamma > 3$ com correções logarítmicas em $\gamma = 3$ em que ocorre a mudança abrupta do padrão heterogêneo para o homogêneo. Note que essa análise foi feita para o limite de redes infinitas. Para valores de N finitos é necessária uma teoria de *escala de tamanho finito* (ETF) [49].

5.1.2 Escala de tamanho finito

O comportamento do PC previsto pela teoria de campo médio para redes infinitas, pode ser testado em sistemas finitos por meio de uma teoria de ETF. A hipótese usual dessa teoria diz que na transição de fase, tanto a densidade ρ de partículas do PC como sua escala de tempo (de vida) característico τ dependem do tamanho N do sistema, assumindo uma dependência de N da forma

$$\rho \sim N^{-\hat{\nu}} \quad (5.7)$$

e

$$\tau \sim N^{\hat{\alpha}}, \quad (5.8)$$

em que os expoentes críticos de escala $\hat{\nu}$ e $\hat{\alpha}$ caracterizam essa transição [50,51]. Essa hipótese é verificada, validando a teoria de campo médio, para o processo de contato e redes regulares [49]. Castellano e Pastor-Satorras relataram na referência [54] um comportamento do PC na criticalidade diferente do esperado pela teoria de campo médio em redes sem escala sem correlação entre graus. Para essas redes, em que $P(k'|k) = k'P(k')/\langle k \rangle$, a densidade total ρ de partículas obedece a equação

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -\rho(t) + \lambda\rho \left[1 - \frac{1}{\langle k \rangle} \sum_k kP(k)\rho_k(t) \right]. \quad (5.9)$$

que pode ser verificada diretamente da equação (5.3). Próximo à criticalidade, o processo se encontra em um regime de baixas densidades. Com isso, foi proposto na referência [61] o mapeamento do PC em um processo de difusão, no qual o estado do processo é determinado apenas pela variável $n(t) = 0, 1, 2, \dots, N$, uma vez que $\rho(t) = n(t)/N$, e com taxas de transições entre estados dadas por:

$$\begin{aligned} w_{n-1,n} &= n \\ w_{n+1,n} &= \lambda n \left[1 - \frac{1}{\langle k \rangle} \sum_k kP(k)\rho_k(t) \right] \end{aligned} \quad (5.10)$$

em que $w_{m,n}$ corresponde à taxa de transição do estado com n partículas para o estado com m partículas. Além disso, no regime estacionário $d\rho_k/dt = 0$ a densidade de partículas no compartimento k é dada por

$$\rho_k = \frac{\lambda k \rho / \langle k \rangle}{1 + \lambda k \rho / \langle k \rangle} \quad (5.11)$$

que, no regime de baixa densidades $\rho_k \approx \lambda k \rho / \langle k \rangle$. Com isso, as taxas de transições podem ser reescritas na forma:

$$\begin{aligned} w_{n-1,n} &= n \\ w_{n+1,n} &= \lambda n (1 - \lambda g n / N), \end{aligned} \quad (5.12)$$

em que $g = \langle k^2 \rangle / \langle k \rangle^2$. Baseado nas taxas (5.12) e simulações numéricas, Castellano e Pastor-Satorras [61] relataram que, na transição do PC em redes sem escala, existe uma dependência adicional do grau de corte k_c (marcada pelo fator g) para as quantidades (5.7) e (5.8). Na criticalidade, essas quantidades estacionárias tomariam as escalas segundo

$$\rho \sim (Ng)^{-1/2} \quad (5.13)$$

e

$$\tau \sim (N/g)^{1/2}. \quad (5.14)$$

A consequência disso é que para análises no limite em que $N \rightarrow \infty$, precisamos levar em conta também o limite em que $k_c(N) \rightarrow \infty$, pois $g \sim k_c^{3-\gamma}$ para $\gamma < 3$ ($g \sim \text{constante}$ se $\gamma > 3$). Além disso, para garantir redes não correlacionadas [61] é preciso que k_c divirja com N mais lentamente do que o corte estrutural $k_c(N) \sim N^{1/2}$ (Apêndice A.2). De forma geral, essa divergência de $k_c(N)$ deve assumir a forma $k_c \sim N^{1/\omega}$, em que ω é um expoente de corte positivo e arbitrário [61, 76, 81]. Com isso, os expoentes críticos das equações (5.7) e (5.8) previstos pela teoria de campo médio heterogêneo (HMF) [54] são:

$$\hat{\alpha} = \frac{1}{2} - \max\left(\frac{3-\gamma}{2\omega}, 0\right) \quad (5.15)$$

e

$$\hat{\nu} = \frac{1}{2} + \max\left(\frac{3-\gamma}{2\omega}, 0\right). \quad (5.16)$$

no ponto crítico $\Delta = (\lambda - 1) = 0$.

Para conectar o comportamento do PC na fase supercrítica em que a densidade de partículas vai a zero segundo $\rho \sim \Delta^\beta$ e $\beta = 1/(\gamma - 2)$, com a fase absorvente, a ETF para o PC foi estudada segundo uma abordagem via equação de Langevin [62]. Dessa abordagem, entretanto, foi verificado que o PC assume comportamentos diferentes na fase supercrítica que depende da relação entre densidade de partícula e o corte superior da distribuição de graus $P(k)$ dados por diferentes regimes do termo de arraste (também chamado termo macroscópico) [59] na equação de Langevin. As passagens analíticas desse estudo [62] serão omitidas por brevidade mas, sem perdas, podemos ter uma ideia desses comportamentos analisando a relação entre a densidade total de partículas no regime estacionário e a estrutura da rede: isso pode ser feito por meio do funcional

$$\Theta[\rho(t)] = \sum_k \frac{kP(k)}{\langle k \rangle} \frac{\lambda k \rho(t)}{\langle k \rangle + \lambda k \rho(t)} \quad (5.17)$$

obtido pela combinação das equações (5.11) e (5.9). Esse é exatamente o funcional que aparece no termo de arraste da equação de Langevin na referência [62] e determina as propriedades dinâmicas do PC. Em redes finitas, existem duas formas diferentes para Θ correspondendo aos regimes $\rho(t) \ll \langle k \rangle / \lambda k c$ (regime I) e $\langle k \rangle / \lambda k c \ll \rho(t) \ll 1$ (regime II). Para o regime I, teremos que $\Theta[\rho] = g\lambda\rho$ e para o regime II, $\Theta[\rho]$ precisa ser estimado pela aproximação contínua

$$\Theta[\rho] = \int_m^{kc} dk \frac{kP(k)}{\langle k \rangle} \frac{\lambda k \rho}{\langle k \rangle + \lambda k \rho}, \quad (5.18)$$

que a solução leva a

$$\Theta[\rho] \approx \Gamma(\gamma - 1)\Gamma(\gamma - 3) \left(\frac{\lambda\rho}{\langle k \rangle}\right)^{\gamma-2}. \quad (5.19)$$

Devido a esses comportamentos distintos da densidade de partículas na fase supercrítica,

a densidade supercrítica de partículas em um sistema finito assume um comportamento anômalo possuindo além da dependência em Δ (seção anterior), uma dependência do tamanho N do sistema marcada pelo fator g :

$$\rho(\Delta, N) = \frac{1}{\sqrt{gN}} f\left(\Delta \sqrt{\frac{N}{g}}\right), \text{ para } \Delta \ll \frac{\lambda g \langle k \rangle}{k_c}. \quad (5.20)$$

Nessa equação, $f(x)$ é uma função de escala em que $f(x) \sim x$ para $x \gg 1$ e $f(x)$ é contante para $x \ll 1$. A anomalia se expressa através do fator g e é dada por $\rho \sim \Delta/g$, se $\Delta > \sqrt{g/N}$.

5.2 O estado quase estacionário

O problema central na análise numérica de processos dinâmicos com estados absorventes é a finitude dos sistemas usados como substrato. Em sistemas finitos, o verdadeiro estado estacionário é o absorvente devido ao número finito de configurações disponíveis para sua dinâmica. Por exemplo, vamos admitir um processo markoviano [59] X_t , de tempo contínuo, assumindo os valores $n = 0, 1, 2, \dots, N$; se $X_t = 0$, então $X_{t'} = 0 \forall t' > t$, sendo $n = 0$, portanto, absorvente. A equação mestra [59] que descreve a evolução da probabilidade P_n do processo estar na configuração $n(t)$ é dada por:

$$\frac{d}{dt} P_n = \sum_m w_{n,m} P_m - \sum_m w_{m,n} P_n, \quad (5.21)$$

em que as taxas $w_{n,m}$ e $w_{m,n}$ representam a transição para dentro e para fora, respectivamente, do estado $n(t)$. Em simulações estocásticas de sistemas finitos, depois de um estado transiente, a probabilidade P_n é esperada bifurcar em duas componentes $P_n(t) = (1 - P_s(t))\delta_{n,0} + q_n(t)$: uma para o estado absorvente e outra $q_n(t)$ para o estado ativo ($n > 0$), sendo que $P_s(t) = \sum_{n \geq 1} q_n(t)$ é a probabilidade do processo não atingir o estado de vácuo até o tempo t . O estado absorvente $P_n = 0$ é sempre solução dessa equação, estando as análises numéricas restritas ao conjunto de amostras que sobreviveram a esse estado. Portanto, o estado “estacionário”, na verdade, é *quase estacionário* (QE). Como esse conjunto de amostras sobreviventes é esparso para $t \rightarrow \infty$, a ideia é povoá-lo redistribuindo a probabilidade de atingir o estado absorvente para o espaço de configurações ativas atingindo um estado QE independente do tempo. Para isso, vamos admitir que quando $t \rightarrow \infty$ a probabilidade $P_n(t)$, normalizada pela probabilidade $P_s(t)$, atinja sua forma independente do tempo; isso define a distribuição QE \bar{P}_n :

$$\bar{P}_n = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{P_n(t)}{P_s(t)}, \quad n \geq 1, \quad (5.22)$$

em que temos a normalização para $\sum_{n \geq 1} \bar{P}_n = 1$ e $\bar{P}_0 \equiv 0$. Nesse limite, as probabilidades estarão relacionadas segundo $P_n(t) = P_s(t) \bar{P}_n$, em que $P_s(t) = \sum_{n \geq 1} P_n(t) = 1 - P_0(t)$ e sua taxa de evolução temporal dada por

$$\frac{d}{dt} P_s(t) = - \sum_n w_{0,n} \bar{P}_n. \quad (5.23)$$

Com isso, podemos reescrever a equação para o processo original X_t , implementando um esquema de simulação QE com a introdução de um novo termo na equação para redistribuir a probabilidade de visitar o estado absorvente com peso \bar{q}_n entre as configurações ativas:

$$\frac{d}{dt} \bar{q}_n = \sum_m \omega_{n,m} \bar{q}_m - \sum_m \omega_{m,n} \bar{q}_n + \sum_n \omega_{0,n} \bar{q}_n, \quad (n > 0), \quad (5.24)$$

em que o último termo do lado direito da equação (5.24) é identicamente zero se $q_n = \bar{P}_n$, para $n > 0$. Na Figura 5.1 é mostrada uma ilustração do método quase estacionário em que dois processos são descritos: o processo X_t e o \bar{X}_t , no qual a probabilidade de atingir o estado absorvente é redirecionada para as configurações ativas q_n .

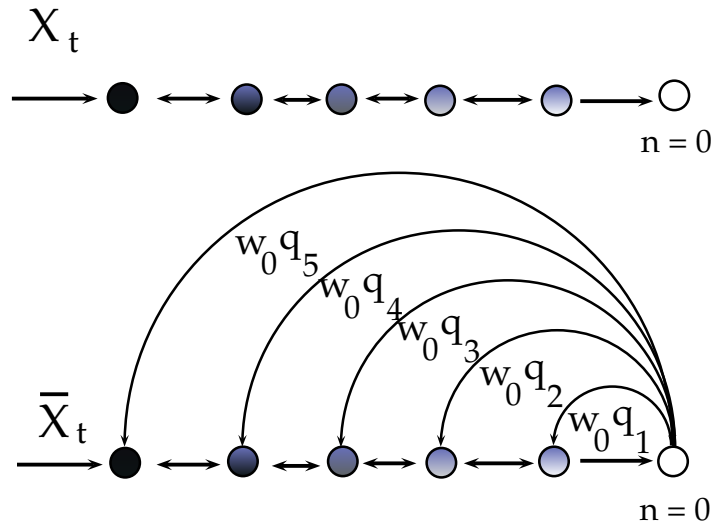


Figura 5.1: Ilustração para o método quase-estacionário em que a probabilidade de atingir o estado absorvente no processo \bar{X}_t é redirecionada para as configurações ativas q_n .

Dessa forma, o processo QE \bar{X}_t , que assume os valores $n = 1, 2, \dots, N$, possui a mesma dinâmica do processo X_t que assume os valores $n = 0, 1, 2, \dots, N$, exceto ao tentar visitar o estado absorvente ($n = 0$). Quando isso acontece nas simulações, sua dinâmica tem a configuração substituída por outra escolhida ao acaso dentro de um conjunto de configurações ativas (respeitando a probabilidade de ocorrência), cujos elementos são representações da história do sistema. Para isso, uma lista de configurações da história da evolução temporal do processo \bar{X}_t é mantida durante toda a simulação. Essa lista é constantemente atualizada, substituindo uma de suas

configurações pela configuração corrente com uma probabilidade p_{rep} . Para o estado quase estacionário do PC em redes regulares [82], p_{rep} foi usada na faixa entre 10^{-3} e 10^{-2} sendo que os autores sugeriram que as simulações são pouco sensíveis a esse parâmetro. Entretanto, outros processos com estados absorventes podem apresentar uma escala de tempo característico diferente da ordem estipulada para p_{rep} como na referência [83]. Para contornar esse problema, uma nova maneira de trabalhar com a atualização da lista de configurações foi proposta [83]. Como a probabilidade de acessar a lista (tentar visitar o estado absorvente) é proporcional a \bar{P}_1 , podemos estimar a probabilidade de substituição pela própria escala de tempo característico $\bar{\tau}$ do processo, já que ela é obtida diretamente da distribuição QE. De fato, uma vez que a relação entre $P_s(t)$ e o estado pré-absorvente ($n = 1$) é dada por $\dot{P}_s(t) = -\bar{P}_1 P_s(t)$ e, portanto, temos que

$$\bar{\tau} = \frac{1}{\bar{P}_1}. \quad (5.25)$$

Além disso, com \bar{P}_n podemos determinar também a densidade QE de partículas

$$\bar{\rho} = \frac{1}{N} \sum_{n \geq 1} n \bar{P}_n \quad (5.26)$$

ou qualquer outra quantidade de interesse envolvendo momentos de ordem superior $\langle \rho^n \rangle$. As quantidades QE convergem para os valores estacionários no limite de $t \rightarrow \infty$ e $N \rightarrow \infty$.

6 *Análises quase estacionárias do processo de contato em redes annealed*

O PC foi alvo de intensas controvérsias sobre a descrição teórica dada pela teoria de campo médio heterogêneo de sua transição de fase para o estado absorvente em redes sem escala [54–57]: uma aparente discordância entre os expoentes críticos obtidos por simulações numéricas e seus valores previstos por essa teoria foi relatada na referência [54]. Para compreender melhor essa suposta falha da teoria de campo médio, estudamos primeiro a dinâmica do PC com a aproximação de redes sem escala do tipo annealed onde essa teoria é exata. Para isso, combinamos análises QE com a construção de uma equação mestra (EM) para a descrição do PC a partir de seu mapeamento em um processo de um passo proposto na referência [84]. Com essa combinação, solucionamos numericamente essa equação e submetemos o processo a testes em simulações de Monte Carlo, verificando as fortes correções previstas pela teoria ETF (dadas por uma abordagem de Langevin [62]) sobre quantidades QE na transição de fase do PC que atrapalham a determinação correta dos expoentes críticos de campo médio em redes heterogêneas. Levando em conta essas correções, mostramos que a teoria de campo médio heterogêneo (HMF) descreve corretamente a transição do PC em redes do tipo annealed. Os resultados deste capítulo foram publicados na referência [42].

6.1 Introdução

Aproximação de redes annealed

Em primeiro lugar, é oportuno dizer o por quê de se trabalhar com uma aproximação de redes *annealed*. A teoria de campo médio heterogêneo assume que todos os vértices de um mesmo compartimento k são estatisticamente equivalentes e que correlações dinâmicas entre graus na vizinhança dos vértices são negligenciáveis. Considere um par de sítios i e j , sendo i ocupado e j vazio. Em uma rede *quenched*, a probabilidade de que o sítio j seja ocupado devido ao vértice i em um passo de tempo será $dt\lambda/k_i$, caso esses vértices sejam conectados

e zero caso contrário. Por essa razão, as correlações dinâmicas entre vértices conectados são da ordem $O(dt)$ e, portanto, relevantes. No caso *annealed*, entretanto, a probabilidade de que dois sítios quaisquer estejam conectados em um dado passo de tempo é $(k_i k_j) / (\sum_j k_j)$. Assim, a probabilidade de que j receba um partícula de i será $dt \lambda k_j / (\sum_j k_j) = dt \lambda k_j / (\langle k \rangle N)$, ou seja, as correlações dinâmicas são da ordem dt/N e tornam-se irrelevantes no limite de $N \rightarrow \infty$. Assim, a aproximação HMF deve ser exata em redes annealed.

6.2 Análise da equação mestra para o processo de contato em redes annealed

Uma abordagem teórica do PC em redes com distribuição heterogênea de graus, pode ser obtida a partir da equação (5.1) de campo médio heterogêneo (HMF) para a evolução da densidade ρ_k em vértices de grau k (ou vértices dentro do compartimento k). Para redes não correlacionadas, em que $P(k'|k) = k' P(k') / \langle k \rangle$, essa equação pode ser escrita na forma

$$\frac{d}{dt} \rho_k(t) = -\rho_k(t) + \lambda \frac{k}{\langle k \rangle} [1 - \rho_k(t)] \rho(t), \quad (6.1)$$

com a densidade total dada por

$$\rho = \sum_k \rho_k P(k) \quad (6.2)$$

e sua evolução temporal descrita pela equação

$$\frac{d}{dt} \rho(t) = -\rho(t) + \lambda \rho \left[1 - \frac{1}{\langle k \rangle} \sum_k k P(k) \rho_k(t) \right]. \quad (6.3)$$

Próximo ao ponto crítico $\lambda_c = 1$, o PC encontra-se em um regime de baixas densidades, o qual pode ser mapeado em um processo de um passo [84]. Escrevemos as taxas de transições entre estados com n partículas, de acordo com os termos de aniquilação e criação no lado direito da equação (6.3):

$$\begin{aligned} w_{n-1,n} &= n \\ w_{n+1,n} &= \lambda n \left[1 - \frac{1}{\langle k \rangle} \sum_k k P(k) \rho_k(t) \right] \end{aligned} \quad (6.4)$$

em que $w_{m,n}$ corresponde à taxa de transição do estado com n partículas para o estado com m partículas. Com essas taxas, é possível construir uma equação mestra que descreva a evolução

da distribuição de probabilidades $P_n(t)$ de que o sistema esteja em um estado com n partículas:

$$\frac{d}{dt}P_n(t) = \sum_m w_{n,m}P_m(t) - \sum_m w_{m,n}P_n(t). \quad (6.5)$$

No regime de $t \rightarrow \infty$, temos que a derivada da equação (6.1) é zero, resultando na equação

$$\rho_k = \frac{\lambda k \rho / \langle k \rangle}{1 + \lambda k \rho / \langle k \rangle}. \quad (6.6)$$

Levando este resultado nas taxas (6.4) e combinando com a equação (6.5) resulta na EM

$$\frac{d}{dt}P_n(t) = (n+1)P_{n+1} + u_{n-1}P_{n-1} - (n+u_n)P_n, \quad (6.7)$$

em que definimos a função discreta $u_n \equiv \lambda n(1 - \Theta)$, sendo Θ dada por

$$\Theta[\rho] = \frac{\lambda \rho}{\langle k \rangle^2} \sum_k \frac{k^2 P(k)}{1 + \lambda k \rho / \langle k \rangle}. \quad (6.8)$$

Vamos considerar o estado QE para a equação (6.7) fazendo $P_n = P_s(t)\bar{P}_n$ e $dP_s/dt = -\bar{P}_1 P_s$. Dessa forma, obtemos uma relação de recorrência

$$\bar{P}_n = \frac{1}{n} \left[(u_{n-1} + n - 1 - \bar{P}_1) \bar{P}_{n-1} - u_{n-2} \bar{P}_{n-2} \right], \quad (6.9)$$

que pode ser iterada usando a condição de normalização $\sum_{n \geq 1} \bar{P}_n = 1$, em que $n = 2, 3, \dots, N$ e $\bar{P}_0 = 0$. Um algoritmo para essa iteração pode ser escrito da seguinte forma: começamos com um valor arbitrário para $\bar{P}_1^{(0)}$, em que o índice superior indica o número de iterações, e iteramos a equação (6.9) para encontrarmos $\bar{P}_n^{(0)}$. Repetimos esse procedimento usando $\bar{P}_1^{(j+1)} = \bar{P}_1^{(j)} / \sum_n \bar{P}_n^{(j)}$, até que a normalização seja alcançada com uma precisão pré-determinada. Este método pode ser otimizado nas iterações para valores de N grandes, truncando valores de n para os quais a probabilidade de ocorrência decaia exponencialmente, dado que n é uma soma de variáveis aleatórias que assume o perfil de uma distribuição normal para $N \rightarrow \infty$ (teorema do limite central [84]).

O resultado da iteração da equação (6.9) para diferentes valores do expoente γ na distribuição de conectividade $P(k) \sim k^{-\gamma}$ está representado por linhas na Figura 6.1, em que o valor usado para o grau mínimo foi $k_0 = 2$ e para o corte superior $k_c = N^{1/2}$. Os símbolos representam simulações QE do PC em redes *annealed*. Tanto para a abordagem teórica, quanto para as simulações QE, foram usadas redes com $N = 2 \times 10^4$ vértices. No gráfico **A**, inserido na Figura 6.1, é mostrada a concordância entre a nossa abordagem via EM e os resultados obtidos pelas simulações do PC para a cauda da distribuição QE. Já o gráfico **B**, inserido na mesma figura, mostra que para redes com $N = 10^2$ vértices existe uma discrepância entre teoria (linhas) e si-

mulação (símbolos). Isso porque nossa abordagem via EM não se aplica para redes pequenas, devido à densidade alta de partículas. À medida em que $N \rightarrow \infty$, a densidade de partículas decai e um resultado melhor é obtido para esse mapeamento.

Um outro fato importante sobre o regime de aplicação dessa abordagem via EM é que na criticidade de transição em que o PC está em um regime de baixas densidades, ela equivale à abordagem via equação de Langevin desenvolvida na referência [62]. A conexão entre as duas abordagens pode ser feita através das respectivas equações de Fokker-Planck (FP). A forma geral de uma equação FP para uma variável estocástica x é [84]

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} A(x) P(x, t) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} D(x) P(x, t), \quad (6.10)$$

em que $A(x)$ e $D(x)$ são, respectivamente, os termos de arraste e de difusão. Da análise de Langevin [62] resulta que $A(n) = n[\lambda - 1 - \lambda\Theta(n/N)]$ e $D(n) = 2\lambda n\Lambda(n/N)$ em que Θ é dado pela equação (6.8) e

$$\Lambda(\rho) = \sum_k \frac{kP(k)}{\langle k \rangle [1 + \lambda k \rho / \langle k \rangle]^3}. \quad (6.11)$$

Além disso, para um processo de um passo arbitrário, os termos de arraste e difusão da equação de FP são dados por [84] $A(n) = w(n+1, n) - w(n-1, n)$ e $D(n) = w(n+1, n) + w(n-1, n)$, respectivamente. Das taxas (6.4) resulta exatamente o termo de arraste obtido com a abordagem de Langevin, enquanto que o termo de difusão toma a forma $D(n) = (1 + \lambda)n + \lambda\Theta(n/N)$. No regime de baixas densidades, podemos expandir Θ e Λ até a ordem dominante $O(\Theta)$ e encontrar em ambas abordagens que $D(n) \simeq 2n + O(\Theta)$. Portanto, essas abordagens são equivalentes nesse regime.

A Figura 6.2 mostra a comparação dos resultados obtidos para redes grandes (com 10^6 e 10^7 vértices) por meio de simulações do PC em redes *annealed* e os resultados obtidos via a iteração da relação de recorrência (6.9). Essa comparação para diferentes valores de λ sugere que mesmo na fase supercrítica em que $\lambda > \lambda_c$, a análise feita com a relação de recorrência (6.9) também é válida desde que a densidade de partículas ainda seja suficientemente pequena. Essa verificação será mostrada com mais detalhes no final deste capítulo.

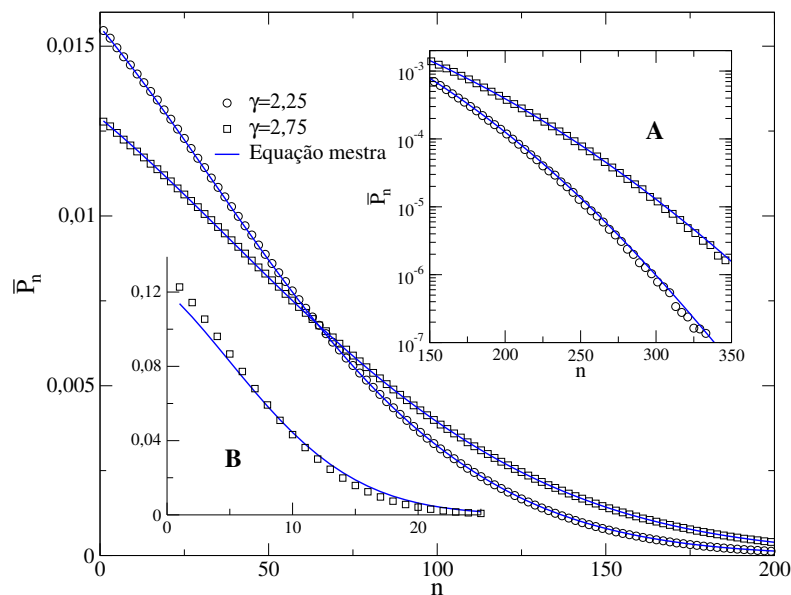


Figura 6.1: Distribuição de probabilidades QE na criticalidade obtida pelas simulações do PC em rede *annealed* sem escala com o grau de corte $N^{1/2}$ comparadas com soluções numéricas da equação (6.9). No gráfico principal temos redes de tamanho $N = 2 \times 10^4$. No gráfico A são mostradas as curvas do gráfico principal em escala logarítmica para comparação do comportamento assintótico das distribuições e o gráfico B mostra as distribuições QE para uma rede pequena, com $N = 10^2$ e $\gamma = 2,75$.

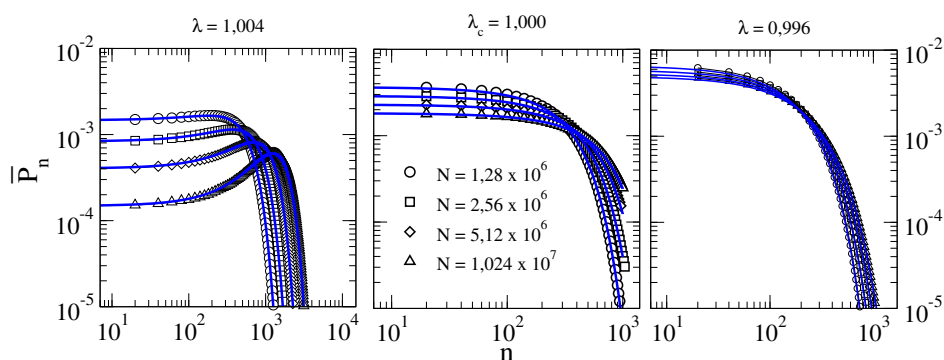


Figura 6.2: Comparação entre resultados obtidos para a distribuição QE de partículas \bar{P}_n através de simulações numéricas com os resultados obtidos via iteração da EM do PC em redes *annealed* com $\gamma = 2,25$, $k_0 = 2$ e $k_c = N^{1/2}$.

6.3 Aproximação analítica na criticalidade

Na referência [85], as propriedades QE do PC foram estudadas em um grafo completo [63]. A teoria de ETF para a transição do PC em grafos completos, descreve a escala para o tempo característico QE como assumindo a forma $\bar{\tau} \sim N^{1/2}$ e a densidade QE de partículas decaindo segundo a relação $\bar{\rho} \sim N^{-1/2}$. Além disso, foi obtido nessa referência uma relação de recorrência para a solução numérica da EM que descreve o PC em grafos completos com N vértices

$$\bar{P}_n = \frac{1}{n} [q_{n-1} - \bar{P}_1] \bar{P}_{n-1} + (n-2)(N-2-n) \frac{\lambda}{N} \bar{P}_{n-2}, \quad (6.12)$$

em que $q_n = [(\lambda/N)(N-n) + 1]$. A distribuição QE de partículas \bar{P}_n segue uma função de escala segundo a equação

$$\bar{P}_n = \frac{1}{\sqrt{N}} f\left(\frac{n}{\sqrt{N}}\right) \quad (6.13)$$

para o limite de $N \rightarrow \infty$ em que $(1/\sqrt{N})$ é um fator de normalização e $f(x)$ uma função de escala que foi verificada numericamente.

Já em redes heterogêneas aparece a dependência do fator g na teoria ETF [61, 62], fazendo com que a expectativa seja que as relações de escala para as quantidades QE obedecem agora as relações $\bar{\tau} \sim (N/g)^{1/2}$ e $\bar{\rho} \sim (gN)^{-1/2}$ (ver capítulo 5). Mas note que no ponto crítico ($\lambda = \lambda_c = 1$) nossa relação de recorrência (6.9) corresponde exatamente à equação (6.12)¹ quando consideramos o regime de baixas densidades, no qual $u_n = \lambda n(1 - \lambda n/\Omega)$ em que $\Omega = N/g$. Por essa razão, aplicamos diretamente o resultado da equação (6.13) para obter a distribuição QE para a equação (6.9):

$$\bar{P}_n = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} f\left(\frac{n}{\sqrt{\Omega}}\right). \quad (6.14)$$

Levando a equação (6.14) na relação de recorrência (6.9), podemos expandi-la em série de Taylor (até a ordem dominante Ω^{-1}) e obter o resultado:

$$x \frac{d^2}{dx^2} f(x) + (2 + x^2) \frac{d}{dx} f(x) + 2xf(x) = -f_0 f(x), \quad (6.15)$$

em que $f_0 = \bar{P}_1 \Omega^{1/2} = f(0)$ deve impor a normalização $\int_0^\infty f(x) dx = 1$. A equação (6.15) foi obtida originalmente na referência [85] e resolvida numericamente. Obteremos agora aproximações analíticas para essa equação. A distribuição de partículas decai linearmente quando $f(x) \simeq f_0(1 - f_0 x/2)$, para $x \ll 1$ e uma correção para esse comportamento inicial pode ser obtida descartando o termo $xf''(x)$ (aproximação para uma curvatura pequena), cuja solução que

¹Existe um erro de digitação na equação (11) da referência [85]

satisfaz a condição de contorno $f(0) = f_0$ é:

$$f(x) \simeq \frac{2f_0}{2+x^2} \exp\left[-\frac{f_0}{\sqrt{2}} \arctan\left(\frac{x}{\sqrt{2}}\right)\right]. \quad (6.16)$$

Para $x \gg 1$, os termos de ordem zero são descartados e a equação (6.15) se torna $f'' + xf' + 2f \simeq 0$. A solução satisfazendo a condição $xf(x) \rightarrow 0$ à medida em que $x \rightarrow 0$ é

$$f(x) \sim \exp\left(\frac{-x^2}{2}\right), \quad (6.17)$$

implicando em uma cauda gaussiana. A Figura 6.3 mostra os comportamentos assintóticos de \bar{P}_n comparados com simulações QE para a transição do PC em redes *annealed* com $N = 1,6 \times 10^5$ vértices, $\gamma = 2,25$ e corte estrutural ($\omega = 2$). O resultado analítico é corroborado pelas simulações numéricas mesmo para a aproximação dada pela equação (6.16) para $x \approx 1$ ou, equivalentemente, para um número de partículas $n \simeq \sqrt{\Omega}$. Particularmente, para o resultado na Figura 6.3 temos que $\sqrt{\Omega} \simeq 147$. A concordância entre essas duas análises se mantém para redes pequenas ($\sim 10^3$) independentemente do expoente γ e da escala para o grau de corte k_c .

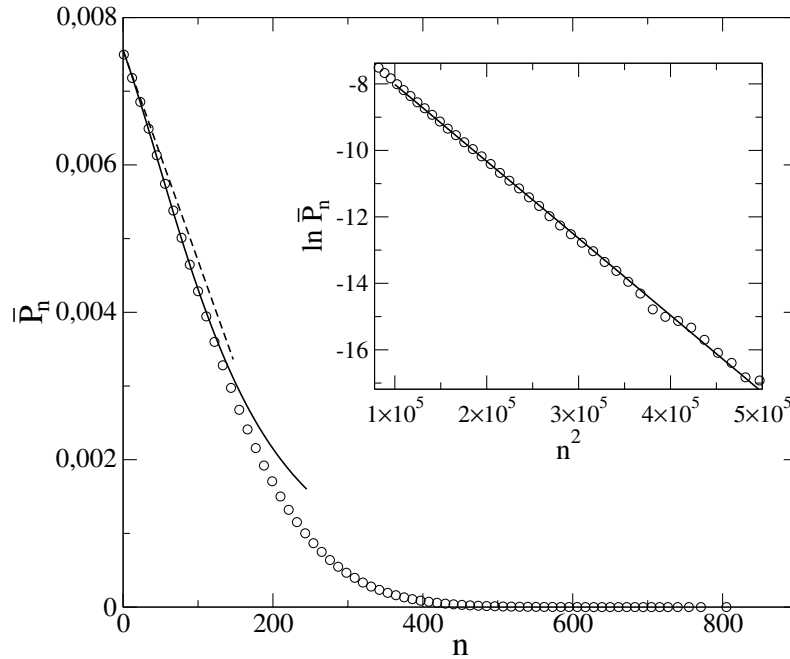


Figura 6.3: Comparação entre a simulação numérica do PC na criticalidade em rede *annealed* e os comportamentos assintóticos da distribuição quase estacionária. No gráfico inserido é mostrada a comparação entre o comportamento assintótico gaussiano e uma linha de inclinação $-1/2\Omega$. Os círculos representam simulações numéricas para $N = 1,6 \times 10^5$, $\gamma = 2,25$ e $\omega = 2$. As linhas cheias são soluções assintóticas enquanto que a linha tracejada é uma aproximação linear para $n/\sqrt{\Omega} \ll 1$.

Além disso, o valor médio do número de partículas no estado QE pode ser obtido dire-

tamente da equação (6.14)

$$\langle n \rangle = \sum_{n=1}^N n \bar{P}_n = \sum_{n=1}^N \left(\frac{n}{\sqrt{\Omega}} \right) f \left(\frac{n}{\Omega} \right), \quad (6.18)$$

que com uma substituição de variáveis $x = n/\sqrt{\Omega}$ e $\Delta x = 1/\sqrt{\Omega}$, a soma pode ser aproximada para o caso contínuo quando $N \rightarrow \infty$:

$$\langle n \rangle = \Omega^{1/2} \sum_{x=m/\sqrt{\Omega}}^{N/\sqrt{\Omega}} x f(x) \Delta x \approx \Omega^{1/2} \int_0^{\infty} x f(x) dx \sim \Omega^{1/2}. \quad (6.19)$$

Disso resulta que

$$\bar{\rho} = \frac{\langle n \rangle}{N} \sim (gN)^{-1/2}, \quad (6.20)$$

recuperando a relação para a densidade de partículas fornecida pela ETF em redes heterogêneas. Da mesma forma, a relação para tempo característico também é obtida por essa análise QE: uma vez que $\bar{P}(1) = f_0/\sqrt{\Omega}$, implica que:

$$\tau = \frac{1}{\bar{P}(1)} \sim \left(\frac{N}{g} \right)^{1/2}. \quad (6.21)$$

6.4 Propriedades de escala na criticalidade

No ponto crítico, a densidade QE de partículas e o tempo característico devem apresentar uma lei de escala com o tamanho N do sistema segundo as hipóteses de ETF $\rho \sim N^{-\hat{\nu}}$ e $\tau \sim N^{\hat{\alpha}}$, respectivamente. Por isso, o ajuste em lei de potência dessas curvas é o critério normalmente empregado para a determinação de pontos críticos em transições de fase com estados absorventes em redes regulares [49]. As Figuras 6.4 e 6.5 mostram os resultados para $\ln \rho$ versus $\ln N$ e $\ln \tau$ versus $\ln N$, no ponto crítico $\lambda_c = 1$. Nessas figuras, os símbolos foram obtidos através de simulação do PC no ponto crítico em redes *annealed*, enquanto as linhas representam os resultados da solução numérica da relação de recorrência (6.9). Ambas as análises são mostradas para diferentes valores de γ .

Apesar da concordância entre essas duas análises, um ajuste em lei de potência das curvas no gráfico principal da Figura 6.4 (redes com corte estrutural $\omega = 2$) revela uma pequena curvatura negativa para $\gamma \leq 5/2$ e positiva para $\gamma > 5/2$. Isso leva a uma discordância com os valores esperados analiticamente para os expoentes $\hat{\alpha} = \max[1/2, (\gamma - 1)/4]$ e $\hat{\nu} = \max[1/2, (5 - \gamma)/4]$ dados nas equações (5.15) e (5.16). Essas divergências dos valores esperados para os expoentes $\hat{\nu}$ e $\hat{\alpha}$ são mostradas nos gráficos **A** e **B**, respectivamente, da Figura 6.4. Esses expoentes são

comparados com seus valores obtidos analiticamente no limite de $N \rightarrow \infty$ e com um ajuste em lei de potência simples (PL). A origem da discrepância mostrada nessa figura está na dependência implícita que N possui do fator g , como observado nas referências [61, 62].

No limite contínuo da distribuição de graus a forma explícita da dependência do fator $g = \langle k^2 \rangle / \langle k \rangle^2$ é dada por

$$g = \frac{(\gamma - 2)^2 k_0^{\gamma-1}}{(\gamma - 1)(3 - \gamma)} \frac{(1 - \xi)^{\gamma-1} (1 - \xi)^{3-\gamma}}{(1 - \xi)^{\gamma-2}} k_c^{3-\gamma} \quad (6.22)$$

em que $\xi = k_0/k_c < 1$ e usamos as equações (4.18) e (4.19). No limite de $N \rightarrow \infty$, o fator g assume a escala $g \sim N^{(3-\gamma)/\omega}$ para $2 < \gamma < 3$ e $g \sim (\text{constante})$ para $\gamma \geq 3$. Considerando redes sem escala em que $2 < \gamma < 3$ e expandindo a equação (6.22) em termos de ξ até sua ordem dominante, encontramos

$$g \simeq \text{constante} \times (1 - \xi^{3-\gamma} + 2\xi^{\gamma-2} \dots) k_c^{3-\gamma}, \quad (6.23)$$

que levando ao comportamento da densidade de partículas previsto pela teoria ETF para redes heterogêneas, $\rho \sim (gN)^{-1/2}$, obtemos a expressão para a densidade estacionária

$$\ln \rho = C - \hat{\nu} \ln N + \frac{1}{2} \frac{k_0^{3-\gamma}}{N^{(3-\gamma)/\omega}} - \frac{k_0^{\gamma-2}}{N^{(\gamma-2)/\omega}} \quad (6.24)$$

e uma expressão similar pode ser encontrada para $\gamma \geq 3$. Essa equação explica os desvios da lei de potência $\rho \sim N^{\hat{\nu}}$, observados para o PC em redes sem escala do tipo *annealed*. O termo dominante para $2 \leq \gamma \leq 5/2$ é negativo causando uma curvatura de mesmo sinal, enquanto que para $\gamma > 5/2$ causa o efeito contrário. Embora as correções desapareçam para $N \rightarrow \infty$, isso ocorre lentamente devido aos valores pequenos dos expoentes envolvidos. Para $\gamma \approx 3$ e $\gamma \approx 2$, as correções são logarítmicas e, portanto, relevantes para qualquer tamanho finito. Por outro lado, introduzindo as correções dadas na equação (6.24) na forma

$$\ln \rho' = \ln \rho - \left(\frac{1}{2} \frac{k_0^{3-\gamma}}{N^{(3-\gamma)/\omega}} - \frac{k_0^{\gamma-2}}{N^{(\gamma-2)/\omega}} \right) = C - \hat{\nu} \ln N \quad (6.25)$$

e fazendo um ajuste linear, o expoente $\hat{\nu}$ é recuperado, como mostra o gráfico **A** inserido na Figura 6.4. Correções equivalentes podem ser obtidas para $\ln \tau$ versus $\ln N$ e o valor esperado para o expoente $\hat{\alpha}$ também é recuperado, como mostra o gráfico **B** na mesma Figura.

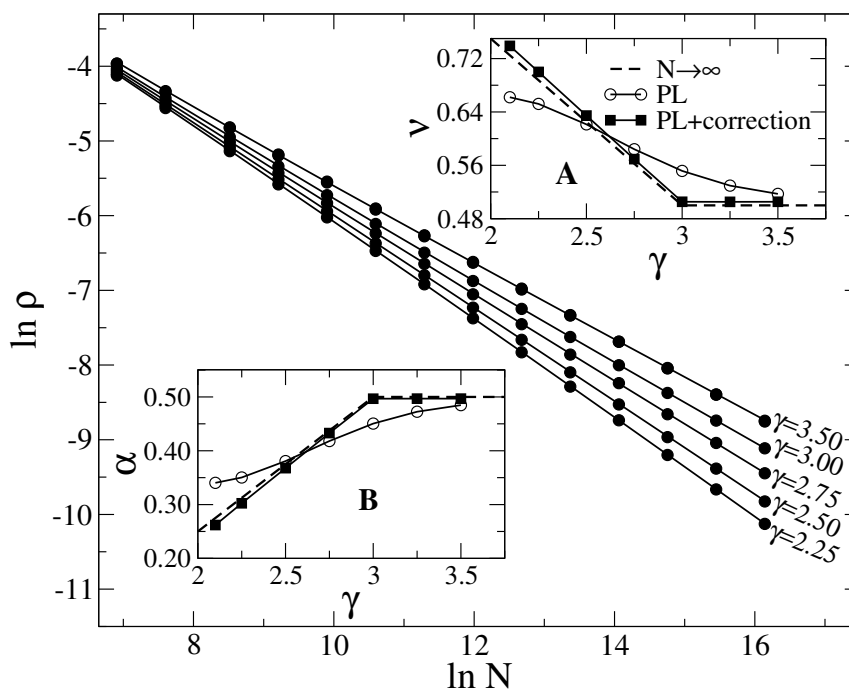


Figura 6.4: A densidade QE para o PC em redes *annealed* com grau de corte $k_c = N^{1/2}$. No gráfico principal as densidades obtidas com a solução numérica da EM está representado por linhas e as simulações QE por símbolos. No gráfico **A** é mostrado o expoente da lei de escala $\bar{\rho} \sim N^{-\hat{\gamma}}$ obtido analiticamente ($N \rightarrow \infty$) representando um ajuste em PL dos dados do gráfico principal e um ajuste para uma PL com correções na escala. No gráfico **B** são feitas as mesmas análises para o tempo característico $\tau \sim N^{\hat{\alpha}}$.

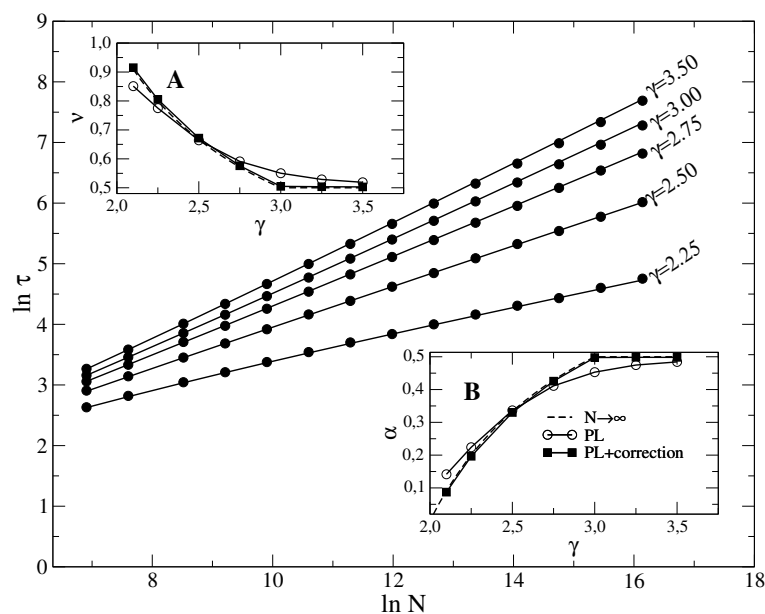


Figura 6.5: Tempo característico para o comportamento crítico do PC em rede *annealed* sem escala com grau de corte $k_c = N^{1/(\gamma-1)}$. No gráfico principal, as linhas representam soluções numéricas da EM e os símbolos simulações QE. Os gráficos **A** e **B** mostram o expoente da lei de escala $\rho \sim N^{\hat{\gamma}}$ e $\tau \sim N^{\hat{\alpha}}$, respectivamente. As legendas são iguais às mostradas na Figura 6.4.

Além disso, uma prova adicional da forte correção para tamanho finito é mostrada na Figura 6.6. A densidade crítica é reescalada pela lei de potência simples com o expoente $\hat{\nu}$ e incluindo as correções dadas pela equação (6.24). Sem a correção, o ajuste depende fortemente do tamanho do sistema ao contrário do comportamento do ajuste com correções. Para $\gamma = 2,25$ e $\omega = 2$ as correções são tão fortes que mesmo mantendo apenas o termo dominante de ordem $O(N^{-0.125})$ não foi suficiente para levar em conta o desvio.

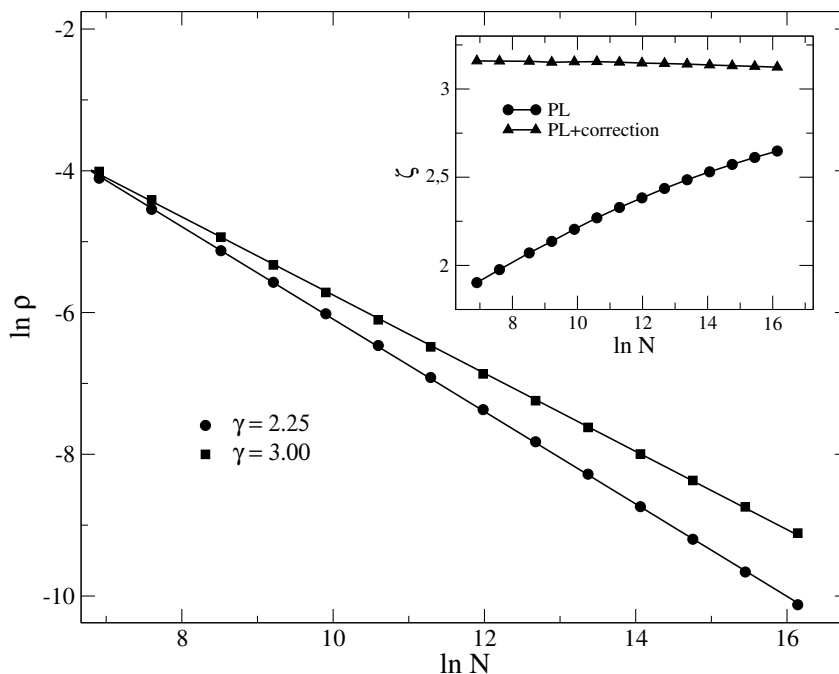


Figura 6.6: Regressões em leis de potência (linhas) das densidades críticas QE (símbolos) para o PC em redes *annealed* sem escala com grau de corte $k_c = N^{1/2}$ e $\gamma = 2.25$ e $\gamma = 3.00$. No gráfico inserido são mostradas as densidades para $\gamma = 2.25$ reescaladas pela lei de potência simples $\zeta = \bar{\rho}N^{0.6875}$ e com correção para a escala $\zeta = \bar{\rho}N^{0.6875}(1 + 2 \times 2^{-0.125} + 3 \times 2^{0.5}N^{-0.25})^{0.5}$.

A mesma análise feita para $\omega = 2$ foi realizada para redes *annealed* com $\omega = \gamma - 1$ correspondendo ao grau de corte natural [35]. Com esse corte, os expoentes previstos para a densidade crítica e o tempo característico - equações (5.16) e (5.15) - são $\hat{\nu} = \max[1/2, 1/(\gamma - 1)]$ e $\hat{\alpha} = \max[1/2, 1/(\gamma - 2)]$, respectivamente. Mais uma vez, esses expoentes só são obtidos se considerarmos as correções para a escala. A Figura 6.5 mostra as análises via EM e simulações. Nos gráficos inseridos, **A** e **B**, são mostradas as análises para os comportamentos dos expoentes $\hat{\nu}$ e $\hat{\alpha}$ para diferentes valores de γ e também para os ajustes em lei de potência simples e lei de potência com correções. Comparando a Figura 6.4 com a Figura 6.5, os desvios relativos entre os expoentes obtidos usando uma lei de potência simples e com uma lei de potência com correção são menores para o corte natural ($\omega = \gamma - 1$). Essa verificação pode ser feita diretamente da equação (6.24): quanto maior o expoente de corte ω , mais fortes serão as correlações.

6.5 Análise quase estacionária na fase super crítica

Espera-se que as análises feitas nas seções anteriores sejam válidas também para a fase supercrítica desde que a densidade de partículas ainda seja suficientemente pequena, como sugere a Figura 6.2 onde é mostrada a concordância entre os resultados para a densidade QE de partículas no regime supercrítico obtidos com a iteração da EM e simulações do PC em redes *annealed* para diferentes valores dos expoentes γ . Isso mostra que mesmo a uma distância considerável do ponto crítico (taxas $\lambda = 1,004$ e $\lambda = 1,040$ representando 0,4% e 4% acima do ponto crítico, respectivamente), a abordagem via EM para o mapeamento do PC em um processo de um passo é adequada. Na Figura 6.7 há uma forte dependência do tamanho do sistema para redes sem escala com $\gamma = 2,25$ e $2,75$. Já para redes com $\gamma = 3,25$, em que o segundo momento da distribuição de graus é bem definido, verificamos que a densidade $\bar{\rho}$ de partículas assume a dependência não monotônica com o tamanho

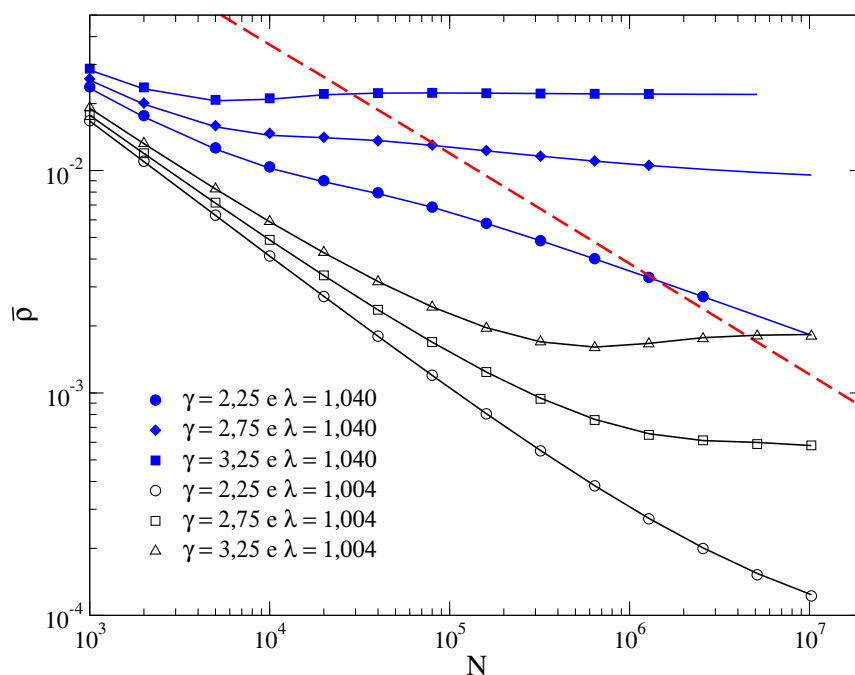


Figura 6.7: Densidades supercríticas como funções do tamanho do sistema para três distribuições de graus diferentes e um grau de corte $k_c = N^{1/2}$. As linhas são soluções numéricas da EM e os símbolos representam as simulações QE.

Esse efeito anômalo da ETF no regime supercrítico, dado pela equação (5.20) em que $\bar{\rho}$ depende simultaneamente de $\Delta = \lambda - \lambda_c$, N e g , é mostrado na Figura 6.8 por meio do colapso dos resultados obtidos com a iteração da equação mestra. São mostrados os valores de $\gamma = 2,25$ e $2,75$, usando o corte estrutural ($\omega = 2$) e natural ($\omega = \gamma - 1$). Foram obtidos colapsos em todos os casos, em concordância com os resultados obtidos nas referências [62, 86].

Nossa abordagem numérica também permitiu uma investigação detalhada dessa dependência anômala na teoria ETF [62] para o comportamento da densidade QE $\bar{\rho}$ de partículas na fase supercrítica - equação (5.20), a qual se expressa pela presença do fator g e é dada por:

$$\bar{\rho} \sim \Delta/g, \text{ se } \Delta > \sqrt{g/N}, \quad (6.26)$$

Dessa forma, analisamos o comportamento da densidade QE reescalada segundo $g^b \bar{\rho}$ como uma função de N (Figura 6.9). Para o expoente teórico $b = 1$, correspondendo à anomalia prevista para a escala, não há um platô nas curvas ($g^b \bar{\rho}$) versus N . Esses platôs previstos só aparecem para $b < 1$. Para $\lambda = 1,040$, os platôs são observados para $b = 0,88$ ($\gamma = 2,25$) e $b = 0,53$ ($\gamma = 2,75$). Na análise feita para a taxa $\lambda = 1.004$, os platôs ocorrem para valores maiores que os da análise anterior: $b = 0,95$ ($\gamma = 2,25$) e $b = 0.56$ ($\gamma = 2,75$) e há uma escala consistente com $b = 1$ para $\gamma = 2,25$ ao contrário dos resultados para $2,75$. Isso porque a escala anômala (6.26) é válida para $\sqrt{g/N} < \Delta \ll g\langle k \rangle/k_c$. Para $\omega = 2$, os lados dessa desigualdade obedecem as relações

$$\sqrt{g/N} \simeq \tilde{c}_\gamma N^{-(\gamma-1)/4} \quad (6.27)$$

e

$$g\langle k \rangle/k_c \simeq c_\gamma N^{-(\gamma-2)/2}, \quad (6.28)$$

em que $\tilde{c}_\gamma^2 = k_0^{\gamma-1}(\gamma-1)(\gamma-2)^2/(3-\gamma)$ e $c_\gamma = k_0^\gamma(\gamma-2)/(3-\gamma)$, sendo $c_\gamma > \tilde{c}_\gamma$ duas constantes de mesma ordem. Logo, se o valor de γ é próximo a 3, os expoentes envolvidos nos limites inferior e superior de Δ são muito próximos e, portanto, não podemos fazer com que o valor de Δ seja suficientemente pequeno e ainda satisfaça um limite superior muito maior do que o inferior como requer a desigualdade (6.26), exceto para sistemas enormes inacessíveis numericamente. Por essa razão, a anomalia da escala só pode ser vista para valores de γ próximos a 2 e as formas de escala com $b < 1$ são metaestáveis atravessando os limites entre os regimes $\rho \sim (gN)^{-1/2}$ e $\rho \sim \Delta/g$ que pode durar por décadas e serem alcançadas somente através de simulações em sistemas enormes, ainda maiores do que os usados neste trabalho (até $N = 10^9$ para as soluções da EM).

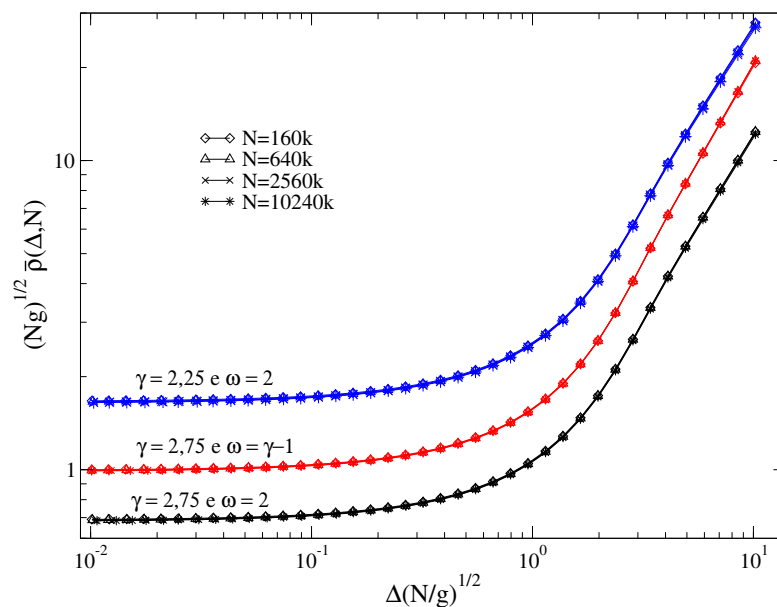


Figura 6.8: Colapsos das soluções numéricas da EM usando a função de escala anômala dada pela equação (5.20) (Os dados foram deslocados para evitar sobreposições).

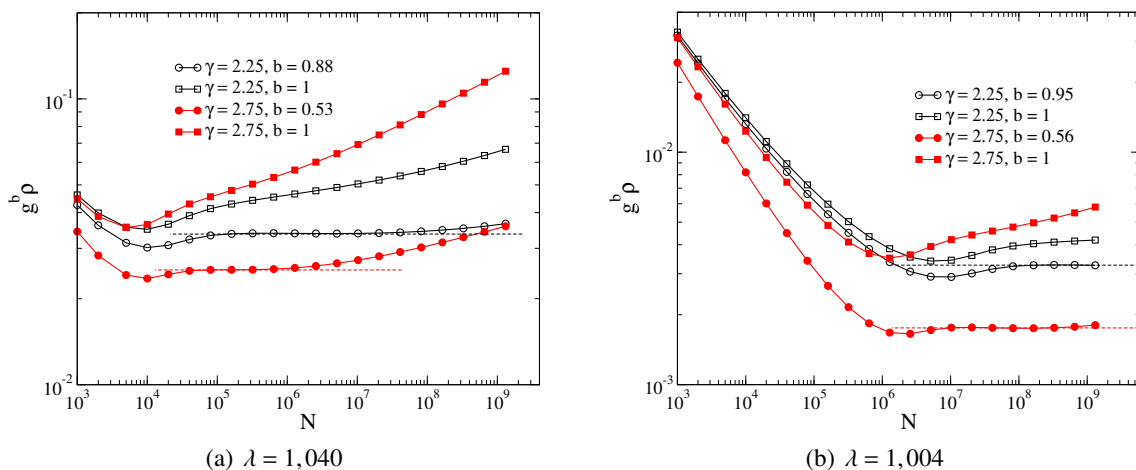


Figura 6.9: Verificação da ETF anômala $\bar{\rho} \sim \Delta/g^b$ na iteração da EM na fase supercrítica do PC com $\omega = 2$.

6.6 Conclusões sobre o processo de contato em redes *annealed*

O PC em redes sem escala apresenta uma riqueza em suas características mesmo ocorrendo em uma topologia aleatória simples, como é o caso da aproximação *annealed*. Exploramos propriedades QE desse processo combinando duas formas de análises: nossa abordagem via EM associada ao mapeamento do PC em um processo de um passo e simulações. As distribuições e quantidades QE determinadas através da solução da EM concordam com os resultados obtidos diretamente da simulação do PC tanto no ponto crítico de sua transição para o estado absorvente como no regime supercrítico. A precisão de nossos dados permitiu identificar as correções que mascaram os expoentes corretos (obtidos analiticamente através da solução exata de uma aproximação de campo médio) para a escala de tamanho finito de quantidades críticas.

A densidade crítica QE de partículas e o tempo característico mostram uma tênue curvatura quando tentamos descrever o comportamento destas quantidades em função do tamanho do sistema através de um decaimento em lei de potência simples. Esse efeito de curvatura deve-se à finitude do sistema e leva a expoentes diferentes daqueles esperados pela teoria ETF. Para redes *annealed*, em que o ponto crítico é conhecido, pudemos determinar as correções para a escala analiticamente e então recuperar os expoentes teóricos previstos pela ETF inclusive na fronteira entre heterogeneidade e homogeneidade, quando a rede perde sua propriedade de escala. Além disso, a análise da região supercrítica mostrou que nesse regime as correções para sistemas de tamanho finito também são relevantes. De fato, o comportamento assintótico da teoria de escala só é observado para sistemas muito maiores do que os atualmente alcançados em simulações.

A análise quase estacionária usual assume uma dependência no parâmetro de ordem do tamanho do sistema como uma lei de potência simples. Esse critério é frequentemente usado para a determinação de pontos críticos de transições de fase com estados absorventes. Com nossa análise via EM mostramos que ao contrário do que acontece em redes regulares, as correções para a escala crítica desaparecem muito lentamente com o aumento do tamanho do sistema sendo importantes mesmo em sistemas enormes ($N \sim 10^7$ neste trabalho). Estes relatos poderão ter um impacto na análise de processos dinâmicos com estados absorventes em redes complexas e para o PC em particular. O método QE aplicado a redes complexas abre caminho para uma caracterização mais detalhada de transições de fase com estado absorvente, inclusive para o caso mais realista de redes *quenched* em que a vizinhança de cada vértice permanece inalterada durante toda a evolução temporal.

7 *Simulações quase estacionárias do processo de contato em redes quenched*

Processos dinâmicos são muito afetados pelo tipo de estrutura em que se desenvolvem. Por esse motivo, os métodos teóricos sofreram adaptações para oferecer uma descrição mais adequada do comportamento desses processos em redes sem escala [10]. Entretanto, foi relatado na referência [54] uma aparente falha da teoria HMF na descrição do PC em redes desse tipo. Com isso, iniciou-se uma longa discussão sobre qual teoria seria adequada para descrever a transição do PC, que culminou na disputa entre duas abordagens concorrentes [56, 61]. Por outro lado, mostramos no capítulo anterior que ao levarmos em conta correções para a teoria ETF [61], o PC é corretamente descrito em redes annealed sem escala. Neste capítulo, mostramos que a teoria HMF também descreve corretamente a criticalidade do PC em redes quenched desde que corrigida sua ETF não trivial. Os resultados deste capítulo foram publicados na referência [43].

Redes do tipo quenched

A exemplo do capítulo anterior, é oportuno dizer o por quê de agora trabalharmos com redes do tipo quenched. Essas redes configuram um caso mais realista que a aproximação *annealed*. Em substratos *quenched*, a vizinhança de cada vértice permanece inalterada durante toda a evolução temporal, que por sua vez, induz correlações dinâmicas, de ordem $O(dt)$ na vizinhança de um vértice ocupado, por esse poder replicar sua partícula em apenas um dos seus k vizinhos. Além disso, como veremos adiante, estendemos nossas análises para o estudo de redes sem escala do tipo *quenched* (com N vértices), assumindo o corte (superior) natural $k_c = N^{1/(\gamma-1)}$ na distribuição heterogênea de graus $P(k)$. Essa análise do corte natural é interessante, uma vez que, na referência [35], Dorogovtsev *et al* relataram que mesmo sem a imposição de um corte na distribuição, o corte natural emerge espontaneamente em redes com distribuição de graus em lei de potência, sendo esse o corte frequentemente encontrado em redes reais [37].

7.1 Introdução

Em 2006, Claudio Castellano e Romualdo Pastor-Satorras publicaram um trabalho com a investigação numérica e uma teoria de campo médio heterogênea (HMF) do comportamento do PC em redes sem escala [54] do tipo *quenched*. Foi uma grande surpresa seus resultados apontarem para uma falha das previsões feitas pela teoria HMF para o comportamento do PC. Essa teoria é desenvolvida no limite de redes infinitas e suas previsões não podem ser diretamente verificadas através de simulações em sistemas computacionais, porque existem efeitos causados pela finitude desses sistemas. O erro cometido neste trabalho foi assumir que os conceitos de teoria ETF conhecidos para redes regulares [49] se aplicava diretamente às redes sem escala.

Na referência [61], foi proposto que o comportamento do PC em redes sem escala não depende somente do tamanho N do sistema, ao contrário do que acontece em redes regulares. Existe também a dependência dos momentos da distribuição de graus $P(k)$: isso está relacionado com a maneira com que o maior grau k_c da rede diverge com o aumento de N . Entretanto, mostramos no capítulo anterior que quando essas correções são levadas em conta, a teoria HMF prevê corretamente o comportamento do PC em redes *annealed* sem escala. Antes disso, Hong et al. [56] propuseram um teoria de campo médio que chamaram de “excitação de gotículas” ou “Droplet mean-field”(DMF). Nesta teoria, o espalhamento da atividade a partir de uma perturbação do vácuo (a gotícula) foi analisado e concluído que os expoentes da ETF não dependem do corte da distribuição. Surgiu então, uma competição entre duas teorias.

Nós aplicamos o método QE (capítulo 5) para estudar a transição de fase para o estado absorvente do PC em redes sem escala do tipo *quenched*. Para isso, assumimos que a hipótese da teoria ETF em redes *quenched* tem a mesma forma não trivial encontrada em redes *annealed*. Dessa forma, conseguimos obter o ponto crítico e os expoentes de escala associados à descrição do comportamento do PC em sua transição de fase e apontamos para a teoria HMF como sendo a adequada para essa descrição.

Redes quenched sem escala

As redes *quenched* sem escala foram construídas segundo o modelo CM [77, 78], em que um grau k é previamente assinalado para cada vértice segundo uma variável aleatória com distribuição em lei de potência, do tipo $P(k) = Ak^{-\gamma}$ e limitada pelos valores dos cortes k_0 (inferior) e k_c (superior). Assim, a distribuição tem um corte rígido $k_c = N^{1/\omega}$, em que $\omega \geq \gamma - 1$ é o expoente de corte (seção 4.5). Investigamos dois modelos para assinalarmos uma aresta

entre dois vértices: (i) o modelo UCM [79], em que dois vértices são ligados ao acaso evitando múltiplas e autoligações com k_c fixo no valor do corte estrutural $k_c = N^{1/2}$. Este modelo produz redes sem escala não correlacionadas; e (ii) o modelo de configurações ordenadas (OCM), proposto nesta tese e descrito a seguir.

Modelo de configurações ordenadas - OCM

Quando lidamos com o corte natural $k_c = N^{1/(\gamma-1)}$ usando o algoritmo CM há um esforço computacional muito grande para gerar redes de tamanhos superiores a 10^5 vértices. Isso porque em redes sem escala surge uma fração não negligenciável de múltiplas conexões [76] causada pela divergência de $\langle k^2 \rangle$. Para tratar esse problema construímos um modelo que permite construir redes sem escala com tamanhos da ordem de 10^7 vértices e corte natural.

No modelo OCM tudo se passa como no algoritmo CM. Porém, após a criação da lista de cópias precisamos ordená-la segundo a ordem decrescente de graus. Depois, as k arestas do vértice de maior grau se ligam a outros k vértices escolhidos ao acaso, respeitando a saturação dos graus previamente assinalado de cada um deles. Uma vez estabelecidas as ligações do vértice de maior grau, esse procedimento é feito para o segundo vértice de maior grau da rede, e assim por diante, até que todas as conexões sejam estabelecidas. Como consequência, o modelo OCM produz redes com correlações desassociativas, em que os vizinhos de um vértice muito conectado possuem na média um menor número de ligações.

Simulações quase estacionário do processo de contato

A distribuição QE de partículas \bar{P}_n foi calculada durante um intervalo de tempo $t_a = 10^6$, após um tempo de relaxação $t_r = 10^6$ passos. Com isso, determinamos a densidade QE $\bar{\rho}$ de partículas e o tempo característico QE $\bar{\tau}$ com as equações (5.26) e (5.25), respectivamente. A evolução do PC foi realizada sobre um *ensemble* de redes para uma média sobre várias configurações topológicas. Foram usadas entre 200 e 500 amostras de redes para cada valor de N variando entre 10^4 até 10^7 vértices.

7.2 Determinação do ponto crítico

Como mostramos no capítulo anterior, o critério de lei de potência que é frequentemente usado em redes regulares, pode ser enganoso se correções da forma (5.13) e (5.14) estão presentes. Por essa razão, usamos o critério de interseção de curvas da razão entre momentos do

parâmetro de ordem $\bar{\rho}$ (densidade QE de partículas), como uma alternativa para a determinação de pontos críticos. O cumulante reduzido de quarta ordem de Binder $U_4 = 1 - \langle \bar{\rho}^4 \rangle / 3 \langle \bar{\rho}^2 \rangle^2$ é uma quantidade padrão para a determinação de pontos críticos em sistemas magnéticos [87], por não depender do tamanho do sistema na transição de fase: isso implica que as curvas U_4 versus (parâmetro de controle) para tamanhos diferentes do sistema se cruzam no ponto crítico. Generalizando, as razões entre momentos são definidas como [88]

$$M_{rs}^q = \frac{\langle \bar{\rho}^q \rangle}{\langle \bar{\rho}^r \rangle \langle \bar{\rho}^s \rangle}, \quad r + s = q. \quad (7.1)$$

Como o parâmetro de ordem é positivo definido, não há restrições para os valores de r e s a serem considerados. A razão pela qual a interseção de curvas M_{rs}^q versus $p = 1/(1 + \lambda)$ é independente do tamanho do sistema pode ser verificada com a forma assintótica de escala da distribuição QE de partículas \bar{P}_n dada pela equação (6.14). A partir dessa equação, temos que

$$\langle n^z \rangle = \sum_{n=1}^N \left(\frac{n}{\sqrt{\Omega}} \right)^z f\left(\frac{n}{\Omega}\right) = \sqrt[3]{\Omega} \sum_{x=1/\sqrt{\Omega}}^{N/\sqrt{\Omega}} x^z f(x) \Delta x = \sqrt[3]{\Omega} \int_0^{\infty} x^z f(x) dx, \quad (7.2)$$

em que aproximamos a soma para o caso contínuo e fizemos a substituição de variáveis $x = n/\sqrt{\Omega}$ e $\Delta x = 1/\sqrt{\Omega}$. Consequentemente, a razão entre momentos $M_{rs}^q = a_q/a_r a_s$, em que $a_z = \int_0^{\infty} x^z f(x) dx$, é independente do tamanho do sistema.

Para validar este critério o aplicamos ao PC em redes *annealed*, em que o ponto crítico é conhecido exatamente, sendo $p_c = 0,5$ (ou equivalentemente, $\lambda_c = 1$). A Figura 7.1 mostra os resultados obtidos. A razão entre momentos também possui correções para efeitos de tamanho finito em redes *annealed* assim como a densidade de partículas e o tempo característico. O ponto de interseção entre curvas converge para $p = 0,5$ somente no limite de $N \rightarrow \infty$. Essa convergência é particularmente rápida para razões entre momentos de ordens maiores, apesar dessas serem mais susceptíveis a flutuações estatísticas do que as de ordens baixas. Investigamos até a razão de quarta ordem entre momentos e os resultados dessa análise em rede *annealed* mostram que os pontos de interseção possuem um valor universal independente de γ . A razão de segunda ordem entre momentos $M_{11}^2 = 1,667(3)$ é ligeiramente maior que o valor 1,660 encontrado para o PC em um grafo completo [85]. Os resultados para outras ordens são: $M_{21}^3 = 2,190(4)$ e $M_{22}^4 = 3,452(3)$.

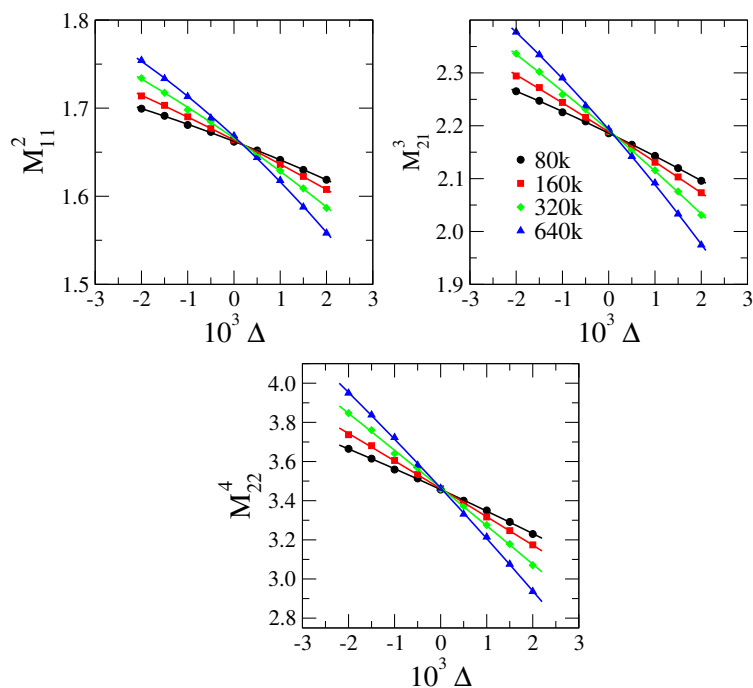


Figura 7.1: Razão entre momentos como função da distância ao ponto crítico $\Delta = (p - p_c)$ para o PC em redes *annealed* com $\gamma = 2,75$ e $\omega = 2$.

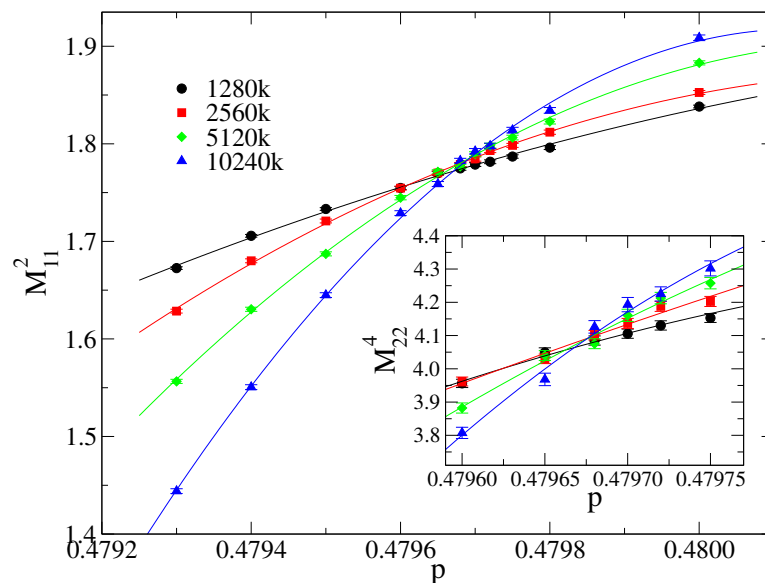


Figura 7.2: Razão entre momentos em função da probabilidade de aniquilação de partículas, p , para o PC em redes construídas segundo o modelo UCM com $\gamma = 2,75$ e $k_0 = 6$. Os símbolos representam simulações numéricas e as linhas são guias para os olhos. A razão de quarta ordem é mostrada no gráfico inserido.

As razões de segunda e quarta ordem entre momentos analisadas para o PC em redes *quenched* são mostradas na Figura 7.2. Os resultados para as razões de terceira ordem entre momentos para diferentes valores do expoente de conectividade γ são mostrados na Figura 7.3 (a)-(c): quanto maior a heterogeneidade da rede (isto é, quanto menor o valor de γ), maiores são os efeitos de finitude do sistema, sendo necessárias redes maiores para determinar o ponto crítico com uma incerteza pequena. Usamos redes variando seus tamanhos de $N = 1,6 \times 10^6$ até $N = 1,024 \times 10^7$ para $\gamma = 2,75$, e de $N = 1,6 \times 10^6$ até $N = 2,048 \times 10^7$ vértices para $\gamma = 2,25$.

Os pontos críticos foram determinados pela extrapolação dos pontos de interseção entre duas curvas correspondendo aos valores N_a e N_b em função do inverso do valor para a média de seus tamanhos $1/\bar{N} = 2/(N_a + N_b)$, em que assume-se a dependência funcional $\lambda_c(\bar{N}) = \lambda_c + \text{const.}/\bar{N}$. A extrapolação dos pontos de interseção para $\gamma = 2,25$ é mostrada na Figuras 7.3(d). Ainda testamos um correção $\lambda - \lambda_c + CN^{-1}$, mas os resultados foram englobados pelas incertezas apresentadas.

Os pontos críticos e as razões entre momentos determinados para diferentes valores de γ estão reunidos na Tabela(7.1). Esses resultados mostram que a análise feita com a razão entre momentos é um método eficiente para a determinação de pontos críticos de transições de fases com um estado absorvente e em redes complexas. No caso *quenched*, essas razões dependem do expoente de conectividade ao contrário do que acontece em redes *annealed*. À medida em que γ cresce, os valores encontrados para razão entre momentos se aproximam dos encontrados no caso *annealed*. Além disso, como veremos no capítulo 6, os resultados obtidos para os pontos críticos são próximos das previsões feitas pela aproximação de pares heterogênea que desenvolvemos nesta tese e se aproximam do caso *annealed*, $p_c = 1/2$, à medida em que $\gamma \rightarrow 2$.

γ	p_c	M_{11}^2	M_{21}^3	M_{22}^4
2,25	0,4896(1)	1,92(1)	2,77(3)	5,1(1)
2,50	0,48425(5)	1,85(2)	2,62(4)	4,7(1)
2,75	0,47968(3)	1,77(2)	2,42(4)	4,10(9)
3,00	0,47602(3)	1,72(2)	2,32(3)	3,81(7)
3,25	0,47303(3)	1,70(1)	2,25(2)	3,60(7)
ANN	1/2	1,667(3)	2,190(4)	3,452(3)

Tabela 7.1: Os Pontos críticos $p_c = 1/(1 + \lambda_c)$ e as razões críticas entre momentos para o PC em redes construídas segundo o modelo UCM com o valor do menor grau $k_0 = 6$. Os valores correspondentes para redes *annealed* (ANN) foram incluídas para comparação.

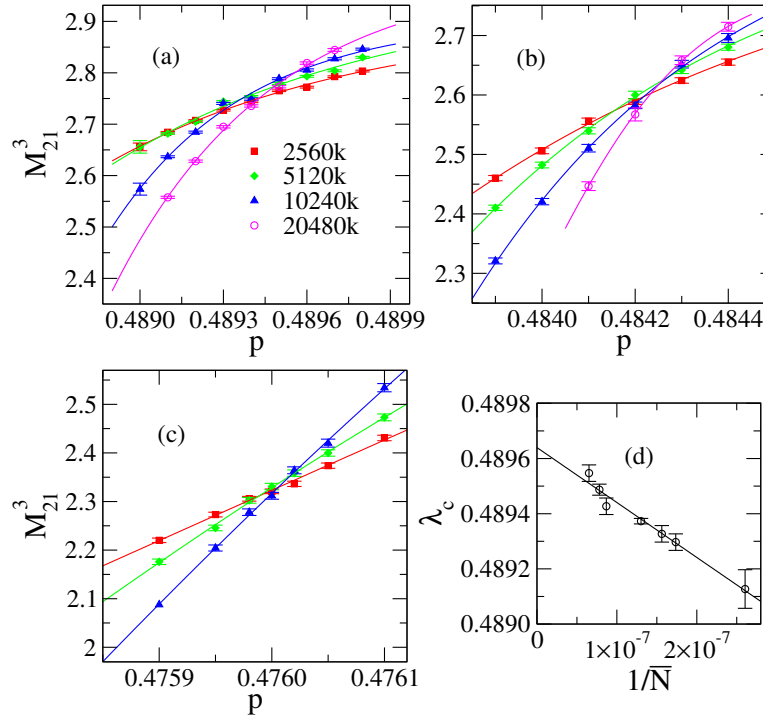


Figura 7.3: resultados para a razão de terceira ordem entre momentos para o PC em redes construídas segundo o modelo UCM com (a) $\gamma = 2, 25$, (b) $\gamma = 2, 50$ e (c) $\gamma = 3, 00$. O valor do menor grau é $k_0 = 6$. Os símbolos representam simulações numéricas e as linhas são guias para os olhos. No gráfico (d) é mostrada a extrapolação usada para determinação do ponto crítico para redes com $\gamma = 2, 25$.

7.3 Determinação dos expoentes críticos

Com o resultado dos pontos críticos para diferentes valores d e γ , determinamos os expoentes que caracterizam a transição PC e examinamos as correções para a ETF. Realizamos a análise da regressão em lei de potência nos gráficos de $\ln \bar{\rho}$ versus $\ln N$ e $\ln \bar{\rho}$ versus $\ln(Ng)$ e uma análise similar para o tempo característico τ assumindo que as equações (5.13) e (5.14) se mantêm para o caso *quenched*. Esses resultados são mostrados nas Figuras 7.4 e 7.5. Tamanhos de rede menores do que $N = 10^5$ vértices foram excluídos da regressão para evitar correções de menor peso para a escala.

Os resultados obtidos numericamente para os expoentes críticos, dados pelas previsões da teoria HMF das equações (5.16) e (5.15), são mostrados na tabela 7.2 e na Figura 7.6. Os expoentes $\hat{\nu}$ e $\hat{\alpha}$ estimados diretamente da regressão em lei de potência como uma função de N para $\gamma = 2, 75, 3, 00$ e $3, 25$ são quantitativamente consistentes com aqueles encontrados para o caso *annealed* com o mesmo tipo de ajuste (capítulo 4), mas possuem valores diferentes daqueles previstos pela teoria HMF no limite de $N \rightarrow \infty$. Isso, porque os expoentes da HMF são

calculados considerando a escala assintótica para g , em que $g \sim k_c^{3-\gamma}$. Entretanto, as correções mais relevantes para a escala

$$g \simeq \text{constante} \times \left[1 - \left(\frac{k_0}{k_c} \right)^{3-\gamma} + 2 \left(\frac{k_0}{k_c} \right)^{\gamma-2} \right] k_c^{3-\gamma} \quad (7.3)$$

não são desprezíveis mesmo para os maiores tamanhos de rede com os quais trabalhamos. Mas ao invés disso, fizemos as regressões $\bar{\rho} \sim (gN)^{-S_\nu}$ e $\hat{\tau} \sim (N/g)^{-S_\alpha}$, obtendo expoentes mais próximos de 1/2 previstos pela teoria HMF ($S_{HMF} = 1/2$) como mostrado na Tabela 7.2.

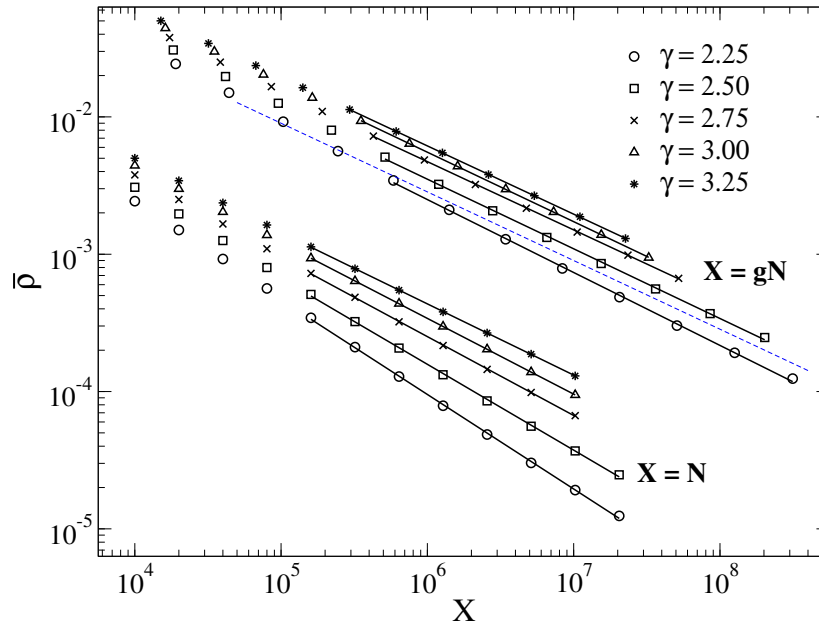


Figura 7.4: Densidade de partículas $\bar{\rho}$ em função do tamanho N do sistema e do termo gN dado pela hipótese de escala com correção para o PC em redes construídas segundo o algoritmo UCM com $k_0 = 6$. Os símbolos representam simulações QE e as linhas cheias correspondem às regressões em lei de potência. A linha tracejada tem inclinação igual a 1/2. Dados para $X = gN$ foram deslocados para facilitar a visualização.

γ	ν	ν_{HMF}	ν_{DMF}	α	α_{HMF}	S_ν	S_α	S_{HMF}
2.25	0.69(2)	0.6875	8/10	0.31(2)	0.3125	0.52(2)	0.43(3)	1/2
2.50	0.63(1)	0.6250	0.6667	0.37(1)	0.3750	0.51(1)	0.49(2)	1/2
2.75	0.57(1)	0.5625	0.5714	0.43(1)	0.4375	0.50(1)	0.50(2)	1/2
3.00	0.55(1)	1/2	1/2	0.44(2)	1/2	0.51(1)	0.48(2)	1/2
3.25	0.51(2)	1/2	1/2	0.47(2)	1/2	0.49(2)	0.49(2)	1/2

Tabela 7.2: Expoentes da ETF para o PC em redes construídas segundo o algoritmo UCM com $k_0 = 6$. Os números entre parênteses representam o erro no último dígito dado pelo desvio padrão dos expoentes obtidos pelo ajuste das curvas mais próximas do ponto crítico, sendo uma acima e outra abaixo de λ_c .

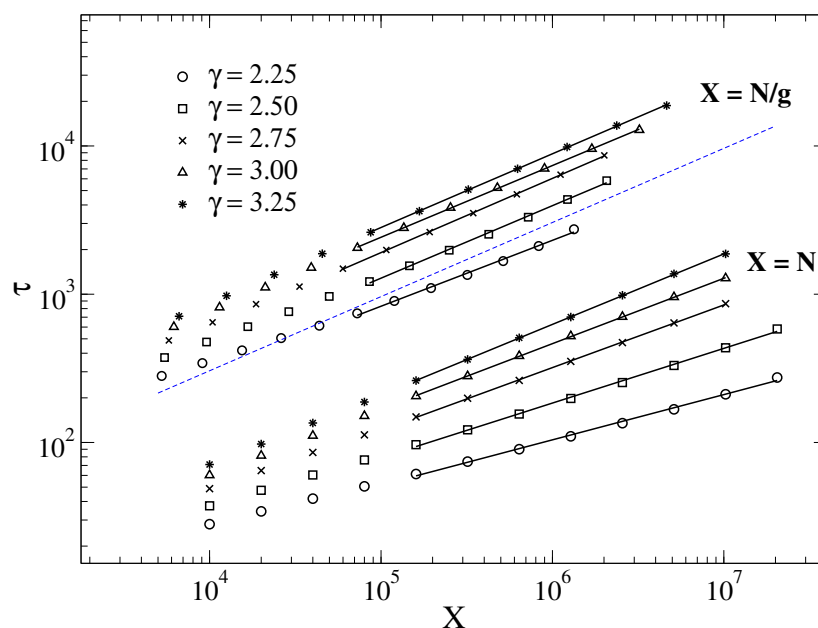


Figura 7.5: Tempo característico τ em função do tamanho N do sistema e do termo N/g dado pela hipótese de escala com correção para o PC em redes construídas segundo o algoritmo UCM com $k_0 = 6$. Os símbolos representam simulações QE e as linhas cheias correspondem às regressões em lei de potência. A linha tracejada tem inclinação igual a 1/2. Dados para $X = gN$ foram deslocados para facilitar a visualização.

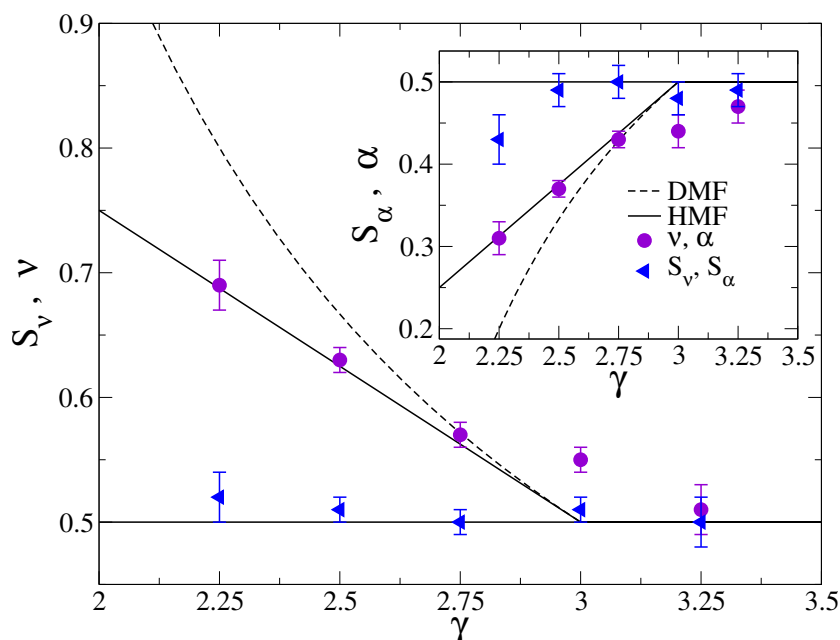


Figura 7.6: Os expoentes da ETF para o PC em redes construídas segundo o algoritmo UCM com $k_0 = 6$ comparados com as previsões das aproximações HMF [54] e DMF [56]. O gráfico principal mostra os resultados das regressões em lei de potência para $\bar{\rho} \sim N^{-\hat{\nu}}$ e $\bar{\rho} \sim (gN)^{-\hat{\nu}}$, enquanto que o gráfico inserido mostra as análises similares feitas para o tempo característico τ .

As correções para a escala do fator g para $\gamma = 2,50$ (Figura 7.6) desaparecem com um decaimento $N^{-1/4}$, sendo o decaimento mais rápido dentro da variação analisada para γ . Por isso, mesmo não incluindo o fator de correção g , tanto o expoente para a densidade de partículas, quanto o expoente para o tempo característico, permanecem em acordo com HMF. Os resultados obtidos com a regressão em lei de potência simples para os expoentes críticos em redes com $\gamma = 2,25$ concordam com a aproximação HMF com exceção da escala de τ versus (N/g) . Essa discordância pode ser devido a efeitos de tamanho finito induzidos por correções pré-assintóticas para o valor médio $\langle k \rangle$, que possivelmente não são previstas pela teoria HMF simples.

A comparação entre os resultados que obtivemos com as predições dadas pelas duas teorias concorrentes, a HMF [54] e a DMF [56], pode ser analisada na Tabela 7.2 e na Figura 7.6.

7.4 Impactos do corte natural na distribuição de conectividades

O corte estrutural $\omega = 2$ vem sendo usado para investigar processos dinâmicos [54, 57, 89] em redes sem escala por prevenir correlações entre graus [76] e tornar a teoria HMF tratável analiticamente. Mesmo assim, o aumento k_c em função de N implica em fortes correções para a escala assintótica [42, 62] e torna a análise numérica difícil em substratos *quenched* muito heterogêneos. Por outro lado, o corte frequentemente encontrado em redes reais [37] é o natural, que emerge em redes com distribuição de graus em lei de potência mesmo sem uma imposição do corte superior [35].

Para trabalhar com o corte natural ($\omega = \gamma - 1$), realizamos também simulações do PC em redes construídas com o modelo OCM. Essa é uma tarefa intrincada sem a utilização desse modelo, pois é praticamente impossível conectar nós de graus muito elevados sem realizar múltiplas conexões se as ligações forem totalmente ao acaso. No modelo OCM, primeiramente conectamos os *hubs* (vértices mais conectados). Isso reduz a probabilidade de sobrar arestas não conectadas no final do algoritmo. A princípio, o modelo OCM introduz muitas correlações entre graus e, portanto, não existe uma expectativa de que a teoria HMF seja válida. Para esse corte, a teoria HMF prevê os expoentes críticos $\hat{\nu} = \max[1/(\gamma - 1), 1/2]$ e $\hat{\alpha} = \max[(\gamma - 2)/(\gamma - 1), 1/2]$.

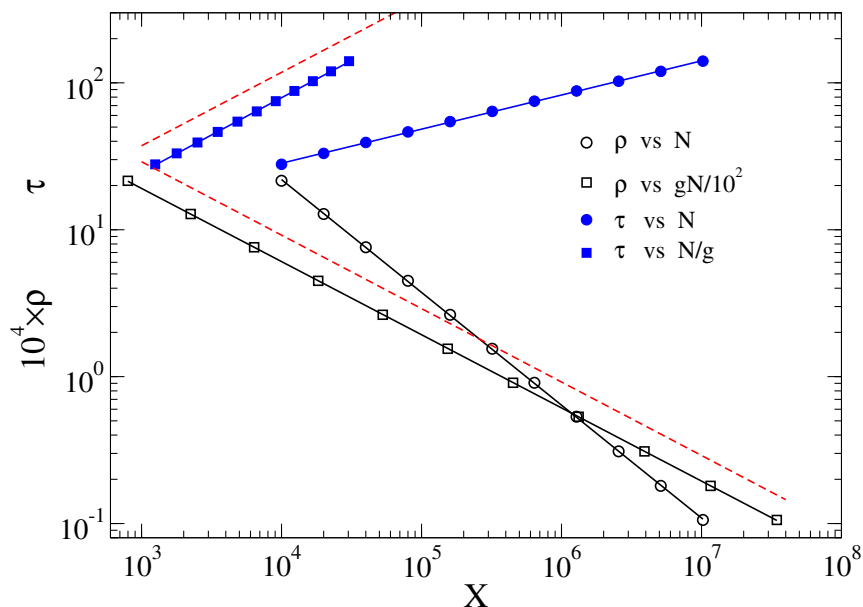


Figura 7.7: Quantidades críticas em redes construídas com o modelo OCM usando $\gamma = 2,25$, expoente de corte $\omega = \gamma - 1$ e grau mínimo na rede $k_0 = 6$. Os símbolos representam simulações QE e as linhas sólidas os ajustes em leis de potência. As linhas tracejadas são leis de potências com inclinação $\pm 1/2$.

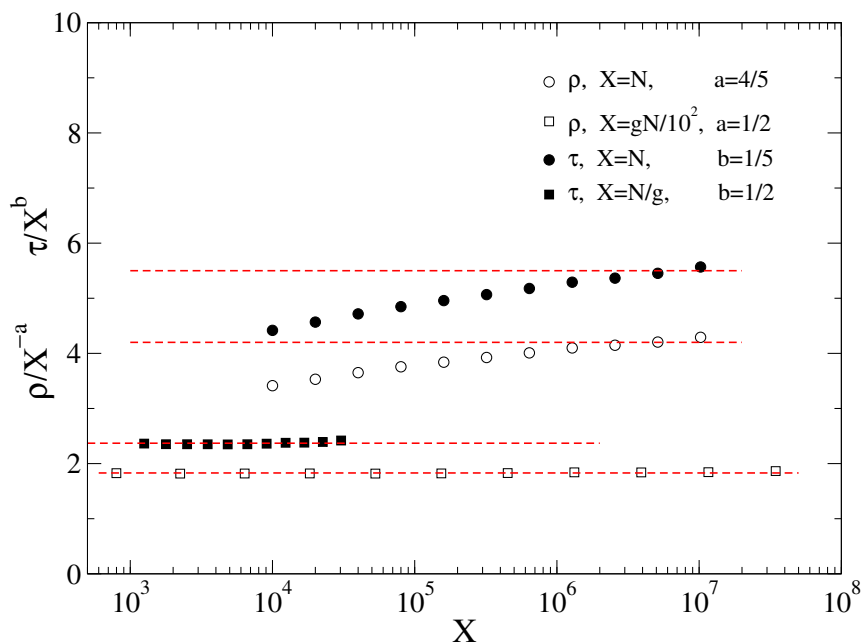


Figura 7.8: Densidade crítica de partículas e o tempo característico rescalados segundo a teoria ETF para o PC em redes OCM.

Apresentamos apenas os resultados para o caso mais heterogêneo $\gamma = 2,25$ com $k_0 = 6$, uma vez que as conclusões para esse caso são válidas para os demais valores de γ . O ponto de interseção para as razões entre momentos converge rapidamente para o valor assintótico, se comparado ao que acontece em redes construídas com o modelo UCM. Os resultados encontrados para o ponto crítico $p_c = 0.4908(1)$ e para as razões entre momentos $M_{11}^2 = 1,714(4)$, $M_{21}^3 = 2,29(1)$ e $M_{22}^4 = 3,78(3)$ são mais próximos das previsões HMF do que os valores para redes com corte estrutural apresentados na Tabela 7.1.

A Figura 7.7 mostra as curvas obtidas por uma regressão em lei de potência sem correção sobre quantidades QE em função do tamanho de redes com $\gamma = 2,25$ e corte natural. Os expoentes críticos obtidos foram $\hat{\nu} = 0,774(5)$ e $\hat{\alpha} = 0,227(5)$. Eles diferem dos valores HMF, $4/5$ e $1/5$, respectivamente, mas também neste caso a discrepância é devido à escala pré-assintótica de g . De fato, a regressão incluindo o fator g resulta nos expoentes $S_\nu = 0,498(4)$ e $S_\alpha = 0,502(5)$ em concordância com a teoria HMF para redes não correlacionadas. Essa concordância é surpreendente, no sentido de que os expoentes HMF são obtidos sobre a hipótese de ausência de correlação entre graus [42,61]. Isso sugere que esse tipo de correlação não afeta, ao menos fortemente, o comportamento do PC.

Uma análise adicional sobre a concordância dos expoentes críticos previstos pela hipótese de escala com os obtidos numericamente com o PC em redes OCM é mostrada na Figura 7.8, em que as quantidades QE foram reescaladas segundo as previsões da HMF. O fator de correção g recupera o comportamento em lei de escala pura previsto pela correção da teoria ETF em redes heterogêneas.

7.5 Conclusões sobre o processo de contato em redes quenched

Neste capítulo, investigamos a transição do PC em redes sem escala do tipo *quenched* com a combinação de simulações QE e os recentes avanços sobre o comportamento da ETF para esse processo em redes sem escala do tipo *annealed*. Determinamos com precisão o ponto crítico de transição para a fase absorvente desse processo aplicando o critério de interseção de curvas para as razões entre momentos da distribuição QE do parâmetro de ordem. Usamos esse critério porque o método normalmente usado para esse fim em redes regulares (ajuste em leis de potência) não se aplica a redes heterogêneas devido a fortes correções para a ETF do PC nessas estruturas. Conhecendo os pontos críticos, obtivemos os expoentes de transição do PC em redes sem escala do tipo *quenched*: mesmo com a presença de correlações dinâmicas in-

trínsecas a essa estrutura, os expoentes críticos obtidos apresentam os mesmos valores daqueles encontrados para o substrato *annealed* que não apresentam correlações desse tipo. Isso indica que a estrutura *quenched* tem pouca influência sobre a dinâmica de transição do PC. Um efeito é afetar a posição do ponto crítico e fazer com que os valores críticos das razões entre momentos dependam do expoente de conectividade γ , enquanto que seus valores são universais no caso *annealed*.

Além disso, verificamos que a teoria HMF descreve corretamente o comportamento do PC em redes com correlações do tipo desassociativas. Isso é surpreendente, no sentido de que essa teoria descarta qualquer tipo de correlação entre seus vértices. Vale a pena dizer, que o estudo em redes desse tipo só foi possível graças ao nosso modelo OCM que tornou possível a construção dessas redes em larga escala.

Levando em consideração os resultados deste capítulo, concluímos que a teoria DMF não é adequada para a descrição do PC em redes *quenched*. Além disso, é oportuno comentar que na referência [56] apenas os resultados para o expoente ν em redes UCM com $\gamma = 2,75$, $2,25$ e $4,00$ são relatados. Para esses valores existe a concordância entre teoria DMF e simulações, embora para $\gamma = 2.25$ os resultados numéricos obtidos não concordam com os nossos. Como nenhum outro valor de γ no regime sem escala é mostrado e nossa análise apresenta resultados consistentes com a teoria HMF, surge a dúvida sobre o rigor dos testes de Monte Carlo realizados nessa referência.

A conclusão que pode ser feita é que HMF descreve (dentro de nossas estimativas de erro) corretamente o comportamento crítico do processo de contato em redes *quenched*, corrigindo a aparente falha das previsões dessa teoria que foram relatadas a alguns anos na referência [54]. É esclarecido agora que essa discrepância entre HMF e resultados numéricos em redes *quenched*, não foram devido a efeitos sutis da topologia, mas sim a anomalias de naturezas não triviais da ETF para o PC.

Entretanto, recapitulando os resultados para $\gamma = 2,25$ (Tabela 7.2), temos que apesar da concordância entre nossos resultados para os expoentes críticos e as previsões da teoria HMF, existe uma falha para as previsões da teoria ETF que prevê o valor $1/2$ para os expoentes críticos com a correção dada pelo fator g . Isso sugere uma restrição desse fator à medida que $\gamma \rightarrow 2$. Portanto, o papel da estrutura de redes *quenched* desse tipo ainda permanece um problema em aberto. No próximo capítulo são apresentados novos resultados para entendermos esse problema.

8 *Redes quenched sem escala revisitadas: ajuste fino para o processo de contato*

A comparação entre os resultados obtidos por simulações numéricas do PC em redes sem escala com $\gamma = 2,25$ e aqueles previstos pela ETF derivada da teoria HMF indica uma imprecisão do fator $g = \langle k^2 \rangle / \langle k \rangle^2$ para a correção de quantidades críticas em redes quenched com $\gamma \rightarrow 2$. A forte heterogeneidade no padrão de conectividade dessas redes parece desempenhar um papel secundário que passa despercebido pela teoria HMF, por tratar apenas das interações ao nível de um vértice e sua vizinhança imediata. Levando isso em consideração, estudamos o papel que a estrutura dessas redes desempenha sobre quantidades QE para procurar uma hipótese violada na conjectura HMF. Além disso, daremos mais um passo na teoria de redes complexas propondo uma aproximação de pares heterogênea a fim de investigar o papel de correlações dinâmicas na vizinhança de um par de vértices.

8.1 Introdução

A forte heterogeneidade nas distribuições de graus em redes sem escala com $\gamma \rightarrow 2$ pode ser decisiva na investigação de propriedades QE de um processo. Nessas redes estão presentes fortes correções de escala (como mostramos no capítulo 7) que levaram a uma aparente discordância das previsões da teoria ETF sobre a transição do PC, como mostra os resultados para $\gamma = 2,25$ na Tabela 7.2. Além disso, a determinação do ponto crítico é cada vez mais complicada à medida em que a heterogeneidade aumenta. Para investigar o papel que a heterogeneidade da rede exerce sobre a dinâmica de um processo PC e o regime de validade da HMF em redes fortemente heterogêneas, nós estudamos a influência de alguns aspectos estruturais de redes sem escala sobre as propriedades QE do PC. Embora grande parte das controvérsias sobre a adequação de aproximações de campo médio para a descrição analítica em substratos heterogêneos tenham sido resolvidas, algumas questões sobre a validade da teoria ETF para essa transição

em redes sem escala com $\gamma \rightarrow 2$ permanecem em aberto.

Nós usamos o método QE para estudar a transição do PC em redes sem escala construídas com o modelo UCM, assumindo o menor grau como sendo $k_0 = 6$. A convergência para o estado QE do processo é obtida rapidamente nessas redes após um tempo de relaxação t_r da ordem de 10^4 passos de tempo. Usamos $t_r = 10^6$ passos em simulações de $t_{max} = 10^7$ e $t_{max} = 10^9$ passos. Um vez atingido o estado QE, a densidade crítica de partículas e o tempo característico do processo foram calculados a partir da distribuição QE de partículas \bar{P}_n determinada durante um tempo de média $t_a = 10^7$ ou 10^9 , dependendo do objetivo de cada parte deste estudo. Nossas análises estão restritas aos pontos críticos de transição do PC, obtidos segundo o critério de interseção de curvas das razões entre momentos como uma função do parâmetro λ .

8.2 Correlações entre medidas estruturais de redes e quantidades QE

A Figura 8.1 mostra o comportamento das estimativas de erro para a razão entre momentos de terceira ordem M_{21}^3 em função do tempo t . Os erros ε_{rs}^q são determinados da forma usual [53] $\sqrt{(\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2)/s}$, em que s é o número de realizações de redes e $x = M_{rs}^q$. O processo foi simulado com tempo de relaxação $t_r = 2 \times 10^5$ passos e em simulações com tempo máximo $t_{max} = 10^9$ passos. As curvas para o comportamento dessas estimativas para as demais razões entre momentos (até quarta ordem) assumem o mesmo comportamento qualitativo, decaindo segundo a relação $\varepsilon_{rs}^q \sim t^{0.5}$ como esperado pelo teorema central do limite para a soma de variáveis aleatórias. Após um tempo de decaimento, as curvas passam a assumir um valor constante indicando um erro residual deixado pela estabilidade das flutuações das quantidades QE. Uma dependência do valor de γ leva a diferentes valores para erro residual indicados pelos platôs nessa figura.

Para $\gamma = 2,25$, os platôs são alcançados após 10^7 e 10^8 passos de tempo para redes com $N = 10^3$ e $N = 10^4$ vértices, respectivamente, sendo necessários tempos maiores que 10^9 passos para redes com mais de 10^5 vértices. Para uma comparação entre o comportamento das estimativas de erro em redes com $\gamma = 2,25$ e com $\gamma = 2,75$, a Figura 8.4 (c) mostra as curvas ε_{21}^3 versus t para redes com $N = 10^6$ vértices. Para $\gamma = 2,75$, o erro residual se estabiliza para tempos maiores que 10^8 passos, enquanto que para redes com $\gamma = 2,25$ o platô só será alcançado para tempos maiores que 10^9 passos.

A diferença nos valores residuais associados aos valores de γ está relacionada à homogeneidade da distribuição de graus $P(k)$ para $\gamma = 2,25$ e $2,75$. Valores para $k \approx k_c$ (cauda da

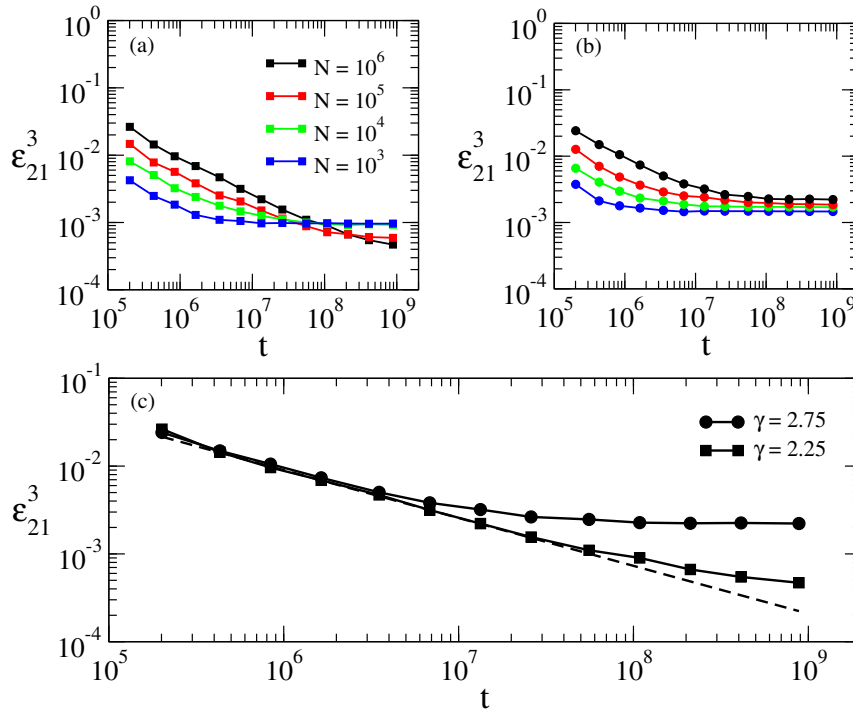


Figura 8.1: Comportamento das estimativas de erro para a razão entre momentos de terceira ordem do PC em redes UCM. (a) $\gamma = 2,25$; (b) $\gamma = 2,75$ (c) A linha tracejada representa um ajuste em lei de potência com expoente igual a 0.5.

distribuição de graus) tem maior ocorrência para $\gamma = 2,25$ que para $\gamma = 2,75$ fazendo com que os elementos do *ensemble* de redes com $\gamma = 2,25$ sejam mais homogêneos entre si. Isso leva a um erro residual menor, uma vez que em ambos os *ensembles* de rede a conectividade está limitada pelo corte estrutural $\omega = 2$.

Uma vez alcançada a estabilidade das flutuações de uma amostra para outra (erro residual nos platôs da Figura 8.1), analisamos o papel de propriedades estruturais de uma rede sem escala sobre quantidades QE do PC. Estudamos as razões entre momentos, para cada realização de rede usada, com o objetivo de encontrar padrões de correlação com as propriedades estruturais de redes que julgamos mais prováveis para uma suposta violação das hipóteses da HMF: o coeficiente de agregação c e a menor distância l entre vértices.

Com base nos resultados da Figura 8.1, a distribuição QE de partículas foi calculada após o tempo de relaxação de $t_r = 10^8$ passos de tempo com o tempo de média de $t_a = 10^9$ passos. As análises para redes com $\gamma = 2,25$ estão restritas aos tamanhos $N = 10^3$ e $N = 10^4$, porque os platôs para os tamanhos $N = 10^5$ e $N = 10^6$ não estão acessíveis em simulações de até $t_{max} = 10^9$ passos de tempo. Por outro lado, pudemos investigar redes com $\gamma = 2,75$ variando seu tamanho de 10^3 até 10^6 vértices. Na Figura 8.2 são mostradas as flutuações relativas (divididas

pela média de ensemble, com notação $\langle \dots \rangle_e$ para M_{21}^3 e comparadas com quantidades estruturais para cada realização de rede. Foram usadas 100 amostras de rede com 10^4 vértices e $\gamma = 2,25$. No topo dessa figura, a comparação é feita entre M_{21}^3 e o valor médio para o coeficiente de agregação $\langle c \rangle$ e na base, a comparação é feita entre M_{21}^3 e o valor médio da menor distância $\langle l \rangle$ entre pares de vértices. Os valores para as médias de ensemble obtidos foram: $\langle M_{21}^3 \rangle_e = 2.58(3)$, $\langle c \rangle_e = 5.2(4) \times 10^{-3}$ e $\langle l \rangle_e = 3.46(2)$. Os demais tamanhos de redes trabalhados ($N = 10^3$ para $\gamma = 2.25$ e $N = 10^3, 10^4$ e 10^5 para $\gamma = 2.75$) apresentam o mesmo padrão de correlação (com razões entre momentos até quarta ordem) mostrado nessa figura.

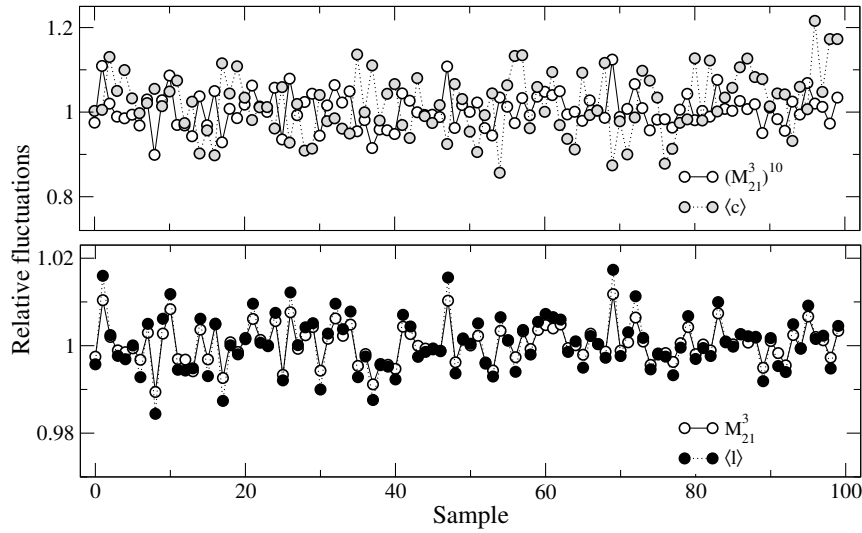


Figura 8.2: Correlação entre propriedades estruturais e dinâmicas (flutuações relativas) em redes UCM com $\gamma = 2.25$ e $N = 10^4$ vértices. As medidas estruturais analisadas foram: o coeficiente de agregação, c , e a menor distância entre vértices, l .

Qualitativamente, observamos uma correlação entre a razão de momentos e $\langle l \rangle$ mas não com $\langle c \rangle$. Para quantificar essas correlações, usamos o coeficiente r de Pearson [26]. Este coeficiente pode ser definido como a covariância entre duas variáveis X e Y dividido pelo produto de seus desvios padrão:

$$r = \frac{\sum_j (X_j - \bar{X})(Y_j - \bar{Y})}{\sqrt{\sum_j (X_j - \bar{X})^2} \sqrt{\sum_j (Y_j - \bar{Y})^2}}. \quad (8.1)$$

Na Figura 8.3 é mostrado o gráfico de dispersão dos pontos correspondentes aos valores obtidos para quantidades QE e estruturais de cada amostra de rede. No topo da figura, temos a dispersão para $M_{11}^2 / \langle M_{11}^2 \rangle_e$ e $\langle c \rangle / \langle c \rangle_e$ e na base, a dispersão para $M_{11}^2 / \langle M_{11}^2 \rangle_e$ e $\langle l \rangle / \langle l \rangle_e$. Na coluna da esquerda mostramos os resultados para redes com $N = 10^4$ e na coluna da direita redes com $N = 10^5$ vértices, ambas com $\gamma = 2.75$. Os coeficientes r encontrados foram: $r = 0.0$ e $r = +0.1$

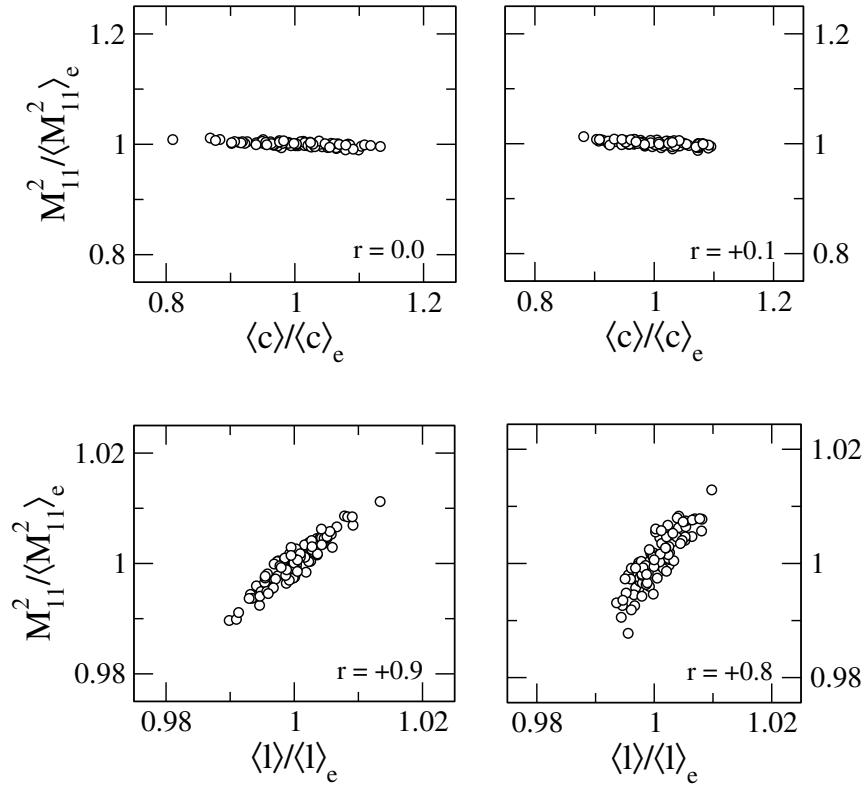


Figura 8.3: Correlação entre a razão entre momentos e a menor distância entre vértices. Na coluna da esquerda temos redes com $N = 10^4$ vértices e na coluna da direita redes com $N = 10^5$ vértices. Em todos os casos $\gamma = 2.75$. Os coeficientes de Pearson correspondentes estão inseridos nas gráficos.

para a correlação entre M_{rs}^q e $\langle c \rangle$ em redes com 10^4 e 10^5 vértices, respectivamente, e entre M_{rs}^q e $\langle l \rangle$, obtivemos $r = +0.9$ em redes com $N = 10^4$ e $r = +0.8$ para redes com $N = 10^5$.

A forte correlação dada pelo coeficiente r próximo de 1 marca uma dependência entre M_{rs}^q e l . Os dados foram colocados sob mesma escala para se ter uma ideia qualitativa da amplitude das flutuações (inclinação do conjunto de pontos) das quantidades QE e estruturais com o aumento do número de vértices de $N = 10^4$ para $N = 10^5$. Os valores médios obtidos para redes com $N = 10^4$ vértices foram: $\langle M_{11}^2 \rangle_e = 1.74(1)$, $\langle c \rangle_e = 3.2(4) \times 10^{-3}$ e $\langle l \rangle_e = 3.73(2)$. Para redes com $N = 10^5$, obtivemos $\langle M_{11}^2 \rangle_e = 1.78(1)$, $\langle c \rangle_e = 7.1(3) \times 10^{-3}$ e $\langle l \rangle_e = 4.19(2)$.

O coeficiente de agregação (uma quantidade *local*) apresenta pouca importância sobre quantidades QE quando comparado à medida da menor distância entre dois vértices (uma medida *global*). Apesar disso, essas flutuações são pequenas e não indicam nenhuma relação com uma suposta violação das hipótese da HMF em redes fortemente heterogêneas para justificar a discrepância entre os resultados obtidos para os expoentes críticos e as previsões da ETF do PC em redes sem escala.

8.3 Validade das hipóteses da teoria de campo médio heterogêneo

A Figura 8.1 mostra que as flutuações das quantidades QE em redes com $\gamma = 2,25$ não acessam um regime estável em simulações de até $t_{max} = 10^9$ passos de tempo. Esse resultado sugere que um tempo de média maior pode melhorar a determinação do ponto crítico. Esse procedimento de aumentar o tempo de média permite ao processo ponderar de maneira mais representativa o peso estatístico de regiões diferentes da rede.

Para verificar essa hipótese, repetimos as análises numéricas para a determinação do ponto crítico da transição do PC em redes sem escala e $\gamma = 2,25$ com os mesmos parâmetros usados no capítulo anterior, exceto que o tempo de média foi $t_a = 10^6$, e agora usamos $t_a = 10^7$ passos. A comparação entre essas duas análises numéricas é mostrada na Figura 8.4, em que a razão entre momentos de terceira ordem foi obtida para essa nova análise com um ensemble de 100 realizações de redes diferentes. A convergência para o ponto crítico foi obtida para o parâmetro $p = 1/(1 + \lambda) = 0.4897(1)$. O gráfico inserido nessa figura mostra, em mesma escala, a análise feita no capítulo 7. Usando um tempo de média maior fica nítida a interseção das curvas para as razões entre momentos. Já quantitativamente, os valores para as razões de momentos encontrados não diferem significativamente dos obtidos no capítulo anterior. Isso é explicado pelos resultados na Figura 8.1, que mostra que as estimativas de erro apresentadas no capítulo 7 seguramente incluem o ponto crítico dentro da faixa de tamanhos simulada.

Uma outra maneira de investigar se a estrutura *quenched* é capaz de violar a hipótese HMF da equivalência dos vértices em um mesmo compartimento de grau é fazer uma comparação entre teoria e o observado em simulações numéricas. A condição estacionária para a equação (5.3) resulta em

$$\rho_k = \frac{\lambda k \rho / \langle k \rangle}{1 + \lambda k \rho / \langle k \rangle}. \quad (8.2)$$

Próximo do ponto crítico, quando $\rho \ll \langle k \rangle / \lambda k_c$, a equação (8.2) pode ser aproximada para:

$$\rho_k \approx \frac{\lambda k \rho}{\langle k \rangle}. \quad (8.3)$$

Dessa forma, podemos definir uma quantidade

$$\Phi_{QE} = \left\langle \frac{\rho_k}{\lambda k \rho} \right\rangle, \quad (8.4)$$

que pode ser obtida nas simulações. Se as hipóteses da HMF forem válidas, teremos que

$$\Phi_{HMF} = \frac{1}{\langle k \rangle}. \quad (8.5)$$

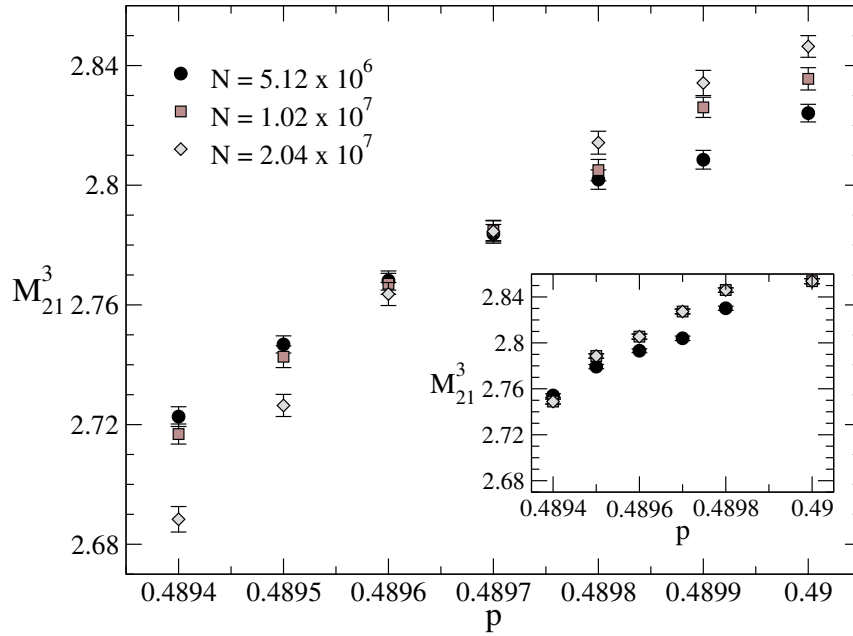


Figura 8.4: Determinação do ponto crítico da transição do PC com tempos d e média diferentes. No gráfico principal foi usado $t_a = 10^7$ e no gráfico inserido $t_a = 10^6$.

A Figura 8.5 mostra as curvas para Φ_{QE} em função de k assumindo um valor constante como prevê a teoria HMF, em redes com $\gamma = 2,25$ e tamanhos variando de $N = 1,28 \times 10^6$ até $N = 2,04 \times 10^7$. Ainda assim, existe uma diferença em função do tamanho da rede entre o valor para Φ_{HMF} (medido em simulações) e Φ_{QE} , dada por

$$\theta(N) = \Phi_{HMF} - \Phi_{QE} \quad (8.6)$$

e mostrada na Figura 8.6. Nessa figura são comparados os comportamentos de $\theta(N)$ para redes com $\gamma = 2,25$ e $\gamma = 2,75$. Para $\gamma = 2,75$, essa diferença decai para um valor finito constante a partir de tamanhos de rede próximos a 10^6 vértices que corresponde à faixa de N em que os expoentes críticos foram obtidos em concordância com a ETF (Figuras 7.4 e 7.5). Já para $\gamma = 2,25$, um platô para $\theta(N)$ não é alcançado mesmo para tamanhos de rede até 20 milhões de vértices. A comparação entre esses comportamentos cria a expectativa de que a concordância entre testes numéricos e teoria ETF será obtida quando $\theta(N)$ alcançar um valor estável para redes com $\gamma = 2,25$. Entretanto, as estimativas para esse limite são impraticáveis do ponto de vista de simulações numéricas. Uma alternativa seria obter uma nova correção para a ETF, uma vez que o fator g fornecido pela teoria HMF não consegue corrigir essa escala para valores de $\gamma = 2,25$. Com esse objetivo, desenvolvemos uma teoria de campo médio heterogênea por pares descrita na próxima seção.

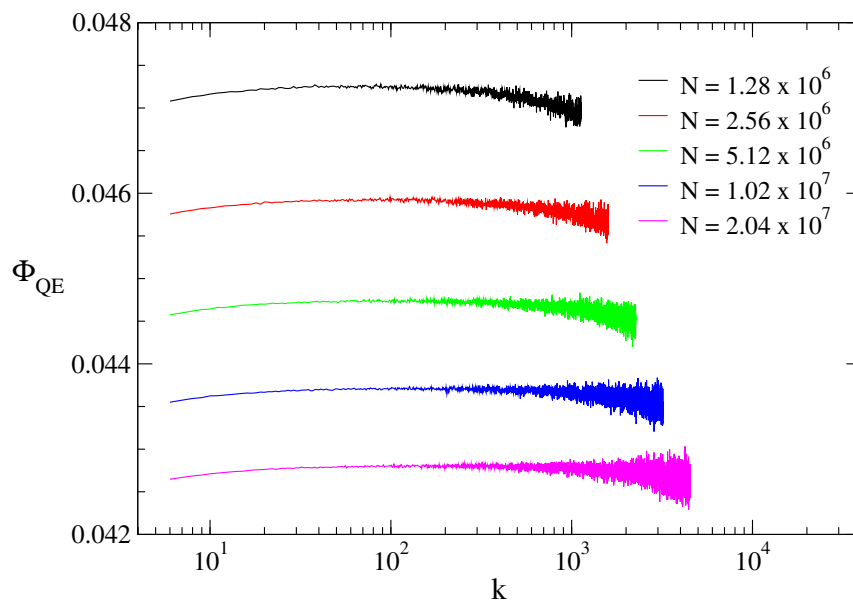


Figura 8.5: A quantidade Φ_{QE} em função do grau k obtida das simulações do PC em redes UCM com $\gamma = 2,25$.

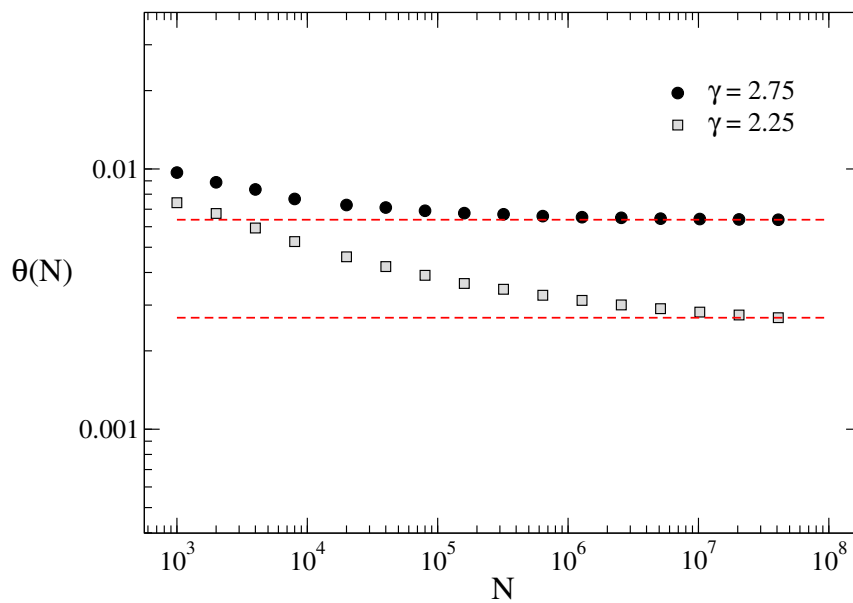


Figura 8.6: Comparação entre os comportamentos de θ em função do tamanho da rede.

8.4 Aproximação de pares heterogênea

Com os resultados das seções anteriores em mãos, temos que a forte heterogeneidade na distribuição de graus em redes *quenched* não correlacionadas não violam as hipóteses HMF. Entretanto, o fator g não reproduz satisfatoriamente as correções de tamanho finito para $\gamma = 2, 25$, mesmo para redes de até 20 milhões de vértices. Outro fato é que a teoria HMF só trata das correlações dinâmicas entre um vértice e seus primeiros vizinhos. Na expectativa de que, ao levarmos em conta essas correlações externas à vizinhança imediata dos vértices, será possível obter um novo fator de correção para a ETF, construímos uma aproximação de pares para redes heterogêneas.

Vamos primeiro introduzir a notação que iremos utilizar nesta seção.

$[A_k]$: densidade de vértices de grau k no estado A ;

$[A_k B_{k'}]$: densidade de primeiros vizinhos em que o primeiro de grau k está no estado A e o segundo de grau k' no estado B ;

$[A_k B_{k'} C_{k''}]$: generalização para três vértices. Os pares $[A_k B_{k'}]$ e $[B_{k'} C_{k''}]$ estão conectados pelo vértice de grau k' .

Um vértice pode estar no estado 1 (ocupado por uma partícula) ou 0 (vazio). Segue ainda, que $[1_k] = \rho_k$, $[0_k] = 1 - \rho_k$, $[0_k 1_{k'}] = \phi_{kk'}$, $[1_k 0_{k'}] = \bar{\phi}_{kk'}$, $[1_k 1_{k'}] = \psi_{kk'}$, $[1_k 1_{k'}] = \omega_{kk'}$ com $\omega_{kk'} = \omega_{k'k}$, $\psi_{kk'} = \psi_{k'k}$ e $\phi_{kk'} = \bar{\phi}_{k'k}$. As condições de normalização são dadas por:

$$\psi_{kk'} + \phi_{kk'} = \rho_{k'} \quad (8.7)$$

$$\psi_{kk'} + \bar{\phi}_{kk'} = \rho_k \quad (8.8)$$

$$\omega_{kk'} + \phi_{kk'} = 1 - \rho_k \quad (8.9)$$

$$\omega_{kk'} + \bar{\phi}_{kk'} = 1 - \rho_{k'} \quad (8.10)$$

$$\psi_{kk'} + \omega_{kk'} + \phi_{kk'} + \bar{\phi}_{kk'} = 1 \quad (8.11)$$

As relações (6.7) a (6.11) derivaram diretamente da probabilidade conjunta $P(A \cap B) + P(A \cap C) = P(A)$ pois $P(B) + P(C) = 1$.

Com isso, a equação dinâmica do PC pode ser escrita na forma

$$\frac{d}{dt}\rho = -\rho_k + \lambda k \sum_{k'} \frac{\phi_{kk'}}{k'} P(k'|k), \quad (8.12)$$

que trata da probabilidade de um vértice de grau k' ocupado replicar sua partícula para um outro de grau k em sua vizinhança. Essa equação tem como caso particular a aproximação de

um vértice usando $\phi_{kk'} \approx (1 - \rho_k)\rho_{k'}$.

A equação dinâmica que leva em conta a interação devido a vizinhança do par $\phi_{kk'}$ é

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\phi_{kk'} &= -\phi_{kk'} + \lambda \frac{\phi_{kk'}}{k'} + \psi_{kk'} + \lambda(k' - 1) \sum_{k''} \frac{[0_k 0_{k'} 1_{k''}] P(k''|k')}{k''} + \\ &\quad - \lambda(k - 1) \sum_{k''} \frac{[1_{k''} 0_k 1_{k'}] P(k''|k)}{k''} \end{aligned} \quad (8.13)$$

em que o primeiro termo representa a aniquilação de partículas em vértices de grau k' , o segundo a criação de uma partícula em vértices de grau k devido uma ligação com outro de grau k' e o terceiro a aniquilação de uma partícula em um vértice de grau k . Esses três primeiros termos representam as interações dentro do par kk' . O quarto termo representa a criação de uma partícula em um par $[0_k 0_{k'}]$ devido a replicação a partir de um vértice de grau k'' ocupado, vizinho do vértice de grau k' do par, e o último termo refere-se à criação de uma partícula em um par $[0_k 1_{k'}]$, replicada por um vértice de grau k'' vizinho do vértice de grau k .

As trincas de vértices $[A_k B_{k'} C_{k''}]$ na equação (8.13) podem ser truncadas com a aproximação de pares [90]

$$[ABC] \approx \frac{[AB][BC]}{[B]}. \quad (8.14)$$

Dáí:

$$[0_k 0_{k'} 1_{k''}] \approx \frac{\omega_{kk'} \phi_{k'k''}}{(1 - \rho_{k'})} \quad (8.15)$$

e

$$[1_{k''} 0_k 1_{k'}] \approx \frac{\phi_{kk''} \phi_{kk'}}{(1 - \rho_k)} \quad (8.16)$$

que combinando com a equação (8.13), resulta

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\phi_{kk'} &= -\phi_{kk'} + \lambda \frac{\phi_{kk'}}{k'} + \psi_{kk'} + \frac{\lambda(k' - 1)\omega_{kk'}}{1 - \rho_{k'}} \sum_{k''} \frac{\phi_{kk'} P(k''|k')}{k''} + \\ &\quad - \frac{\lambda(k - 1)\phi_{kk'}}{1 - \rho_k} \sum_{k''} \frac{\phi_{kk''} P(k''|k)}{k''} \\ &= -\phi_{kk'} \left(2 + \frac{\lambda}{k'}\right) + \rho_{k'} + \frac{\lambda(k' - 1)}{(1 - \rho_{k'})} (1 - \rho_k - \phi_{kk'}) \sum_{k''} \frac{\phi_{k'k''} P(k''|k')}{k''} + \\ &\quad - \frac{\lambda(k - 1)\phi_{kk'}}{(1 - \rho_k)} \sum_{k''} \frac{\phi_{kk''} P(k''|k)}{k''} \end{aligned} \quad (8.17)$$

em que usamos as relações (6.7) e (6.9). Linearizando a equação (8.17), obtemos:

$$\frac{d}{dt}\phi_{kk'} = -\phi_{kk'} \left(2 + \frac{\lambda}{k'}\right) + \rho_{k'} + \lambda(k' - 1) \sum_{k''} \frac{\phi_{k'k''} P(k''|k')}{k''}, \quad (8.18)$$

que para $t \rightarrow \infty$ ($\rho_k \approx 0$ e $\phi_{kk'} \approx 0$) torna-se

$$\frac{\rho_k}{k} = \lambda \sum_{k'} \frac{\phi_{kk'}}{k'} P(k'|k), \quad (8.19)$$

que combinando com a equação (8.18) resulta que

$$\phi_{kk'} = \frac{2k' - 1}{2k' + \lambda} \rho_{k'}. \quad (8.20)$$

Para $t \rightarrow \infty$ e perto do ponto crítico,

$$\frac{d}{dt} \rho_k = -\rho_k + \lambda k \sum_{k'} \frac{(2k' - 1)P(k'|k)}{(2k' - \lambda)k'} \rho_{k'} = \sum_{k'} A_{kk'} \rho_{k'} \quad (8.21)$$

em que

$$A_{kk'} = -\delta_{kk'} + \lambda k \frac{(2k' - 1)P(k'|k)}{(2k' - \lambda)k'} = -\delta_{kk'} + C_{kk'} \quad (8.22)$$

O estado absorvente é instável quando o maior autovalor de $A_{kk'}$ é positivo [36]. Para redes não correlacionadas, em que $P(k'|k) = k'P(k')/\langle k \rangle$, temos que $v_k = k$ é um autovetor para $C_{kk'}$ com autovalor:

$$\Lambda = \frac{\lambda}{\langle k \rangle} \sum_{k'} \frac{(2k' - 1)k'P(k')}{(2k' - \lambda)} \quad (8.23)$$

Uma vez que $C_{kk'} > 0$ é irredutível e $a_k > 0$, o teorema de Perron-Frobenius [37] garante que Λ é o maior autovalor de $C_{kk'}$. Dessa forma, o ponto crítico é dado por $\Lambda = 1$, que resulta na equação transcendente

$$\frac{\lambda_c}{\langle k \rangle} \sum_{k'} \frac{(2k' - 1)k'P(k')}{(2k' + \lambda_c)} = 1 \quad (8.24)$$

que pode ser resolvida numericamente para um valor arbitrário de $P(k')$. A consistência dessa equação pode ser verificada usando o caso particular para uma rede homogênea, em que $P(k') = \delta_{k',m}$, levando ao resultado já conhecido [90].

$$\lambda_c = \frac{m}{m-1}. \quad (8.25)$$

A Figura 8.7 mostra a comparação entre a solução numérica da equação (8.24) para a aproximação de pares heterogênea e nossas simulações numéricas do PC em redes UCM para diferentes valores de γ . Essa figura mostra uma comparação entre os valores fornecidos pela aproximação de pares heterogênea e os valores obtidos nas simulações. Essas duas curvas possuem uma melhor concordância no regime sem escala ($\gamma = 2,25, 2,50$ e $2,75$) se comparado ao regime em que $\langle k^2 \rangle$ assume uma escala finita depois da transição abrupta entre heterogeneidade e homogeneidade que ocorre em $\gamma = 3,00$, dada pela aproximação contínua com limite assintótico de $k_c \rightarrow \infty$ verificado nas equações (4.18) e (4.19). Neste momento, vale a pena

comentar que a aproximação de pares homogênea vem sendo usada para fornecer estimativas sobre a determinação de pontos críticos em redes heterogêneas, a exemplo do que mostramos na Tabela 9.1 e em outras referências [83, 91], mas nenhuma teoria que conhecemos explica o motivo dessa aproximação funcionar e acreditamos não se passar de uma feliz coincidência. Há ainda nessa figura as previsões fornecidas pela aproximação de pares homogênea. Note, que à medida que temos estruturas mais heterogêneas ($\gamma \rightarrow 2$) nossa aproximação fornece valores mais próximos dos obtidos via simulação.

Uma outra informação que essa figura trás é sobre a convergência do ponto crítico previsto pela aproximação de pares heterogênea para cada valor de γ . Vamos restringir essa análise para os valores de $\gamma = 2, 25$ e $2, 75$. Para $\gamma = 2, 75$ a convergência do ponto crítico ocorre a partir de tamanhos de rede com 10^6 vértices, o que não acontece para $\gamma = 2, 25$ mesmo para redes de até $20M$ de vértices. Combinando essa discussão com aquela feita no final da seção anterior, temos a expectativa de que um novo fator de correção para a ETF possa ser obtido da aproximação de pares heterogênea e nos ajude a entender melhor a imprecisão do fator g para corrigir a escala de tamanho finito em redes com $\gamma \rightarrow 2$. Esses cálculos estão em andamento.

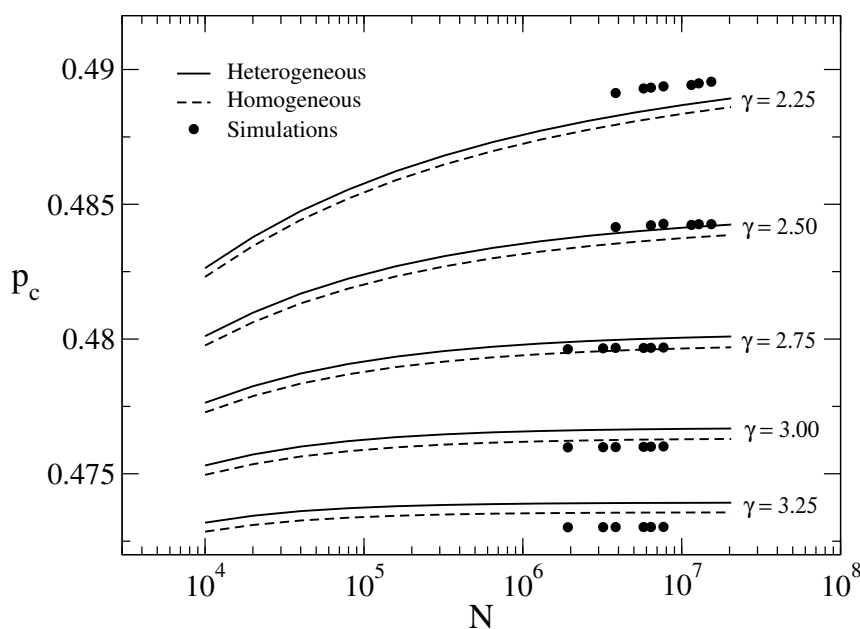


Figura 8.7: Comparação entre a aproximação de pares heterogênea, a aproximação de pares homogênea e simulações QE do PC em redes UCM com $k_0 = 6$. Os círculos representam os resultados obtidos nas simulações, as linhas cheias são soluções numéricas da equação (8.24) fornecidas pela aproximação de pares heterogênea e uma comparação adicional é feita com aproximação de pares homogênea representada pelas linhas tracejadas.

8.5 Conclusões preliminares

Neste capítulo, investigamos em detalhes a transição do PC em redes *quenched* sem escala em que nosso foco foi verificar uma suposta violação das hipóteses da teoria HMF para compreender melhor a discordância entre os expoentes críticos previstos pela ETF e os resultados dos testes numéricos relatados no capítulo anterior para $\gamma \rightarrow 2$.

O papel desempenhado pela estrutura de redes *quenched* sem escala não viola as hipóteses da teoria HMF, mesmo em redes com forte heterogeneidade à medida em que $\gamma \rightarrow 2$. Dessa análise, entretanto, identificamos uma relação entre quantidades QE e a menor distância entre vértices que é a medida estrutural associada à propriedade de mundo pequeno presente em redes complexas. Essa verificação foi possível com o estudo da dinâmica do PC para tempos longos, em que as flutuações das quantidades QE atingem um erro residual (estável). Com isso, foi possível separar e quantificar a parcela de influência sobre a dinâmica do PC devido a flutuações de medidas estruturais de uma amostra para outra dentro do *ensemble* de redes.

Apesar das hipóteses da teoria HMF não serem violadas, de alguma forma as correlações dinâmicas em estruturas de redes com $\gamma \rightarrow 2$ desempenham um papel importante sobre a criticalidade do PC que essa teoria não é capaz de identificar. Talvez essa possa ser a razão para o fator g não corrigir a ETF do PC para esses valores γ . De fato, a teoria HMF só trata das interações entre um vértice e seus vizinhos. Para levar em conta as correlações dinâmicas devido as interações fora da vizinhança imediata de um vértice, construímos uma aproximação de pares heterogênea que se mostrou consistente na previsão de pontos críticos. No momento, estamos refinando os cálculos dessa teoria a fim de obtermos um novo fator de correção para a ETF que possa nos ajudar a entender melhor a discrepância entre testes numéricos e a ETF do PC em redes *quenched* sem escala.

Vale a pena comentar que embora não tenhamos verificado uma correlação entre quantidades críticas QE do PC e o caráter de agregação de redes sem escala, esse ponto ainda permanece em aberto. Isso porque o coeficiente de agregação é inversamente proporcional ao número de vértices em modelos de redes sem escala não correlacionadas [36] e, portanto, é muito baixo nas redes estudadas até este ponto. Ainda não há (ao menos do nosso conhecimento) relatos na literatura sobre a existência ou não da influência dessa propriedade sobre transições de fases em redes complexas. Abordamos esse tema no próximo capítulo.

9 *Comportamento crítico do processo de contato em redes de mundo pequeno*

No capítulo 8, ao analisarmos em detalhes o papel estrutural de redes quenched, verificamos que a menor distância entre vértices é uma quantidade importante para a medição de quantidades QE do PC, ao contrário do papel desempenhado pela agregação de vértices nessas redes. Entretanto, modelos de redes aleatórias heterogêneas apresentam um caráter de agregação irrisório se comparado ao que encontramos em redes reais. Enquanto os processos dinâmicos em redes sem escala vem sendo alvo de estudos intensivos e controvérsias sobre a validade de teorias de campo médio, o papel de diferentes padrões de agregação de vértices sobre transições de fase em redes complexas não foi investigado até o momento. Neste capítulo, estudamos a transição do PC em redes Watts-Strogatz [30] que permitem a coexistência de uma alta agregação e uma distância curta entre vértices ao interpolar entre redes regulares e aleatórias. Entretanto, a agregação de vértices não influencia a transição do PC.

9.1 **Introdução**

O modelo proposto por Watts e Strogatz (WS) [30] é um marco para a teoria de redes complexas, unindo propriedades das redes aleatórias e regulares. A propriedade de mundo pequeno em uma rede diz que o valor médio da distância entre vértices $\langle l \rangle$ aumenta logaritmicamente ou ainda mais lentamente com o número N de vértices. Essa é uma propriedade central compartilhada pelas redes complexas. Além da propriedade de mundo pequeno, um alto coeficiente de agregação c medindo a presença de triângulos (vizinhos interconectados de um vértice), é uma outra característica importante encontrada em várias redes reais [37]. Apesar dessas redes apresentarem frequentemente uma distribuição de graus sem escala $P(k) \sim k^{-\gamma}$ com $2 \leq \gamma < 3$, os modelos para redes aleatórias desse tipo apresentam uma baixa agregação entre seus vértices. Nesses casos, c possui uma dependência adicional do corte superior k_c da distribuição $P(k)$, além da dependência do tamanho do sistema [92]. Por exemplo, para redes com o corte natural

$k_c \sim N^{1/(\gamma-1)}$ que é frequentemente encontrado em redes reais [37], o coeficiente de agregação é previsto seguir a escala $c(k_c) \sim N^{2-\gamma} \ln N$ [92]. Por outro lado, tanto a propriedade de mundo pequeno quanto um alto coeficiente de agregação podem coexistir em redes WS.

Diferentemente das redes sem escala, redes WS apresentam uma distribuição de conectividade $P(k)$ do tipo *Poisson* [93]: centrada em um valor médio e decaindo exponencialmente para $k \gg 1$. Por isso, esse modelo produz redes estatisticamente homogêneas em que todos os vértices possuem aproximadamente o mesmo número de ligações, embora sejam estritamente heterogêneas. Para levarmos em conta qualquer heterogeneidade na distribuição $P(k)$, estudamos a dinâmica do PC nessas redes usando a equação HMF (5.1) e usando o parâmetro $K = \langle k \rangle = 6$.

9.2 Determinação do ponto crítico para diferentes padrões de agregação

Aplicamos o critério da interseção de curvas para a razão entre momentos da densidade QE de partículas apresentado no capítulo 7, para determinar o ponto crítico de transição do PC. Esse deve estar deslocado da sua previsão analítica ($\lambda_c = 1$) devido às correlações dinâmicas existentes em redes *quenched* WS. Por outro lado, podemos ter padrões diferentes dessas correlações com o ajuste do coeficiente de agregação por meio da probabilidade de redirecionamento p . Para isso, investigamos o PC em diferentes topologias de redes WS construídas com os parâmetros $p = 0.01$, $p = 0.10$ e $p = 1.00$.

Para se ter uma ideia qualitativa dos diferentes padrões de agregação estudados, a Figura 9.1 mostra as regiões de atividade do PC em redes WS para dois valores de p . No topo temos $p = 0.05$ e na base $p = 0.5$. Essas redes foram construídas com 200 vértices. Para $p = 0.05$, a atividade mostra uma alta agregação, em contraste com a formação de pequenos agrupamentos para $p = 0.5$. Por outro lado, tomando dois valores fixos de t como guia para os olhos, os dois casos apresentam uma pequena distância entre diferentes regiões da rede por estarem cheias de atalhos entre vértices.

O resultado da determinação do ponto crítico do PC em redes WS com $p = 0.01$ e $p = 0.10$ é mostrado na Figura 9.2. A interseção de curvas $M_{r,s}^q$ versus λ foi obtida para razões entre momentos até a quarta ordem usando um *ensemble* com 200 realizações diferentes de redes. Variamos o tamanho dessas redes de 10^3 até 10^7 vértices, embora não sendo necessário redes enormes, como no caso de redes sem escala, para a convergência do ponto crítico. Isso porque para redes sem escala essa convergência depende além do tamanho da rede, da forma

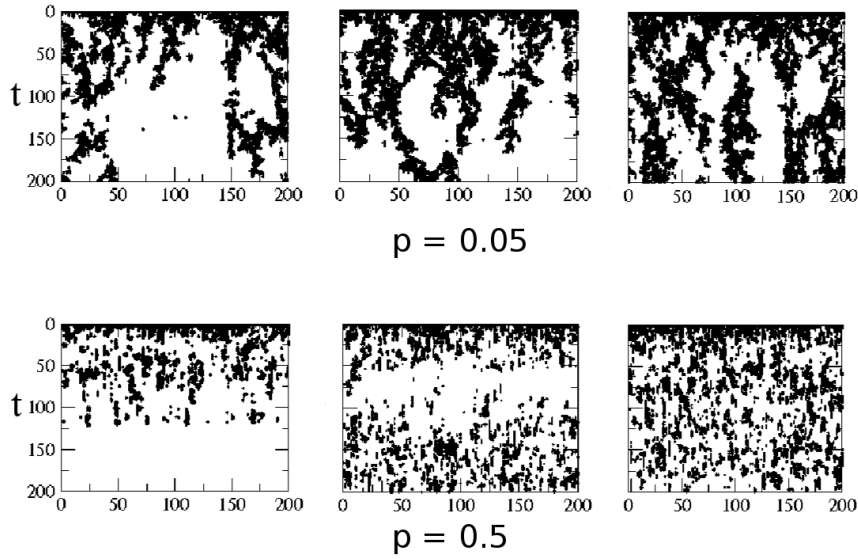


Figura 9.1: Evolução do PC a partir da configuração com 100% dos vértices ocupados em redes WS com $K = 6$. No topo temos $p_r = 0.05$ e na base $p_r = 0.5$. Da esquerda para a direita, temos o PC na fase subcrítica, perto do ponto crítico e na fase supercrítica. A contagem do tempo cresce para baixo.

como o grau de corte superior $k_c(N)$ diverge. Essa dependência é marcada por meio da correção para a ETF em redes heterogêneas dada pelo fator adimensional [42, 61] $g = \langle k^2 \rangle / \langle k \rangle^2$, que depende da natureza da distribuição $P(k)$. Para redes WS, a distribuição de graus pode ser aproximada por

$$P(k) = \frac{m^{k-m}}{(k-m)!} e^{-m} \quad (9.1)$$

no limite de $p \rightarrow 1$, que é uma distribuição do tipo *Poisson* [36] para as variáveis $k' = k - m$ com valor médio $\langle k' \rangle = m$, sendo $m = K/2$. Esse é o limite com maior flutuação em torno do valor médio $\langle k \rangle$ (Figura 4.10) em que $\langle k^2 \rangle$ vai para seu valor máximo. Com isso, g é uma função de p e tem seu valor máximo em $g(1) \approx 1$ não apresentando correções significativas para a ETF. Além disso, a natureza da $P(k)$ em redes WS não admite a divergência de k_c , pois a ocorrência dos valores de $k \gg 1$ decai exponencialmente.

Os resultados obtidos para as razões entre momentos não são afetados pelas correlações na primeira vizinhança dos vértices em diferentes padrões de agregação, causadas pela densidade de triângulos (decrecente à medida que $p : 0 \rightarrow 1$), concordando com os valores obtidos no caso *annealed* para qualquer valor de p . Isso é mostrado na Tabela 9.1. Por outro lado, essas correlações acabam deslocando a posição do ponto crítico daquela prevista pela aproximação de campo médio com o aumento desse deslocamento à medida que o padrão de agregação vai em direção à aquele encontrado em redes regulares ($p \rightarrow 0$). Mesmo a aproximação de pa-

res [91] não prediz corretamente essa posição, levando a valores de 1% abaixo dos encontrados em nossas simulações.

Embora a fraca heterogeneidade encontrada na distribuição de graus de redes WS não afete a razão entre momentos como acontece em redes sem escala, essas redes são de fato heterogêneas. Para entendermos melhor o papel desempenhado por essa heterogeneidade sobre a dinâmica do PC, nós comparamos esses resultados com simulações da transição do PC em redes aleatórias regulares (RRN). Apesar do modelo WS partir de uma rede regular e alguma memória

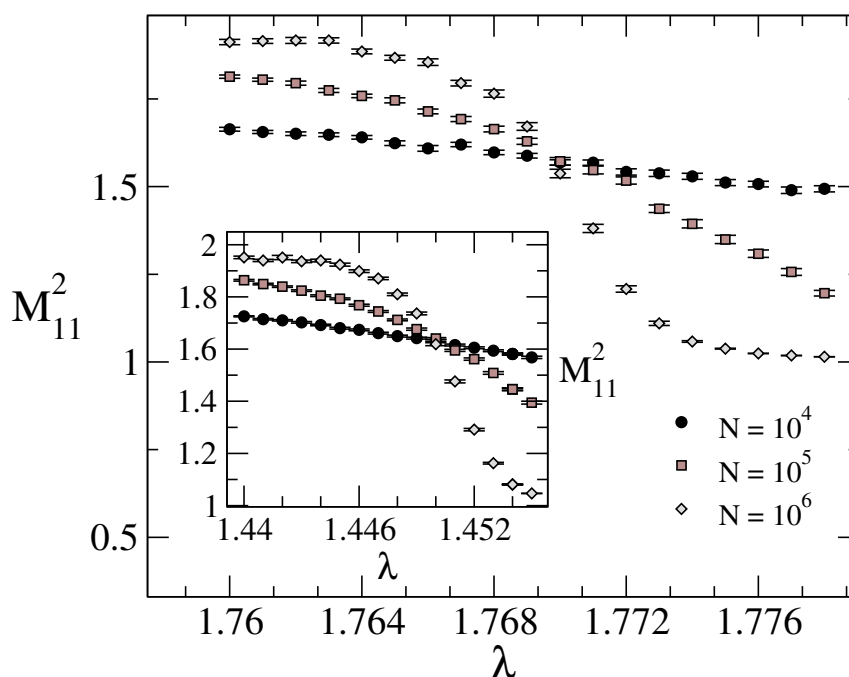


Figura 9.2: Critério de interseção de curvas da razão entre momentos para o PC em redes WS com $p = 0.01$ e $p = 0.10$ no gráfico inserido. Em ambos os casos $\langle k \rangle = 6$.

dessa construção inicial ainda permaneça em $p = 1$, os atalhos criados pelos redirecionamentos de arestas causam um padrão estritamente heterogêneo para a distribuição de graus. Entretanto, a comparação com os resultados *annealed* para as razões entre momentos relatam que esse padrão não desempenha nenhum papel sobre a criticalidade do PC. Para entendermos melhor o papel da heterogeneidade, nós comparamos os resultados obtidos para a transição do PC em redes WS com $p = 1.00$, com simulações do PC em RRN. As redes RRN são genuinamente aleatórias mas com um padrão homogêneo de conectividade. No algoritmo do modelo RRN, os pares de vértices foram conectados aleatoriamente e cada vértice possui, exatamente, grau $k = 6$. Esse valor foi colocado para obter o mesmo valor médio $\langle k \rangle = 6$ usado nas simulações do PC em redes WS. Dessa forma, a única diferença entre essas estruturas é a heterogeneidade presente em redes WS e não em RRN.

Na Figura 9.3 é mostrada a determinação do ponto crítico do PC em RRN e rede WS com $p = 1$ em que o valor encontrado para ambas as redes também está deslocado para um valor acima do previsto pela HMF devido à correlações presentes em redes *quenched*. As razões entre momentos concordam com aquelas obtidas para os casos *annealed* (Tabela 9.1).

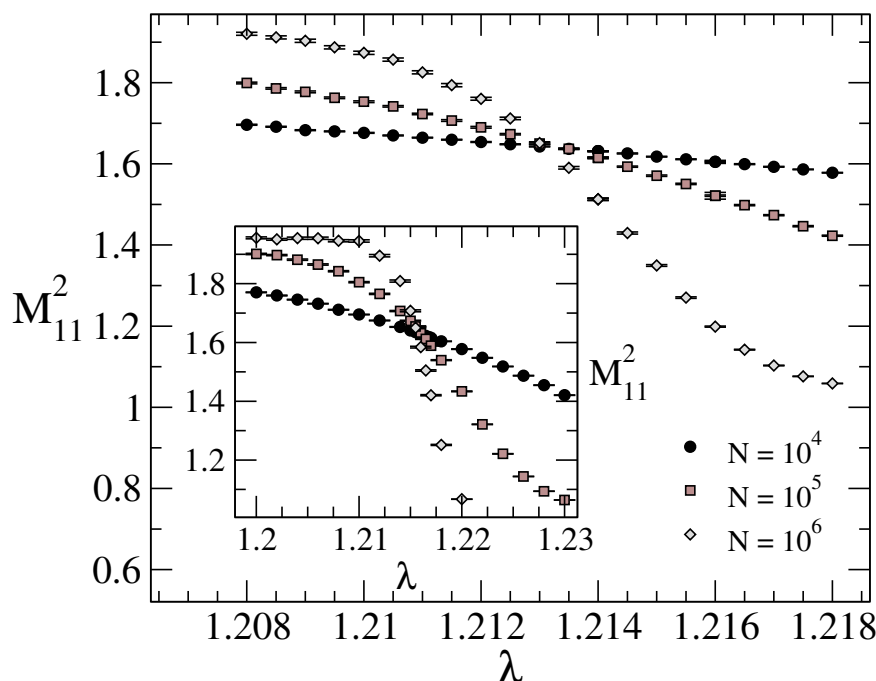


Figura 9.3: Critério de interseção de curvas para o PC em redes WS com $p = 1.00$ e RRN no gráfico inserido. Em ambos os casos $\langle k \rangle = 6$.

p	λ_c	λ_c^{PA}	M_{11}^2	M_{21}^3	M_{22}^4
0.01	1.7692(1)	6/5	1.64(4)	2.1(1)	3.2(2)
0.10	1.4498(1)	6/5	1.65(3)	2.1(1)	3.4(1)
1.00	1.2130(1)	6/5	1.65(3)	2.1(1)	3.4(1)
RRN	1.2155(1)	6/5	1.664(6)	2.18(1)	3.41(3)
ANN	1	1	1.667(3)	2.190(4)	3.452(3)

Tabela 9.1: Pontos críticos λ_c e razões críticas entre momento para o PC em rede WS e RRN, ambas com $\langle k \rangle = 6$. A terceira coluna reporta as previsões da aproximação homogênea de pares $\lambda_c^{PA} = \langle k \rangle / (\langle k \rangle - 1)$. Os valores correspondentes ao caso *annealed* também foram incluídos para comparação.

9.3 Determinação dos expoentes críticos

Nós também verificamos as previsões para os valores dos expoentes da teoria HMF. Para isso usamos os pontos críticos obtidos na seção anterior. A teoria HMF prevê que o compor-

tamento da densidade $\bar{\rho}$ de partículas e do tempo de vida $\bar{\tau}$ do PC em sua criticalidade, são dados pelas equações (5.7) e (5.8), respectivamente, se o fator g de correção para a ETF não é relevante. Por isso, a expectativa é que esses comportamentos sejam verificados nas simulações do PC em redes WS.

A Figura 9.4 mostra o comportamento de escala para $\bar{\rho}$ e $\bar{\tau}$ como uma função de N para os valores da taxa λ 0.01% acima e abaixo do valor $\lambda_c = 1.7692(1)$ (também no gráfico). Para esse resultado, foi usada a topologia de menor desordem ($p = 0.01$), em que os expoentes críticos obtidos são mostrados na Tabela 9.2. Para redes maiores que 10^5 vértices, o desvio dos pontos revela a distinção entre as fases supercrítica e sub-crítica perto do ponto crítico λ_c . Enquanto para $\lambda > \lambda_c$ a densidade de partículas segue para sua saturação em um valor finito de $\bar{\rho}$ (curvatura negativa), a dinâmica de partículas vai para uma escala na forma $\bar{\rho} \sim N^{-1}$ para $\lambda < \lambda_c$ (curvatura positiva). Uma análise similar feita para τ , revela o crescimento exponencial para $\lambda > \lambda_c$, enquanto $\tau \sim (const.)$ no caso contrário.

Além disso, a Figura 9.5 mostra a comparação entre o comportamento das quantidades QE do PC na topologia WS mais desordenada ($p = 1.00$) e em RRN com a análise das relações $\ln(\bar{\rho})$ versus $\ln(N)$ e $\ln(\bar{\tau})$ versus $\ln(N)$. Essas quantidades QE apresentam o mesmo comportamento crítico tanto em RRN quanto em redes WS com $p = 1.00$. Todos esses resultados sobre os expoentes críticos obtidos para a transição do PC em redes WS e RRN estão resumidos na Tabela 9.2.

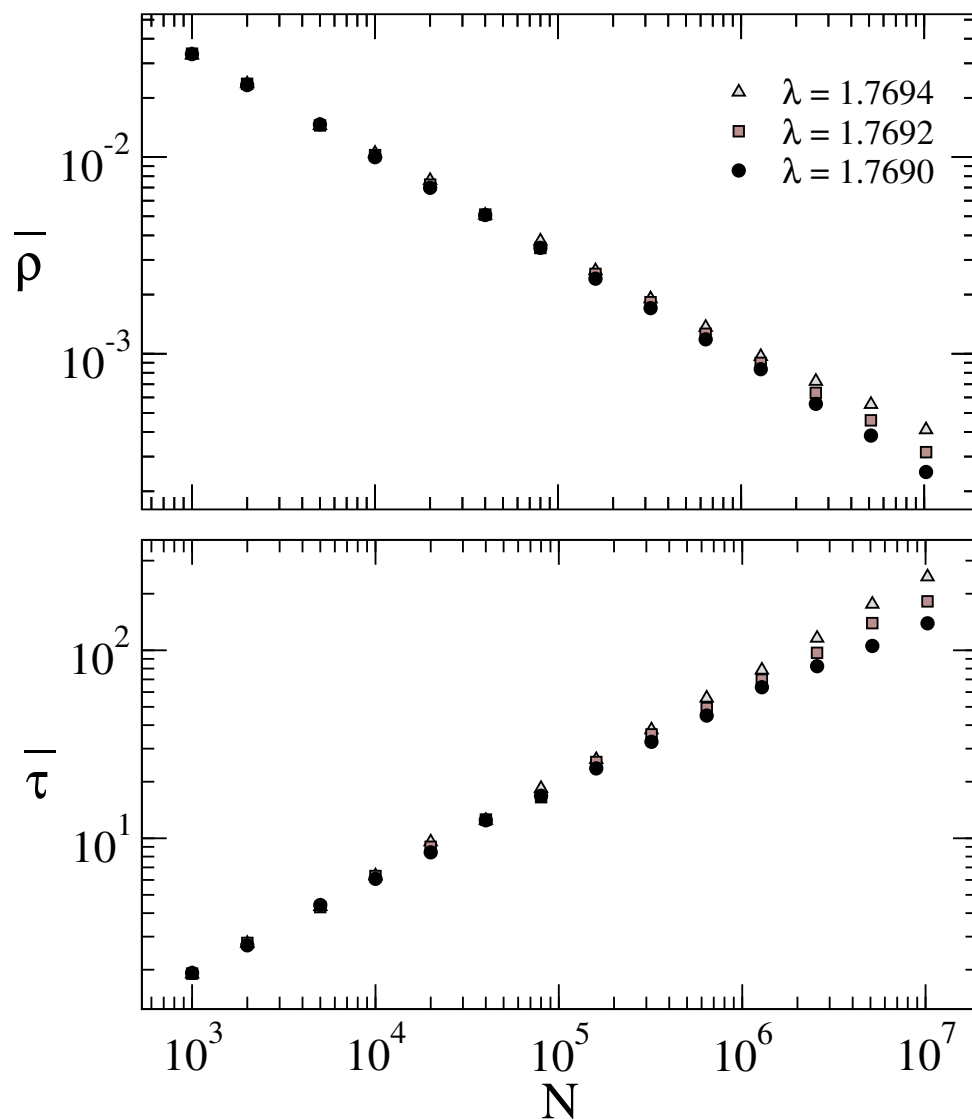


Figura 9.4: No topo é mostrado o comportamento de escala da densidade QE de partículas $\bar{\rho}$ e na base para o tempo característico QE $\bar{\tau}$ do PC em redes WS com $K = 6$ e $p = 0.01$ ($\lambda_c = 1.7692(1)$).

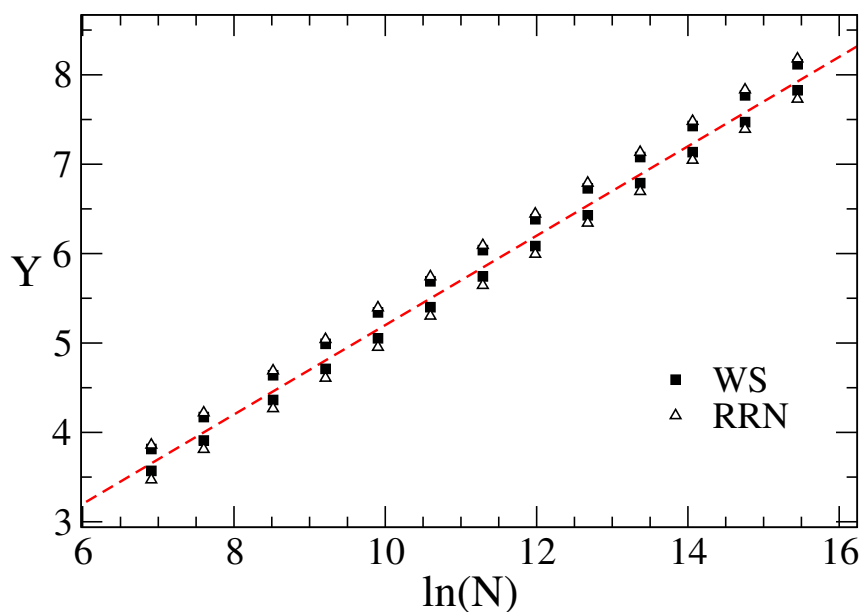


Figura 9.5: Comportamento de escala para quantidades críticas QE do PC em redes com $\langle k \rangle = 6$. Para os pontos acima da curva tracejada de inclinação 1/2, temos $Y = -\ln(\bar{\rho})$ e abaixo $Y = \ln(\bar{\tau})$. Os quadrados representam redes WS e os triângulos RRN.

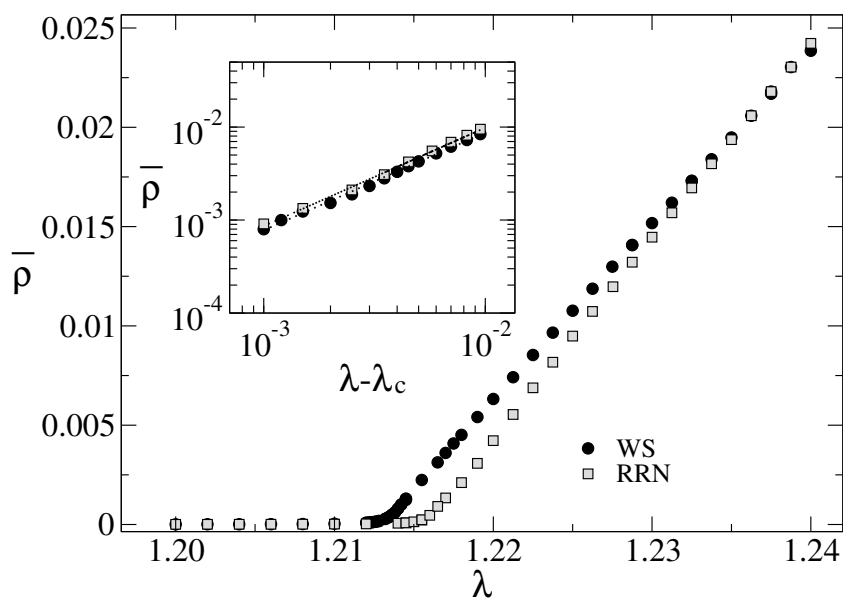


Figura 9.6: Densidade QE $\bar{\rho}$ de partículas em função de λ para redes WS e RRN, ambas com $N = 10^6$ vértices. No gráfico inserido, temos $\bar{\rho}$ em função da distância ao ponto crítico $\lambda_c = 1.2130(1)$ para rede WS com $p = 1,00$ e $\lambda_c = 1.2155(1)$ para RRN, em que as linhas tracejadas são ajustes na forma $\rho \sim (\lambda - \lambda_c)^\beta$, ambas com $\beta = 1.04(3)$.

p	λ_c	$\hat{\nu}$	$\hat{\alpha}$	FSS
0.01	1.7692(1)	0.50(1)	0.49(2)	1/2
0.10	1.4498(1)	0.50(1)	0.49(1)	1/2
1.00	1.2130(1)	0.50(1)	0.50(2)	1/2
RRN	1.2155(1)	0.50(1)	0.50(2)	1/2

Tabela 9.2: Expoentes críticos para o PC em redes WS e RRN, ambas com $\langle k \rangle = 6$.

Para completar nossas análises, fizemos uma regressão na forma $\rho \sim (\lambda - \lambda_c)^\beta$ que fornece $\beta = 1.04(3)$, em concordância com o expoente previsto pela teoria de campo médio usual [49] $\beta = 1$. Isso é mostrado no gráfico inserido na Figura 9.6, corroborando a similaridade do comportamento crítico do PC em ambas as estruturas. Como perto do ponto crítico nenhuma diferença significativa foi verificada para as quantidades QE, realizamos também uma análise para valores fora do regime de transição que é mostrada no gráfico principal da Figura 9.6. Nessa figura, fizemos uma comparação entre a densidade de partículas como uma função de λ para redes WS com $p = 1.00$ e RRN.

Fora da criticalidade é verificada uma diferença entre a dinâmica do PC em RRN e em redes WS para uma faixa restrita de λ . A heterogeneidade na distribuição de graus em redes WS faz com que a população de partículas seja maior que em RRN. Isso porquê os compartimentos com $k > \langle k \rangle$ colaboram para o espalhamento da dinâmica de partículas, uma vez que o evento de criação do PC é proporcional a k e o de aniquilação de partículas independente da estrutura do substrato usado. Mas note, que para valores da taxa criação $\lambda \gtrsim 1.23$ observamos o mesmo comportamento para a densidade de partículas para ambas as redes.

9.4 Conclusões

A investigação sobre a influência de diferentes padrões de agregação entre vértices foi possível por meio da simulação da transição de fase do PC em redes do tipo mundo pequeno. Apesar dessas redes permitirem a coexistência de uma alta agregação e da propriedade de mundo pequeno, os resultados obtidos revelam que o papel desempenhado pelos padrões diferentes de correlações dinâmicas na vizinhança dos vértices não é capaz de alterar os valores universais para as razões entre momentos obtidos do caso *annealed*. A mesma concordância com o caso *annealed* foi verificada para o PC em RRN.

Como esperado, essas correlações dinâmicas intrínsecas em desordens congeladas deslocam os pontos críticos das posições previstas pela teoria HMF. Entretanto, a aproximação de pares homogênea nos deu uma ideia da força dessas correlações em triangulações de vértices

ao perder sua predição à medida em que $p \rightarrow 1$ em que a densidade de *loops* de três vértices é cada vez maior. Por outro lado, os expoentes críticos previstos pela teoria HMF para a transição do PC são verificados em ambas as estruturas, não sofrendo qualquer influência dos padrões diferentes de agregação usados em redes WS e sem correções significativas para a ETF devido a natureza das distribuições $P(k)$ das redes estudadas neste capítulo.

A comparação da influência da heterogeneidade na distribuição de graus em redes WS com o padrão homogêneo dessa distribuição em RRN mostrou que essa diferença não desempenha um papel importante na transição do PC. Já fora da criticalidade verificamos que o padrão heterogêneo faz com que a densidade de partículas seja maior porque os compartimentos com $k > \langle k \rangle$ colaboram para o espalhamento da dinâmica de partículas, uma vez que o evento de criação é proporcional a k e o de aniquilação de partículas independente da estrutura do substrato usado, com taxa unitária.

Ao contrário do que acontece para o modelo suscetível-infectado-suscetível (SIS) [10, 94], o limiar de criação de partículas no PC independe da estrutura do substrato (seção 5.1.1). Isso corrobora a comparação entre redes WS e RRN na criticalidade. No caso SIS, há uma dependência do grau no vértice mais conectado que não aparece para o PC. Essa dependência emerge da própria construção do modelo: a diferença sutil é que para o modelo SIS cada um dos k vizinhos de um vértice pode ser infectado com uma taxa proporcional ao número de conexões deles. Por essa razão, um estudo do modelo SIS sob a influência das topologias de redes WS e RRN pode levar a resultados diferentes sobre o comportamento crítico desse modelo.

10 Processos dinâmicos em redes espaciais: uma perspectiva imediata

O esforço para à compreensão de transições de fases em redes complexas tem sido dedicado à dinâmicas em redes em que a posição espacial dos vértices e suas distâncias não são levadas em conta. De fato, vários sistemas complexos estão dispostos sobre um espaço euclidiano bidimensional como é o caso, por exemplo, da rede de roteadores da Internet e, evidentemente, nossas relações sociais. Dessa forma, as conexões entre vértices nesse tipo de rede podem ser afetadas por sua proximidade geográfica e são esperadas consequências não triviais, surgindo da ação combinada entre heterogeneidade e geografia.

As redes espaciais podem ser usadas para a modelagem de sistemas em diversos campos: redes de transporte, telefonia sem fio, instalações elétricas, redes sociais, dentre outros. Esses são exemplos de estruturas em que o espaço métrico é relevante. Por exemplo, podemos modelar a relação entre a mobilidade humana em uma grande região geográfica e o alcance de uma epidemia [16, 95]. Com essa interpretação, o caráter sem escala das linhas aéreas possui implicação direta na forma como, por exemplo, a gripe aviária ou o espalhamento do H1N1 [17] passou de um estado endêmico para uma pandemia em 2009.

Rozenfeld *et al* [96] sugeriram um algoritmo para embutir uma rede sem escala com conexão aleatoriamente distribuída entre seus vértices em um espaço com métrica euclidiana. Dessa forma, puderam combinar dois importantes aspectos das redes reais: o padrão sem escala de conectividade e a distância entre vértices. Para um efeito prático, essas estruturas são embutidas em um espaço com duas dimensões e uma métrica euclidiana¹. Inicialmente, assinalamos o grau de cada um dos vértices localizados por um par ordenado (x, y) . Depois, aplicamos condições de contorno periódicas [97] às bordas da rede e determinamos um círculo de raio $r(k) = Ak^{1/2}$ dentro do qual será permitido a um vértice efetivar suas k ligações. Esse círculo

¹Em um espaço bidimensional, a distância entre dois pares ordenados de abscissa x_1 e x_2 com cotas y_1 e y_2 é dada pelo resultado de Pitágoras: $(\text{distância}) = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2}$.

determina a vizinhança de um vértice, como mostrado na Figura 10.1. Em seguida, escolhemos qualquer vértice i da rede para efetuar cada uma de suas k_i conexões dentro da sua vizinhança, respeitando a proximidade de seus vizinhos. Se o número k_i de conexões ainda não for atingido, mas o número de ligações dos seus vizinhos já estiver saturado passa-se para a escolha de um novo vértice. O mesmo acontece se o vértice escolhido já estiver conectado com toda sua vizinhança e ainda possuir conexões livres, não podendo se conectar com vértices fora do seu limite geográfico $r(k)$.

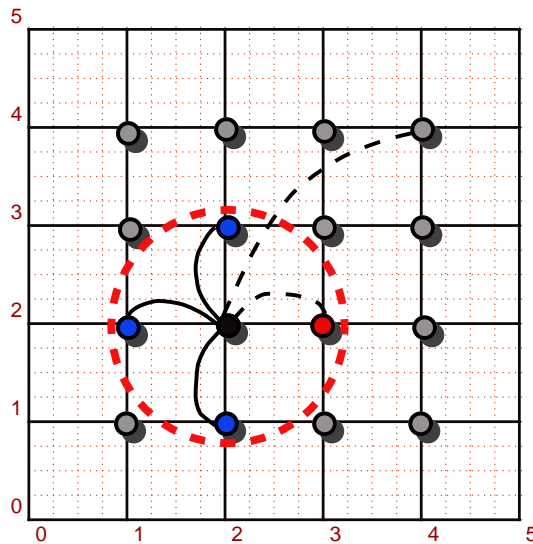


Figura 10.1: Ilustração do algoritmo para a construção de redes sem escala em um espaço bidimensional. O vértice preto se conecta com os vizinhos azuis, mas é impedido de se conectar ao vértice vermelho que já atingiu a saturação. O círculo tracejado vermelho delimita o alcance para as conexões do vértice preto que não pode se conectar a nenhum outro fora destes limites.

Nas Figuras 10.2 e 10.4 são mostradas as estruturas de redes espaciais que geramos a partir do algoritmo acima, em que foi usada uma *constante territorial* $A = 10$ e diferentes valores para o expoente γ . Os resultados para as correspondentes distribuições de conectividades $P(k) \sim k^{-\gamma}$ são mostrados na Figura 10.5.

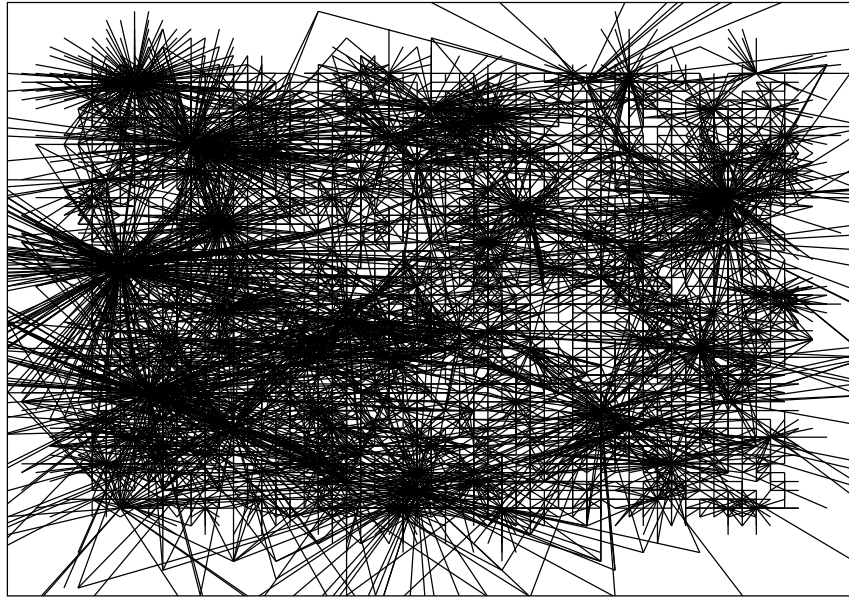


Figura 10.2: Rede espacial de tamanho $R = 50$ com $k_0 = 4$, $k_c = N^{1/2}$ e $\gamma = 2,50$.

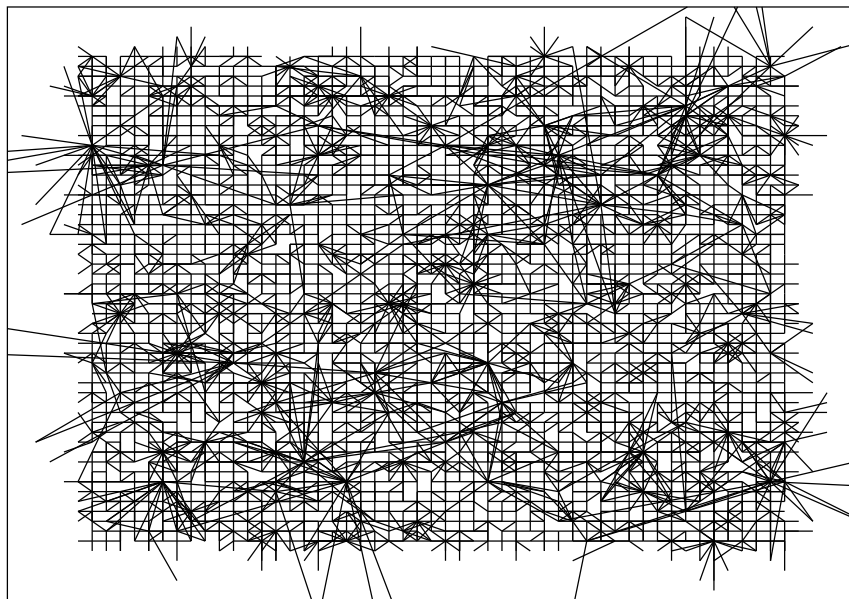


Figura 10.3: Rede espacial de tamanho $R = 50$ com $k_0 = 4$, $k_c = N^{1/2}$ e $\gamma = 3,00$.

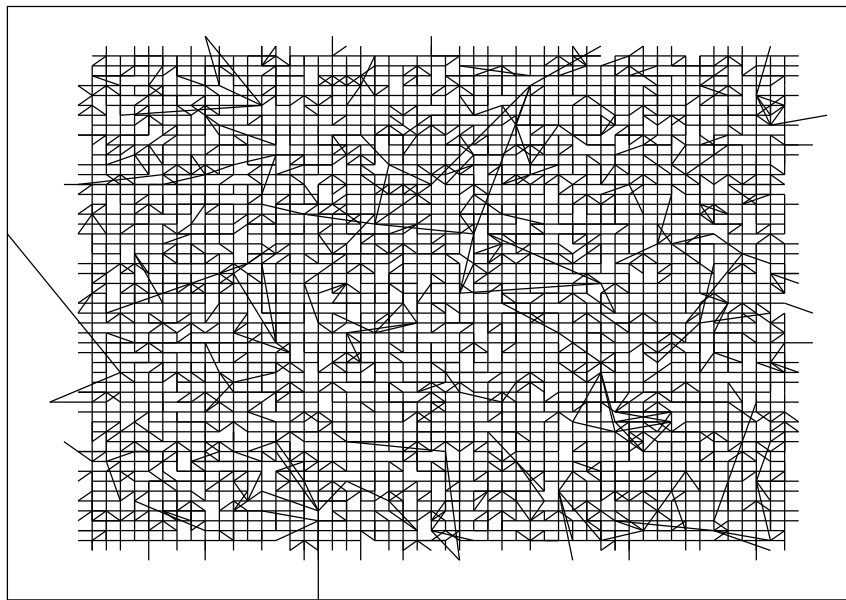


Figura 10.4: Rede espacial de tamanho $R = 50$ com $k_0 = 4$, $k_c = N^{1/2}$ e $\gamma = 5,00$.

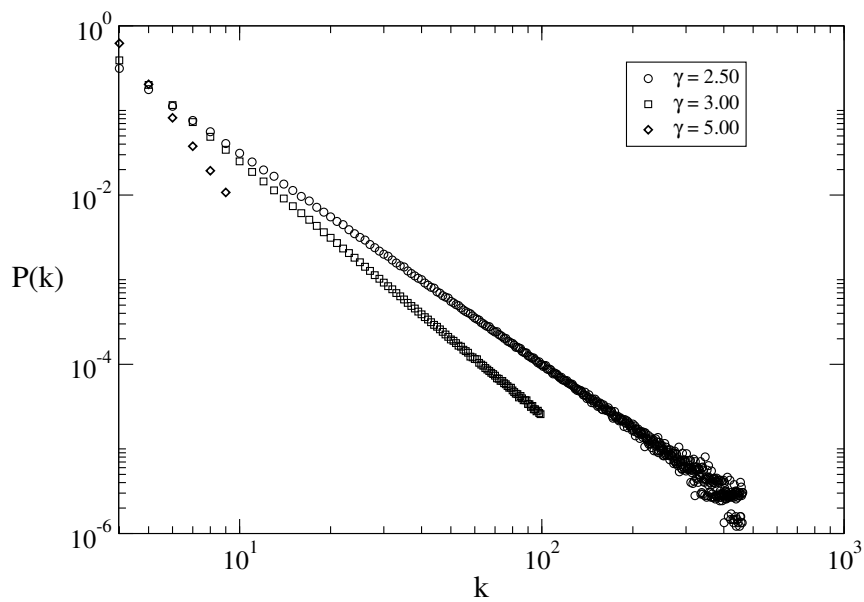


Figura 10.5: Distribuição de graus segundo a lei de escala $P(k) \sim k^{-\gamma}$ para $\gamma = 2,5$, $\gamma = 3,5$ e $\gamma = 5,0$ em uma rede espacial de tamanho $R = 100$ com $k_0 = 4$ e $k_c = N^{1/2}$.

Como uma perspectiva de trabalho, propomos um estudo de processos dinâmicos com estados absorvente ocorrendo em redes espaciais, que poderão revelar se a combinação entre geografia e heterogeneidade levar a comportamentos críticos não triviais em processos desse tipo. Simulações preliminares do PC em redes espaciais já estão em andamento e esperamos que em um curto tempo os resultados já estejam disponíveis.

11 Conclusões finais

A teoria de redes complexas fornece modelos com propriedades diversas que representam uma evolução dos modelos de redes aleatórias, podendo inclusive, combinar características de redes regulares e aleatórias, a exemplo dos modelos de redes de mundo pequeno. Além disso, essa teoria vem alterando abordagens tanto matemáticas quanto conceituais de processos dinâmicos em substratos desse tipo.

Em particular, processos que exibem estados absorventes podem ser levados a comportamentos críticos não triviais se comparado a sua evolução em redes regulares. Ao estudarmos o modelo de PC, vimos que, apesar da simplicidade de suas regras dinâmicas, sua evolução em redes complexas leva a comportamentos não triviais que nos ofereceram diversos desafios para sua compreensão.

A combinação do método QE com nossa abordagem via EM para a descrição do PC em redes complexas, nos permitiu entender as correções necessárias para estudar esse processo em sistemas com escalas finitas, o que vimos não ser uma tarefa trivial. Com isso, mostramos que a teoria HMF descreve corretamente o PC em redes complexas, ao contrário do que havia sido relatado há alguns anos [54]. Entretanto, também identificamos que essas correções possuem restrições quanto a estrutura dos substratos usados como suporte para o estudo da dinâmica do PC. Em redes sem escala fortemente heterogêneas o fator de correção fornecido pela teoria HMF não é capaz de ajustar a ETF do PC para sua investigação em sistemas finitos. A razão disso pode estar ligada ao fato dessa teoria negligenciar as correlações dinâmicas provindas das interações entre vértices fora da sua vizinhança imediata. Isso nos motivou a dar mais um passo na teoria de redes complexas com a construção de uma aproximação de pares heterogênea na expectativa de obtermos um novo fator de correção para a ETF que nos ajude a compreender melhor a criticalidade do PC em redes tão heterogêneas.

ANEXO A – Cortes na distribuição de graus

A.1 Corte natural

Mesmo sem a imposição de um corte na distribuição de graus em lei de potência do tipo $P(k) \sim k^{-\gamma}$ o corte natural

$$k_c = N^{\gamma-1} \quad (\text{A.1})$$

emerge espontaneamente para distribuições de graus $P(k) \sim k^{-\gamma}$ sem escala ($2 \leq \gamma < 3$) em redes finitas. Para descrever a distribuição de graus com uma dependência explícita do tamanho da rede, dada pelo corte superior, dada por uma função de escala:

$$P(k, N) = k^{-\gamma} f\left(\frac{k}{k_c(N)}\right) \quad (\text{A.2})$$

em que f é constante para $x \ll 1$ e decai rapidamente para $x \gg 1$. Agora, considere a variável k em uma aproximação contínua e a distribuição de conectividade normalizada no limite de uma rede infinita:

$$\int_m^\infty P(k) dk = \int_m^\infty C k^{-\gamma} = 1 \quad (\text{A.3})$$

$$\Rightarrow C = \frac{1}{\int_m^\infty k^{-\gamma} dk} \quad (\text{A.4})$$

Portanto,

$$P(k) = (\gamma - 1) m^{\gamma-1} k^{-\gamma}, \quad (\text{A.5})$$

com $\gamma > 2$ e $k \in [m, \infty]$, em que m é o menor grau encontrado no grafo. Vamos considerar ainda a geração de um número arbitrário n de sequências s de números aleatórios distribuídos segundo a equação (A.5), tal que $s_n = \{k_1, k_2, \dots, k_N\}$. Com isso, $K_n = \max\{k_1, k_2, \dots, k_N\}$ é o valor mais alto para k dessa sequência. Dessa forma, devemos assumir $k_c(N)$ como o valor médio para o *ensemble* de sequências

$$k_c(N) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n K_i. \quad (\text{A.6})$$

Note que a probabilidade de k_c ser menor ou igual a K é a mesma de que cada valor individual k_i também seja menor ou igual a K . Então, a função de distribuição do valor máximo de K é dada por [36]:

$$\Pi(K, N) = [\Psi(K)]^N \quad (\text{A.7})$$

em que

$$\Psi(K) = \int_m^K P(k)dk = \left(1 - \frac{K}{m}\right)^{-\gamma+1}. \quad (\text{A.8})$$

Tomando a derivada da equação (A.7), obtemos a distribuição de probabilidades para seu valor máximo:

$$\pi(K, N) = \frac{d\Pi(K, N)}{dK} = \frac{N(\gamma-1)}{m} \left(\frac{K}{m}\right)^{-\gamma} \left[1 - \left(\frac{K}{m}\right)^{-\gamma+1}\right]^{N-1}. \quad (\text{A.9})$$

Como k_c é definido pela equação (A.6), então podemos escrever que

$$k_c(N) = \int_m^\infty K\pi(K, N)dK = \frac{Nm}{\Lambda} \frac{\Gamma(1+\Lambda)\Gamma(N)}{\Gamma(N+\Lambda)}, \quad (\text{A.10})$$

em que $\Gamma(x)$ é a função Gamma e definimos a constante $\Lambda = (\gamma-2)/(\gamma-1)$. Usando a relação assintótica:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\Gamma(N+a)}{\Gamma(N+b)} \approx N^{a-b}, \quad (\text{A.11})$$

obtemos o comportamento dominante para esse limite de N

$$k_c(N) \approx m \frac{\Gamma(1+\Lambda)}{\Lambda} N^{1-\Lambda} \sim mN^{1/(\gamma-1)}. \quad (\text{A.12})$$

A.2 Corte estrutural

Vamos definir uma quantidade $r_{kk'}$ como sendo a razão entre o número de arestas $E_{kk'}$ que existem ligando os compartimentos k e k' e o número máximo possível $m_{kk'}$ de arestas entre esses compartimentos. Assumindo uma rede sem múltiplas conexões, $m_{kk'}$ será dado por:

$$m_{kk'} = \min\{kN_k, k'N_{k'}, N_k N_{k'}\} \quad (\text{A.13})$$

e, portanto,

$$r_{kk'} = \frac{E_{kk'}}{m_{kk'}} = \frac{\langle k \rangle P(k, k')}{\min\{kP(k), k'P(k'), NP(k)P(k')\}} \quad (\text{A.14})$$

em que,

$$P(k, k') = \frac{E_{kk'}}{\langle k \rangle N} \quad (\text{A.15})$$

é a *probabilidade conjunta* de, ao acaso, tomarmos uma aresta de um grafo e que em uma de suas pontas esteja um vértice de grau k e na outra um vértice de grau k' .

Vale a pena notar que $r_{kk'}$ deve ser menor ou igual a 1 para quaisquer valores de k e k' . Levando isso em consideração, vamos desenhar um espaço $k - k'$ (Figura A.1), no qual a probabilidade conjunta esteja definida. A curva $r_{kk'} = 1$ define a fronteira separando a região na qual os pares (k, k') assumem valores admissíveis $r_{kk'} \leq 1$ da região não física $r_{kk'} > 1$. Definindo um corte estrutural k_e como o valor para o grau que delimita a região quadrada de valores plausíveis, obtemos a região delimitada pelas curvas $r_{kk'} = 1$ e $k = k'$. Dessa forma, o corte estrutural pode ser definido como sendo a solução da equação

$$r_{kk'} = 1. \quad (\text{A.16})$$

Para grafos não correlacionados, a probabilidade conjunta pode ser fatorada como

$$P(k, k') = \frac{kk'P(k)P(k')}{\langle k \rangle^2}, \quad (\text{A.17})$$

implicando que a equação (A.14) se reduz a

$$r_{kk'} = \frac{kk'}{\langle k \rangle}. \quad (\text{A.18})$$

Nesse caso, o corte estrutural precisa preservar a condição física $r_k k' \geq 1$, tomando a forma

$$k_s(N) = (\langle k \rangle N)^{1/2} \quad (\text{A.19})$$

independente da forma da distribuição $P(k)$ e do expoente de conectividade γ em redes sem escala.

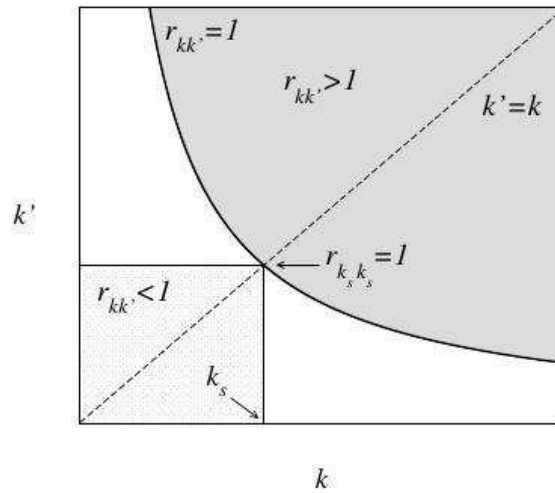


Figura A.1: Construção geométrica do corte estrutural k_s .

Referências Bibliográficas

- [1] BALCAN, D. et al. Seasonal transmission potential and activity peaks of the new influenza a (h1n1): a monte carlo likelihood analysis based on human mobility. *BMC medicine*, BioMed Central Ltd, v. 7, n. 1, p. 45, 2009.
- [2] HUFNAGEL, L.; BROCKMANN, D.; GEISEL, T. Forecast and control of epidemics in a globalized world. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, National Acad Sciences, v. 101, n. 42, p. 15124–15129, 2004.
- [3] STROGATZ, S. H. Exploring complex networks. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 410, n. 6825, p. 268–276, 2001.
- [4] ALBERT, R.; BARABÁSI, A. L. Statistical mechanics of complex networks. *Reviews of modern physics*, APS, v. 74, n. 1, p. 47, 2002.
- [5] NEWMAN, M. E. J. The structure and function of complex networks. *SIAM review*, SIAM, v. 45, n. 2, p. 167–256, 2003.
- [6] BOCCALETTI, S. et al. Complex networks: Structure and dynamics. *Physics reports*, Elsevier, v. 424, n. 4, p. 175–308, 2006.
- [7] LOSCALZO, J.; BARABÁSI, A. Systems biology and the future of medicine. *Wiley interdisciplinary reviews. Systems biology and medicine*, John Wiley & Sons, Inc., v. 3, n. 6, p. 619–627, 2011.
- [8] BARABÁSI, A.; OLTVAI, Z. N. Network biology: understanding the cell’s functional organization. *Nature Reviews Genetics*, Nature Publishing Group, v. 5, n. 2, p. 101–113, 2004.
- [9] BUCHANAN, M. et al. *Networks in cell biology*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2010.
- [10] PASTOR-SATORRAS, R.; VESPIGNANI, A. Epidemic dynamics and endemic states in complex networks. *Physical Review E*, APS, v. 63, n. 6, p. 066117, 2001.
- [11] PASTOR-SATORRAS, R.; VESPIGNANI, A. Immunization of complex networks. *Physical Review E*, APS, v. 65, n. 3, p. 036104, 2002.
- [12] BOGUNÁ, M.; PASTOR-SATORRAS, R. Epidemic spreading in correlated complex networks. *Physical Review E*, APS, v. 66, n. 4, p. 047104, 2002.
- [13] AMARAL, L. A. N.; OTTINO, J. M. Complex networks. *The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems*, Springer, v. 38, n. 2, p. 147–162, 2004.
- [14] RIBEIRO, L. C. et al. Dynamic stability in random and scale-free b-lymphocyte networks. *Physical Review E*, APS, v. 75, n. 3, p. 031911, 2007.

- [15] BALCAN, D. et al. Multiscale mobility networks and the spatial spreading of infectious diseases. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, National Acad Sciences, v. 106, n. 51, p. 21484–21489, 2009.
- [16] BALCAN, D. et al. Modeling the spatial spread of infectious diseases: The global epidemic and mobility computational model. *Journal of computational science*, Elsevier, v. 1, n. 3, p. 132–145, 2010.
- [17] BAJARDI, P. et al. Human mobility networks, travel restrictions, and the global spread of 2009 h1n1 pandemic. *PLoS One*, Public Library of Science, v. 6, n. 1, p. e16591, 2011.
- [18] STEHLÉ, J. et al. Simulation of an seir infectious disease model on the dynamic contact network of conference attendees. *BMC medicine*, BioMed Central Ltd, v. 9, n. 1, p. 87, 2011.
- [19] ALBERT, R.; JEONG, H.; BARABÁSI, A. L. Error and attack tolerance of complex networks. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 406, n. 6794, p. 378–382, 2000.
- [20] BALTHROP, J. et al. Technological networks and the spread of computer viruses. *arXiv preprint cs/0407048*, 2004.
- [21] ERDÖS, P.; RÉNYI, A. On random graphs, I. *Publicationes Mathematicae (Debrecen)*, v. 6, p. 290–297, 1959.
- [22] ERDOS, P.; RENYI, A. On the evolution of random graphs. *Publ. Math. Inst. Hung. Acad. Sci*, v. 5, p. 17–61, 1960.
- [23] MAGALHÃES, M. N. *Probabilidade e variáveis aleatórias*. [S.l.]: Edusp, 2006.
- [24] BARABÁSI, A.; ALBERT, R. Emergence of scaling in random networks. *Science*, v. 286, p. 509–512, 1999.
- [25] BARABÁSI, A. L.; BONABEAU, E. Scale-free networks. *Scientific American*, v. 288, n. 5, p. 50–59, 2003.
- [26] CALDARELLI, G. *Scale-Free Networks: Complex Webs in Nature and Technology (Oxford Finance)*. [S.l.]: Oxford University Press, USA, 2007.
- [27] BARABÁSI, A. L. et al. Evolution of the social network of scientific collaborations. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier, v. 311, n. 3, p. 590–614, 2002.
- [28] DOROGOVTSEV, S. N.; MENDES, J. F. F. *Evolution of networks: From biological nets to the Internet and WWW*. [S.l.]: OUP Oxford, 2003.
- [29] PASTOR-SATORRAS, R.; VESPIGNANI, A. *Evolution and structure of the Internet: A statistical physics approach*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2007.
- [30] WATTS, D. J.; STROGATZ, S. H. Collective dynamics of "small-world" networks. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 393, 1998.
- [31] WATTS, D. J. Networks, dynamics, and the small-world phenomenon. *American Journal of Sociology*, JSTOR, v. 105, n. 2, p. 493–527, 1999.
- [32] MILGRAM, S. The small world problem. *Psychology today*, New York, v. 2, n. 1, p. 60–67, 1967.

- [33] LESKOVEC, J.; HORVITZ, E. Worldwide buzz: Planetary-scale views on an instant-messaging network. *Microsoft Research, Technical Publication*, 2007.
- [34] MILO, R. et al. Network motifs: simple building blocks of complex networks. *Science Signalling*, AAAS, v. 298, n. 5594, p. 824, 2002.
- [35] DOROGOVTSSEV, S. N.; GOLTSEV, A. V.; MENDES, J. F. F. Critical phenomena in complex networks. *Review of Modern Physics*, American Physical Society, v. 80, p. 1275–1335, 2008.
- [36] BARRAT, A.; BARTHLEMY, M.; VESPIGNANI, A. *Dynamical Processes on Complex Networks*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2008.
- [37] NEWMAN, M. *Networks: an introduction*. [S.l.]: Oxford University Press, Inc., 2010.
- [38] ALBERT, R.; BARABÁSI, A. L. Statistical mechanics of complex networks. *Review of Modern Physics*, American Physical Society, v. 74, p. 47–97, 2002.
- [39] BARABÁSI, A. L.; FRANGOS, J. *Linked: The New Science Of Networks Science Of Networks*. [S.l.]: Basic Books, 2002.
- [40] VESPIGNANI, A. Modelling dynamical processes in complex socio-technical systems. *Nature Physics*, Nature Publishing Group, v. 8, n. 1, p. 32–39, 2012.
- [41] BARABÁSI, A. Scale-free networks: A decade and beyond. *Science*, 2009.
- [42] FERREIRA, S. C.; FERREIRA, R. S.; PASTOR-SATORRAS, R. Quasistationary analysis of the contact process on annealed scale-free networks. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 83, p. 066113, 2011.
- [43] FERREIRA, S. C. et al. Quasistationary simulations of the contact process on quenched networks. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 84, p. 066102, 2011.
- [44] NEWMAN, M. E. J. Communities, modules and large-scale structure in networks. *Nature Physics*, Nature Publishing Group, v. 8, n. 1, p. 25–31, 2011.
- [45] SIMINI, F. et al. A universal model for mobility and migration patterns. *Nature*, Nature Publishing Group, a division of Macmillan Publishers Limited. All Rights Reserved., v. 484, n. 7392, p. 96–100, 2012.
- [46] ALBERT, R. Scale-free networks in cell biology. *Journal of cell science*, The Company of Biologists Ltd, v. 118, n. 21, p. 4947–4957, 2005.
- [47] JEONG, H. et al. The large-scale organization of metabolic networks. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 407, n. 6804, p. 651–654, 2000.
- [48] CASTELLANO, C.; FORTUNATO, S.; LORETO, V. Statistical physics of social dynamics. *Reviews of modern physics*, APS, v. 81, n. 2, p. 591, 2009.
- [49] MARRO, J.; DICKMAN, R. *Nonequilibrium phase transitions in lattice models*. [S.l.]: Cambridge Univ Pr, 1999.
- [50] GRASSBERGER, P. de la torre a 1979. *Ann. Phys., NY*, v. 122, p. 373, 1980.

- [51] GRASSBERGER, P. On phase transitions in schlögl's second model. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, Springer, v. 47, n. 4, p. 365–374, 1982.
- [52] BINNEY, J. J. et al. *The theory of critical phenomena: an introduction to the renormalization group*. [S.l.]: Oxford University Press, Inc., 1992.
- [53] STAUFFER, D.; AHARONY, A. *Introduction to percolation theory*. [S.l.]: CRC, 1994.
- [54] CASTELLANO, C.; PASTOR-SATORRAS, R. Non-mean-field behavior of the contact process on scale-free networks. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 96, p. 038701, 2006.
- [55] HA, M.; HONG, H.; PARK, H. Comment on “non-mean-field behavior of the contact process on scale-free networks”. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 98, p. 029801, 2007.
- [56] HONG, H.; HA, M.; PARK, H. Finite-size scaling in complex networks. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 98, p. 258701, 2007.
- [57] CASTELLANO, C.; PASTOR-SATORRAS, R. Castellano and pastor-satorras reply:. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 98, p. 029802, 2007.
- [58] HARRIS, T. E. Contact interactions on a lattice. *The Annals of Probability*, v. 2, 1974.
- [59] TOMÉ, T. *Dinâmica estocástica e irreversibilidade*. [S.l.]: Edusp, 2001.
- [60] LIGGETT, T. M. *Interacting Particle Systems*. [S.l.]: Springer Berlin Heidelberg, 1985.
- [61] CASTELLANO, C.; PASTOR-SATORRAS, R. Routes to thermodynamic limit on scale-free networks. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 100, p. 148701, 2008.
- [62] BOGUÑÁ, M.; CASTELLANO, C.; PASTOR-SATORRAS, R. Langevin approach for the dynamics of the contact process on annealed scale-free networks. *Physical Review E*, APS, v. 79, n. 3, p. 036110, 2009.
- [63] CHARTRAND, G. *Introductory Graph Theory*. [S.l.]: Dover Publications, 1984.
- [64] BOLLOBAS, B. *Modern Graph Theory*. Corrected. [S.l.]: Springer, 1998. Paperback.
- [65] CALDARELLI, G. Scale-free networks: complex webs in nature and technology. *OUP Catalogue*, Oxford University Press, 2011.
- [66] NEWMAN, M. Assortative mixing in networks. *Physical Review Letters*, APS, v. 89, n. 20, p. 208701, 2002.
- [67] COHEN, R.; HAVLIN, S. *Complex networks: structure, robustness and function*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2010.
- [68] BARTHÉLÉMY, M.; AMARAL, L. A. N. Small-world networks: Evidence for a crossover picture. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 82, p. 3180–3183, 1999.
- [69] BARRAT, A.; WEIGT, M. On the properties of small-world network models. *EUROPHYSICAL JOURNAL B*, v. 13, p. 547, 2000.

- [70] NEWMAN, M. E. J.; WATTS, D. J. Scaling and percolation in the small-world network model. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 60, n. 6, p. 7332–7342, 1999.
- [71] MENEZES, M. A. D.; MOUKARZEL, C. F.; PENNA, T. J. P. First-order transition in small-world networks. *EPL (Europhysics Letters)*, p. 574+, 2000.
- [72] BARRAT, A.; WEIGT, M. On the properties of small-world network models. *The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems*, Springer, v. 13, n. 3, p. 547–560, 2000.
- [73] ALBERT, R.; JEONG, H.; BARABÁSI, A. The diameter of the world wide web. *Nature*, v. 401, p. 130–131, 1999.
- [74] DOROGOVTSSEV, S. N.; GOLTSEV, A. V.; MENDES, J. F. F. Correlations in interacting systems with a network topology. *Physical Review E*, v. 72, 2005.
- [75] BURDA, Z.; CORREIA, J.; KRZYWICKI, A. Statistical ensemble of scale-free random graphs. *arXiv*, v. 64, n. 0104155, 2001.
- [76] BOGUÑÁ, M.; PASTOR-SATORRAS, R.; VESPIGNANI, A. Cut-offs and finite size effects in scale-free networks. *The European Physical Journal B*, v. 38, p. 205, 2004.
- [77] MOLLOY, M.; REED, B. A critical point for random graphs with a given degree sequence. *Random Structures and Algorithms*, v. 6, n. 2-3, p. 161–180, 1995.
- [78] MOLLOY, M.; REED, B. The Size of the Largest Component of a Random Graph on a Fixed Degree Sequence. *Combinatorics, Probab. Comput.*, v. 7, p. 295, 1998.
- [79] CATANZARO, M.; BOGUÑÁ, M.; PASTOR-SATORRAS, R. Generation of uncorrelated random scale-free networks. *Physical Review E*, APS, v. 71, n. 2, p. 27103, 2005.
- [80] ABRAMOWITZ, M.; STEGUN, I. A. *Handbook of mathematical functions: with formulas, graphs, and mathematical tables*. [S.l.]: Dover publications, 1965.
- [81] BURDA, Z.; KRZYWICKI, A. Uncorrelated random networks. *Physical Review E*, APS, v. 67, n. 4, p. 046118, 2003.
- [82] OLIVEIRA, M. M. D.; DICKMAN, R. How to simulate the quasistationary state. *Physical Review E*, APS, v. 71, n. 1, p. 16129, 2005.
- [83] SANDER, R. S.; FERREIRA, S. C.; PASTOR-SATORRAS, R. Phase transitions with infinitely many absorbing states in complex networks. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 87, p. 022820, 2013.
- [84] KAMPEN, N. G. V. *Stochastic processes in physics and chemistry*. [S.l.]: North holland, 1992.
- [85] DICKMAN, R.; VIDIGAL, R. Quasi-stationary distributions for stochastic processes with an absorbing state. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, IOP Publishing, v. 35, n. 5, p. 1147, 2002.
- [86] NOH, J. D.; PARK, H. Critical behavior of the contact process in annealed scale-free networks. *Physical Review E*, APS, v. 79, n. 5, p. 056115, 2009.

- [87] LANDAU, D. P.; BINDER, K. *A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics*. [S.l.]: Cambridge university press, 2005.
- [88] DICKMAN, R.; SILVA, J. K. L. D. Moment ratios for absorbing-state phase transitions. *Physical Review E*, APS, v. 58, n. 4, p. 4266, 1998.
- [89] CASTELLANO, C.; PASTOR-SATORRAS, R. Thresholds for epidemic spreading in networks. *Physical Review Letters*, APS, v. 105, n. 21, p. 218701, 2010.
- [90] BEN-AVRAHAM, D.; KÖHLER, J. Mean-field (n, m)-cluster approximation for lattice models. *Physical Review A*, APS, v. 45, n. 12, p. 8358, 1992.
- [91] MUÑOZ, M. A. et al. Griffiths phases on complex networks. *Physical review letters*, APS, v. 105, n. 12, p. 128701, 2010.
- [92] COLOMER-DE-SIMON, P.; BOGUNÁ, M. Clustering of random scale-free networks. *Physical Review E*, APS, v. 86, n. 2, p. 026120, 2012.
- [93] REIF, F. *Fundamentals of statistical and thermal physics*. [S.l.]: McGraw-Hill New York, 1965.
- [94] FERREIRA, S. C.; CASTELLANO, C.; PASTOR-SATORRAS, R. Epidemic thresholds of the susceptible-infected-susceptible model on networks: A comparison of numerical and theoretical results. *arXiv preprint arXiv:1206.6728*, 2012.
- [95] BALCAN, D. et al. Multiscale mobility networks and the spatial spreading of infectious diseases. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, v. 106, n. 51, p. 21484–21489, 2009.
- [96] ROZENFELD, A. F. et al. Scale-free networks on lattices. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 89, n. 21, p. 218701, 2002.
- [97] SCHERER, C. *Métodos Computacionais da Física*. [S.l.]: Editora Livraria da Física, 2005.