

ANGÉLICA SOUSA DA MATA

**TRANSIÇÕES DE FASES EM UM PROCESSO DE
REAÇÃO-DIFUSÃO EM METAPOPLAÇÕES
HETEROGÊNEAS**

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

**VIÇOSA
MINAS GERAIS - BRASIL
2011**

ANGÉLICA SOUSA DA MATA

**TRANSIÇÕES DE FASES EM UM PROCESSO DE REAÇÃO-DIFUSÃO EM
METAPOPULAÇÕES HETEROGÊNEAS**

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

APROVADA: 18 de fevereiro de 2011.

Prof. Marcelo Lobato Martins
(Co-orientador)

Prof. Sidiney Geraldo Alves
(Co-orientador)

Prof. Ismael Lima M. Sobrinho

Prof. Marcelo Martins de Oliveira

Prof. Silvio da Costa Ferreira Júnior
(Orientador)

Dedico aos meus pais, Sebastião e
Mara, com todo amor e gratidão.

“A moral e a ciência têm seus domínios próprios, que se tocam mas não se penetram. Uma nos mostra que fim devemos visar; a outra, sendo dado o fim, nos faz conhecer os meios de atingí-lo. ”

Henri Poincaré - O Valor da Ciência

Agradecimentos

A Deus por ser a força que me sustenta em todos os momentos da minha vida.

Aos meus pais, Sebastião e Mara, por tudo que fizeram e fazem por mim. Por sempre me apoiarem na minha vida acadêmica, não medindo esforços para que eu alcançasse meus objetivos. Esta é mais uma conquista pela qual vocês são completamente responsáveis.

Às minhas irmãs, Carol e Jacque, extensivamente à Ana Paula, pelo companheirismo durante todos esses anos em Viçosa, pela amizade e sobretudo por serem meu alicerce emocional.

Ao professor Silvio pela orientação, apoio, confiança e paciência e por ser um exemplo de pesquisador no qual sempre procuro me espelhar.

A todos os professores do departamento de Física da UFV com os quais tive a oportunidade de aprender algo nas disciplinas cursadas.

Aos funcionários do departamento.

À CAPES pela bolsa concedida e também ao CNPq e à FAPEMIG pelo suporte oferecido.

Ao GISC e também ao Departament de Física y Enginyeria Nuclear/ Universitat Politècnica de Catalunya pelo suporte computacional.

Ao professor Romualdo Pastor-Satorras pelas valiosas discussões.

Aos colegas da pós-graduação, principalmente aos meninos da sala 213 pelos momentos de descontração.

A todos os meus amigos que, embora eu não tenha citado o nome sabem o quanto foram importantes na conclusão de mais essa etapa. Em especial, agradeço à Aline, Mirela, Priscila, Renan, Saulo, Ronan, Alci, Mário e Thiago pelos estudos, pelo apoio na pesquisa e pela maravilhosa convivência ao longo desses anos.

Sumário

Lista de Figuras	ix
Lista de Tabelas	x
Resumo	xi
Abstract	xii
1 Introdução	1
2 Redes Complexas	4
2.1 Conceitos básicos e definições	4
2.2 Propriedades topológicas	7
2.3 Modelos Fundamentais	11
2.3.1 Grafo Aleatório	12
2.3.2 O modelo de Watts-Strogatz	13
2.3.3 O modelo de conexão preferencial	15
2.3.4 Modelo de Configurações	17
3 Transições de fases para estados absorventes	20
3.1 Introdução aos processos dinâmicos	20
3.2 Processos de reação-difusão com estados absorventes	21
3.3 Estado quase-estacionário	26
3.4 Simulações Computacionais	29
4 Processos de reação-difusão em redes heterogêneas	32

4.1	Modelo SIS em redes heterogêneas	32
4.2	Imunização em redes heterogêneas	36
5	Um processo de reação-difusão em metapopulações heterogêneas	39
5.1	Modelo	39
5.2	Análise de Campo Médio	41
5.3	Simulações e Discussões	47
5.4	Detalhes da teoria de campo médio	56
5.4.1	Determinação do autovetor de $C_{kk'}$	56
5.4.2	Limites assintóticos da função hipergeométrica	57
5.4.3	Expoentes críticos	58
6	Considerações Finais	61
	Referências Bibliográficas	63
A	Correlação entre graus	68
B	<i>Cutoffs</i> em redes sem escala	70

Lista de Figuras

2.1	As pontes da antiga cidade de Königsberg, na Rússia.	5
2.2	Na esquerda, um mapa esquemático do centro da cidade de Königsberg no século XVIII. Na direita a sua representação em forma de grafo, na qual os vértices representam as várias partes da cidade e as ligações entre eles simbolizam as sete pontes.	5
2.3	Um grafo que mostra, em destaque, um dos caminhos que conecta os nós A e B	6
2.4	Comparação da distribuição de Poisson (discos) e da lei de potência (quadrados) em escala linear (esquerda) e na escala logarítmica (direita). As duas distribuições têm o mesmo grau médio $\langle k \rangle = 10$	8
2.5	Um grafo particular que pode ser desconectado retirando apenas o vértice em destaque que tem grau 2. Por outro lado, o nó destacado em vermelho é muito conectado mas sua remoção não leva a ruptura do grafo.	9
2.6	Os três possíveis comportamentos do grau médio dos vizinhos $\langle k_{nn} \rangle$ versus o grau k do vértice de origem.	11
2.7	(a) Construção do modelo de Watts-Strogatz. Começamos com $N = 20$ vértices cada um deles conectado aos 4 vizinhos mais próximos ($k = 4$). (b) Quando se aumenta a aleatoriedade aumenta-se o número de ligações redirecionadas. (c) Em $p = 1$ temos um grafo completamente aleatório onde todas as ligações foram redirecionadas. Figura adaptada da referência [27].	14
2.8	Distribuição de probabilidade da conectividade k para $m = 3$ e vários valores de p . Figura adaptada da referência [28].	14
2.9	Rede de Barabási-Albert de tamanho $N = 200$ e conectividade média $\langle k \rangle = 6$. Os <i>hubs</i> estão no centro do grafo. Figura retirada de [11].	15
2.10	Distribuição de conectividade do modelo de Barabási-Albert, com $N = 10^5$, $m_0 = 10$ e $m = 2$	16
2.11	Distribuição de grau $P(k)$ de uma rede sem escala gerada pelo modelo UCM, com $N = 10^4$ e $m_0 = 2$, para diferentes valores de γ	19

2.12	Grau médio dos vizinhos mais próximos dos vértices com grau k , $k_{mn}(k)$ para o algoritmo UCM com diferentes expoentes γ	19
3.1	Taxas do processo dinâmico do modelo SIS em uma dimensão.	22
3.2	Evolução temporal típica do modelo SIS a partir de uma única partícula para valores subcrítico (esquerda), crítico (centro) e supercrítico (direita) da taxa de ocupação λ	26
3.3	Processo original, X_t com o estado 0 absorvente e seu processo relacionado X_t^* . Figura retirada da referência [39].	28
3.4	Densidade quase-estacionária no modelo SIS unidimensional em função do tempo. Simulações quase-estacionária: $L = 20, 50, 100, 200, 500, 1000$ de cima para baixo. A inclinação da reta pontilhada é -0.16	29
3.5	Densidade QE no modelo SIS 1-D de tamanho: $L = 20(\circ)$, $L = 200(\square)$ e $L = 400(\triangle)$. A inserção mostra a densidade estacionária para este modelo. . .	30
3.6	Tempo de meia vida do estado QE em função do tamanho do sistema no modelo SIS em uma dimensão, $\tau \propto L^{-\nu_{\parallel}/\nu_{\perp}}$ no ponto crítico. O expoente obtido por uma regressão em lei de potência é $\nu_{\parallel}/\nu_{\perp} = 1.58(3)$	30
3.7	Densidade quase-estacionária no modelo SIS unidimensional em função do tamanho do sistema no ponto crítico. O expoente obtido por uma regressão em lei de potência é $\beta/\nu_{\perp} = 0.256(2)$	31
4.1	Solução gráfica da equação 4.7. A) Se a inclinação da função $y_2(\Theta)$ em $\Theta = 0$ for menor do que 1, a única solução da equação é $\Theta = 0$. B) Quando a inclinação é maior do que 1, a solução não trivial Θ^* pode ser encontrada. Figura adaptada da referência [11].	34
4.2	Comportamento da densidade estacionária do modelo SIS em função da taxa de infecção para diferentes valores do expoente γ	35
4.3	Modelo SIS em uma rede Barabási-Albert com imunização uniforme e direcionada, com taxa de infecção fixa $\lambda = 0.25$. Uma extrapolação linear dos maiores valores de h , para a imunização direcionada, leva a uma estimativa da imunização crítica $h_c = 0.16$. Adaptada da referência [44].	38
5.1	Representação esquemática do processo RD em uma metapopulação estruturada. Os nós da rede representam diferentes populações. Cada nó é uma cadeia unidimensional em que os sítios podem estar ocupados ou vazios. As partículas podem se mover de uma população para outra de acordo com a conectividade da rede.	40

5.2	Experimentos de espalhamento para uma taxa de troca $\alpha = 0.1$, expoente $\gamma = 2.25$, e cadeias lineares de tamanho $L = 250$. (a) Número médio de partículas próximo ao ponto crítico $\lambda_c = 1.1047(2)$ para uma rede de populações com $N = 16000$ nós. (b) A dependência com o tamanho da rede para uma taxa supercrítica $\lambda = 1.1070$	48
5.3	Densidade QE versus tempo. Os parâmetros fixos do modelo são $\gamma = 2.25$, $L = 250$ e $\alpha = 0.1$	49
5.4	(a) Distribuição de probabilidade quase-estacionária do número total de partículas para diferentes taxas de criação, e taxa de troca $\alpha = 0.1$. O expoente é $\gamma = 2.25$. O tamanho da rede é $N = 32 \times 10^3$ e as cadeias unidimensionais têm $L = 250$ sítios. (b) Comportamento assintótico da distribuição QE na criticalidade. O gráfico principal mostra o decaimento exponencial enquanto a inserção mostra a cauda Gaussiana.	50
5.5	Distribuição QE para diferentes tamanhos da rede na fase supercrítica com taxas de criação e troca $\lambda = 0.7890$ e $\alpha = 0.5$, respectivamente. O expoente da distribuição de conectividade é $\gamma = 2.25$ O gráfico no interior mostra a densidade QE como uma função do tamanho da rede (símbolos) e a linha pontilhada é a regressão em lei de potência com expoente $\gamma = -0.52$	51
5.6	Distribuição QE para uma rede heterogênea com $N = 64000$ nós e expoente $\gamma = 2.25$. As taxas de criação e troca são $\lambda = 1.1045$ e $\alpha = 0.1$. Cada símbolo representa uma média sobre 20 configurações de rede.	52
5.7	(a)-(c) A densidade QE em função do tamanho do sistema próximo ao ponto crítico para uma taxa de troca $\alpha = 0.1$. Os expoentes γ estão indicados em cada figura. Símbolos representam as simulações e as linhas representam as regressões polinômias usadas para estimar a curvatura. Cada figura também contém a curvatura estimada C e a inclinação S da regressão em lei de potência. Figura (d) mostra a densidade de partículas em função de (gN)	53
5.8	Densidade QE em função do tamanho da rede obtida através da solução numérica da equação (5.25). Símbolos são as simulações numéricas e as linhas são as regressões em lei de potência.	54
5.9	Tempo característico da distribuição QE na criticalidade para a taxa de troca $\alpha = 0.1$ As taxas de criação são $\lambda = 1.1047$ ($\gamma = 2.25$), $\lambda = 1.1075$ ($\gamma = 2.75$), e $\lambda = 1.1114$ ($\gamma = 3.50$). Símbolos são simulações e linhas, regressões em lei de potência.	55
B.1	Construção geométrica do <i>cutoff</i> estrutural k_s . Figura retirada da referência [32].	72

Lista de Tabelas

5.1	Estimativa dos pontos críticos. Os números entre parênteses representam a incerteza no último dígito. O resultado de campo médio foi incluído para comparação.	51
5.2	Estimativa do expoente crítico $\hat{\nu}$ definido por $\rho \sim N^{-\hat{\nu}}$. Os números entre parênteses representam as incertezas no último dígito. Os resultados de campo médio correspondentes ao limite assintótico (MF1) e aos expoentes efetivos com correções de tamanho finito (MF2) também estão incluídos.	52
5.3	Estimativa dos expoentes obtidos com uma regressão em lei de potência de ρ versus gN . Os números entre parênteses representam as incertezas no último dígito. Os resultados de campo médio (MF) também foram incluídos.	54

Resumo

MATA, Angélica Sousa da, M. Sc., Universidade Federal de Viçosa, fevereiro de 2011.
Transições de fases em um processo de reação-difusão em metapopulações heterogêneas.
Orientador: Silvio da Costa Ferreira Junior. Co-Orientadores: Marcelo Lobato Martins e Sidiney Geraldo Alves.

Uma área de interesse destacado da Física Estatística é o estudo de sistemas que apresentam transições de fases para estados absorventes [1, 2]. Estes modelos têm sido estudados em redes que apresentam topologias complexas e heterogêneas [3, 4, 5]. Nesta dissertação, um modelo para caracterizar a transição de fases em um processo de reação-difusão (RD) em metapopulações heterogêneas é investigado. O modelo é composto por um conjunto de reticulados regulares denominado metapopulação. Estes reticulados estão conectados por uma rede aleatória com distribuição de conectividade dada por uma lei de potência. O processo RD inclui aniquilação espontânea, criação auto-catalítica e difusão por meio do intercâmbio de partículas entre as populações diferentes. Uma teoria de campo médio heterogênea foi desenvolvida e comparada com simulações numéricas realizadas com o método quase-estacionário (QE) [6]. Os resultados mostram que a densidade QE apresenta um período de relaxação curto. As distribuições QE mudam de um decaimento exponencial no regime subcrítico para uma distribuição Gaussiana no regime supercrítico, em acordo com os comportamentos previstos pela análise de campo médio. A taxa de migração e a heterogeneidade da rede contribuem para manter o estado estacionário ativo, ou seja, reduzir a taxa crítica. A taxa crítica foi estimada com boa precisão. Porém, as incertezas nas estimativas dos expoentes críticos não permitem conclusões definitivas sobre a criticalidade do modelo. Os expoentes observados são coerentes com a teoria de campo médio heterogênea. Eles são independentes das taxas de migração e do grau de heterogeneidade da rede e os valores obtidos são de 5 a 10% maiores que o valor teórico. Essa possível concordância entre simulações e a teoria de campo médio é, a princípio, algo surpreendente já que a estrutura congelada da rede provoca o surgimento de correlações dinâmicas no sistema, mas tais correlações não seriam suficientemente fortes para alterar os expoentes críticos.

Abstract

MATA, Angélica Sousa da, M. Sc., Universidade Federal de Viçosa, february, 2011. **Phase transitions in a reaction-diffusion process in heterogeneous metapopulations.** Adviser: Silvío da Costa Ferreira Junior. Co-Advisers: Marcelo Lobato Martins and Sidiney Geraldo Alves.

A field of outstanding interest in Statistical Physics is the investigation of systems exhibiting phase transitions to absorbing states [1, 2]. These models have been investigated in networks with complex and heterogeneous topologies [3, 4, 5]. This dissertation is devoted to investigate the phase transition in a reaction-diffusion (RD) process in heterogeneous metapopulations. The model consists of a set of regular lattices called metapopulation. These regular lattices are connected by a random network with a power law degree distribution. The RD process includes spontaneous annihilation, self-catalytic creation and diffusion through the interchange of particles between distinct populations. A heterogeneous mean field theory was developed and compared with numerical simulations performed using the quasi-stationary (QS) method [6]. The results show that the QS density presents a short relaxation time. The QS distributions change from an exponential decay in the subcritical regime to a Gaussian distribution in the supercritical regime, in agreement with the behaviors predicted by the mean field analysis. The migration rate and the network heterogeneity contribute to sustain the active stationary state, i. e., to reduce the critical rate. The critical rate was estimated with a good precision. However, the uncertainties in critical exponents do not allow a final conclusion about the model criticality. The observed exponents are consistent with the heterogeneous mean field theory. They are independent of both the migration rate and network heterogeneity and the obtained values are between 5 and 10% greater than the theoretical ones. This supposed agreement between simulation and mean field theory is, at a first glance, surprising since the quenched structure of the network promotes the emergence of dynamical correlations in the system, but these correlations seem to not be strong enough to change the critical exponents.

Capítulo 1

Introdução

Redes complexas surgem no contexto de uma grande variedade de sistemas naturais e artificiais. O cérebro consiste de inúmeros neurônios interconectados; ecossistemas consistem de espécies cuja interdependência poder ser mapeada por cadeias alimentares; células possuem redes complexas de interação entre genes, proteínas e outras moléculas; sistemas sociais podem ser descritos por grafos que descrevem a interação entre os indivíduos, entre outros exemplos [2, 3]. Tendo em vista a grande frequência de redes complexas na natureza, é de grande interesse estudar suas características e propriedades fundamentais. Com o intuito de entender a dinâmica nessas redes, muitos modelos de Física Estatística foram estudados em topologias complexas. Problemas clássicos como modelos de spin [7], caminhadas aleatórias [8], modelo do votante [9] e o processo de contato [3] são exemplos recentes.

Ultimamente, parte da comunidade de Física Estatística tem focado seus estudos em processos dinâmicos em redes complexas. Muitas propriedades são necessárias para caracterizar a topologia dessas redes, dentre as quais podemos destacar duas que são fundamentais no estudo de processos dinâmicos: a distribuição de conectividade $P(k)$ que está relacionada com a heterogeneidade e propriedades sem escala da rede¹ e o menor caminho médio entre dois vértices que está relacionado com a propriedade de mundo pequeno². Uma questão de grande interesse é investigar como as propriedades topológicas destas redes influenciam processos de reação-difusão. Nestes processos, o que ocorre basicamente é: uma partícula do tipo B se torna uma partícula do tipo A , espontaneamente, e a reação de uma partícula B com uma partícula A gera duas partículas B . Esse processo pode ser interpretado como uma reação química com transição de fases para um estado absorvente. Esse mesmo processo de reação, no entanto, também tem sido usado em dinâmica populacional e é o análogo clássico do modelo suscetível-infectado-suscetível (SIS) para descrever o espalhamento de epidemias [10]. Note que as partículas B são

¹Redes sem escala são caracterizadas por uma distribuição de conectividade $P(k) \sim k^{-\gamma}$, com $2 < \gamma < 3$.

²A propriedade de mundo pequeno refere-se a uma distância média entre dois nós que cresce logaritmicamente com o número de nós na rede.

as únicas responsáveis pela dinâmica do sistema, que são chamadas de partículas ativas, porque A não gera B espontaneamente. Assim, quando só existem partículas A no sistema, dizemos que a dinâmica do processo fica congelada, ou seja, o sistema está no estado absorvente. O limite entre a sobrevivência e a extinção das partículas B é marcado por um ponto crítico que caracteriza a transição de fases para o estado absorvente. Esse estado é uma característica importante em sistemas de tamanho finito porque o único estado realmente estacionário é o estado absorvente. Efeitos de tamanho finito são fundamentais no estudo de processos dinâmicos em redes sem escala. A finitude do sistema e o estado absorvente devem ser estudados de maneira adequada. Um procedimento muito utilizado é o método quase-estacionário em que a configuração absorvente é adequadamente retirada da dinâmica [1, 2].

Os estudos de processos epidêmicos descritos pela dinâmica do modelo SIS (susceptível-infetado-susceptível) em redes sem escala mostram que, nestas redes, o ponto crítico é nulo no limite termodinâmico, o que significa que a epidemia persiste indefinidamente, independente do valor da taxa de infecção, evidenciando a fragilidade de tais redes. Quando se faz uma aproximação de campo médio, ou seja, despreza-se as correlações entre os vértices da rede, chega-se a uma expressão para o ponto crítico que é inversamente proporcional ao segundo momento $\langle k^2 \rangle$ da distribuição de conectividade $P(k)$. Com isso, conclui-se que as flutuações topológicas afetam diretamente a dinâmica de modelos de reação-difusão em redes sem escala, já que estas possuem um segundo momento que diverge no limite termodinâmico [4, 5, 11, 12].

Podemos dizer então, que a estrutura e a heterogeneidade das redes são elementos chaves no estudo de processos dinâmicos. Trabalhos recentes [10, 13] preocupam-se em analisar processos de reação-difusão em redes de metapopulações. Esses modelos são caracterizados, basicamente, pela heterogeneidade da conectividade dos nós e uma característica local de contato entre as partículas, dentro de cada população. Os modelos de metapopulações são formados por um conjunto de populações interconectadas. Dentro de cada população, existem partículas nos estados A , B , C , etc. que podem representar, por exemplo, indivíduos suscetíveis, infectados, imunizados, etc, dentro de um contexto epidemiológico. As partículas que pertencem à mesma metapopulação interagem umas com as outras e podem mudar seu estado de acordo com a dinâmica do processo. A interação entre as populações ocorre através do movimento das partículas de uma comunidade para outra, representando a migração. Essa troca ocorre com a mesma probabilidade para todas as partículas sem memória da sua origem [14, 15, 16]. Entretanto, estes modelos não assumem nenhuma estrutura dentro das populações.

Para o nosso trabalho, propusemos um modelo de metapopulações estruturadas, em que cada nó de uma rede representa uma população formada por uma cadeia unidimensional. Ferreira e Martins [17] estudaram um modelo análogo ao processo de reação-difusão em metapopulações, apresentado nesta dissertação. No trabalho destes autores, as populações são conectadas através de uma rede de Barabási-Albert [17]. Um aspecto interessante desses modelos é que, diferentemente do modelo SIS em uma rede complexa pura, o ponto crítico encontrado é diferente de zero, o que mostra que a interação local entre as partículas em cada população desempenha um

papel importante [17, 18].

O nosso objetivo, nesta dissertação, é estudar processos de reação-difusão em metapopulações estruturadas com a finalidade de caracterizar a transição de fases para o estado absorvente nestes sistemas. Esse trabalho foi organizado da seguinte maneira: no capítulo 2 apresentamos uma revisão de literatura sobre redes complexas, conceitos, definições e suas principais propriedades. Mostramos também alguns modelos de redes que são muito utilizados no estudo de processos dinâmicos, enfatizando o modelo de configurações não correlacionado (UCM - *Uncorrelated Configuration Model*)[19]. O algoritmo deste modelo é detalhado na seção 2.3.4, uma vez que ele faz parte da metodologia do nosso trabalho pois esta rede foi usada para conectar as metapopulações. No capítulo 3 explicamos o modelo SIS como um exemplo de um processo de reação-difusão simples com transição de fases para um estado absorvente. Nesta parte, definiremos o conceito de classe de universalidade, reproduzindo alguns cálculos que permitem definir os expoentes críticos que caracterizam a transição de fases para esse modelo em uma cadeia unidimensional. Também apresentaremos o método que utilizamos para simular o estado quase-estacionário. Esta metodologia será apresentada juntamente com a reprodução de alguns resultados da literatura para validá-la. No capítulo 4 faremos a união dos dois assuntos abordados nos capítulos anteriores apresentando um processo de reação-difusão em redes complexas. Neste capítulo, alguns resultados importantes da literatura serão abordados. No capítulo 5, detalharemos o modelo proposto para estudar a transição de fases em metapopulações estruturadas, explicaremos os parâmetros utilizados nas simulações e mostraremos os resultados computacionais e uma teoria de campo médio. Por fim, no capítulo 6 discutiremos as conclusões e perspectivas deste trabalho. No final da dissertação, um conjunto de apêndices é usado para detalhar algumas passagens ou discussões com a finalidade de enriquecer o texto, mas que são opcionais para a compreensão do texto principal.

Capítulo 2

Redes Complexas

Neste capítulo, vamos introduzir algumas definições básicas sobre redes e teoria de grafos. Definiremos algumas medidas importantes na caracterização de redes como coeficiente de aglomeração, menor caminho médio e correlação entre os vértices. Também falaremos de algumas propriedades de redes complexas sem escala. E, por último, faremos uma pequena revisão sobre alguns modelos de redes que são úteis no estudo de processos dinâmicos, como processos de reação-difusão.

2.1 Conceitos básicos e definições

O matemático Leonard Euler (1707-1783) foi o primeiro cientista a introduzir a noção de grafos [20]. O seguinte enigma acabou resultando na criação de um novo ramo da matemática. Euler queria responder a uma questão popular do seu tempo: se estamos no centro da antiga cidade de Königsberg (Rússia) como podemos atravessar as sete pontes (veja figura 2.1) passando apenas uma vez por cada uma delas?

A solução desse problema requer uma abstração matemática. Um passo crucial foi colocar todas as informações relevantes em um mapa simplificado, como mostrado na figura 2.2. Neste mapa, Euler representou as diferentes partes da cidade por vértices, não importando a distância entre eles. As pontes, por sua vez, são representadas por linhas, que são as ligações que unem cada parte da cidade. Desta maneira, o mapa da cidade se torna o que é chamado de grafo. Através desse formalismo o problema original se torna mais abstrato: é possível encontrar um caminho que passa através de todas as ligações apenas uma vez?

Se a solução existe, ela deve estar relacionada com as propriedades intrínsecas do grafo. Uma propriedade imediata é a quantidade de ligações (pontes) que cada vértice possui. Por e-

xemplo, se um vértice possui exatamente duas ligações, pode-se entrar por uma ponte e sair por outra. Se o número de ligações do vértice for maior que dois, porém par, o argumento continua o mesmo, ou seja, sempre poderemos entrar e sair de um vértice usando ligações diferentes. Por outro lado, vértices com número de ligações ímpar podem apenas começar ou terminar o caminho, caso contrário passaríamos mais de uma vez por uma mesma ligação. Aqui está a solução do problema. Se voltarmos a figura 2.2 veremos que todos os vértices tem um número ímpar de ligações. Logo, Euler provou que não existe um caminho que passa apenas uma vez por cada uma das pontes [21].

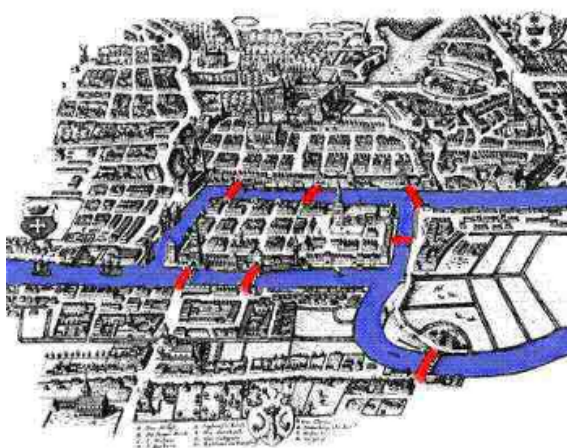


Figura 2.1: As pontes da antiga cidade de Königsberg na Rússia.¹

Tendo como ponto de partida problemas como esse, a teoria de grafos torna-se cada vez mais elaborada. Nosso objetivo é explicar alguns conceitos básicos de teoria de grafos que serão úteis para caracterizar redes complexas.

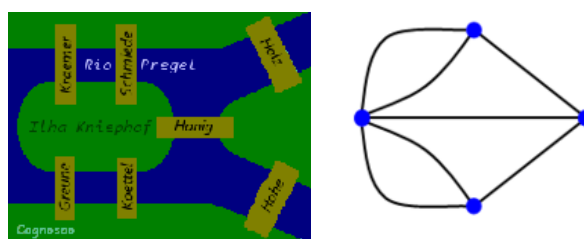


Figura 2.2: Na esquerda, um mapa esquemático do centro da cidade de Königsberg no século XVIII. Na direita a sua representação em forma de grafo, na qual os vértices representam as várias partes da cidade e as ligações entre eles simbolizam as sete pontes.²

Em termos gerais, uma rede é qualquer sistema que admite uma representação abstrata matemática por um grafo, cujos nós (vértices) identificam os elementos do sistema e o conjunto de conexões (ligações) representa a relação ou interação entre esses elementos. As redes fornecem um quadro teórico que permite uma representação conveniente de relações entre os

¹Figura retirada de <<http://www.mat.uc.pt/alma/escolas/pontes/>>.

²Figuras retiradas de <<http://users.prof2000.pt/agnelo/grafos/pontesh.htm>>.

elementos em sistemas complexos nos quais a caracterização do sistema implica em um mapeamento das interações de um grande número de indivíduos [11].

O estudo de redes tem uma longa tradição em teoria de grafos, matemática discreta, sociologia e tem infiltrado cada vez mais nos campos da Física e Biologia. A linguagem rigorosa para a descrição de redes é encontrada na teoria de grafos. A seguir, vamos mostrar algumas definições usadas em teoria de grafos que serão úteis no estudo de redes.

Um grafo não direcionado é definido como um par de conjuntos $G(V, E)$, em que V é um conjunto de elementos contáveis, chamados vértices ou nós e E é um conjunto de pares não ordenados de diferentes vértices, chamados ligações. O número total de vértices em um grafo é denotado por N e define a ordem do grafo. Vale observar que em muitos contextos biológicos e físicos, N define o tamanho da rede uma vez que identifica o número de elementos distintos que compõem o sistema. No entanto, em teoria de grafos, o tamanho do grafo é identificado como o número de ligações E . A menos que seja especificado a seguir, iremos nos referir a N como o tamanho do sistema [11, 21].

Se dois vértices diferentes são conectados, dizemos que eles são adjacentes ou vizinhos. Para um grafo de tamanho N o número máximo de ligações é $N(N - 1)/2$. Quando todas as possíveis ligações estão presentes, o grafo é denominado completo. Um grafo indicado como $G(V, E)$ pode ser desenhado como um conjunto de pontos representando os vértices unidos por linhas (ligações).

Uma questão central na estrutura de grafos é a acessibilidade dos vértices, isto é, a possibilidade de ir de um vértice a outro por meio das ligações da rede. Para analisar as propriedades de conectividade vamos definir um caminho P_{i_0, i_n} em um grafo $G(V, E)$ como um conjunto ordenado de $n + 1$ vértices $V_P = \{i_0, i_1, \dots, i_n\}$ e n ligações $E_P = \{(i_0, i_1), (i_1, i_2), \dots, (i_{n-1}, i_n)\}$. O caminho P_{i_0, i_n} conecta os vértice i_0 e i_n (veja figura 2.3). O tamanho do caminho P_{i_0, i_n} é n . Um ciclo, também chamado de loop, é um caminho fechado ($i_0 = i_n$) em que todos os vértices e ligações são disitintos. Um grafo é dito *conectado* se existe um caminho que conecta quaisquer dois vértices no grafo [11].

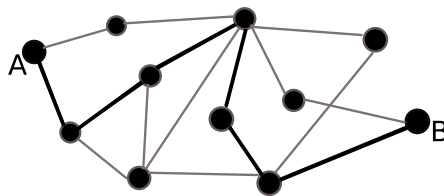


Figura 2.3: Um grafo que mostra, em destaque, um dos caminhos que conecta os nós A e B.

O conceito de caminho nos leva à definição de distância entre dois vértices. A distância natural medida entre dois vértices i e j é definida como o número de ligações que existe no menor caminho que os conecta (l_{ij}). Quando dois vértices são desconectados, define-se que $l_{ij} = \infty$.

Um definição característica de distância em uma rede é o menor caminho médio definido

como o valor médio de l_{ij} sobre todos os possíveis pares de vértices na rede.

$$\langle l \rangle = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{ij} l_{ij} \quad (2.1)$$

Na maioria dos grafos aleatórios, o menor caminho médio cresce logaritmicamente com o tamanho do sistema N ($\langle l \rangle \sim \log N$). O fato de que qualquer par de nós estar conectado por um caminho pequeno constitui o então chamado efeito de mundo pequeno [20, 22], que é fundamental no estudo de processos dinâmicos, como discutiremos adiante.

2.2 Propriedades topológicas

Quando se trata de descrever grafos, com muitos vértices e ligações (até 10^8) desde redes de interação de proteínas a *www*, uma descrição conveniente pode ser obtida por meio de distribuições estatísticas como a distribuição de conectividade $P(k)$. A distribuição $P(k)$ fornece a probabilidade de que um nó, selecionado aleatoriamente, tenha k ligações, ou seja, grau k . Essa distribuição é obtida construindo-se um histograma de frequências normalizado dos graus dos nós da rede. O grau médio de um grafo não direcionado é definido como o valor médio de k sobre todos os vértices da rede,

$$\langle k \rangle = \frac{1}{N} \sum_i k_i = \sum_k kP(k) \equiv \frac{2E}{N}, \quad (2.2)$$

desde que cada ligação contribua para o grau de um vértice. Analogamente, é possível definir o n -ésimo momento da distribuição,

$$\langle k^n \rangle = \sum_k k^n P(k). \quad (2.3)$$

As propriedades da distribuição $P(k)$ são cruciais para classificar os diferentes tipos de rede, algo de extrema importância no estudo de processos dinâmicos [11].

Podemos separar as redes em duas classes de acordo com a sua distribuição $P(k)$. A primeira são as redes homogêneas. Neste caso, a distribuição dos graus $P(k)$ tem uma forma funcional que decai rapidamente, o que é chamado na literatura de “cauda leve”, tais como as distribuições Gaussiana ou de Poisson. A segunda classe consiste de redes com conectividade estatisticamente heterogênea o que corresponde a distribuição de “cauda pesada”. Muitas redes possuem um alto nível de heterogeneidade na conectividade, isso vem do fato de que os *hubs* existem em um número suficientemente grande para que não possam ser desprezados. Esta ca-

racterística é observada em redes de transporte aéreo, entre muitos outros exemplos.

As caudas pesadas possuem, em geral, um decaimento assintótico em lei de potência $P(k) \sim k^{-\gamma}$ [23]. Neste caso, vértices com grau muito maior que o grau médio $\langle k \rangle$ são encontrados com uma probabilidade não-desprezível [11]. O contraste entre estes tipos de distribuição é mostrado na figura 2.4, na qual comparamos uma distribuição de Poisson com uma distribuição em lei de potência para o mesmo grau médio.

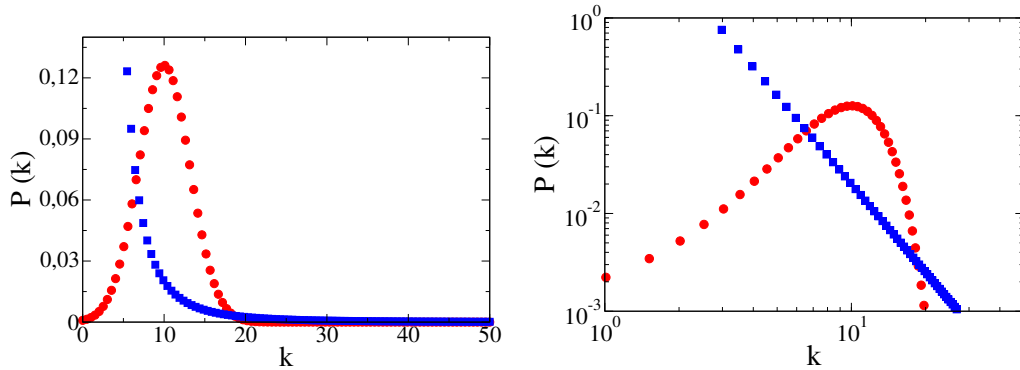


Figura 2.4: Comparação da distribuição de Poisson (discos) e da lei de potência (quadrados) em escala linear (esquerda) e na escala logarítmica (direita). As duas distribuições têm o mesmo grau médio $\langle k \rangle = 10$.

O significado da heterogeneidade contido na distribuição em lei de potência pode ser entendido olhando para os dois primeiros momentos da distribuição. Podemos calcular o valor médio dos graus fazendo:

$$\langle k \rangle = \int_m^{k_c} k P(k) dk, \quad (2.4)$$

em que $m \geq 1$ é o menor grau possível da rede e k_c é o maior grau que um nó pode ter. Por simplicidade k foi considerada uma variável contínua em que a soma discreta foi substituída por uma integral. Calculando o valor desta integral,

$$\langle k \rangle = \int_m^{k_c} k A k^{-\gamma} dk = \frac{A k^{2-\gamma}}{2-\gamma} \Big|_m^{k_c} \approx \frac{(\gamma-1)}{(\gamma-2)} m \quad (2.5)$$

quando $k_c \rightarrow \infty$ e $\gamma > 2$, em que $A \approx (\gamma-1)m^{\gamma-1}$ é a constante de normalização. Vemos que, neste caso, o grau médio é bem definido e finito. A variância normalizada da distribuição $\sigma^2 / \langle k \rangle^2$ expressa as flutuações aleatórias presentes no sistema. A variância $\sigma^2 = \langle k^2 \rangle - \langle k \rangle^2$ é dominada pelo segundo momento da distribuição

$$\langle k^2 \rangle = \int_m^{k_c} k^2 A k^{-\gamma} dk \sim k_c^{3-\gamma}. \quad (2.6)$$

No limite assintótico de redes infinitas, temos que $\langle k^2 \rangle \rightarrow \infty$, ou seja, as flutuações divergem quando $\gamma < 3$. A ausência de qualquer escala intrínseca para essas flutuações, no intervalo definido entre $2 < \gamma \leq 3$, implica que o valor médio não é uma escala característica para o

sistema. Em outras palavras, observa-se uma rede sem escala.

O nível de heterogeneidade da rede pode ser definido pelo parâmetro κ :

$$\kappa = \frac{\langle k^2 \rangle}{\langle k \rangle}. \quad (2.7)$$

As redes sem escala são caracterizadas por $\kappa \rightarrow \infty$, enquanto as redes homogêneas possuem $\kappa \sim \langle k \rangle$ nesse limite. Por esta razão, podemos generalizar e nos referir a rede sem escala como todas as redes que têm o parâmetro $\kappa \gg \langle k \rangle$ pois as redes reais são finitas [21].

Sabemos que é possível definir a distância entre quaisquer pares de vértices como o número de ligações presentes no menor caminho que os conecta. O efeito de mundo pequeno significa que podemos ir de um vértice a outro passando por uma quantidade muito pequena de ligações. Essa propriedade foi popularizada no contexto sociológico por Milgram em 1967 [11] que mostrou que em média seis ligações, ou seja, seis pessoas, são suficientes para conectar duas pessoas quaisquer escolhidas aleatoriamente nos Estados Unidos. Desde então, o efeito de mundo pequeno tem sido identificado como uma característica de redes complexas, em particular, redes de infraestrutura nas quais a distância média pequena é muito importante para a rapidez da comunicação [20, 22]. Como vimos, a propriedade de mundo pequeno se refere à redes em que $\langle l \rangle$ [equação (2.1)] escala logarithmicamente, ou mais lentamente, com o tamanho do sistema.

Quando estudamos redes, uma das ideias principais é estabelecer a importância dos seus elementos básicos. A importância de um nó é comumente definida pela sua centralidade. Somos levados a pensar que os nós com maior grau, ou seja, maior número de conexões, são os mais importantes, porém, alguns casos especiais, mostram que isso não é, necessariamente, verdade.

Podemos ter casos em que se retirarmos um vértice pouco conectado o grafo se torna desconectado, como mostra a figura 2.5. Por essa razão, diferentes medidas da centralidade de um vértice foram propostas. Esses conceitos serão descritos aqui porque podem desempenhar um papel importante em redes sem escala, como, por exemplo, no uso de diferentes estratégias de imunização no espalhamento de doenças em redes complexas.

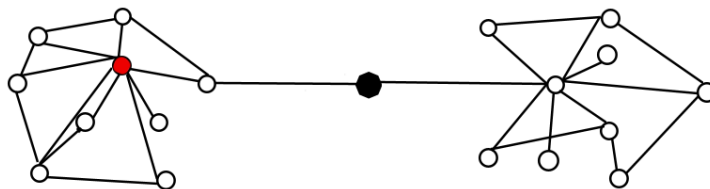


Figura 2.5: Um grafo particular que pode ser desconectado retirando apenas o vértice em destaque que tem grau 2. Por outro lado, o nó destacado em vermelho é muito conectado mas sua remoção não leva a ruptura do grafo.

A maneira mais simples de identificar o vértice mais central é olhar para o vértice cuja

distância média de todos os outros é mínima. Isto corresponde a dizer que a centralidade $c(i)$

$$c(i) = \frac{1}{\sum_{j=1,n} d_{ij}} \quad (2.8)$$

é máxima.

Juntamente com as medidas de centralidade, os vértices também são caracterizados pela estrutura da sua vizinhança local. Uma propriedade comum de redes sociais é a formação de grupos, representando círculos de amigos ou conhecidos em que cada membro conhece um ao outro. Essa propriedade é chamada de agrupamento (*clustering*) e implica que, se o vértice i está conectado ao nó j que também está conectado à k , existe uma alta probabilidade de i e k também estarem conectados [22]. O *clustering* de um grafo não direcionado pode ser medido através da média do coeficiente de *clustering* de todos os nós. O *clustering* $C(i)$ de um nó i é definido pela razão do número de ligações entre os vizinhos de i e o número máximo de ligações possíveis entre esses vizinhos. Se o grau do nó i é k_i e se os seus vizinhos têm e_i ligações entre eles, então:

$$C(i) = \frac{e_i}{k_i(k_i - 1)/2} \quad (2.9)$$

O coeficiente de agrupamento médio do grafo é dado por:

$$\langle C \rangle = \frac{1}{N} \sum_i C(i). \quad (2.10)$$

Outra relação que podemos obter entre dois vértices conectados é quão similares eles são. Uma vez que a propriedade mais estudada de um vértice é o seu grau, a alternativa mais simples é verificar a presença de correlações entre os vértices com grau semelhante. Em algumas situações, existe uma tendência dos vértices se conectarem com outros nós que possuem propriedades semelhantes as suas, por exemplo, vértices com alto grau de conectividade se conectarem, preferencialmente, com nós que também tenham um grande número de ligações. Neste caso, a rede é chamada de associativa. Se ocorre o contrário, ou seja, os nós com alto grau se conectam a outros com baixa conectividade, temos uma rede disassociativa [24].

Uma maneira de quantificar tal medida é através da probabilidade condicional $P(k_1|k_2)$ de ter um vértice com grau k_1 de um lado da ligação, dado que do outro lado, tem-se um nó com grau k_2 . No apêndice A mostramos mais detalhes sobre essa probabilidade condicional.

Como $P(k_1|k_2)$ pode ser algo difícil de medir para redes grandes, uma abordagem menos rigorosa, porém mais intuitiva e simples não só é possível como, na verdade, muito mais usada. Dado um vértice i com grau k_i , calcula-se o grau médio dos seus vizinhos mais próximos,

$$k_{nn,i} = \frac{1}{k_i} \sum_{j \in V(i)} k_j, \quad (2.11)$$

em que a soma é sobre todos os vizinhos do vértice i . Desta quantidade, podemos obter uma medida para investigar o comportamento da correlação entre os graus, dada por [25]:

$$k_{nn}(k) = \frac{1}{N_k} \sum_{i/k_i=k} k_{nn,i}, \quad (2.12)$$

em que N_k é o número de nós de grau k e o somatório é sobre todos os vértices i com grau $k_i = k$. Esta última quantidade está relacionada com a correlação entre os graus dos vértices conectados pois essa média pode ser expressa, alternativamente como:

$$k_{nn}(k) = \sum_{k'} k' P(k'|k). \quad (2.13)$$

Se os graus dos vizinhos não são correlacionados (detalhes no apêndice A),

$$P(k|k') = \frac{k' P(k')}{\langle k \rangle}, \quad (2.14)$$

ou seja, $P(k'|k)$ é apenas uma função de k' e $k_{nn}(k)$ é uma constante. Se k_{nn} cresce com k então a rede é associativa. Por outro lado, se k_{nn} decresce com k dizemos que o grafo é disassociativo [11, 19, 25] (veja figura 2.6).

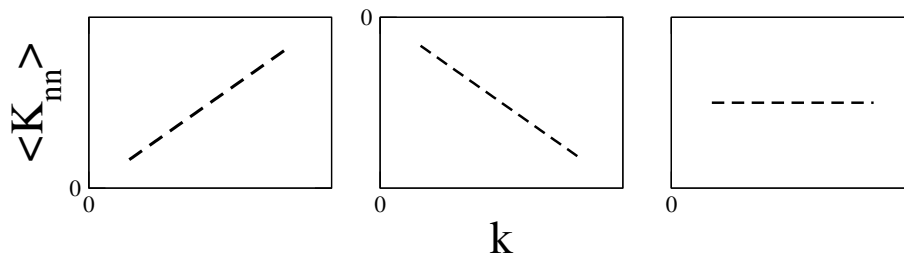


Figura 2.6: Os três possíveis comportamentos do grau médio dos vizinhos $\langle k_{nn} \rangle$ versus o grau k do vértice de origem.

2.3 Modelos Fundamentais

A física teórica é baseada na ideia de que os fenômenos podem ser descritos quantitativamente por representações simplificadas chamadas modelos. Um ponto positivo de grafos é que eles já são uma simplificação útil para representação de vários tipos de redes.

Alguns modelos de redes são introduzidos nesta seção com o objetivo de mostrar a evolução histórica de redes complexas em geral. Por último, daremos maior ênfase no modelo de configurações pois este será usado durante todo o nosso trabalho.

2.3.1 Grafo Aleatório

O modelo de grafo aleatório proposto por Erdős e Rényi em 1959 [11] é o modelo de rede mais simples que inclui a estocasticidade como elemento essencial. No modelo original de um grafo aleatório $G(N, E)$ tem-se um conjunto de N diferentes vértices conectados aleatoriamente por E ligações. Uma variação desse modelo é um grafo construído com N diferentes vértices em que cada uma das $N(N - 1)/2$ possíveis ligações está presente com uma probabilidade p e ausente com uma probabilidade $1 - p$. Consequentemente, o número total de ligações é uma variável aleatória, descrita por uma distribuição binomial, com o valor esperado dado por [21]:

$$\langle E \rangle = p \left[\frac{N(N - 1)}{2} \right]. \quad (2.15)$$

Como cada ligação contribui para o grau de dois vértices, temos que o grau médio $\langle k \rangle$ do grafo é [22]:

$$\langle k \rangle = \frac{2\langle E \rangle}{N} = (N - 1)p \simeq Np. \quad (2.16)$$

Para obter a distribuição de grau $P(k)$ notamos que, a probabilidade de criar um vértice com grau k é igual a probabilidade de conectá-lo a k vértices e não conectá-lo a $N - 1 - k$ vértices. Contabilizando todas as possibilidades de permutação, essa regra gera uma distribuição binomial:

$$P(k) = \binom{N - 1}{k} p^k (1 - p)^{N - 1 - k} \quad (2.17)$$

Quando N é muito grande e p muito pequeno, mas com o produto pN finito, a distribuição binomial pode ser aproximada por uma distribuição de Poisson [26]:

$$P(k) = e^{-\langle k \rangle} \frac{\langle k \rangle^k}{k!} \quad (2.18)$$

Ou seja, $P(k)$ decai muito rapidamente para valores grandes de k , o que significa flutuações finitas em torno do valor médio. Este modelo é o exemplo típico de um grafo aleatório estatisticamente homogêneo, em que o grau de diferentes vértices pode ser considerado aproximadamente igual ao grau médio $k \simeq \langle k \rangle$ [11].

Se voltarmos as equações (2.9) e (2.10) podemos calcular o coeficiente de aglomeração de um grafo aleatório. Relembrando, o *clustering* $C(i)$ de um nó i é definido pela razão do número de ligações entres os vizinhos de i e o número máximo de ligações possíveis entre esses vizinhos. No grafo de Erdős-Rényi, para qualquer vértice, a probabilidade de que quaisquer dois dos seus vizinhos estejam conectados é dada por p . Logo, o número de ligações médio entre os vizinhos de i , e_i , é dado por: $e_i = pk_i(k_i - 1)/2$. Assim, o coeficiente de aglomeração médio

da rede será:

$$\langle C \rangle = \frac{1}{N} \sum_i \frac{e_i}{k_i(k_i - 1)/2} = \frac{\langle k \rangle}{N}. \quad (2.19)$$

Como $\langle k \rangle$ é finito, é fácil concluir que o coeficiente de clustering de um grafo aleatório se aproxima de zero no limite de redes infinitamente grandes.

Para uma rede conectada de grau médio $\langle k \rangle$, o número médio de primeiros vizinhos ($d = 1$) é $\langle k \rangle$. Se a posição das ligações é completamente aleatória e desprezando ciclos, o número de vizinhos a uma distância d de qualquer nó pode ser aproximada por $\langle k \rangle^d$. Vamos definir r tal que $\langle k \rangle^r \simeq N$, ou seja, o número de nós a uma distância r do vértice i deve ser aproximadamente igual ao tamanho N do grafo. Então, podemos aproximar o menor caminho médio $\langle l \rangle$ [equação (2.1)] por r e obter [11]:

$$\langle l \rangle \simeq \frac{\log N}{\log \langle k \rangle}. \quad (2.20)$$

Este comportamento é uma assinatura de efeito de mundo pequeno observado em muitas redes complexas e nos informa que, mesmo para redes grandes, a maioria dos vértices é conectada por uma distância pequena, pois o menor caminho médio cresce logaritmicamente com o tamanho do sistema.

2.3.2 O modelo de Watts-Strogatz

O modelo de mundo pequeno (*small world*), elaborado por Watts e Strogatz em 1998 [27], foi inspirado no fato de que muitas redes sociais são altamente aglomeradas e, ao mesmo tempo, exibem uma distância média pequena entre os vértices. O modelo de Watts e Strogatz (WS) é um modelo que interpola entre um reticulado ordenado e uma rede puramente aleatória [21, 22].

O modelo WS original começa com um anel de N vértices em que cada vértice é simetricamente conectado a seus $2m$ vizinhos mais próximos como mostrado na figura 2.7a. Então, para cada vértice, cada ligação é redirecionada com probabilidade p e preservada com probabilidade $1 - p$. Essas reLigações são feitas aleatoriamente evitando auto-conexões e acabam criando atalhos entre as partes distantes no anel. O parâmetro p mede o nível de aleatoriedade no grafo, mantendo o número de ligações constante resultando em um grafo com $\langle k \rangle = 2m$ [27]. No limite de $p \rightarrow 1$, o fato de que cada vértice mantém um número mínimo m de ligações induz uma memória no grafo de tal modo que esta rede não é localmente equivalente a um grafo de Erdős-Rényi.

Qualquer valor diferente de zero para p introduz uma desordem na rede na forma de uma conectividade não uniforme. No limite de $p \rightarrow 1$ a expressão para a distribuição de conectividade é [11]:

$$P(k) = \frac{m^{k-m}}{(k-m)!} \exp(-m), \quad (2.21)$$

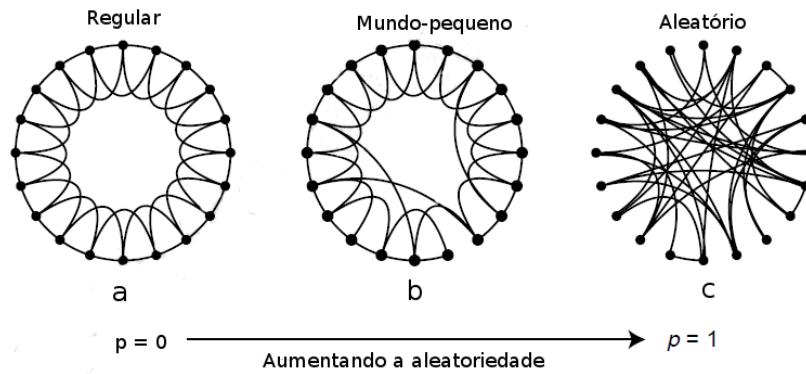


Figura 2.7: (a) Construção do modelo de Watts-Strogatz. Começamos com $N = 20$ vértices cada um deles conectado aos 4 vizinhos mais próximos ($k = 4$). (b) Quando se aumenta a aleatoriedade aumenta-se o número de ligações redirecionadas. (c) Em $p = 1$ temos um grafo completamente aleatório onde todas as ligações foram redirecionadas. Figura adaptada da referência [27].

ou seja, uma distribuição de Poisson para a variável $k' = k - m$, com valor médio $\langle k' \rangle = m$. Na figura 2.8, mostramos a distribuição de probabilidade para $m = 3$ e vários valores de p .

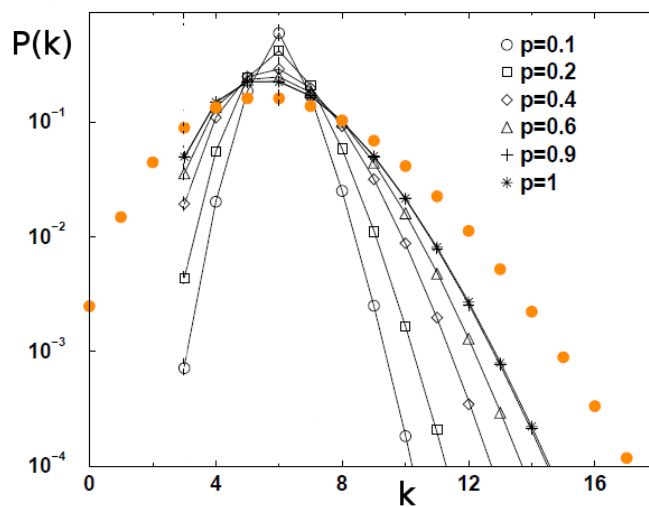


Figura 2.8: Distribuição de probabilidade da conectividade k para $m = 3$ e vários valores de p . Figura adaptada da referência [28].

Barrat e Weigt [28] deduziram a seguinte dependência do coeficiente de aglomeração com a probabilidade de redirecionamento das ligações p :

$$\langle C(p) \rangle \simeq \frac{3(m-1)}{2(2m-1)}(1-p)^3. \tag{2.22}$$

Este modelo representa um grande desenvolvimento no estudo de redes sociais e muitos outros sistemas [29] uma vez que nos permite associar o coeficiente de agrupamento com a

aleatoriedade do grafo. Além de explicar que o valor alto desse coeficiente, observado em muitas redes reais, pode estar relacionado com a memória da estrutura inicial que é remodelada por alguns elementos estocásticos.

2.3.3 O modelo de conexão preferencial

Em muitas redes reais, novos nós não são conectados aleatoriamente mas eles tendem à se conectar aos vértices que já tem um grande número de conexões. Por exemplo, uma pessoa que tem uma boa relação social, um grande número de amigos, tem mais facilidade de fazer novas amizades do que uma pessoa que tem um pequeno círculo de amigos. Esta classe de sistemas pode então, ser descrita por um modelo baseado no mecanismo de conexão preferencial. O modelo de Barabási-Albert é o mais famoso desta classe [11].

O modelo Barabási-Albert [30, 31] é adequado para reproduzir o crescimento de algumas redes reais. Para reproduzir esta característica, o grafo é construído em passos de tempo sucessivos em que novos vértices são adicionados ao sistema. Os vértices de destino (aqueles já presentes na rede) são escolhidos para receber a nova ligação de acordo com o seu grau de conectividade naquele momento.

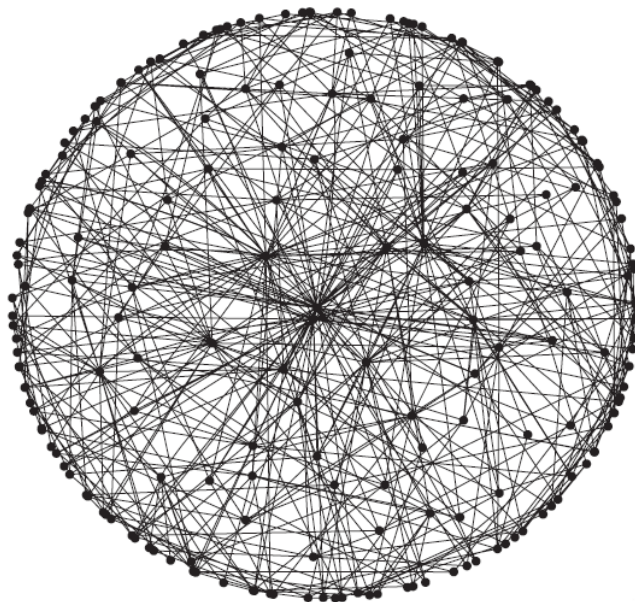


Figura 2.9: Rede de Barabási-Albert de tamanho $N = 200$ e conectividade média $\langle k \rangle = 6$. Os *hubs* estão no centro do grafo. Figura retirada de [11].

Esquemáticamente, podemos dizer que os dois ingredientes desse modelo são: *crescimento* e *ligação preferencial*. Crescimento implica que novos vértices entram na rede a cada passo de tempo. Ligação preferencial significa que esses vértices recém-chegados estabelecem sua

conexão preferencialmente com os vértices que já são bem conectados [21]. Os passos para o algoritmo que gera esse grafo são [11, 22]:

1. Começa-se com um grafo completo com m_0 vértices e $m_0(m_0 - 1)/2$ conexões.
2. Um novo vértice é adicionado a cada passo de tempo com $m \geq 1$ ligações.
3. Os vértices recém-chegados se conectam aos nós já presentes na rede, com uma probabilidade $\prod(k_i)$ proporcional ao seu grau, isto é:

$$\prod(k_i) = \frac{k_i}{\sum_{j=1,N} k_j} \quad (2.23)$$

em que $\sum_{j=1,N} k_j$ é a soma do grau de todos os nós da rede e k_i é o grau do nó i . Note que, como a cada passo de tempo apenas um novo vértice entra na rede, temos uma rede de tamanho $N = m_0 + t$. A figura 2.9 mostra um exemplo de uma rede Barabási-Albert.

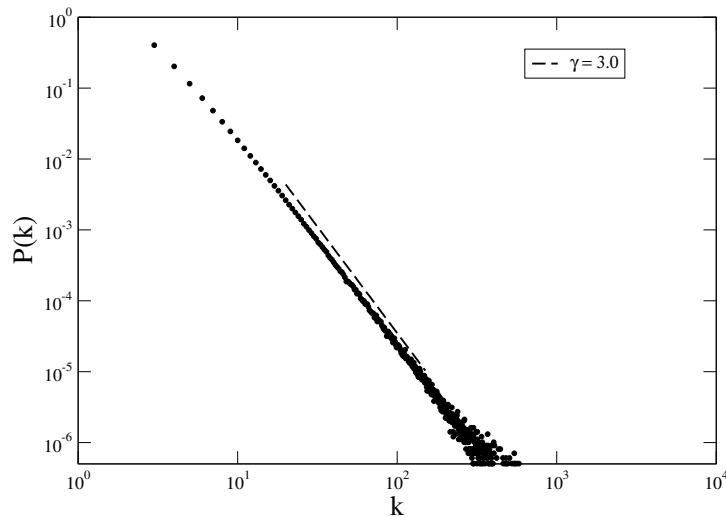


Figura 2.10: Distribuição do modelo de Barabási-Albert, com $N = 10^5$, $m_0 = 10$ e $m = 2$.

Esse algoritmo produz, naturalmente, redes sem escala, gerando uma distribuição do grau de conectividade em forma de lei de potência, isto é, $P(k) \propto k^{-3}$ quando $N \rightarrow \infty$. Neste modelo, em que novas ligações aparecem apenas por causa dos vértices recém chegados, a distribuição de conectividade pode ser escrita como [11]:

$$P(k, t) = 2m^2 \frac{t + (m_0/2m) \langle k \rangle_0}{t + m_0} k^{-3} \quad (2.24)$$

no limite de $t \rightarrow \infty$ a solução é: $P(k) = 2m^2 k^{-3}$ (veja figura 2.10).

Para esse modelo o coeficiente de aglomeração e o menor caminho médio são [11]:

$$\langle C \rangle = \frac{m}{8N} (\ln N)^2 \quad \text{e} \quad \langle l \rangle \sim \frac{\log(N)}{\log \log(N)}, \quad (2.25)$$

respectivamente. Essas equações mostram que o agrupamento local aumenta a medida que aumentamos o tamanho do sistema e que o menor caminho médio escala com o tamanho do sistema mais lentamente do que uma lei logarítmica simples, o que significa um efeito forte de mundo pequeno. Esse modelo baseado no crescimento do número de nós e na ligação preferencial nos mostra que através de uma dinâmica simples, pode-se obter redes sem escala e com propriedade de mundo pequeno.

2.3.4 Modelo de Configurações

Enquanto a maioria das redes reais demonstra a presença de correlações, redes aleatórias não correlacionadas são importantes do ponto de vista teórico, especialmente como modelos de redes para testar o comportamento de sistemas dinâmicos cuja solução analítica está disponível apenas na ausência de correlações. Nesta seção, vamos focar em um modelo de rede aleatória não correlacionada chamado *Uncorrelated Configuration Model* (UCM) [19] pois esta rede sem escala será utilizada nesta dissertação para estudar a dinâmica de um processo de reação-difusão em redes complexas como será visto nos próximos capítulos.

O algoritmo clássico para construir redes aleatórias com qualquer distribuição de grau $P(k)$ é chamado modelo de configurações (*Configuration Model* - CM). Para construir uma rede com a definição original deste algoritmo, começamos atribuindo para cada vértice i , em um conjunto de N vértices, um número aleatório k_i de ligações de acordo com a distribuição de probabilidade $P(k)$, com $m \leq k < N$ (nenhum vértice pode ter o grau maior que $N - 1$ e menor que m) e impondo a restrição de que a soma dos graus de todos os vértices $\sum_i k_i$ seja par, para garantir que todas as conexões que saem de um vértice cheguem a outro vértice distinto. A rede se forma conectando esses pares de ligações de maneira uniformemente aleatória respeitando a sequência k_i previamente estabelecida. O resultado dessa construção é uma rede aleatória cujos graus são, por definição, distribuídos de acordo com $P(k)$ e na qual, a princípio, não há correlação de grau, dada a natureza aleatória das ligações [19].

Essa prescrição funciona muito bem quando se tem uma distribuição $P(k)$ que possui um segundo momento bem definido, ou seja $\langle k^2 \rangle$ finito. No entanto, quando se trata de redes sem escala [$P(k) \sim k^{-\gamma}$, para $2 < \gamma \leq 3$] o segundo momento diverge, como foi discutido na seção 2.2, as ligações atribuídas de maneira completamente aleatória geram uma rede não correlacionada somente se incluirmos auto-conexão (um vértice conectado a ele mesmo) e múltiplas conexões (dois vértices conectados mais de uma vez) [32]. Enquanto a presença de auto-conexões e conexões múltiplas é natural na matemática de teoria de grafos, elas são artificiais em redes reais, principalmente as que estamos interessados aqui: redes sociais e de transporte. Essa situação pode ser evitada impondo uma restrição adicional proibindo múltiplas e auto-conexões. Essa restrição, no entanto, tem o efeito de introduzir correlações na rede [33].

A origem desta correlação pode ser associada à cota superior $k_c(N)$, em uma rede de tamanho N . Na verdade, é possível mostrar que para evitarmos correlações no modelo de configurações excluindo múltiplas e auto-conexões, deve-se ter uma cota que escala com $k_c(N) \sim N^{1/2}$, chamada cota estrutural. No apêndice B os efeitos de cotas superiores são discutidos.

Como é o valor máximo permitido dos graus na rede que determina a presença ou a ausência de correlações, Catanzaro *et. al.* [19] propuseram uma versão sem correlações do modelo CM, o UCM (*Uncorrelated Configuration Model*). Os passos do algoritmo são:

- (i) Em um conjunto de N vértices inicialmente desconectados, atribui-se para cada vértice i , um número k_i de ligações de acordo com a distribuição $P(k) \sim k^{-\gamma}$ e sujeito às restrições $m \leq k_i \leq N^{1/2}$ e $\sum_i k_i$ par.
- (ii) Constrói-se a rede escolhendo aleatoriamente dois vértices e os conectando, respeitando o grau já estabelecido k_i e evitando múltiplas e auto-conexões.

Esse algoritmo pode ser implementado da seguinte maneira [19, 34]: Uma vez que o grau k_i é atribuído, uma lista de $\sum_i k_i$ elementos é criada, com k_i cópias do i -ésimo elemento. Um par de elementos desta lista é escolhido aleatoriamente para criar uma ligação. Se os elementos são iguais ou correspondem à uma ligação já existente, eles não são utilizados porém permanecem na lista e um novo par de vértices é sorteado. Caso contrário, a conexão é aceita e a lista atualizada, eliminando os elementos correspondentes à nova ligação criada. Este procedimento é repetido até todos os elementos da lista estarem conectados com o número de ligações previamente estabelecido.

Na figura 2.11 mostramos a distribuição de conectividade do modelo UCM para diferentes valores de γ e na figura 2.12 mostramos a ausência de correlações para uma UCM sem escala onde calculamos o grau médio dos vizinhos de um vértice com grau k utilizando as equações (2.12) e (2.13) mostradas na seção 2.2. Apesar de se tratar de um modelo no qual não há correlação entre os graus, é importante ressaltar que esse algoritmo é interessante no sentido de checar a precisão de muitas soluções analíticas de processos dinâmicos em redes complexas.

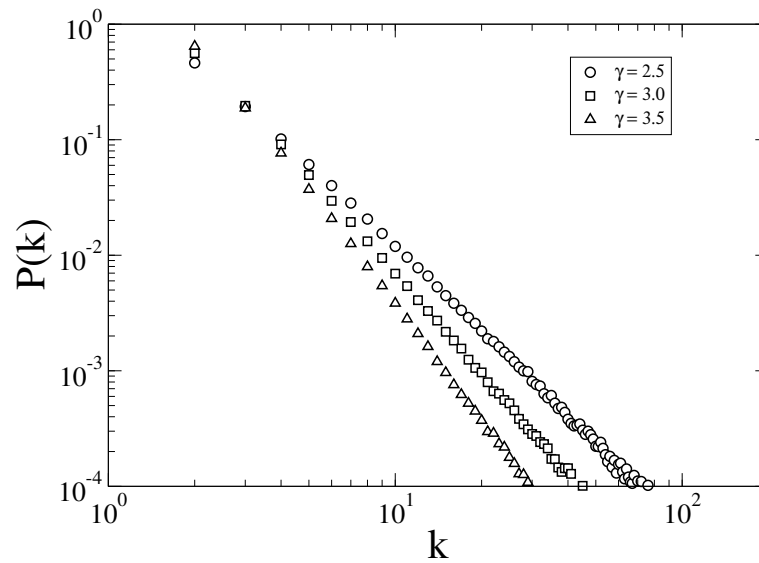


Figura 2.11: Distribuição de grau $P(k)$ de uma rede sem escala gerada pelo modelo UCM, com $N = 10^4$ e $m_0 = 2$, para diferentes valores de γ .

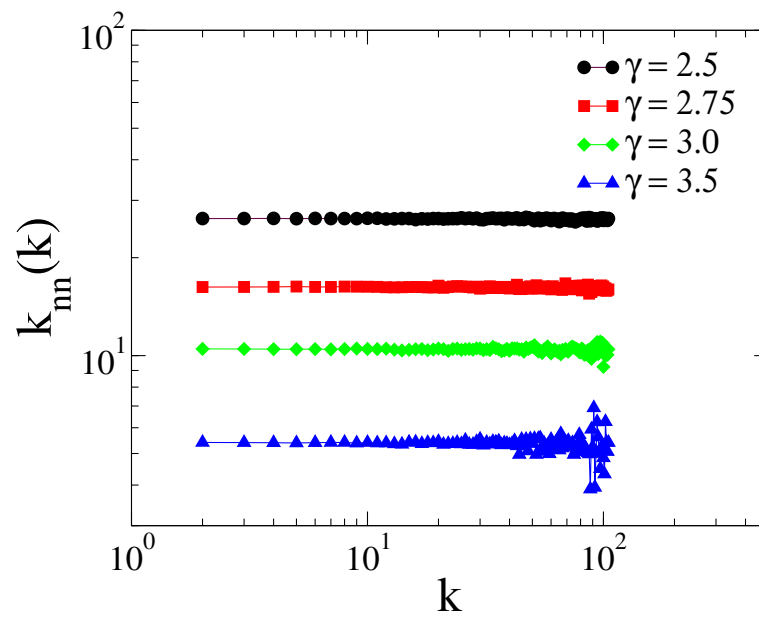


Figura 2.12: Grau médio dos vizinhos mais próximos dos vértices com grau k , $k_{nn}(k)$ para o algoritmo UCM com diferentes expoentes γ .

Capítulo 3

Transições de fases para estados absorventes

Nesse capítulo faremos uma pequena introdução aos processos dinâmicos governados por equações mestras. Vamos introduzir um modelo de reação-difusão (RD) como um exemplo simples de um processo dinâmico com transição de fases para um estado absorvente, o modelo SIS, que representa a propagação de uma epidemia. Por fim, apresentaremos o método quase-estacionário [6] que utilizamos ao longo do nosso trabalho e sua aplicação no modelo SIS para validar nossa metodologia. Embora a classe de universalidade desse modelo seja bem conhecida [2, 3, 6], essas simulações também são resultados originais dessa dissertação.

Um conceito importante no estudo de transições de fases é o de classe de universalidade que está relacionado com o fato de que o comportamento crítico de sistemas com propriedades específicas sejam caracterizados pelo mesmo conjunto de leis de escala, ou seja, expoentes críticos. Isso significa que, mesmo modelos com dinâmicas microscópicas diferentes podem pertencer à mesma classe de universalidade se compartilharem certas propriedades e simetrias [35].

3.1 Introdução aos processos dinâmicos

Para modelar processos dinâmicos em redes ou reticulados é útil fazer algumas definições. Identificamos cada nó ou sítio i como um elemento do sistema e introduzimos uma variável correspondente σ_i que caracteriza seu estado. Por exemplo, na propagação de epidemias a variável σ_i indica se o indivíduo está saudável ou infectado. Podemos enumerar todos os possíveis estados $\sigma_i = 1, 2, \dots$ para cada nó e o conjunto das variáveis de estado de todos os nós da rede

define um estado do sistema. Isso significa que podemos denotar uma configuração particular no tempo t por $\sigma(t) = \{\sigma_1(t), \sigma_2(t), \dots, \sigma_N(t)\}$, em que o índice $i = 1, 2, \dots, N$ percorre todos os nós de uma rede de tamanho N [11].

Um processo dinâmico com aleatoriedade é um processo estocástico. Quando a dinâmica não depende da história da evolução do sistema mas somente do estado atual dizemos que o processo é Markoviano. O método mais geral para estudar um processo Markoviano em tempo contínuo consiste em analisar a equação mestra que fornece a probabilidade $P(\sigma, t)$ de encontrar o sistema no estado σ no instante t . Esta probabilidade é normalizada, ou seja, $\sum_{\sigma} P(\sigma, t) = 1$. Para um processo dinâmico, com taxas de transição do estado σ para o estado σ' dadas por $W(\sigma \rightarrow \sigma')$, a equação mestra é [36]:

$$\frac{dP(\sigma, t)}{dt} = \sum_{\sigma'} [P(\sigma', t)W(\sigma' \rightarrow \sigma) - P(\sigma, t)W(\sigma \rightarrow \sigma')] \quad (3.1)$$

em que a soma é sobre todas as possíveis configurações σ' .

Uma condição que leva ao estado estacionário é:

$$P(\sigma', t)W(\sigma' \rightarrow \sigma) = P(\sigma, t)W(\sigma \rightarrow \sigma') \quad (3.2)$$

para quaisquer estados σ e σ' . Essa é a equação do balanceamento detalhado que, como o próprio nome diz, tem um significado muito claro: na situação estacionária, devemos ter o mesmo número de transição em uma direção e na direção contrária [37].

A equação do balanceamento detalhado aplica-se a sistemas termodinâmicos no equilíbrio, como por exemplo transição de fase em um material magnético [36]. Porém, nesta dissertação, vamos estudar transições de fases em sistemas com estados absorventes, que violam fortemente a condição de balanceamento detalhado pois são intrinsecamente irreversíveis. Um estado absorvente é aquele tal que a transição dele para qualquer estado é proibida, embora a transição de outros estados para ele seja permitida. Portanto, o simples fato de um modelo possuir um estado absorvente mostra que ele não pode obedecer à condição de balanço detalhado [38].

3.2 Processos de reação-difusão com estados absorventes

O modelo de reação-difusão pode ser estudado para representar processos químicos, dinâmica de população ou a propagação de uma epidemia simples. Vamos considerar um processo RD que segue a dinâmica do modelo SIS definido em uma rede em que cada sítio pode estar em um dos dois estados: ocupado representado por $\sigma = 1$ ou vazio representado por $\sigma = 0$. O pro-

cesso de criação acontece através do contato entre os vizinhos. Um sítio ocupado pode infectar todos os seus vizinhos que estiverem vazios a uma taxa λ , enquanto sítios ocupados podem ficar vazios espontaneamente a uma taxa unitária e ficam imediatamente suscetíveis à uma nova infecção [2]. As taxas para o modelo SIS em uma dimensão são mostradas na figura 3.1. Como se vê é um processo dinâmico no qual os sítios ficam ocupados e vazios continuamente. Entretanto, o sistema pode atingir um estado no qual todos os sítios ficam vazios. Nesse caso, não há mais reação das partículas e esse estado será um estado estacionário absorvente. O sistema também pode evoluir para um estado estacionário ativo em que o número de partículas nunca cessa completamente. No limite termodinâmico, o modelo apresenta um estado ativo estável além do estado absorvente. Esse fato é de grande importância dado que, para sistemas finitos, os quais conseguimos estudar em simulações numéricas, o estado absorvente é o único estado estável, uma vez que ele é sempre atingido para tempos suficientemente longos. Note que, o modelo não possui simetria no processo de criação e aniquilação, uma vez que a aniquilação é espontânea e a criação é autocatalítica, ou seja, é necessário que se tenha uma partícula na rede para que outra partícula seja criada.

$$\begin{array}{ccc}
 1\ 0\ 0 & 1\ 0\ 1 & 1 \\
 \downarrow \lambda & \downarrow 2\lambda & \downarrow 1 \\
 1\ 1\ 0 & 1\ 1\ 1 & 0
 \end{array}$$

Figura 3.1: Taxas do processo dinâmico do modelo SIS em uma dimensão.

Este modelo pertence a mesma classe de universalidade de um outro processo RD denominado processo de contato, porém é importante que fique claro a diferença entre eles. Em ambos os modelos, o processo de aniquilação é o mesmo, ou seja, os sítios ocupados ficam vazios espontaneamente. Porém no processo de contato, a criação ocorre apenas em um dos vizinhos vazios de um sítio ocupado, escolhido de maneira aleatória, enquanto no modelo SIS, a criação ocorre em todos os vizinhos vazios.

As regras de implementação computacional do modelo são: o modelo SIS consiste em um sistema de partículas interagentes residindo em sítios de uma rede e evoluindo de acordo com regras locais e markovianas. Cada sítio da rede pode estar em dois estados: vazio ($\sigma = 0$) ou ocupado ($\sigma = 1$). A cada passo de tempo, escolhe-se um sítio i da rede ao acaso. Se o sítio estiver vazio e tiver um ou mais vizinhos ocupados, ele passa a ser ocupado com uma probabilidade proporcional à taxa de criação λ . Se não houver vizinhos ocupados, esse sítio permanece vazio. Se o sítio escolhido estiver ocupado, ele se torna vazio com uma probabilidade proporcional a uma taxa unitária. No primeiro caso, temos um processo de criação autocatalítica de partículas e no segundo, temos um processo de aniquilação espontânea [37]. O tempo é incrementado por Δt depois de cada passo. Geralmente, $\Delta t = 1/N$ onde N é o número de sítios na rede e corresponde a uma tentativa por sítio em média, a cada unidade de tempo. A eficiência

deste algoritmo é melhorada através do uso de uma lista que contém somente os sítios ocupados. Assim, um sítio escolhido aleatoriamente pode, com uma probabilidade $p = 1/(1 + \lambda)$ se tornar vazio, ou com uma probabilidade $q = 1 - p = \lambda/(1 + \lambda)$ ocupar todos os seus vizinhos se estes ainda não estiverem ocupados. Neste caso, o Δt é incrementado por $1/N_{oc}$, onde N_{oc} é o número de partículas no sistema [2].

Vamos considerar o caso em que a rede é uma cadeia unidimensional em que cada sítio tem dois vizinhos. A equação que descreve a evolução temporal da probabilidade de um sítio estar ocupado é:

$$\frac{dQ(\mathbf{1})}{dt} = -Q(\mathbf{1}) + 2\lambda Q(\mathbf{101}) + \lambda Q(\mathbf{100}) + \lambda Q(\mathbf{001}) \quad (3.3)$$

em que o primeiro termo do lado direito se refere a probabilidade do sítio ficar vazio, a uma taxa unitária. Os demais termos, se referem a probabilidade dele se tornar ocupado por um dos seus vizinhos da direita ou da esquerda. Considerando o sistema homogêneo, isto é, $Q(\mathbf{001}) = Q(\mathbf{100})$, temos que:

$$\frac{dQ(\mathbf{1})}{dt} = -Q(\mathbf{1}) + 2\lambda[Q(\mathbf{101}) + Q(\mathbf{100})] = -Q(\mathbf{1}) + 2\lambda Q(\mathbf{10}). \quad (3.4)$$

A equação (3.4) não é auto-consistente devido ao termo $Q(\mathbf{10})$. Para encontrar uma solução aproximada, podemos aplicar uma aproximação de campo médio que, na sua forma mais simples, consiste em desprezar as correlações entre sítios [2]. Para um par de sítios σ_i e σ_j isso significa $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle$. Portanto, a equação (3.4) torna-se

$$\frac{dQ(1)}{dt} = -Q(1) + 2\lambda Q(1)Q(0). \quad (3.5)$$

Definindo $\rho = Q(1)$ e $1 - \rho = Q(0)$, em que ρ representa a densidade de partículas, podemos reescrever a equação acima como:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho + 2\lambda(1 - \rho)\rho. \quad (3.6)$$

As soluções estacionárias para esta equação que caracterizam os estados estacionários para esse modelo são: $\rho = 0$, a solução trivial, que se refere ao estado absorvente, e

$$\rho = \frac{\lambda - 1/2}{\lambda}, \quad (3.7)$$

que está relacionada com o estado estacionário ativo (densidade de partículas não nula). Essa solução é estável para $\lambda > 1/2$. O sistema exibe uma transição de fases entre um estado estacionário absorvente e um estado ativo. Essa transição é descrita pelo parâmetro de ordem, a densidade ρ , cujo comportamento em torno do ponto crítico é:

$$\rho \sim (\lambda - \lambda_c), \quad (3.8)$$

em que $\lambda_c = 1/2$ é a taxa crítica, acima da qual o número de partículas no sistema é diferente de zero.

A equação (3.6) pode ser resolvida exatamente com a solução

$$\rho = \frac{\lambda - \lambda_c}{\lambda - ce^{-(\lambda - \lambda_c)t}}, \quad (3.9)$$

para o caso de $\lambda \neq 1/2$, em que c é uma consante que deve ser determinada pelas condições iniciais. Quando $t \rightarrow \infty$, a solução estacionária $\rho = 0$, correspondente ao estado absorvente, é obtida se $\lambda < \lambda_c$. A solução correspondente ao estado ativo $\rho = (\lambda - \lambda_c)/\lambda$ é atingida se $\lambda > \lambda_c$.

Na fase absorvente, a densidade ρ decai a zero exponencialmente

$$\rho \sim e^{-(\lambda_c - \lambda)t}. \quad (3.10)$$

Da maneira análoga, a densidade relaxa exponencialmente para a solução não nula na fase ativa:

$$\rho \sim \frac{\lambda - \lambda_c}{\lambda} - Be^{-(\lambda - \lambda_c)t} \quad (3.11)$$

Em ambos os casos, o tempo característico de relaxação τ é dado por:

$$\tau \sim |\lambda_c - \lambda|^{-1} \quad (3.12)$$

No ponto crítico, $\lambda = \lambda_c$, o tempo τ diverge e a relaxação deixa de ser exponencial. A evolução temporal da densidade passa a ser dada por:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho^2, \quad (3.13)$$

cuja solução é:

$$\rho = \frac{1}{t + C}. \quad (3.14)$$

Para tempos longos, o decaimento torna-se uma lei de potência $\rho \sim t^{-1}$ [37].

É importante ressaltar que, todos os resultados acima foram obtidos considerando uma aproximação de campo médio simples. Entretanto, todos esses conceitos podem ser generalizados, pois esse modelo exhibe transições de fases contínuas em que o parâmetro de ordem, na fase supercrítica ($\lambda > \lambda_c$) e perto do ponto crítico, segue uma lei de potência:

$$\rho \propto (\lambda - \lambda_c)^\beta. \quad (3.15)$$

A teoria de campo médio fornece $\beta = 1$. O tempo de relaxação diverge quando $\lambda \rightarrow \lambda_c$, e seu

comportamento crítico é caracterizado pelo expoente ν_{\parallel} , definido por:

$$\tau \propto |\lambda - \lambda_c|^{-\nu_{\parallel}}. \quad (3.16)$$

Podemos ainda definir o comprimento de correlação espacial ξ , que também diverge quando $\lambda \rightarrow \lambda_c$,

$$\xi \propto |\lambda - \lambda_c|^{-\nu_{\perp}} \quad (3.17)$$

O comprimento de correlação espacial mede, basicamente, o alcance da influência que um sítio ocupado tem em relação a outro sítio na rede. No ponto crítico temos $\rho \propto t^{-\delta}$ e a teoria de campo médio fornece $\delta = 1$.

Classe de universalidade: Percolação Direcionada

Considere o modelo SIS em uma dimensão em que cada sítio é representado pela coordenada x . Esse sistema pode ser representado por um reticulado bidimensional (x, t) , cujas camadas registram as configurações nos instantes $t = 0, 1, 2, \dots$ [2, 37]. Na figura 3.3 mostramos um padrão espaço-temporal para a dinâmica do modelo SIS. O eixo horizontal representa a posição dos sítios e o vertical o tempo. Em $t = 0$, apenas o sítio central do reticulado está ocupado. A evolução temporal produz padrões espaço-temporais com ramificações, ou seja, caminhos direcionados no eixo t .

Nos modelos com transições para estados absorventes, existe uma classe de universalidade denominada classe de percolação direcionada (PD) que tem se mostrado bastante robusta com relação às regras microscópicas. Grassberger e Janssen [39] elaboraram a conjectura de que um sistema que possui as propriedades enumeradas abaixo, pertence à classe de universalidade PD:

- I. O modelo apresenta uma transição de fase contínua de uma fase ativa para um único estado absorvente.
- II. A transição é caracterizada por um parâmetro de ordem escalar e positivo.
- III. As regras dinâmicas envolvem somente interações de curto alcance.
- IV. O sistema não possui simetrias adicionais ou desordem congelada.

Como o modelo SIS apresenta todas as propriedades citadas acima, esperamos que ele pertença a classe PD, juntamente com outros modelos que apresentam transição de fases para um único estado absorvente, como o processo de contato. Isso significa que esses modelos podem ser caracterizados pelos mesmos expoentes críticos.

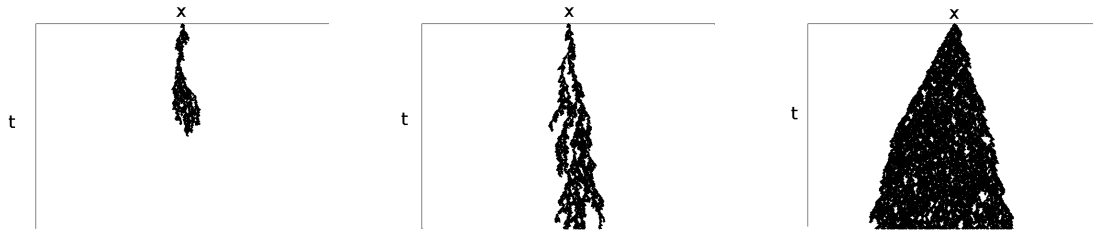


Figura 3.2: Evolução temporal típica do modelo SIS a partir de uma única partícula para valores subcrítico (esquerda), crítico (centro) e supercrítico (direita) da taxa de ocupação λ .

Apesar dessa conjectura não ter sido provada rigorosamente ela vem sendo reforçada por evidências numéricas em diversos modelos. Contudo, foram encontrados sistemas com infinitos estados absorventes que também apresentam os mesmos expoentes da classe PD. Logo, devemos considerar que a conjectura de Grassberger e Janssen fornece às condições suficientes para um sistema pertencer a classe de percolação direcionada, porém a determinação das condições necessárias ainda é uma questão em aberto [39].

3.3 Estado quase-estacionário

Na vizinhança do ponto crítico, propriedades extensivas dependem fortemente do tamanho do sistema. Além disso, em sistemas de tamanhos finitos, o estado absorvente é um ponto fixo que pode ser visitado mesmo na fase supercrítica devido às flutuações estocásticas. Em particular, simulações são extremamente sensíveis a efeitos de tamanho finito e requerem estratégias adequadas, juntamente com uma análise de escala de tamanho finito [40]. Para contornar essa situação, estudamos o estado quase-estacionário, que descreve as propriedades estatísticas das amostras que sobreviveram depois de um transiente inicial, ou seja, das amostras que não ficaram aprisionadas no estado absorvente.

As propriedades quase-estacionárias são determinadas a partir da média das amostras que sobreviveram de um grande número de tentativas independentes. Depois de um transiente que depende do tamanho do sistema L e da distância ao ponto crítico ($\Delta = \lambda - \lambda_c$), a média sobre as amostras que sobreviveram converge para valores estacionários, no limite termodinâmico.

Próximo ao ponto crítico e para valores grandes de L , a densidade de partículas no estado quase-estacionário, $\bar{\rho}(\Delta, L)$ tem o seguinte comportamento [2, 39]:

$$\bar{\rho}(\Delta, L) = L^{-\beta/\nu_{\perp}} f(\Delta L^{1/\nu_{\perp}}). \quad (3.18)$$

A função de escala $f(x)$ é proporcional a x^β para $x \gg 1$, que corresponde a L muito maior que o comprimento de correlação ξ , para satisfazer $\bar{\rho} \propto \Delta^\beta$. A forma de escala revela que, se fizermos um gráfico de $L^{\beta/\nu_\perp} \rho$ em função de $L^{1/\nu_\perp} \Delta$, as curvas para tamanhos diferentes devem colapsar na curva $f(x)$ [39].

A análise de escala de tamanho finito, também permite estimar o valor do ponto crítico com precisão pela dependência em L de $\bar{\rho}(\lambda, L)$. No ponto crítico, $\lambda = \lambda_c$, a equação 3.18 fornece,

$$\bar{\rho} \sim L^{-\beta/\nu_\perp}, \quad (3.19)$$

No regime subcrítico, $\lambda < \lambda_c$, $\bar{\rho}$ decai com L^{-1} , enquanto que no regime supercrítico $\lambda > \lambda_c$, $\bar{\rho}$ se aproxima de um valor diferente de zero quando $L \rightarrow \infty$, pois $\bar{\rho} \sim \Delta^\beta$. A classe de universalidade do modelo SIS pode ser caracterizada por três expoentes críticos independentes: $\beta, \nu_\parallel, \nu_\perp$. Os outros podem ser obtidos por relações de escala [2].

Neste trabalho, utilizamos uma maneira eficiente de simular o estado quase-estacionário (QE), proposta por Oliveira e Dickman [6]. Eles mostram que esse método reproduz os resultados para o processo de contato, que pertence à mesma classe de universalidade do modelo SIS.

Nessa dissertação, esse método será usado para estudar a transição para o estado absorvente em um modelo de reação-difusão em metapopulações. Por isso, adaptaremos alguns trechos da referência [6] para introdução do método.

A definição formal da distribuição quase-estacionária é: considere um processo markoviano de tempo contínuo X_t que assume os valores $n = 0, 1, 2, \dots, N$, com $n = 0$ representando o estado absorvente e N o tamanho da rede. Seja $q_n(t)$ a probabilidade que $X_t = n$, dada alguma condição inicial X_0 . A probabilidade de sobreviver $P_s(t) = \sum_{n \geq 1} q_n(t)$ é a probabilidade do processo não ficar preso no estado absorvente até o instante t . Suponha que quando $t \rightarrow \infty$, $q_n(t)$, normalizada pela probabilidade de sobreviver $P_s(t)$, atinja um valor independente do tempo (condição de quase-estacionariedade). Desta maneira, a distribuição quase-estacionária é definida como:

$$\bar{q}_n = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{q_n(t)}{P_s(t)} \quad (n \geq 1), \quad (3.20)$$

com $\bar{q}_0 \equiv 0$. A distribuição QE é normalizada: $\sum_{n \geq 1} \bar{q}_n = 1$.

Para entender melhor o método de simulação quase-estacionária, considere a seguinte equação mestra:

$$\frac{dq_n}{dt} = \sum_{n'} [q_{n'} W(n' \rightarrow n) - q_n W(n \rightarrow n')] \quad (3.21)$$

em que q_n é a probabilidade do sistema estar no estado n e a taxa $W(n' \rightarrow n)$ [$W(n \rightarrow n')$] representa a transição para dentro [fora] do estado n . Na simulação de Monte Carlo, é gerado um conjunto de amostras do processo estocástico. A simulação original do processo X_t , que possui um estado absorvente, é solução da equação acima. Porém, podemos reescrever esta equação de tal maneira que ela possa representar um esquema de simulação quase estacionária, isto é, podemos introduzir um termo na equação (3.21) que redireciona a probabilidade do

sistema ficar aprisionada no estado absorvente para o sub-espaço não-absorvente. Neste caso, cada estado não absorvente recebe uma parte proporcional à sua probabilidade. Desta maneira, a equação (3.21) torna-se:

$$\frac{dq_n}{dt} = \sum_{n' \neq 0} [q_{n'} W(n' \rightarrow n) - q_n W(n \rightarrow n')] + q_{n'} W(n' \rightarrow 0), \quad (3.22)$$

em que o termo final representa a redistribuição da probabilidade, transferida do estado absorvente na equação mestra original para o sub-espaço não-absorvente [6]. Assim, podemos definir um processo X_t^* cuja a distribuição de probabilidade estacionária é igual a distribuição quase-estacionária de X_t . A distribuição de probabilidade de X_t^* é governada pela equação acima, o que implica que para $n > 0$ a evolução de X_t^* é idêntica a de X_t . Quando X_t visita o estado absorvente, no entanto, X_t^* assume um estado ativo e então retoma sua evolução normal, até que ocorra outra visita ao estado absorvente (veja figura 3.3).

Um aspecto sutil da equação 3.22 é que a distribuição q_n é usada para determinar o valor de X_t^* quando X_t visita o estado absorvente. Embora não se tenha um conhecimento a priori de q_n , uma possibilidade, na simulação, é usar a história $X_n^*(0 < n < t)$ no tempo t , para estimar q_n . Isto é feito, salvando, em atualizações periódicas, amostras dos estados já visitados. X_n^* irá visitar estados de acordo com a distribuição QE. Deve-se atualizar as amostras periodicamente substituindo aleatoriamente uma dessas configurações pela configuração atual. Desta maneira, a distribuição para o processo X_t^* irá convergir para a distribuição QE para tempos longos.

Resumindo, o processo de simulação de X_t^* tem a mesma dinâmica de X_t , exceto quando a

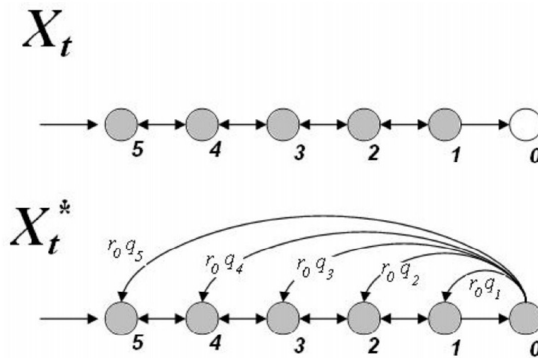


Figura 3.3: Processo original, X_t com o estado 0 absorvente e seu processo relacionado X_t^* . Figura retirada da referência [39].

transição para o estado absorvente é iminente. Nesta situação, X_t^* é substituído por um estado não absorvente, selecionado aleatoriamente do histórico da simulação. O termo final não linear da equação (3.22) representa a memória na simulação.

Uma informação importante que podemos obter desta simulação é o tempo de meia vida de um estado estacionário, dado por:

$$\tau = 1/A_0 \quad (3.23)$$

em que A_0 é a probabilidade total do sistema ficar aprisionado no estado absorvente, ou seja, $A_0 = \sum_n W(n \rightarrow 0)q_n$. Em sistemas de tamanho finito, o destino final do processo é sempre o estado absorvente, logo o tempo de meia vida de um estado quase-estacionário pode ser longo em um sistema grande, mas é sempre finito.

Este método foi utilizado durante todo o nosso trabalho. Na próxima sessão, serão mostrados alguns resultados computacionais que comprovam a eficácia deste método. No ponto crítico, as simulações quase-estacionárias do modelo SIS em uma dimensão, requerem cerca de uma ordem de grandeza menos tempo de processamento comparado com as simulações convencionais. Quando $\lambda \gg \lambda_c$ os dois métodos se equivalem pois as visitas ao estado absorvente se tornam muito raras, e para $\lambda < \lambda_c$, a eficiência é ainda maior pois as simulações convencionais estão sujeitas à incertezas muito grandes já que quase todas as amostras ficam aprisionadas no estado absorvente antes que o regime quase-estacionário seja atingido [39].

3.4 Simulações Computacionais

Nesta seção pretendemos mostrar os resultados¹ do método quase-estacionário explicado acima para o modelo SIS unidimensional em um anel de L sítios. Veremos que essa abordagem é válida mesmo se tratando de um processo com um número grande de configurações, muito maior que o tamanho da lista M de amostras dos estados ativos já visitados pelo sistema.

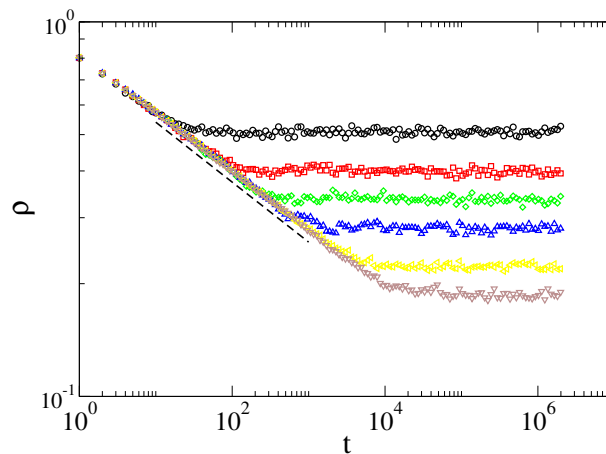


Figura 3.4: Densidade quase-estacionária no modelo SIS unidimensional em função do tempo. Simulações quase-estacionária: $L = 20, 50, 100, 200, 500, 1000$ de cima para baixo. A inclinação da reta pontilhada é -0.16 .

Apenas para um teste, nas simulações quase-estacionária utilizamos uma lista de tamanho $M = 10^2$, o processo foi simulado por 2×10^6 passos de Monte Carlo. Relembramos que os eventos de aniquilação espontânea são escolhidos com probabilidade $1/(1 + \lambda)$ e os eventos

¹É importante ressaltar que todas as simulações apresentadas neste capítulo são resultados originais. Entretanto, não fazem parte dos resultados principais da dissertação pois a classe de universalidade do modelo já é bem estabelecida.

de criação com uma probabilidade $\lambda/(1 + \lambda)$. Para otimizar, escolhemos um sítio a partir de uma lista dos sítios ocupados naquele momento. O sítio escolhido se torna vazio, no caso da aniquilação, ou seus primeiros vizinhos, se estiverem vazios, se tornam ocupados, no caso da criação. O incremento de tempo é dado por $\Delta t = 1/L_{oc}$, em que L_{oc} é o número de sítios ocupados. Os resultados dos primeiros 5×10^5 passos de tempo são descartados no cálculo das médias devido à relaxação do sistema. Na figura 3.4, mostramos a relaxação da densidade quase-estacionária. Podemos ver que para $t > 10^5$ a densidade atinge um valor aproximadamente constante para todos os tamanhos.

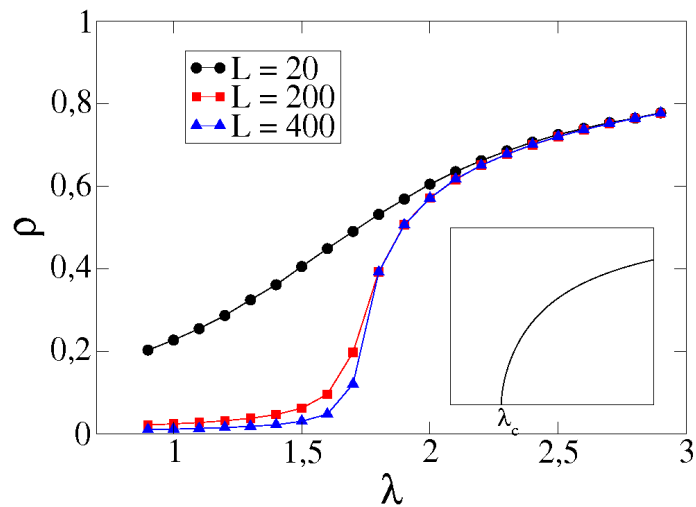


Figura 3.5: Densidade QE no modelo SIS 1-D de tamanho: $L = 20$ (\circ), $L = 200$ (\square) e $L = 400$ (\triangle). A inserção mostra a densidade estacionária para este modelo.

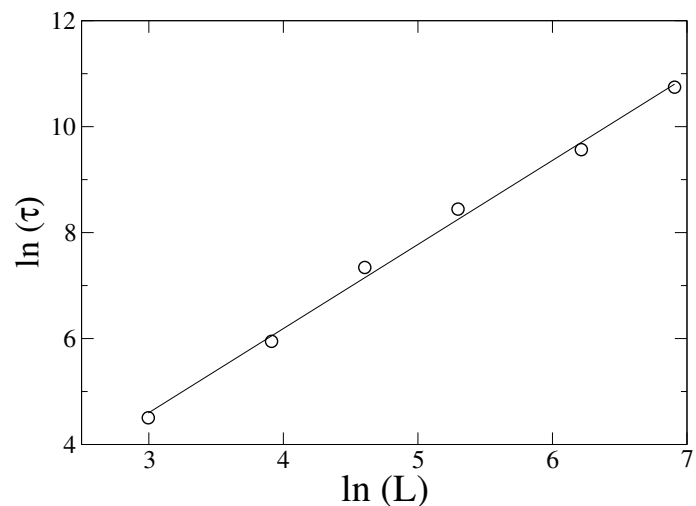


Figura 3.6: Tempo de meia vida do estado QE em função do tamanho do sistema no modelo SIS em uma dimensão, $\tau \propto L^{-\nu_{\parallel}/\nu_{\perp}}$ no ponto crítico. O expoente obtido por uma regressão em lei de potência é $\nu_{\parallel}/\nu_{\perp} = 1.58(3)$.

No início, a lista de configurações é preenchida sempre que o tempo t aumenta de uma unidade, até que uma lista de M configurações seja acumulada. Depois disso, atualizamos a

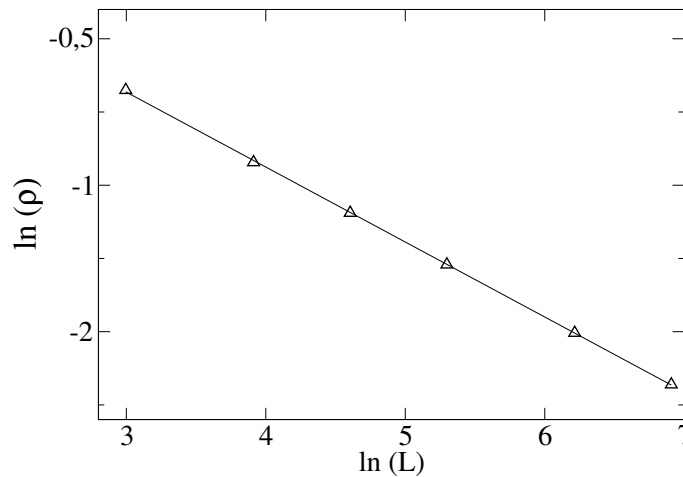


Figura 3.7: Densidade quase-estacionária no modelo SIS unidimensional em função do tamanho do sistema no ponto crítico. O expoente obtido por uma regressão em lei de potência é $\beta/\nu_{\perp} = 0.256(2)$.

lista, substituindo uma configuração escolhida aleatoriamente pela configuração atual, com uma probabilidade $p_{rep} = 0.02$, sempre que t aumenta por uma unidade.

Na figura 3.5 mostramos as simulações quase-estacionárias para diferentes tamanhos da cadeia unidimensional. Esse comportamento está de acordo com as simulações QE obtidas pelo método usual. Note que a medida que o tamanho do sistema cresce, a densidade aproxima-se de zero para $\lambda < \lambda_c$.

Também estudamos o modelo no ponto crítico em cadeias com tamanhos de 20 a 1000 sítios. Fizemos 500 amostras e mantivemos $M = 100$ e $p_{rep} = 0.02$. Encontramos $\lambda_c = 1.742(2)$, em que a incerteza do último dígito é mostrada entre parênteses. Este valor é coerente com os resultados encontrados na literatura $\lambda_c = 1.74173$ [41].

Fizemos uma estimativa para o tempo de meia vida do estado quase-estacionário como citado na seção anterior e encontramos que τ segue uma lei de potência $\tau(\lambda_c, L) \sim L^{\nu_{\parallel}/\nu_{\perp}}$ com boa precisão. Um ajuste em lei de potência do gráfico da figura 3.6 nos fornece $\nu_{\parallel}/\nu_{\perp} = 1.56(3)$ que está de acordo com o encontrado na literatura [2].

Para finalizar, verificamos também que os dados da simulação QE para o parâmetro de ordem ρ seguem uma lei de potência do tipo $\rho \sim L^{-\beta/\nu_{\perp}}$ (veja figura 3.7). Um ajuste através de uma lei de potência simples para os dados de $L = 20$ a 1000 fornece $\beta/\nu_{\perp} = 0.256(2)$ que concorda com os resultados da literatura para essa classe de universalidade [2].

Capítulo 4

Processos de reação-difusão em redes heterogêneas

Neste capítulo, vamos introduzir alguns conceitos gerais de modelos de reação-difusão em redes complexas enfatizando o papel da heterogeneidade das redes no processo de espalhamento de partículas. Para estudarmos as características de um processo de reação-difusão em uma rede, um parâmetro fundamental, como vimos no capítulo 3 é a taxa crítica. Vamos ver que, em redes sem escala o modelo SIS apresenta taxa crítica nula, o que significa que a epidemia se espalha indefinidamente, independente do valor da taxa de infecção.

4.1 Modelo SIS em redes heterogêneas

Nosso objetivo neste capítulo é exemplificar o estudo de processos de reação-difusão em redes heterogêneas, utilizando o modelo SIS (Suscetível-Infetado-Susceptível), que é o modelo mais utilizado no estudo de propagação de epidemias. É útil que façamos, primeiramente, uma análise desse modelo em uma rede homogênea não correlacionada de tamanho N . Relembrando, no modelo SIS, os nós se tornam vazios a uma taxa unitária e os nós vazios, se tiverem pelo menos um vizinho ocupado, ficam ocupados a uma taxa λ .

A equação de campo médio que descreve a evolução temporal da densidade de partículas ρ é dada por:

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = -\rho(t) + \lambda\langle k \rangle\rho(t)[1 - \rho(t)]. \quad (4.1)$$

O primeiro termo da equação se refere à aniquilação espontânea e o segundo termo à probabilidade de ocupar um novo vértice, usando a hipótese de campo médio discutida na seção 3.2.

Nessa equação é assumida a hipótese de mistura homogênea na qual cada vértice tem, aproximadamente, o mesmo número de ligações $k \simeq \langle k \rangle$ [42]. Essa equação já foi estudada na seção 3.2 em que fizemos uma abordagem de campo médio para o modelo SIS em uma cadeia unidimensional. A taxa crítica $\lambda = 1/\langle k \rangle$ é obtida imediatamente. Portanto, todos os expoentes encontrados anteriormente valem para essa equação.

Esse resultado se refere à redes homogêneas. No entanto, a maioria das redes usada para descrever processos dinâmicos possui uma topologia heterogênea, com distribuição de conectividade $P(k)$ do tipo “cauda pesada”, descrita por uma lei de potência $P(k) \sim k^{-\gamma}$. Neste caso, é necessário reescrever a equação (4.1) usando uma densidade $\rho_k(t)$ de nós com conectividade k que estão ocupados. Assim, a equação para $\rho_k(t)$ pode ser escrita como [4, 5]:

$$\frac{d\rho_k(t)}{dt} = -\rho_k(t) + \lambda k [1 - \rho_k(t)] \Theta_k(t). \quad (4.2)$$

Agora, o termo de criação é proporcional à taxa de criação λ , à densidade de vértices vazios $1 - \rho_k(t)$, ao grau k e à quantidade $\Theta_k(t)$ que representa a probabilidade de uma ligação de um vértice com grau k apontar para um nó ocupado. Em uma hipótese de redes homogêneas, Θ é simplesmente a densidade global de sítios ocupados, como na equação (4.1)

No capítulo 1, vimos que as correlações entre os graus de uma rede são definidas pela probabilidade condicional $P(k|k')$. Assim, podemos reescrever Θ_k como:

$$\Theta_k(t) = \sum_{k'} P(k|k') \rho_{k'}(t), \quad (4.3)$$

ou seja, a probabilidade de que uma ligação de um vértice de grau k esteja apontando para um vértice ocupado é dada pela probabilidade de que um vértice aponte para qualquer vértice com grau k' vezes a probabilidade de que este vértice esteja ocupado. As equações (4.2) e (4.3) definem juntas, uma equação de campo médio para o modelo SIS em redes complexas [42]:

$$\frac{d\rho_k(t)}{dt} = -\rho_k(t) + \lambda k [1 - \rho_k(t)] \sum_{k'} P(k|k') \rho_{k'}(t). \quad (4.4)$$

Essa equação é válida apenas para redes em que a posição dos nós não é relevante, isto é, a única variável relevante é o grau k . Isso implica que todos os vértices com grau k são estatisticamente equivalentes. Não é o caso, por exemplo, de reticulados, nos quais a estrutura espacial restringe a conectividade dos vértices. Também foram descartadas correlações dinâmicas pois assumimos que a densidade ρ_k não depende de $\rho_{k'}$. Isso é uma aproximação, pois se um nó está conectado a um infectado, isto altera a probabilidade dele também estar infectado.

Para redes não correlacionadas, vimos que $P(k'|k) = k'P(k')/\langle k \rangle$. Então, Θ_k é independente de k e é dado por:

$$\Theta = \frac{1}{\langle k \rangle} \sum_{k'} k' P(k') \rho_{k'}(t). \quad (4.5)$$

No estado estacionário, a equação (4.2) fornece:

$$\rho_k = \frac{k\lambda\Theta}{1 + k\lambda\Theta}. \quad (4.6)$$

Essa equação mostra que, quanto maior o grau de um vértice, maior é a probabilidade dele estar ocupado. Substituindo essa equação na equação (4.5), obtemos uma equação auto-consistente em Θ [43]:

$$\Theta = \frac{1}{\langle k \rangle} \sum_k kP(k) \frac{\lambda k\Theta}{1 + \lambda k\Theta}. \quad (4.7)$$

Usando argumentos geométricos, a solução da equação (4.7) segue da interseção das curvas $y_1(\Theta) = \Theta$ e $y_2(\Theta) = (1/\langle k \rangle) \sum_k kP(k) \lambda k\Theta / (1 + \lambda k\Theta)$. Esta última é uma função monotonicamente crescente de Θ entre os limites $y_2(0) = 0$ e $y_2(1) = (1/\langle k \rangle) \sum_k kP(k) \lambda k / (1 + \lambda k) < 1$. Para obtermos uma solução de $\Theta^* \neq 0$, a inclinação de $y_2(\Theta)$ no ponto $\Theta = 0$ deve ser maior ou igual a 1 (veja figura 4.1). Essa condição pode ser escrita como [44]:

$$\left. \frac{d}{d\Theta} \left(\frac{1}{\langle k \rangle} \sum_k kP(k) \frac{\lambda k\Theta}{1 + \lambda k\Theta} \right) \right|_{\Theta=0} \geq 1 \quad (4.8)$$

O valor de λ que satisfaz a equação (4.8), define a taxa crítica λ_c , que para uma rede aleatória, não correlacionada, é dado por:

$$\lambda_c = \frac{\langle k \rangle}{\langle k^2 \rangle} \quad (4.9)$$

No limite termodinâmico, redes sem escala possuem $\langle k^2 \rangle \rightarrow \infty$, o que corresponde a

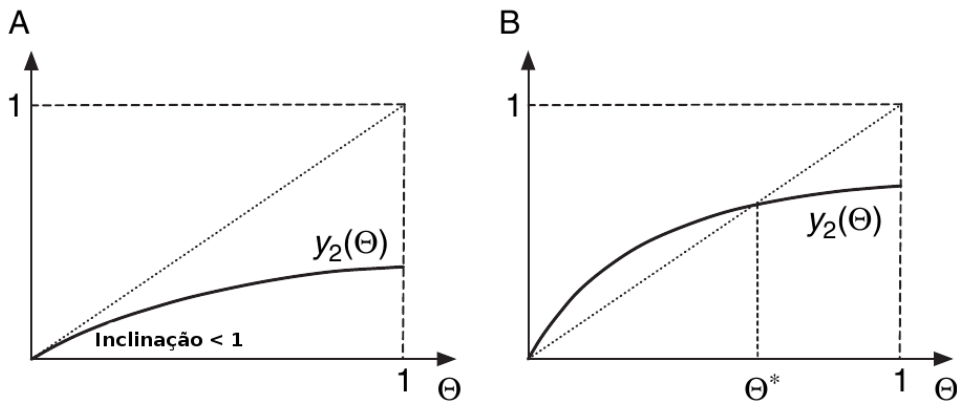


Figura 4.1: Solução gráfica da equação 4.7. A) Se a inclinação da função $y_2(\Theta)$ em $\Theta = 0$ for menor do que 1, a única solução da equação é $\Theta = 0$. B) Quando a inclinação é maior do que 1, a solução não trivial Θ^* pode ser encontrada. Figura adaptada da referência [11].

$\lambda_c = 0$ e evidencia a fragilidade de tais redes. Pensando no aspecto de uma epidemia se propagando com a dinâmica do modelo SIS, por exemplo, qualquer taxa de infecção $\lambda > 0$ fará com

que a epidemia persista [11].

A equação (4.9) é um exemplo em que as flutuações topológicas alteram o valor da taxa crítica. Além disso, é possível calcular explicitamente o valor da densidade estacionária de partículas como uma função dos parâmetros da infecção em uma rede sem escala não correlacionada [5]. Considere uma rede com distribuição de conectividade $P(k) = (\gamma - 1)m^{\gamma-1}k^{-\gamma}$ e fazendo uma aproximação contínua para k , obtemos o valor para o primeiro momento desta distribuição de conectividade:

$$\langle k \rangle = \int_m^{k_c} kP(k)dk \simeq \frac{(\gamma - 1)m}{\gamma - 2}, \quad (4.10)$$

em que m é o grau mínimo dos vértices e $k_c \gg m$ o grau máximo. E o segundo momento é dado por:

$$\langle k^2 \rangle = \int_m^{k_c} k^2P(k)dk \simeq \frac{(\gamma - 1)m^2}{\gamma - 3}, \quad (4.11)$$

De acordo com o resultado da equação (4.9), a taxa crítica para redes infinitas é dada por:

$$\lambda_c = \begin{cases} \frac{\gamma-3}{m(\gamma-2)} & \text{se } \gamma > 3 \\ 0 & \text{se } \gamma \leq 3, \end{cases} \quad (4.12)$$

pois $\langle k^2 \rangle$ é infinito para $\gamma \leq 3$ e finito para $\gamma > 3$.

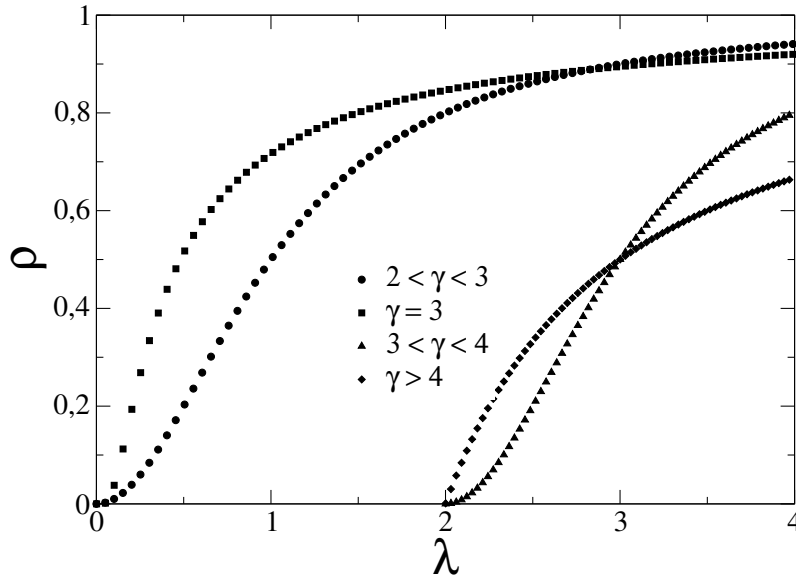


Figura 4.2: Comportamento da densidade estacionária do modelo SIS em função da taxa de infecção para diferentes valores do expoente γ .

Se substituirmos a expressão de $P(k)$ na equação (4.5) e levamos a (4.6), vamos obter expressões para Θ e ρ_k . Essas equações podem ser resolvidas no limite em que $\lambda \rightarrow \lambda_c$ e obtém-se os seguinte resultados [5, 11]:

a) $2 < \gamma < 3$

$$\rho_{\infty} \sim \lambda^{1/(3-\gamma)} = \lambda^{\beta} \quad (4.13)$$

Essa relação mostra a ausência de uma taxa crítica, pois a densidade de partículas será sempre diferente de zero para qualquer valor de $\lambda > 0$. O expoente $\beta = 1/(3 - \gamma)$ é sempre maior que 1, o que implica que para pequenos valores de λ a densidade de partículas é muito pequena, $\rho_{\infty} \ll 1$.

b) $\gamma = 3$

$$\rho_{\infty} \sim \exp(-m/\lambda) \quad (4.14)$$

Neste caso, também observamos a ausência de taxa crítica e a densidade de partículas é exponencialmente pequena, para $\lambda \approx 0$.

c) $3 < \gamma < 4$

$$\rho_{\infty} \sim \left(\lambda - \frac{\gamma - 3}{m(\gamma - 2)} \right)^{1/\gamma-3} = (\lambda - \lambda_c)^{\beta} \quad (4.15)$$

Neste caso, o comportamento em lei de potência é observado e agora a taxa crítica é finita $\lambda_c = \frac{\gamma-3}{m(\gamma-2)}$, porém não apresenta um comportamento singular.

d) $\gamma > 4$

$$\rho_{\infty} = \lambda - \frac{\gamma - 3}{m(\gamma - 2)} = \lambda - \frac{1}{\langle k \rangle} \quad (4.16)$$

que recupera o valor de λ_c obtido para redes homogêneas.

Resumindo, para todas as redes sem escala, com $2 < \gamma \leq 3$, não existe taxa crítica, isto é, $\rho = 0$ apenas se $\lambda = 0$. No intervalo $3 < \gamma < 4$, a taxa crítica reaparece, mas sem comportamento singular ($\beta > 1$). Para $\gamma > 4$ o comportamento crítico descrito pela análise de campo médio é retomado e a rede tem as mesmas propriedades de redes homogêneas. A figura 4.2 mostra esses comportamentos.

4.2 Imunização em redes heterogêneas

Como mencionamos anteriormente, a fragilidade de redes sem escala contra ataques epidêmicos representa algo extremamente importante no controle e erradicação de doenças e vírus de

computadores. Por isso, diferentes estratégias de imunização foram estudadas [44].

A estratégia mais simples de imunização é a chamada imunização uniforme que consiste na introdução aleatória de indivíduos imunizados na população. Neste procedimento, os nós imunes não podem ser infectados e logo não transmitem a infecção para seus vizinhos. Neste caso, para uma taxa fixa de infecção λ , o parâmetro relevante de controle é a imunidade h , definida como a fração de nós imunes presentes na rede. Dentro de uma hipótese de campo médio, a presença dessa imunidade uniforme irá reduzir efetivamente a taxa λ por um fator $(1 - h)$, isto é, a probabilidade de encontrar e infectar um indivíduo saudável e não-imune. Para uma rede homogênea, com imunização uniforme, a equação (4.1), no estado estacionários fornece:

$$\begin{aligned} \rho &= 0, & h &> h_c \\ \rho &\sim h_c - h, & h &\leq h_c \end{aligned} \quad (4.17)$$

Em que h_c é o valor crítico de imunização acima do qual a densidade de indivíduos infectados no estado estacionário é nulo e depende de λ da seguinte maneira:

$$h_c = \frac{\lambda - \lambda_c}{\lambda} \quad (4.18)$$

que é válida para $\lambda > \lambda_c$.

A imunização aleatória é útil para reduzir a infecção localmente, mas é ineficiente para encontrar qualquer fração crítica de indivíduos imunizados que garanta a erradicação da infecção. Um argumento intuitivo que mostra que essa estratégia é inadequada é que nela os nós da rede muito conectados e conseqüentemente, com mais potencial para infectar outros nós, tem a mesma importância que os nós com pouca conectividade [11].

Sabemos que a propagação de uma epidemia que segue a dinâmica do modelo SIS em uma rede sem escala apresenta uma taxa de infecção crítica λ_c nula no limite termodinâmico [4]. Isso implica que a reescala de $\lambda \rightarrow \lambda(1 - h)$, quando $\lambda > \lambda_c$, não erradica a infecção exceto quando $h = 1$, ou seja, apenas uma imunização completa da rede garante o estado estacionário livre de doenças.

Um procedimento mais eficiente seria adotar uma estratégia que levasse em conta o grau de conectividade dos nós. Chamada de imunização direcionada essa estratégia consiste em imunizar uma percentagem de h nós mais conectados da rede, que são, em muitos casos, os mais propícios a espalhar a doença. Isso é uma solução simples para otimizar o problema de imunização e é mais eficiente que a imunização uniforme em redes com conectividade finita.

Para avaliar a eficiência da imunização direcionada, vamos analisar um cálculo explícito para uma rede não correlacionada $P(k|k') = kP(k)/\langle k \rangle$ com expoente $\gamma = 3$ [11, 44]. Neste estudo, foi considerado que uma fração h de indivíduos com alta conectividade são imunizados com sucesso. Isso corresponde, no limite de redes muito grandes, à introdução de um limiar superior k_l , em que todos os nós com conectividade $k > k_l$ são imunizados. A fração de

indivíduos imunizados é dada por:

$$h = \sum_{k>k_l} P(k) \quad (4.19)$$

uma relação que torna k_l uma função implícita de h . A presença de um limiar $k_l(h)$ define novos momentos $\langle k \rangle_h$ e $\langle k^2 \rangle_h$ que podem ser calculados em função da densidade de indivíduos imunizados. O valor da nova taxa crítica é:

$$\lambda_c = \frac{\langle k \rangle_{h_c}}{\langle k^2 \rangle_{h_c}}. \quad (4.20)$$

O valor da imunização crítica $h_c(\lambda)$ depende da distribuição de conectividade da rede. Um cálculo para testar a eficiência de tal estratégia, foi feito utilizando uma rede que possui $P(k) \sim k^{-3}$ [44] e foi obtido

$$h_c \sim \exp(-2m/\lambda) \quad (4.21)$$

que indica que a imunização direcionada é conveniente em redes sem escala, pois a taxa de imunização crítica é exponencialmente menor que a taxa de infecção λ . O gráfico da figura 4.3, mostra a diferença da estratégia de imunização direcionada comparado com a imunização uniforme.

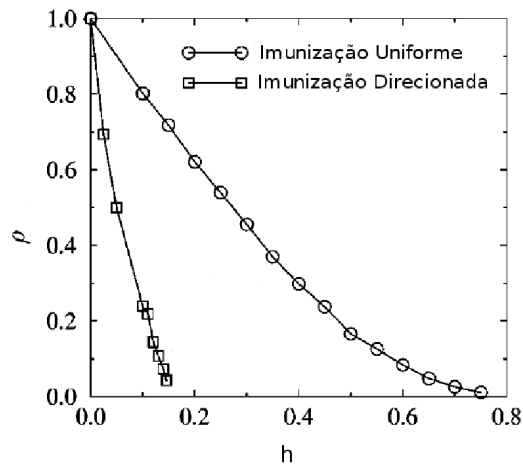


Figura 4.3: Modelo SIS em uma rede Barabási-Albert com imunização uniforme e direcionada, com taxa de infecção fixa $\lambda = 0.25$. Uma extrapolação linear dos maiores valores de h , para a imunização direcionada, leva a uma estimativa da imunização crítica $h_c = 0.16$. Adaptada da referência [44].

Capítulo 5

Um processo de reação-difusão em metapopulações heterogêneas

Neste capítulo apresentaremos um processo de reação-difusão (RD) com um estado absorvente em metapopulações. O nosso objetivo é entender o papel da estrutura interna nas populações bem como o efeito do intercâmbio (migração) entre diferentes populações conectadas por uma estrutura heterogênea. O foco do nosso trabalho é a transição de fases para o estado absorvente que tem se mostrado extremamente fértil em redes complexas [3, 4, 5, 12, 42]. As análises anteriores feitas em metapopulações são, quase que totalmente, em sistemas bosônicos, em que um número ilimitado de partículas podem ocupar um mesmo nó e a interação ocorre de maneira uniforme [10, 13, 14, 15, 16]. No processo RD que estudaremos, cada sítio pode ser ocupado por uma única partícula e cada nó (população) tem um número finito de ocupação.

5.1 Modelo

De uma maneira geral, nosso modelo para estudar a transição de fases em um processo de reação-difusão consiste em N populações conectadas através de uma rede não-direcionada caracterizada por uma distribuição de conectividade $P(k)$ com correlação entre os graus dada por $P(k|k')$. Cada população é definida por uma rede regular d -dimensional, com L^d sítios, com condições de contorno periódicas em que as interações ocorrem entre os z vizinhos. Cada nó da rede representa uma população e cada uma delas é um reticulado regular contendo sítios vazios e ocupados. Esse conjunto de populações é chamado metapopulação. Os nós vão sempre se referir às metapopulações e os sítios às partículas. A dinâmica das partículas dentro das metapopulações segue o seguinte processo de reação-difusão. Os sítios ocupados e vazios são representados por $\sigma = 1$ e $\sigma = 0$, respectivamente. Um sítio ocupado pode ocupar todos os

seus vizinhos vazios a uma taxa λ e pode se tornar vazio espontaneamente a uma taxa unitária. Além disso, as partículas podem ser trocadas a uma taxa α entre duas metapopulações que estão conectadas. A suposição de que as taxas são constantes e independentes do grau de conectividade e do número de partículas de cada nó, bem como o tamanho fixo das metapopulações são simplificações que podem ser reformuladas em trabalhos futuros.

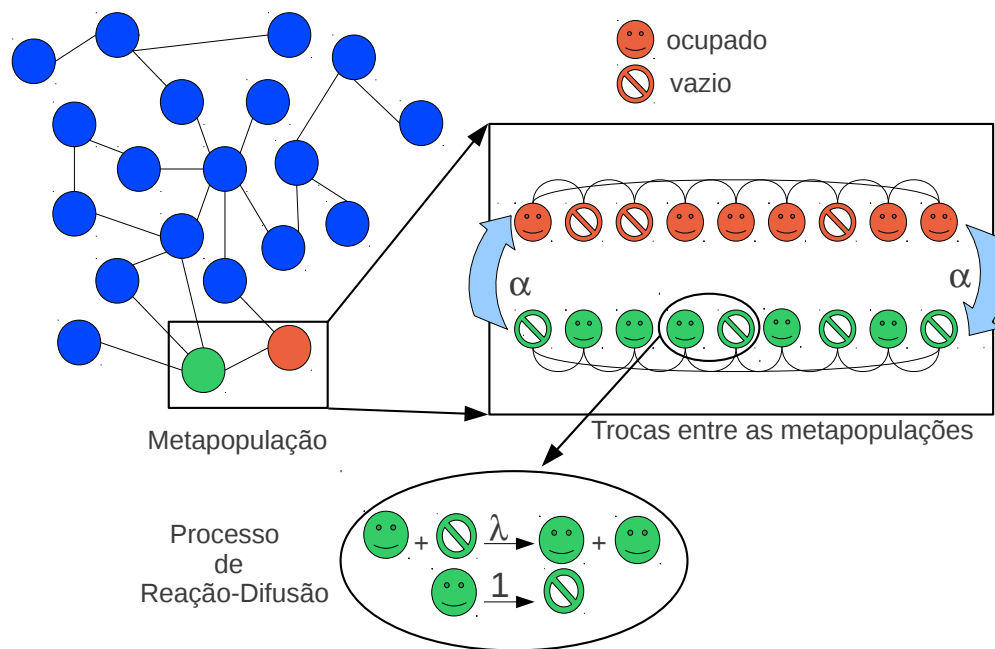


Figura 5.1: Representação esquemática do processo RD em uma metapopulação estruturada. Os nós da rede representam as diferentes populações. Cada nó é uma cadeia unidimensional em que os sítios podem estar ocupados ou vazios. As partículas podem se mover de uma população para outra de acordo com a conectividade da rede.

A versão discretizada do modelo, que foi utilizada nas simulações, é a seguinte: a cada passo de tempo um sítio ocupado i é escolhido aleatoriamente e o tempo é incrementado por $\Delta t = 1/N_{oc}$, em que N_{oc} é o número de sítios ocupados em todos os vértices. O sítio selecionado irá realizar uma das três ações:

1. se tornar vazio com uma probabilidade $p = 1/(1 + \lambda + \alpha)$;
2. ocupar todos os seus sítios vizinhos, que ainda não estão ocupados, com uma probabilidade $q = \lambda/(1 + \lambda + \alpha)$;
3. ser trocado por outro sítio em um nó vizinho com uma probabilidade $r = 1 - p - q$.

Na troca, um nó de destino é escolhido aleatoriamente entre todos os vizinhos do vértice onde está o sítio i . Então, um sítio que pertença ao vizinho escolhido também é sorteado aleatoriamente para ser trocado com o sítio i . Note que uma tentativa de infectar todos os vizinhos que já estão ocupados, bem como trocar dois sítios ocupados entre duas populações não provoca nenhuma mudança no sistema, mas a dinâmica segue para o próximo passo. A figura 5.1 resume as regras do modelo.

5.2 Análise de Campo Médio

Na análise de campo médio que descreveremos estamos assumindo que a rede de metapopulações é completamente definida pela distribuição de conectividade $P(k)$ e a correlação entre os graus dos vértices $P(k|k')$, o que significa que nós com o mesmo grau possuem as mesmas propriedades, ou seja, são estatisticamente equivalentes. Vamos definir $Q(\sigma; k)$ como a probabilidade de um sítio que está localizado em um nó com grau k estar no estado σ . Da mesma maneira, podemos definir a probabilidade $Q(\sigma\sigma'; k)$ de um par de sítios vizinhos dentro de um nó com grau k estar nos estados $\sigma\sigma'$ e assim por diante. Em outras palavras, $Q(\sigma\sigma'; k)$ representa a fração de sítios em um nó de grau k que está no estado σ e seu vizinho da direita está no estado σ' . Considerando a homogeneidade espacial dentro das populações, temos que $Q(\sigma\sigma'; k) = Q(\sigma'\sigma; k)$. A equação que descreve a dinâmica de $Q(1; k)$ pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} \frac{dQ(1; k)}{dt} = & -Q(1; k) + z\lambda Q(01; k) + \alpha k Q(0; k) \sum_{k'} \frac{Q(1; k'|k)P(k'|k)}{k'} \\ & - \alpha Q(1; k) \sum_{k'} Q(0; k'|k)P(k|k') \end{aligned} \quad (5.1)$$

A probabilidade condicional $Q(\sigma; k|k')$ nos fornece a probabilidade de um sítio dentro de um nó com grau k' estar no estado σ dado que ele esteja conectado a um nó com grau k . O primeiro termo da equação (5.1) representa a aniquilação espontânea, a uma taxa unitária, o segundo termo se refere a ocupação devido aos z sítios vizinhos a uma taxa λ , e o terceiro e o quarto termos estão relacionados às entradas e saídas de partícula de um nó com grau k , referente ao intercâmbio entre as metapopulações. Note que para o caso de uma cadeia unidimensional temos $z = 2$. O fator $1/k'$ no terceiro termo leva em consideração que um sítio em um nó com grau k' pode migrar para qualquer um dos seus vizinhos com igual chance. O fator $1/k$ no último termo é cancelado porque existem exatamente k possibilidades de troca.

Essa equação do movimento não tem solução analítica. Vamos assumir que o sistema apresenta correlações dinâmicas fracas tal que a densidade de sítios ocupados em uma população é independente do estado dos nós vizinhos, isto implica que $Q(\sigma'; k'|k) \approx Q(\sigma'; k')$. Introduzindo a notação $Q(1; k) = \rho_k$, $Q(0; k) = 1 - \rho_k$ e $Q(01; k) = \phi_k$, a equação de campo médio

se torna:

$$\frac{d\rho_k}{dt} = -\rho_k + z\lambda\phi_k + \alpha k(1 - \rho_k) \sum_{k'} \frac{\rho_{k'} P(k|k')}{k'} - \rho_k \alpha \sum_{k'} (1 - \rho_{k'}) P(k|k'). \quad (5.2)$$

Definindo a densidade total de partículas como:

$$\rho = \langle \rho_k \rangle = \sum_k P(k) \rho_k \quad (5.3)$$

e a densidade de pares vazios-ocupados como:

$$\phi = \langle \phi_k \rangle = \sum_k P(k) \phi_k \quad (5.4)$$

e usando a condição de balanceamento detalhado para redes conectadas [32] $k' P(k|k') P(k') = k P(k'|k) P(k)$, podemos mostrar que os termos de entrada e saída se cancelam e a equação (5.2) se torna:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho + z\lambda\phi. \quad (5.5)$$

A equação (5.5) tem a mesma forma que a equação de movimento para o modelo SIS em reticulados regulares, quando fazemos $\alpha = 0$ na equação (5.2). Porém, é importante ressaltar que elas não são equivalentes porque ϕ_k é, em geral, uma função de k se $\alpha \neq 0$.

Uma aproximação de campo médio simples, também chamada de aproximação de um sítio, desconsidera também a correlação entre os sítios, o que significa aproximar $Q(\sigma\sigma'; k) \approx Q(\sigma; k)Q(\sigma'; k)$ e, conseqüentemente, $\phi_k \approx \rho_k(1 - \rho_k)$. Desta maneira, a equação (5.5) se torna:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho + z\lambda(\rho - \langle \rho_k^2 \rangle), \quad (5.6)$$

que não é auto-consistente por causa do termo $\langle \rho_k^2 \rangle$.

A solução da equação (5.2) pode ser difícil de ser encontrada, dependendo da forma de $P(k'|k)$ mas, podemos obter a taxa crítica λ_c analisando a estabilidade das soluções estacionárias. Um ponto fixo dessa equação é $\rho_k = 0$ que corresponde ao estado absorvente. A linearização da equação (5.2) em torno desse ponto fixo resulta em:

$$\frac{d\rho_k}{dt} = -(1 - z\lambda + \alpha) + \alpha k \sum_{k'} \frac{\rho_{k'} P(k|k')}{k'} + \mathcal{O}(2) \quad (5.7)$$

em que $\mathcal{O}(2)$ representa as contribuições de segunda ordem em ρ_k . Introduzindo uma notação mais compacta, temos:

$$\frac{d\rho_k(t)}{dt} = \sum_{k'} L_{kk'} \rho_{k'}(t) + \mathcal{O}(2) \quad (5.8)$$

em que os elementos da matriz Jacobiana $L_{kk'}$ são dados por:

$$L_{kk'} = -(1 - z\lambda + \alpha)\delta_{kk'} + \alpha k P(k|k')/k' \quad (5.9)$$

e $\delta_{kk'}$ é a função delta de Kronecker.

O estado estacionário ativo existe apenas se o estado absorvente é instável. Um resultado elementar de álgebra linear diz que um ponto fixo é instável se o maior autovalor da matriz Jacobiana é positivo [45]. Se definirmos a matriz de conectividade $C_{kk'} = kP(k|k')/k'$, o maior autovalor de $L_{kk'}$ é $\ell_m = -(1 - z\lambda + \alpha) + \alpha c_m$, em que c_m é o maior autovalor de $C_{kk'}$. Podemos mostrar que existe um autovetor único $v_k = k$ com autovalor $c = 1$. Essa demonstração encontra-se na última seção deste capítulo. Desde que o estado absorvente é instável para $\ell_m > 0$, o ponto crítico é $\lambda_c = 1/z$. Observe que o ponto crítico que encontramos nessa aproximação de campo médio é independente da taxa de viagem α e da conectividade da rede. A taxa crítica encontrada é a mesma do modelo SIS em uma aproximação de campo médio homogênea com conectividade média $\langle k \rangle = z$ [5].

No caso de redes não correlacionadas temos $P(k'|k) = k'P(k')/\langle k \rangle$ e a equação (5.2) se torna:

$$\frac{d\rho_k}{dt} = z\Delta\rho_k - \rho_k^2 + \frac{\alpha k \rho}{\langle k \rangle} (1 - \rho_k) - \rho_k \alpha \left(1 - \frac{\Theta}{\langle k \rangle}\right), \quad (5.10)$$

em que $\Delta = \lambda - \lambda_c$ e $\Theta = \sum_k k \rho_k P(k)$.

No estado estacionário e perto do ponto crítico, temos:

$$\rho_k = \frac{k\rho/\langle k \rangle}{1 - z\Delta/\alpha + (k\rho - \Theta)/\langle k \rangle} + \mathcal{O}(2). \quad (5.11)$$

Desprezando as contribuições de segunda ordem, podemos usar a equação (5.11) para obter uma expressão para Θ :

$$\Theta = \sum_k \frac{k^2 P(k) \rho / \langle k \rangle}{1 - z\Delta/\alpha + (k\rho - \Theta)/\langle k \rangle}. \quad (5.12)$$

Essa aproximação é válida somente quando $\Delta/\alpha \ll 1$, ou seja, não se aplica ao limite de $\alpha \rightarrow 0$.

Para uma distribuição de conectividade arbitrária $P(k) = (\gamma - 1)m^{\gamma-1}k^{-\gamma}$, $k = m \cdots k_c$, $k_c \gg m$ e $\gamma > 2$ e substituindo a soma por uma integral, temos

$$\Theta = (\gamma - 1)m^{\gamma-1}\varrho \int_m^{k_c} \frac{k^{2-\gamma}}{1 + \varrho k} dk, \quad (5.13)$$

em que

$$\varrho = \frac{\rho}{\langle k \rangle (1 - \epsilon)} \ll 1 \quad \text{e} \quad \epsilon = \frac{z\Delta}{\alpha} + \frac{\Theta}{\langle k \rangle} \ll 1. \quad (5.14)$$

Note que ϱ e ϵ são muito menores que a unidade porque estamos perto do ponto crítico. A solução é dada por:

$$\frac{\Theta}{\langle k \rangle} = F(1, \gamma - 2, \gamma - 1, -1/\varrho m) - \left(\frac{m}{k_c}\right)^{\gamma-2} F(1, \gamma - 2, \gamma - 1, -1/\varrho k_c), \quad (5.15)$$

em que $F(a, b, c, z)$ é a função hipergeométrica de Gauss [46]. O comportamento dessa função é bem conhecido no estudo de transições de fases para estados absorventes em redes complexas e as propriedades assintóticas dependem de comportamento de ϱk_c no limite termodinâmico [47, 48, 49]. Para $\varrho k_c \gg 1$, ou seja, no limite de sistemas infinitos, o segundo termo da equação (5.15) pode ser desprezado e usando o limite assintótico de F , encontramos:

$$\Theta = \begin{cases} \langle k \rangle \Gamma(3 - \gamma) \Gamma(\gamma - 1) (m\varrho)^{\gamma-2} & , \quad 2 < \gamma < 3 \\ \langle k^2 \rangle \varrho & , \quad \gamma > 3 \end{cases}, \quad (5.16)$$

em que $\Gamma(x)$ é a função Gamma [46] e $\langle k^2 \rangle = (\gamma - 1)/(\gamma - 3)m$ para $\gamma > 3$. Os detalhes de todos esses procedimentos estão apresentados no final deste capítulo, porém a sua leitura é opcional para a compreensão do texto principal.

A aproximação de um sítio da equação (5.6) envolve o termo $\langle \rho_k^2 \rangle$ que pode ser obtido multiplicando a equação (5.10) por ρ_k e mantendo os termos até segunda ordem. Assim, o resultado para o estado estacionário é:

$$\langle \rho_k^2 \rangle \simeq \frac{\rho \Theta}{\langle k \rangle (1 - z\Delta/\alpha)}, \quad (5.17)$$

que, substituindo na equação (5.6), fornece a seguinte expressão para Θ :

$$\Theta \simeq \langle k \rangle \Delta / \lambda. \quad (5.18)$$

Usando o comportamento assintótico de Θ dado pela equação (5.16), encontramos $\rho \sim \Delta^\beta$, com o expoente crítico

$$\beta = \max \left[1, \frac{1}{\gamma - 2} \right]. \quad (5.19)$$

Na criticalidade, a densidade escala com $d\rho/dt = -\langle \rho_k^2 \rangle \simeq -\rho \Theta / \langle k \rangle$. Usando o comportamento assintótico de Θ , podemos mostrar que a densidade crítica escala com $\rho \sim t^{-\delta}$, em que o expoente crítico $\delta = \beta$. Também podemos mostrar que perto do ponto crítico, a densidade se aproxima do valor assintótico com $\rho(t) = \rho_s + \text{const.} \times \exp(-t/\tau)$ em que o tempo característico diverge $\tau = (zb\Delta)^{-1} \sim \Delta^{-\nu_{\parallel}}$ com um expoente $\nu_{\parallel} = 1$. Esses expoentes críticos coincidem com a aproximação de campo médio heterogênea para o processo de contato em redes não correlacionadas [47, 48, 49]. Os detalhes dos cálculos estão feitos na seção 5.4.

Uma teoria de campo médio para tamanhos finitos pode ser obtida usando a estratégia proposta por Castellano e Pastor-Satorras [47] e aprimorada por Ferreira et. al [40], em que a

equação de movimento é mapeada em um processo de um passo. Um processo de um passo é um processo Markoviano definido por uma variável estocástica $X(t)$ que pode assumir valores inteiros e apenas transições do tipo $X(t + \Delta t) \rightarrow X(t) \pm 1$ são permitidas [5]. No limite de baixas densidades, podemos substituir a equação (5.17) na equação (5.6) para obter a equação de campo médio macroscópica.

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho + z\lambda\rho [1 - \Theta(\rho)/\langle k \rangle]. \quad (5.20)$$

Como discutido anteriormente, o primeiro termo representa o processo de aniquilação $n \rightarrow n - 1$ e o segundo, o termo de criação $n \rightarrow n + 1$. De acordo com a referência [47], o processo de um passo correspondente a equação (5.20) é definido pelas taxas:

$$\begin{aligned} W(n - 1, n) &= n \\ W(n + 1, n) &= \lambda z n [1 - \Theta(n/N)/\langle k \rangle], \end{aligned} \quad (5.21)$$

em que $W(n, m)$ representa a transição de um estado com m sítios ocupados para um estado com n sítios ocupados. Note que as taxas (5.21) são os termos de criação e aniquilação da equação (5.20) multiplicados por N . A equação mestra para um processo de um passo arbitrário é [50]

$$\frac{dQ_n}{dt} = \sum_m W(n, m)Q_m(t) - \sum_m W(m, n)Q_n(t). \quad (5.22)$$

Substituindo as taxas (5.21), encontramos

$$\frac{dQ_n}{dt} = (n + 1)Q_{n+1} + u_{n-1}Q_{n-1} - (n + u_n)Q_n \quad (5.23)$$

com $u_n = \lambda n(1 - \Theta/\langle k \rangle)$ e Θ é dado pela equação (5.12).

Podemos definir uma distribuição QE de acordo com a condição:

$$Q_n(t) = P_s(t)\bar{Q}_n \quad (5.24)$$

em que \bar{Q}_n é independente do tempo e $\bar{Q}_0 \equiv 0$ é o estado absorvente e $P_s(t)$ é a probabilidade de sobreviver, ou seja, a probabilidade do sistema não ficar aprisionado no estado absorvente.

Como discutido na seção 3.3, podemos então, substituir $Q_n(t) = P_s(t)\bar{Q}_n$ na equação mestra (5.23) e usar $dP_s/dt = -\bar{Q}_1 P_s$ [51] para obter, no estado estacionário, a seguinte relação de recorrência:

$$\bar{Q}_n = \frac{1}{n} [(u_{n-1} + n - 1 - \bar{Q}_1)\bar{Q}_{n-1} - u_{n-2}\bar{Q}_{n-2}] \quad (5.25)$$

em que $n = 2, \dots, N$ e $\bar{Q}_0 \equiv 0$.

Neste trabalho, estamos interessados na dedução dos expoentes de campo médio da análise QE, $\rho \sim N^{-\hat{\nu}}$ e $\tau \sim N^{\hat{\alpha}}$. No ponto crítico, a densidade QE é suficientemente pequena para garantir que $\rho k_c \ll 1$ e, conseqüentemente $\rho k \ll 1$ para qualquer k e a equação (5.12) se torna

$\Theta \simeq \rho \langle k^2 \rangle / \langle k \rangle$. Introduzindo essa aproximação em u_n na equação (5.25) obtemos

$$n\bar{Q}_n = \left[(n-1) \left(\lambda \frac{n-1}{\Omega} + 1 \right) - \bar{Q}_1 \right] \bar{Q}_{n-1} - \lambda(n-1) \left(\frac{n-2}{\Omega} \right) \bar{Q}_{n-2}, \quad (5.26)$$

em que $\Omega = N/g$ e $g = \langle k^2 \rangle / \langle k \rangle^2$. Recentemente, essa mesma equação foi obtida por Ferreira et. al. [40] na análise do processo de contato em uma rede *annealed*¹ sem escala. Na verdade, essa equação também já tinha sido analisada por Dickman e Vidigal no estudo do processo de contato em um grafo completo [51]. A única diferença está no fator Ω . Enquanto Ω é apenas o tamanho do grafo para o processo de contato em um grafo completo, em redes sem escala este fator possui uma dependência mais complicada com o tamanho devido ao fator g .

Como as soluções da equação (5.26) já foram muito estudadas, apenas reproduziremos os principais resultados da referência [40], que foi submetido à Phys. Rev. E. A distribuição QE no ponto crítico para sistemas grandes, tem a seguinte forma:

$$\bar{Q}_n = \frac{1}{\sqrt{N/g}} f \left(\frac{n}{\sqrt{N/g}} \right), \quad (5.27)$$

em que $f(x)$ apresenta as seguintes propriedades: $f(x) \sim \exp(-ax)$ para $x \ll 1$, em que a é uma constante, e $f(x) \sim \exp(-x^2/2)$, para $x \gg 1$. A densidade QE no ponto crítico escala com N , tal que:

$$\bar{\rho} \sim (gN)^{-1/2} \quad (5.28)$$

Para sistemas assintoticamente grandes, sabemos que $g \sim k_c^{3-\gamma}$ para $\gamma < 3$ e $g \sim \text{const.}$ para $\gamma > 3$. O resultado é uma lei de potência $\bar{\rho} \sim N^{-\hat{\nu}}$, em que

$$\hat{\nu} = \frac{1}{2} + \max \left(\frac{3-\gamma}{2\omega}, 0 \right), \quad (5.29)$$

na qual uma dependência $k_c \sim N^{1/\omega}$ foi assumida para a cota superior do grau de conectividade.

De maneira análoga, o tempo característico escala com

$$\tau \sim \left(\frac{N}{g} \right)^{1/2} \quad (5.30)$$

que resulta, no limite de redes grandes, em uma lei de potência, $\tau \sim N^{\hat{\alpha}}$ com o expoente:

$$\hat{\alpha} = \frac{1}{2} - \max \left(\frac{3-\gamma}{2\omega}, 0 \right). \quad (5.31)$$

¹Redes *annealed* são redes em que as as ligações são redirecionadas a uma taxa maior do que as taxas envolvidas no processo dinâmico o que implica na inexistência de correlação dinâmica [48].

5.3 Simulações e Discussões

Nas simulações computacionais, usamos cadeias unidimensionais de tamanho $L = 250$ e variamos o número de metapopulações no intervalo $N = 1000 - 128000$. Portanto, o número total de sítios no sistema ultrapassa o valor de 3×10^7 para as simulações maiores. A rede que conecta as metapopulações foi gerada pelo modelo de configurações com distribuição de conectividade $P(k) \sim k^{-\gamma}$ com cutoff $k_c = N^{1/2}$ que garante a ausência de correlação entre os graus dos vértices. Portanto, o expoente do limite superior do grau de conectividade é $\omega = 2$. Variamos o valor do expoente $\gamma = 2.25, 2.75$ e 3.5 correspondendo a redes altamente heterogênea, pouco heterogênea, e homogênea, respectivamente. O grau mínimo da rede foi mantido fixo em $m = 2$. Implementamos a simulação quase-estacionária explicada no capítulo 3 utilizando uma lista de $M = 100$ configurações para substituir as visitas ao estado absorvente e $p_{rep} = 0.02\Delta t$, em que Δt é o passo de tempo discreto na definição microscópica do modelo. Depois de um tempo de relaxação $t_r = 5 \times 10^5$, construímos os histogramas QE durante um intervalo $t_m = 5 \times 10^5$ passos. É importante mencionar que o tempo de relaxação característico de processos dinâmicos em topologias com propriedade de mundo pequeno é muito menor que o tempo de relaxação em reticulados regulares [40, 52]. Por essa razão o tempo de relaxação pode ser tão curto como 5×10^5 em contraste com $10^7 - 10^9$ passos utilizados em simulações de modelos com estados absorventes em redes regulares. No entanto, é necessário realizar médias sobre configurações de rede. Para isso, usamos 100 configurações de rede para cada conjunto de parâmetros.

O ponto de partida para investigar a criticalidade do modelo é determinar o ponto crítico com precisão [2]. Em reticulados regulares isto pode ser feito por meio de simulações de espalhamento. Esta análise consiste em perturbar o estado absorvente introduzindo apenas um sítio ativo no sistema e seguir a evolução temporal do número médio de partículas $\langle n \rangle$ e/ou da probabilidade de sobrevivência P_s . Nestes ensaios, a média temporal é feita sobre todas as amostras, incluindo as que ficaram aprisionadas no estado absorvente. No ponto crítico, estas quantidades escalam com o tempo da seguinte maneira: $\langle n \rangle \sim t^\eta$ e $P_s \sim t^{-\delta}$, se o sistema for suficientemente grande. Em topologias complexas, no entanto, os experimentos de espalhamento rapidamente alcançam o regime estacionário devido a pequena distância entre os nós que cresce logaritmicamente com o tamanho da rede [11], como discutido na seção 2.1. Este efeito já foi observado por Ferreira e Martins [17] no estudo do processo de contato em metapopulações conectadas por uma rede de Barabási-Albert. Na figura 5.2, mostramos a análise de espalhamento típica para nosso modelo de reação-difusão perto do ponto crítico $\lambda_c = 1.1047(2)$. Este valor foi obtido através da análise quase-estacionária que será discutida adiante. Como podemos notar, mesmo na fase supercrítica, a densidade de partículas tende a zero devido a finitude do sistema. Na figura 2(b) podemos ver que a atividade é mais duradoura à medida em que aumentamos o tamanho da rede. Portanto, os efeitos de tamanho finito acabam

subestimando o valor do ponto crítico e a análise de tamanho finito também se torna necessária para os experimentos de espalhamento. Conseqüentemente, é mais apropriado determinar o ponto crítico através da análise QE, na qual os efeitos de tamanho finito aparecem naturalmente na análise.

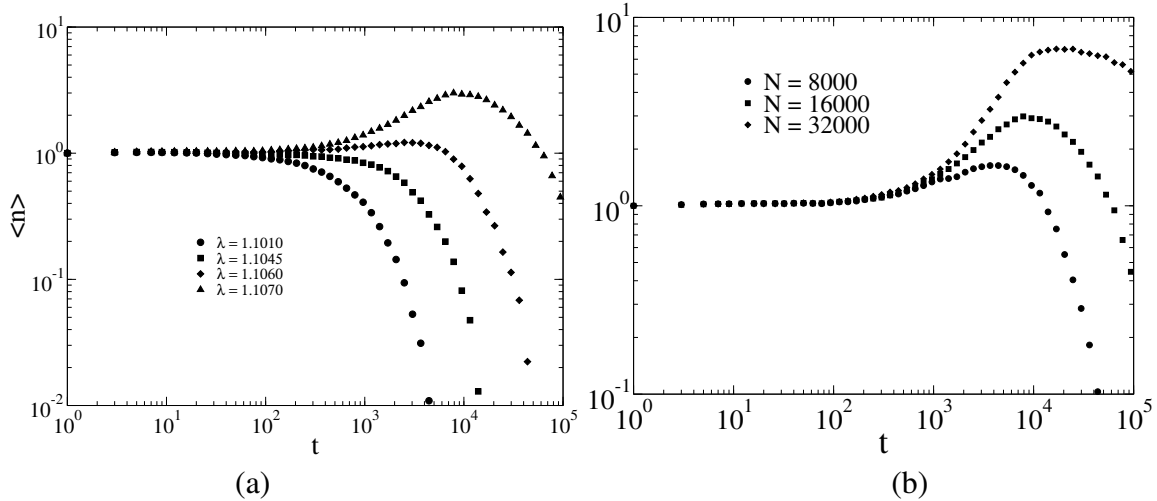


Figura 5.2: Experimentos de espalhamento para uma taxa de troca $\alpha = 0.1$, expoente $\gamma = 2.25$, e cadeias lineares de tamanho $L = 250$. (a) Número médio de partículas próximo ao ponto crítico $\lambda_c = 1.1047(2)$ para uma rede de populações com $N = 16000$ nós. (b) A dependência com o tamanho da rede para uma taxa supercrítica $\lambda = 1.1070$.

Iniciaremos nossa discussão com o tempo de relaxação para o estado estacionário. A figura 5.3 mostra a densidade QE para duas redes de tamanho $N = 16000$ e 128000 começando com 2% dos sítios ocupados aleatoriamente. A densidade total de partículas na rede é dada por:

$$\rho = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \rho_i,$$

em que ρ_i é a densidade de sítios ocupados na população i . Também consideramos a densidade média restrita aos N_h nós mais conectados, os *hubs*. Mais especificamente, classificamos os nós em ordem crescente de conectividade e definimos um conjunto \mathcal{A} incluindo apenas 10% dos nós mais conectados. Desta maneira, a densidade nos *hubs* é definida como

$$\rho_h = \frac{1}{N_h} \sum_{i \in \mathcal{A}} \rho_i.$$

Durante o período de tempo inicial, a densidade QE é equivalente a densidade usual enquanto o estado absorvente não tenha sido visitado. Inicialmente, a densidade total apresenta um valor constante em um intervalo de tempo curto e decai rapidamente para o estado estacionário. Porém, no início, a densidade nos *hubs* aumenta antes de atingir o estado estacionário. Este resultado nos diz que a dinâmica inicial do sistema é controlada pela difusão em direção aos vértices altamente conectados. A configuração inicial, com uma distribuição de partículas uni-

forme nas metapopulações é instável e o sistema evolui para o estado com $\rho_k \simeq \rho k / \langle k \rangle$ para $\rho \ll 1$ previsto pela análise de campo médio [veja equação (5.11)]. A figura 5.3 também confirma o período curto de relaxação. Mesmo para sistemas grandes ($N = 1.28 \times 10^5$), a densidade QE fica aproximadamente constante para $t \gtrsim 5 \times 10^4$.

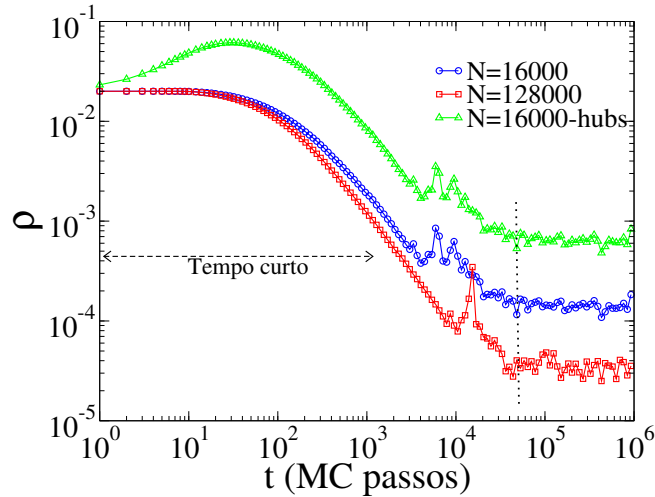


Figura 5.3: Densidade QE versus tempo. Os parâmetros fixos do modelo são $\gamma = 2.25$, $L = 250$ e $\alpha = 0.1$.

Na figura 5.4(a) mostramos os histogramas das distribuições QE para sistemas de tamanhos fixos N e L , variando a taxa de criação λ próximo ao ponto crítico $\lambda = 1.1047(2)$. A distribuição muda de um decaimento exponencial no regime subcrítico para uma distribuição normal (Gaussiana) na fase supercrítica, representada por uma parábola no gráfico semi-logarítmico. A distribuição normal no regime supercrítico pode ser explicada pelo Teorema do Limite Central [36, 37, 53]. Para simplificar, vamos supor que o estado de um sítio qualquer é uma variável aleatória que pode assumir os valores $\sigma = 1$ com probabilidade ρ e $\sigma = 0$ com probabilidade $1 - \rho$, em que ρ é a densidade global do sistema. O Teorema do Limite Central afirma que a soma de K variáveis aleatórias independentes e com a mesma distribuição de probabilidade, com variância b e média a finitas converge para uma distribuição gaussiana com média Ka e variância Kb . Este argumento é válido se $Ka \gg 1$ no limite em que $K \rightarrow \infty$, o que ocorre apenas na fase supercrítica. Na fase subcrítica, o decaimento exponencial significa que apenas os estados com poucas partículas são observados [matematicamente da ordem de $n \sim \mathcal{O}(1)$] e a densidade decai com $\rho \sim N^{-1}$. A distribuição QE no ponto crítico é investigada separadamente na figura 5.4(b). As distribuições decaem exponencialmente para um pequeno número de partículas enquanto uma cauda Gaussiana é observada para densidades altas, como mostrado na inserção da figura 5.4(b). Estes comportamentos estão de acordo com os limites assintóticos da equação (5.27).

Outro efeito de tamanho finito é mostrado na figura 5.5 na qual mostramos a distribuição QE supercrítica para diferentes tamanhos da rede. As distribuições são reescaladas por um fator \sqrt{N} . As distribuições para tamanhos pequenos ($N < 8000$) colapsam em uma única curva o

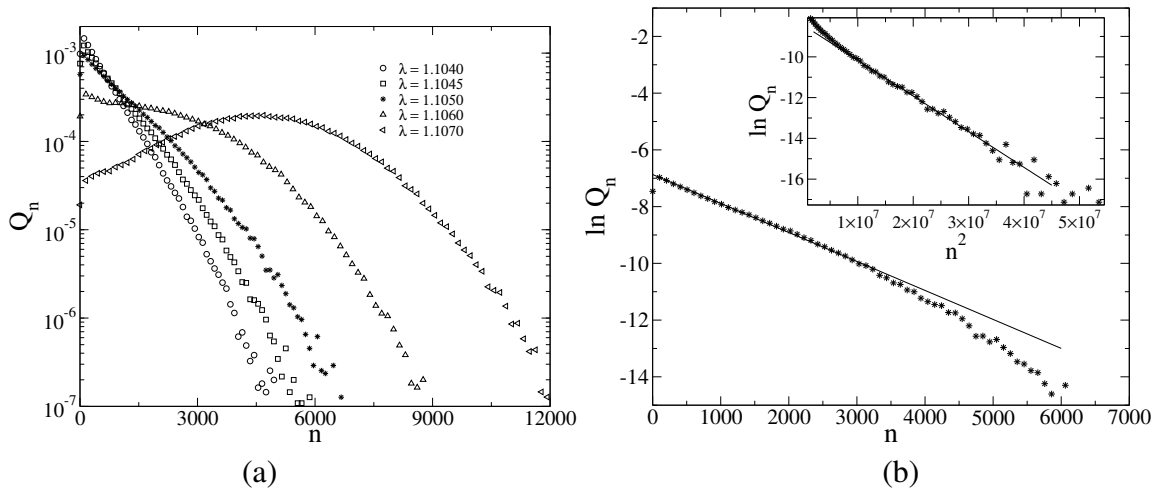


Figura 5.4: (a) Distribuição de probabilidade quase-estacionária do número total de partículas para diferentes taxas de criação, e taxa de troca $\alpha = 0.1$. O expoente é $\gamma = 2.25$. O tamanho da rede é $N = 32 \times 10^3$ e as cadeias unidimensionais têm $L = 250$ sítios. (b) Comportamento assintótico da distribuição QE na criticalidade. O gráfico principal mostra o decaimento exponencial enquanto a inserção mostra a cauda Gaussiana.

que significa que elas possuem, aproximadamente, a forma $Q_n \approx f(n/\sqrt{N})/\sqrt{N}$ e, conseqüentemente, $\rho \sim N^{-0.5}$. Esse comportamento corresponde a abordagem de campo médio na criticalidade em redes homogêneas, pois o fator g é constante. Isso ilustra como um pseudo ponto crítico pode ser encontrado nesse modelo mesmo com 8000×250 sítios. Quando aumentamos o tamanho da rede, a distribuição muda para uma Gaussiana, como esperado no regime supercrítico.

A análise de campo médio fornece que o fator $g = \langle k^2 \rangle / \langle k \rangle^2$ é uma quantidade relevante no comportamento crítico. Esse fator varia de uma configuração de rede para outra por causa da aleatoriedade do sistema. O desvio relativo $\sigma_g^2 / \langle g \rangle^2 = (\langle g^2 \rangle - \langle g \rangle^2) / \langle g \rangle^2$ quantifica a intensidade das flutuações em que $\langle \dots \rangle$ representa a média sobre todas as configurações de rede. Pode-se mostrar que para uma rede UCM com $k_c = N^{1/2}$ esta quantidade escala com $\sigma_g^2 / \langle g \rangle^2 \sim N^{\gamma-1}$ para $2 < \gamma < 3$ e tende a zero para $\gamma > 3$ (veja referência [48] para detalhes). Portanto, as flutuações relativas aumentam com o tamanho do sistema para redes sem escala ($2 < \gamma < 3$), o que poderia afetar as distribuições QE. Na figura 5.6 mostramos a distribuição QE para uma rede com $N = 64000$ nós e expoente $\gamma = 2.25$. Cada curva corresponde a uma média sobre um grupo de 20 configurações de rede. A distribuição não varia significativamente de um grupo para outro, logo uma média sobre 100 configurações, que utilizamos nas simulações QE, é suficiente para as nossas análises.

A figura 5.7 mostra a densidade QE para a taxa de troca $\alpha = 0.1$. As curvas para os maiores valores de λ tendem a encurvar para cima enquanto para os valores menores de λ , elas encurvam para baixo, como esperado na transição do regime super para o subcrítico. No entanto, as curvaturas são muito próximas em torno da transição, dificultando a determinação do ponto crítico. Para determinar o ponto crítico de uma maneira sistemática fizemos uma regressão com

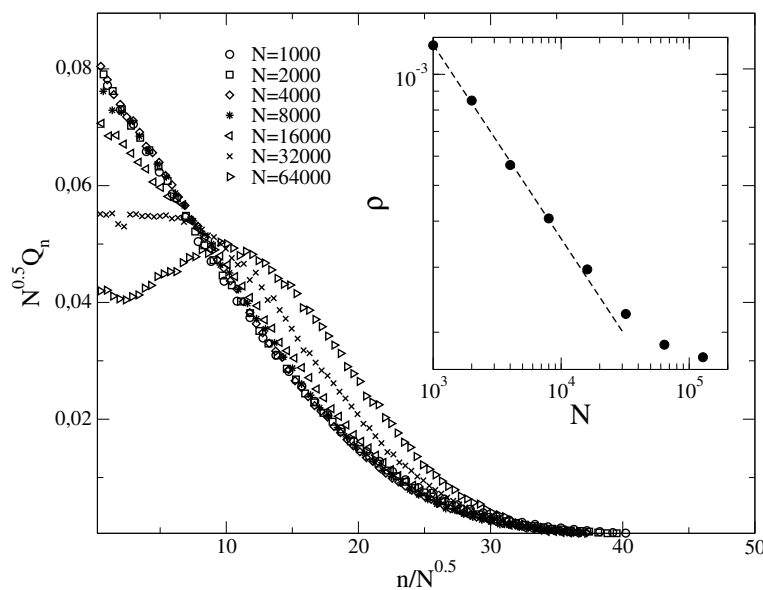


Figura 5.5: Distribuição QE para diferentes tamanhos da rede na fase supercrítica com taxas de criação e troca $\lambda = 0.7890$ e $\alpha = 0.5$, respectivamente. O expoente da distribuição de conectividade é $\gamma = 2.25$. O gráfico no interior mostra a densidade QE como uma função do tamanho da rede (símbolos) e a linha pontilhada é a regressão em lei de potência com expoente $\gamma = -0.52$.

um polinômio de segunda ordem e nos gráfico de $\ln \rho$ versus $\ln N$ analisamos o coeficiente do termo quadrático, C , que tem o mesmo sinal que a curvatura. Associamos uma curvatura nula ao ponto crítico. Esse critério de curvatura nula permite que calculemos o ponto crítico com uma incerteza menor que 0.02%, como mostramos na tabela 5.1. A taxa crítica diminui com o aumento da migração α e aumenta com o expoente γ . A dependência com α implica que quanto maior a migração, mais facilmente as partículas difundem na rede, e isso favorece a atividade no sistema. A dependência com γ mostra que a heterogeneidade da rede contribui para manter o estado estacionário ativo.

Tabela 5.1: Estimativa dos pontos críticos. Os números entre parênteses representam a incerteza no último dígito. O resultado de campo médio foi incluído para comparação.

$\gamma \backslash \alpha$	0.05	0.10	0.50	MF
2.25	1.2352(3)	1.1047(3)	0.7880(3)	1/2
2.75	—	1.1075(2)	—	1/2
3.50	—	1.1114(1)	—	1/2

A pequena incerteza na taxa crítica ainda causa uma grande incerteza na estimativa dos expoentes. Mesmo para simulações com o dobro de passos de tempo essa incerteza na determinação do expoentes críticos ainda permanece. As estimativas dos expoentes críticos e suas respectivas incertezas foram feitas utilizando uma média ponderada das regressões em lei de potência obtidas das curvas que apresentaram as menores curvaturas sendo uma positiva e outra

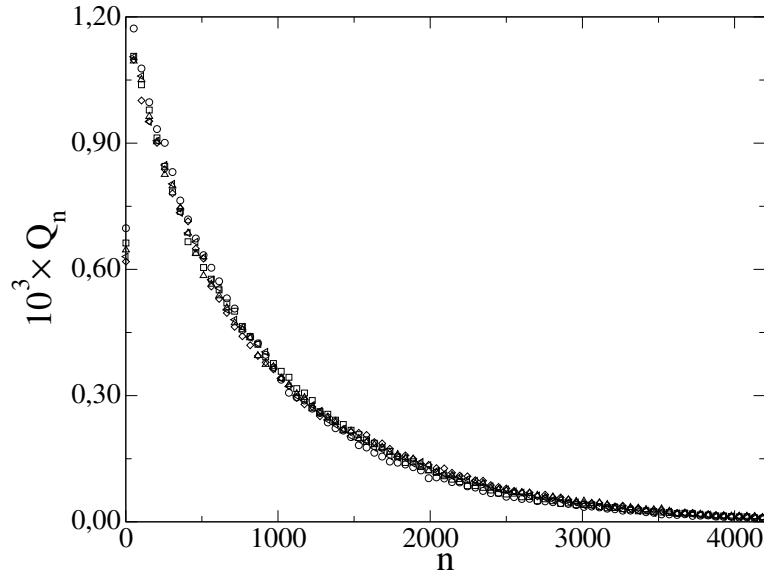


Figura 5.6: Distribuição QE para uma rede heterogênea com $N = 64000$ nós e expoente $\gamma = 2.25$. As taxas de criação e troca são $\lambda = 1.1045$ e $\alpha = 0.1$. Cada símbolo representa uma média sobre 20 configurações de rede.

negativa. Quanto menor a curvatura, mais próximo do ponto crítico, então o peso utilizado foi $1/|C|$. Os expoentes da lei de potência $\rho \sim N^{-\hat{\nu}}$, determinados utilizando esse procedimento, estão na tabela 5.2. Considerando as incertezas, não é possível determinar se os expoentes dependem ou não da taxa de migração α e tampouco do expoente γ .

Tabela 5.2: Estimativa do expoente crítico $\hat{\nu}$ definido por $\rho \sim N^{-\hat{\nu}}$. Os números entre parênteses representam as incertezas no último dígito. Os resultados de campo médio correspondentes ao limite assintótico (MF1) e aos expoentes efetivos com correções de tamanho finito (MF2) também estão incluídos.

$\gamma \backslash \alpha$	0.05	0.10	0.50	MF1	MF2
2.25	0.65(5)	0.64(3)	0.67(6)	0.6875	0.645
2.75	–	0.59(1)	–	0.5625	0.590
3.50	–	0.58(4)	–	1/2	0.528

A aproximação de campo médio fornece $\rho \sim (gN)^{-1/2}$ e, no limite assintótico, $\rho \sim N^{-\hat{\nu}}$ em que $\hat{\nu} = \max[(5 - \gamma)/4, 1/2]$. Os expoentes obtidos através das simulações numéricas concordam com esta expressão somente se considerarmos os erros que, provavelmente, estão superestimados. Esta concordância pode melhorar se considerarmos as correções para os efeitos de tamanho finito relacionadas ao fator g . É possível mostrar que $\rho \sim (gN)^{-1/2}$ se torna [40]

$$\ln \rho = \text{const.} - \hat{\nu} \ln N + \frac{1}{2} \frac{m^{3-\gamma}}{N^{\frac{3-\gamma}{2}}} - \frac{m^{\gamma-2}}{N^{\frac{\gamma-2}{2}}}. \quad (5.32)$$

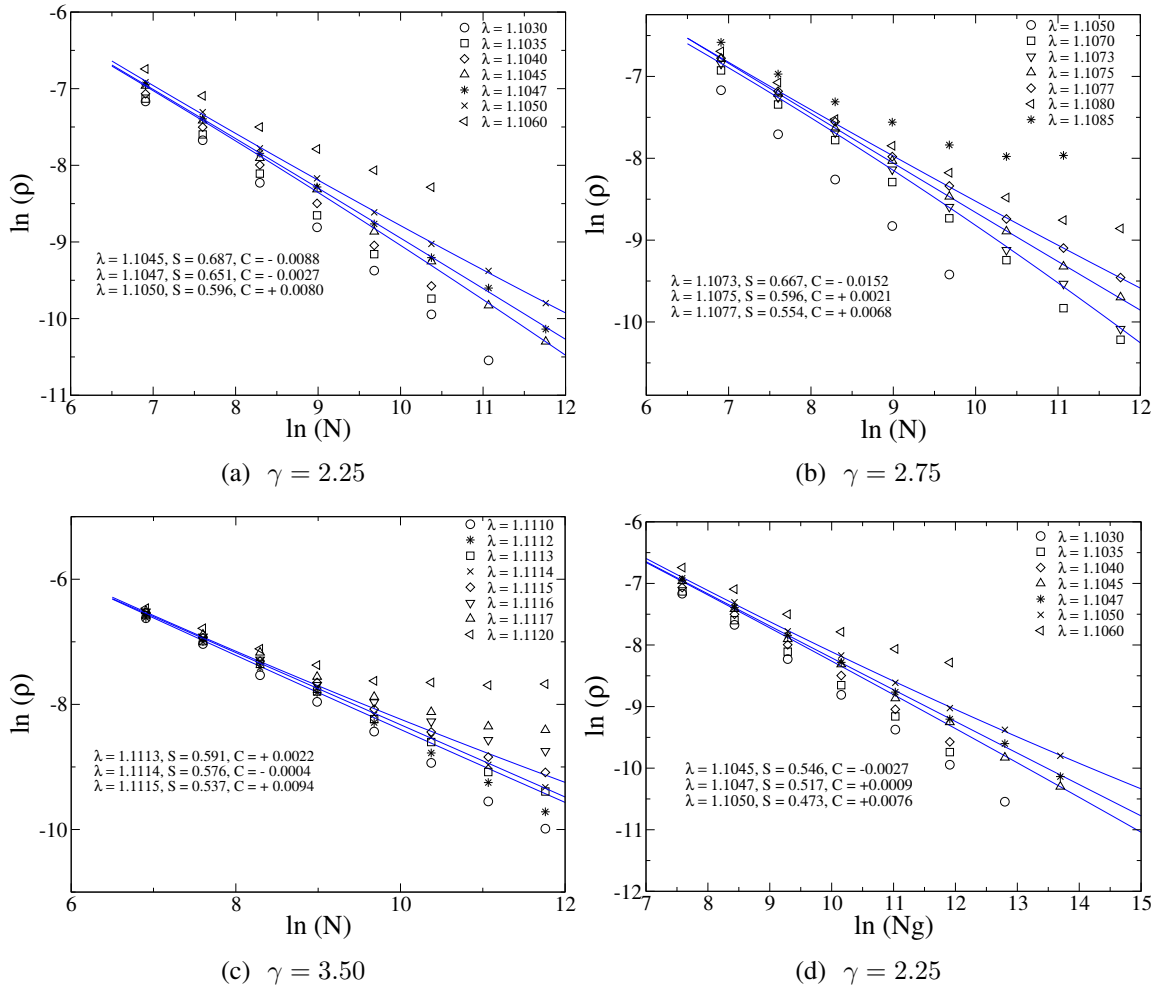


Figura 5.7: (a)-(c) A densidade quase-estacionária em função do tamanho do sistema próximo ao ponto crítico para uma taxa de troca $\alpha = 0.1$. Os expoentes γ estão indicados em cada figura. Símbolos representam as simulações e as linhas representam as regressões polinômias usadas para estimar a curvatura. Cada figura também contém a curvatura estimada C e a inclinação S da regressão em lei de potência. Figura (d) mostra a densidade de partículas em função de (gN) .

A equação (5.32) mostra que a correção pode ser relevante, particularmente para $\gamma \rightarrow 3$ e $\gamma \rightarrow 2$. Os efeitos de tamanho finito podem ser considerados na análise de campo médio resolvendo a equação (5.25) numericamente. A receita numérica para fazê-lo é dada, com detalhes, na referência [51]. Basicamente, essa receita para iterar a relação de recorrência é a seguinte: começamos com um chute inicial para \bar{Q}_1^0 e usamos a equação (5.25) para calcular os correspondentes \bar{Q}_n^0 e também o valor de $S = \sum_{n=1}^N \bar{Q}_n^0$. O procedimento é repetido, mas agora usando $\bar{Q}_n^{j+1} = \bar{Q}_n^j / S$ como uma nova tentativa. Depois de poucos passos de tempo, S converge para a unidade e cada ponto \bar{Q}_n representa a distribuição QE. Soluções numéricas são mostradas na figura 5.3 e os resultados dos expoentes encontrados com uma regressão em lei de potência são apresentado na tabela 5.2. Uma boa concordância é obtida para $\gamma = 2.25$ e $\gamma = 2.75$ mas o resultado para $g = 3.5$ ainda diverge. Uma análise mais direta consiste em analisar as curvas $\ln \rho$ versus $\ln(gN)$, diretamente, como mostrado na figura 5.7(d). A teoria de campo médio prediz

uma inclinação de $-1/2$ na criticalidade. Os resultados desta análise são apresentados na tabela 5.3. Em todos os casos temos um cenário consistente com a independência entre os expoentes e a taxa de migração α e o expoente γ , em concordância com a teoria de campo médio. No entanto, os expoentes são ligeiramente maiores que $1/2$ o que pode ser o indício de duas coisas: a teoria de campo médio não é exata e as simulações não são precisas o suficiente para obter os expoentes corretos.

Tabela 5.3: Estimativa dos expoentes obtidos com uma regressão em lei de potência de ρ versus gN . Os números entre parênteses representam as incertezas no último dígito. Os resultados de campo médio (MF) também foram incluídos.

$\gamma \backslash \alpha$	0.05	0.10	0.50	MF
2.25	0.53(6)	0.52(5)	0.53(4)	1/2
2.75	–	0.51(1)	–	1/2
3.50	–	0.52(5)	–	1/2

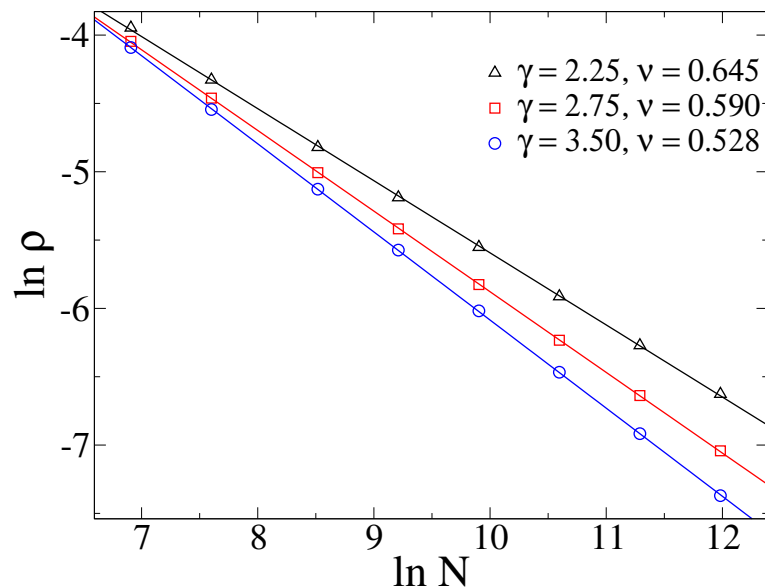


Figura 5.8: Densidade QE em função do tamanho da rede obtida através da solução numérica da equação (5.25). Símbolos são as simulações numéricas e as linhas são as regressões em lei de potência.

A figura 5.9 mostra o tempo característico QE em função do tamanho reescalado da rede N/g . Essas curvas foram obtidas através de simulações e apresentam inclinação mais baixa do que a prevista pela teoria de campo médio. A teoria de campo médio prevê $\tau \sim (N/g)^{1/2}$. A regressão em lei de potência fornece 0.39, 0.40 e 0.34 para $\gamma = 2.25, 2.75$ e 3.50 , respectivamente. O tempo QE foi determinado usando a relação $\tau = 1/\bar{Q}_1$ como discutido na seção 3.3. No entanto esta quantidade é relativamente sensível porque o sistema tem que visitar o estado absorvente um grande número de vezes para garantir uma boa estatística, além de ser

necessário uma boa estimativa para o ponto crítico. Então, outra procedimento que adotamos foi medir o tempo de vida entre duas visitas consecutivas ao estado absorvente porém, ainda assim, obtivemos o mesmo resultado mostrado na figura 5.9, que não concorda com a teoria de campo médio.

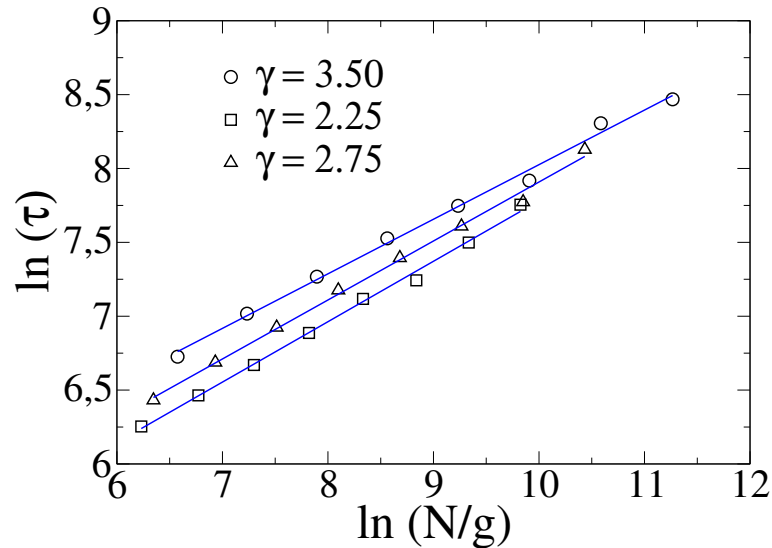


Figura 5.9: Tempo característico da distribuição QE na criticalidade para a taxa de troca $\alpha = 0.1$. As taxas de criação são $\lambda = 1.1047$ ($\gamma = 2.25$), $\lambda = 1.1075$ ($\gamma = 2.75$), e $\lambda = 1.1114$ ($\gamma = 3.50$). Símbolos são simulações e linhas, regressões em lei de potência.

Devido à propriedade de mundo pequeno, não faz sentido falar em correlações espaciais em redes complexas porque a vizinhança de um dado sítio efetivamente abrange toda a rede. No entanto, podemos pensar em correlações dinâmicas. A possível concordância entre os expoentes observados nas simulações e os expoentes obtidos via teoria de campo médio é, a princípio, algo surpreendente uma vez que a estrutura congelada de tais redes causa o aparecimento de correlações. Para explicar melhor a ideia de correlações, suponha um processo RD em uma rede arbitrária em que um dado nó j é proibido de ficar vazio devido à uma regra adicional na dinâmica do sistema. Consequentemente, um nó i conectado ao nó j tem uma chance muito maior de ser infectado do que outro nó idêntico a ele, mas que não esteja conectado à j . Se a condição congelada é substituída por um substrato *annealed*, em que todas as conexões são redirecionadas a uma taxa maior do que as taxas envolvidas no processo RD, a memória do estado de um nó j é rapidamente perdida e nenhuma correlação dinâmica surge no processo. A teoria de campo médio heterogênea assume que uma quantidade relevante é o grau do nó independentemente do nó com o qual ele está conectado. Em outras palavras, qualquer tipo de correlação dinâmica é irrelevante. No nosso processo de reação-difusão, a estrutura interna das metapopulações deveria implicar na existência de correlações dinâmicas e espaciais. Por exemplo, o processo de contato, um modelo muito simples de reação-difusão, em redes heterogêneas congeladas (*quenched*) e *annealed*, apresenta expoentes críticos distintos.

Note que o ponto crítico depende tanto da heterogeneidade quanto da taxa de migração

enquanto a aproximação de campo médio fornece $\lambda_c = 1/2$. Isto é a prova de que as correlações estão presentes. Mas os expoentes críticos sugerem que as correlações não são fortes o suficiente para mudar os expoentes críticos. A migração das partículas é, possivelmente, um mecanismo envolvido na atenuação das correlações dinâmicas. De fato, as correlações devem desaparecer para valores altos da taxa de migração. A taxa crítica que se aproxima do valor de campo médio confirma essa conclusão.

5.4 Detalhes da teoria de campo médio

Esta seção tem como objetivo mostrar alguns detalhes técnicos sobre os cálculos de campo médio. A sua leitura é opcional e não compromete o entendimento do texto principal. Na primeira parte, demonstramos que a matriz $C_{kk'}$ tem um autovalor único $c = 1$ e autovetor $v_k = k$. Na próxima subseção mostramos os limites assintóticos da função hipergeométrica de Gauss e os passos necessários para chegar à expressão (5.16). E no final detalhamos algumas passagens extras no cálculo dos expoentes críticos.

5.4.1 Determinação do autovetor de $C_{kk'}$

Queremos provar que a matriz $C_{kk'} = kP(k|k')/k'$ tem um autovalor único $c = 1$ que corresponde ao autovetor $v_k = k$. A equação de autovalor é dada por:

$$\sum_{k'} C_{kk'} v_{k'} = c v_k \Rightarrow \sum_{k'} \frac{kP(k|k')}{k'} v_{k'} = c v_k. \quad (5.33)$$

Multiplicando a equação acima por $P(k)$ e somando em k , temos:

$$\sum_{kk'} \frac{kP(k|k')P(k)v_{k'}}{k'} = c \sum_k P(k)v_k \Rightarrow c = \frac{\sum_{kk'} kP(k|k')P(k)v_{k'}/k'}{\sum_k P(k)v_k} \quad (5.34)$$

Usando novamente a equação do balanceamento detalhado: $k'P(k|k')P(k') = kP(k'|k)P(k)$, obtemos:

$$c = \frac{\sum_{kk'} P(k'|k)P(k')v_{k'}}{\sum_k P(k)v_k} = \frac{\sum_{k'} [\sum_k P(k|k')] v_{k'} P(k')}{\sum_k P(k)v_k} = 1 \quad (5.35)$$

desde que $\sum_k P(k|k') = 1$. Para checar que $v_k = k$ satisfaz a equação de autovalor é direto. A unicidade da solução é garantida pelo teorema de Perron-Frobenius, que estabelece que o maior autovalor de uma matriz não negativa e irredutível é positivo e único [54]. A matriz $C_{kk'}$ possui essas duas propriedades [55].

5.4.2 Limites assintóticos da função hipergeométrica

De acordo com [46]:

$$\int_a^\infty \frac{x^{\mu-1}}{(1+\beta x)} dx = \frac{a^{\mu-1}}{\beta(\mu-1)} F(1, 1-\mu, 2-\mu; -1/\beta a) \quad \text{Re} < 1 \quad (5.36)$$

em que $F(a, b, c; z)$ é a função hipergeométrica de Gauss. No caso da equação (5.13), temos que $\mu - 1 = \gamma - 2$ e como $\mu < 1 \rightarrow \gamma > 2$.

As expansões assintóticas para essa função são [46]:

$$F(a, b, c; z) = 1 + \frac{ab}{c} z + \mathcal{O}(2) \quad |z| \ll 1 \quad (5.37)$$

$$F(a, b, c; z) = \frac{\Gamma(b-a)\Gamma(c)}{\Gamma(b)\Gamma(c-a)} (-z)^{-a} + \frac{\Gamma(a-b)\Gamma(c)}{\Gamma(a)\Gamma(c-b)} (-z)^{-b} + \dots \quad z \rightarrow \infty \quad (5.38)$$

Podemos reescrever a integral (5.13) da seguinte maneira:

$$I = \beta \int_m^{k_c} \frac{k^{2-\gamma}}{(1+\beta k)} dk = \beta \int_m^\infty \frac{k^{2-\gamma}}{(1+\beta k)} dk - \beta \int_{k_c}^\infty \frac{k^{2-\gamma}}{(1+\beta k)} dk \quad (5.39)$$

$$I = \frac{m^{2-\gamma}}{\gamma-2} F(1, \gamma-2, \gamma-1; -1/\beta m) - \frac{k_c^{2-\gamma}}{\gamma-2} F(1, \gamma-2, \gamma-1; -1/\beta k_c) \quad (5.40)$$

Note que $\beta m \ll 1$ pois $\rho \approx 0$, então o primeiro termo da expressão acima pode ser expandido usando (5.38). Nesta expansão, o termo que predomina é $\min(a, b)$. No nosso caso, temos $a = 1$ e $b = \gamma - 2$. Isto significa que, para $\gamma < 3$ o termo que predomina é $b = \gamma - 2$ e para $\gamma > 3$ o termo predominante é $a = 1$, de tal modo que:

$$F(1, \gamma-2, \gamma-1; -1/\beta m) = \Gamma(3-\gamma)\Gamma(\gamma-1)(\beta m)^{\gamma-2}, \quad \gamma < 3 \quad (5.41)$$

e

$$F(1, \gamma-2, \gamma-1; -1/\beta m) = \frac{\gamma-2}{\gamma-3} \beta m, \quad \gamma > 3 \quad (5.42)$$

em que as relações $\Gamma(1) = 1$ e $\Gamma(z) = (z-1)\Gamma(z-1)$ foram usadas.

De maneira análoga, se $\beta k_c \ll 1$, o segundo termo da integral I também pode ser expandido usando a expressão (5.38), mas se $\beta k_c \gg 1$, devemos usar a expansão (5.37) que fornece $F(1, \gamma-2, \gamma-1; -1/\beta k_c) \approx 1$.

No limite de redes infinitas $k_c \rightarrow \infty$. Como o segundo termo da integral I decai com $k_c^{2-\gamma}$

e $\gamma > 2$, esse termo pode ser desprezado, de tal modo que encontramos a solução:

$$\Theta = \begin{cases} \langle k \rangle \Gamma(3 - \gamma) \Gamma(\gamma - 1) (m \varrho)^{\gamma-2} & , \quad 2 < \gamma < 3 \\ \langle k^2 \rangle \varrho & , \quad \gamma > 3 \end{cases} . \quad (5.43)$$

Relembrando que para $k_c \rightarrow \infty$ temos

$$\langle k \rangle = (\gamma - 1) m^{\gamma-1} \int_m^{k_c} k k^{-\gamma} dk \approx \frac{\gamma - 1}{\gamma - 2} m, \quad \gamma > 2 \quad (5.44)$$

e

$$\langle k^2 \rangle = (\gamma - 1) m^{\gamma-1} \int_m^{k_c} k^2 k^{-\gamma} dk \approx \begin{cases} \frac{\gamma-1}{3-\gamma} m^{\gamma-1} k_c^{3-\gamma} & , \quad 2 < \gamma < 3 \\ \frac{\gamma-1}{\gamma-3} m^2 & , \quad \gamma > 3. \end{cases} \quad (5.45)$$

5.4.3 Expoentes críticos

Vamos mostrar que a densidade crítica escala com $\rho \sim \Delta^\beta$ em que $\beta = \max[1, 1/\gamma - 1]$ e $\rho \sim t^{-\delta}$ em que $\delta = \beta$.

Podemos obter o termo $\langle \rho_k^2 \rangle$ da equação (5.6) multiplicando a equação (5.10) por ρ_k e mantendo os termos até segunda ordem. No estado estacionário obtemos:

$$z \Delta \rho_k^2 + \frac{\alpha k \rho \rho_k}{\langle k \rangle} - \alpha \rho_k^2 = 0. \quad (5.46)$$

multiplicando a equação acima por $P(k)$ e somando sobre todos os valores de k , encontramos

$$z \Delta \langle \rho_k^2 \rangle + \frac{\alpha \rho}{\langle k \rangle} \underbrace{\langle k \rho_k \rangle}_\Theta - \alpha \langle \rho_k^2 \rangle = 0. \quad (5.47)$$

que nos leva a

$$\langle \rho_k^2 \rangle \simeq \frac{\rho \Theta}{\langle k \rangle (1 - z \Delta / \alpha)}, \quad (5.48)$$

que, substituindo na equação (5.6) nos fornece a seguinte expressão para Θ

$$\Theta \simeq \langle k \rangle \Delta / \lambda, \quad (5.49)$$

na qual a aproximação $z \Delta / \alpha \ll 1$ foi utilizada.

Usando o comportamento assintótico de Θ dado pela equação (5.16), encontramos

$$\frac{\Theta}{\langle k \rangle} \simeq \frac{\Delta}{\lambda} \simeq \rho^{\gamma-2} \Rightarrow \rho \sim \Delta^{1/\gamma-2}, \quad 2 < \gamma < 3, \quad (5.50)$$

e

$$\frac{\Theta}{\langle k \rangle} \simeq \frac{\Delta}{\lambda} \simeq \rho \Rightarrow \rho \sim \Delta^1, \quad \gamma > 3, \quad (5.51)$$

ou seja, $\rho \sim \Delta^\beta$, com o expoente crítico

$$\beta = \max \left[1, \frac{1}{\gamma - 2} \right]. \quad (5.52)$$

No ponto crítico ($\lambda = \lambda_c = 1/z$), podemos escrever a equação (5.6) como:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\langle \rho^2 \rangle \simeq -\frac{\rho\Theta}{\langle k \rangle}. \quad (5.53)$$

Para $\gamma > 3$, no limite assintótico, $\Theta \simeq \langle k^2 \rangle \rho$, então a equação acima se torna:

$$\frac{d\rho}{dt} \simeq -g\rho^2 \quad (5.54)$$

em que $g = \langle k^2 \rangle / \langle k \rangle^2$. Resolvendo esta equação diferencial, obtemos:

$$\rho \sim (gt)^{-1}, \quad (5.55)$$

e, no intervalo de $2 < \gamma < 3$, também no limite assintótico, $\Theta \simeq c_\gamma \rho^{\gamma-2}$, em que c_γ é uma constante que depende apenas de γ . Assim, a equação (5.53) se torna:

$$\frac{d\rho}{dt} = -c_\gamma \rho^{\gamma-2} \quad (5.56)$$

e o resultado desta equação diferencial é:

$$\rho \sim t^{-1/\gamma-2}, \quad (5.57)$$

Desse modo, podemos concluir que $\delta = \beta = \max[1, 1/\gamma - 2]$.

Vamos agora mostrar que perto do ponto crítico, a densidade se aproxima do valor assintótico com $\rho(t) = \rho_s + \text{const} \times \exp(-t/\tau)$ em que o tempo característico diverge $\tau = (zb\Delta)^{-1} \sim \Delta^{-\nu_\parallel}$ com um expoente $\nu_\parallel = 1$. Retornando a aproximação de um sítio, considerando $\rho = \rho_s + f(t)$, em que $f \ll 1$. E usando a expressão geral para Θ :

$$\frac{\Theta}{\langle k \rangle} \approx \frac{\Delta}{\lambda} \rightarrow \Theta = \Lambda_\gamma \rho^b \quad (5.58)$$

em que Λ_γ é uma constante que depende apenas de γ e $b = \min(1, \gamma - 2)$. A expressão (5.6) se torna:

$$\frac{df}{dt} = z\Delta(\rho_s + f) - \frac{z\lambda}{\langle k \rangle}(\rho_s + f)\Lambda_\gamma(\rho_s + f)^b, \quad (5.59)$$

em que a relação $\langle \rho_k^2 \rangle \simeq \rho \Theta / \langle k \rangle$ foi usada. Fazendo a aproximação $(\rho_s + f)^{b+1} \approx \rho_s^{b+1} [1 + (b+1)f\rho_s^{-1}]$ e lembrando que $\Theta_s = \Lambda_\gamma \rho_s^b$ e $\Theta_s / \langle k \rangle = \Delta / \lambda$, no ponto crítico, obtemos:

$$\frac{df}{dt} = zb\Delta f \rightarrow f(t) \sim \exp(-zb\Delta t) \rightarrow f(t) \sim e^{-t/\tau} \quad (5.60)$$

e, da lei de escala $\tau \sim |\Delta|^{-\nu_{||}}$, tiramos que $\nu_{||} = 1$.

Capítulo 6

Considerações Finais

Nesta dissertação estudamos a transição de fases em sistemas com estados absorventes dando ênfase a um processo de reação-difusão em metapopulações estruturadas. Primeiramente, fizemos uma revisão sobre redes complexas e introduzimos o modelo de configurações não correlacionado (UCM) [19] que foi utilizado no nosso modelo para conectar as metapopulações. Depois, estudamos a transição de fases para estados absorventes apresentando um processo de reação-difusão em uma cadeia unidimensional [2, 37], juntamente com a apresentação do método quase-estacionário proposto por Oliveira e Dickman [6], ferramenta fundamental utilizada nas simulações computacionais. Em seguida, mostramos um estudo sobre a criticalidade em um processo de reação-difusão em redes heterogêneas [3, 5, 4]. Finalmente, apresentamos nosso modelo para o estudo de transição de fases em um processo RD em metapopulações estruturadas. A análise da criticalidade deste modelo foi feita através da teoria de campo médio e de simulações numéricas.

Observamos que a densidade QE apresenta um período curto de relaxação que é muito menor que o tempo de relaxação para o mesmo processo em reticulados regulares, devido ao efeito de mundo pequeno. Constatamos que a distribuição QE muda de um decaimento exponencial para uma distribuição Gaussiana na transição da fase sub para a fase supercrítica, o que está de acordo com os comportamentos assintóticos da distribuição QE prevista pela análise de campo médio. Também analisamos a influência da taxa de migração α e do expoente γ da distribuição de conectividade $P(k) \sim k^{-\gamma}$ da rede, na determinação do ponto crítico. Observamos que λ_c diminui com o aumento de α e aumenta com o aumento de γ . Isso significa que, tanto a migração, quanto a heterogeneidade da rede contribuem para manter o estado estacionário ativo.

Conseguimos estimar o ponto crítico com boa precisão, cerca de 0.02% de incerteza, mas mesmo as simulações com 2×10^6 passos de Monte Carlos não foram suficientes para diminuir a incerteza na estimativa dos expoentes críticos, que é cerca de 7%, o que nos impede de tirar conclusões definitivas sobre a criticalidade do modelo. Porém, há indícios de que as simulações

estão de acordo com a teoria de campo médio. Apesar de haver correlações espaciais e dinâmicas nas metapopulações estruturadas, pois a taxa crítica λ_c varia com a taxa de migração e com a heterogeneidade da rede, essas correlações não seriam fortes o suficiente para mudar os expoentes críticos. Um fator que pode ser responsável por isso é a aleatoriedade no processo de migração que causaria o enfraquecimento das correlações dinâmicas. Isso é plausível porque à medida em que se aumenta o valor de α , λ_c se aproxima do valor previsto pela teoria de campo médio. No trabalho de Ferreira e Martins [17], eles também estudaram a criticalidade de um modelo com estado absorvente em metapopulações com estrutura interna e mostraram que os valores dos expoentes críticos obtidos via simulações são diferentes dos expoentes previstos pela teoria de campo médio. Naquele trabalho, o processo de migração, ocorre preferencialmente para os nós mais conectados e, portanto, a nossa teoria de campo médio não se aplica.

Como perspectivas deste trabalho, pretendemos analisar a dependência da taxa crítica em função do tamanho L das cadeias unidimensionais bem como em função da estrutura espacial das metapopulações. Também é do nosso interesse, verificar os resultados desse modelos em redes *annealed*, na qual não há correlação dinâmica e, por isso, espera-se que as simulações aproximem-se ainda mais da teoria de campo médio. Além disso, esse trabalho será a base do estudo de outros problemas interessantes como, por exemplo, modelos mais reais de propagação de epidemias e implementação de estratégias de imunização na fase endêmica.

Referências Bibliográficas

- [1] HENKEL M.; Hinrichsen H.; Lübeck S., *Non-equilibrium phase transition: Absorbing Phase Transitions*. Springer, Netherlands, 2008.
- [2] MARRO J.; DICKMAN R., *Nonequilibrium Phase Transition in Lattice Models*. Cambridge: Cambridge University Press, 1999.
- [3] CASTELLANO C.; PASTOR-SATORRAS R., *Non-Mean-Field Behavior of the Contact Process on Scale-Free Networks*, Phys. Rev. Lett. **96**, 038701, 2006.
- [4] PASTOR-SATORRAS R.; VESPIGNANI A., *Epidemic spreading in scale-free networks*, Phys. Rev. Lett. **86**, 3200-3203, 2001.
- [5] PASTOR-SATORRAS R.; VESPIGNANI A., *Epidemic dynamics and endemic states in complex networks*, Phys. Rev. E **63**, 066117, 2001.
- [6] OLIVEIRA M. M.; DICKMAN R., *How to simulate the quasistationary state*, Phys. Rev. E. **71**, 016129, 2005.
- [7] DOROGOVITSEV S. N.; GOLTSEV A. V.; MENDES J. F. F., *Critical phenomena in complex networks*, Rev. Mod. Phys. **80**, 1275, 2008.
- [8] KOZMA B.; HASTINGS M. B.; KORNISS G., *Diffusion Processes on Power-Law Small-World networks*, Phys. Rev. Lett. **95**, 018701, 2005.
- [9] SOOD V.; REDNER S., *Voter model on heterogeneous graphs*, Phys. Rev. Lett. **94**, 178701, 2005.
- [10] COLIZZA V. PASTOR-SATORRAS R.; VESPIGNANI A., *Reaction-diffusion processes and metapopulation models in heterogeneous networks*. Nature, 2007.
- [11] BARRAT A.; BARTHÉLEMY M.; VESPIGNANI A., *Dynamical process on complex networks*, Cambridge: Cambridge University Press, 2008.
- [12] BOGUÑA M.; PASTOR-SATORRAS R., *Epidemic spreading in correlated complex networks*. Phys. Rev. E **66**, 047104, 2002.

- [13] COLIZZA V.; VESPIGNANI A., *Epidemic modeling in metapopulation systems with heterogeneous coupling pattern: Theory and simulations*. J. Theor. Bio. **251**, 2007.
- [14] AJELLI M. et. al., *Comparing large-scale computational approaches to epidemic modeling: Agente-based versus structured metapopulations models*. BMC Infection Diseases, **10**, 190, 2010.
- [15] BALCAN D. et. al., *Multiscale mobility networks and the spatial spreading of infectious diseases*, PNAS, **51**, 106, 2009.
- [16] COLIZZA V.; VESPIGNANI A., *Invasion threshold in heterogeneous metapopulation networks*, Phys. Rev. Lett. **99**, 148701, 2007.
- [17] FERREIRA S. C.; MARTINS M. L., *Critical Behavior of the contact process in a multi-scale network*. Phys. Rev. E **76**, 036112, 2007.
- [18] SILVA S. L.; FERREIRA J. A.; MARTINS M. L., *Epidemic Spreading in a Scale-Free Network of regular Lattices*. Physica A **377**, 689, 2007.
- [19] CATANZARO M. BOGUÑA M.; PASTOR-SATORRAS, *Generation of uncorrelated random scale-free networks*. Phys. Rev. E **71**, 027103, 2005.
- [20] DOROGOVTSSEV S. N; MENDES, J. F. F., *The shortest path to complex networks*. arXiv:cond-mat/0404593v4, 2004.
- [21] CALDARELLI G., *Scale-free Networks - complex webs in nature and technology*, Oxford: Oxford University Press, 2007.
- [22] BARABÁSI A. L; ALBERT R., *Statistical mechanics of complex networks*. Rev. Mod. Phys **74**, 47, 2002.
- [23] PASTOR-SATORRAS R.; VESPIGNANI A., *Evolution and Structure of the Internet: A Statistical Physics Approach*, Cambridge: Cambridge University Press, 2004.
- [24] NEWMAN. M. E. J., *Assortative Mixing in Networks*. Phys. Rev. Lett. **89**, 208701, 2002.
- [25] PASTOR-SATORRAS R.; VAZQUEZ A.; VESPIGNANI A. *Dynamical and correlation properties of the internet*. Phys. Rev. Let. **87**, 258701 2001.
- [26] FELLER, W., *An introduction to Probability Theory and Its Applications*. Princeton: Princeton University, 1968.
- [27] WATTS D. J.; STROGATZ S. H., *Collective Dynamics of 'small-world' networks*. Nature, **393**, 1998.

- [28] BARRAT A.; WEIGT M., *On the properties of small-world network models*. Eur. Phys. J. **13**, 547-560, 2000.
- [29] STROGATZ S. H., *Exploring complex networks*, Nature, **410**, 2000.
- [30] BARABÁSI A. -L.; ALBERT R., *Emergence of scaling in random networks*. Science **286**, 1999.
- [31] ALBERT R.; JEONG H.; BARABÁSI A-L.; *Error and attack tolerance of complex networks*. Nature **406**, 2000.
- [32] BOGUÑA M.; PASTOR-SATORRAS R.; VESPIGNANI A., *Cut-offs and finite size effects in scale-free networks*. Eur. Phys. Jour. B **38**, 2004.
- [33] PARK J.; NEWMAN M. E. J., *The origin of degree correlations in the Internet and other networks*. Phys. Rev E **68**, 026112, 2003.
- [34] CALLAWAY D. S.; et. al., *Are randomly grown graphs really random?*. Phys. Rev. E **64**, 041902, 2001.
- [35] STANLEY H. E., *Scaling, universality and renormalization: Three pillars of modern critical phenomena*. Rev. Mod. Phys., 1999.
- [36] SALINAS S., *Introdução a Física Estatística*. São Paulo: Edusp, 2005.
- [37] TOMÉ T.; OLIVEIRA M. J., *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade*. São Paulo: Edusp, 2001.
- [38] SCHWABL F., *Statistical Mechanics*. Alemanha: Springer, 2006.
- [39] OLIVEIRA M. M., *Simulações de sistemas com estados absorventes: método e aplicações..* 2007. 64f. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, MG, 2007.
- [40] FERREIRA S. C; FERREIRA R. S.; PASTOR-SATORRAS R., *Quasi-stationary analysis of the contact process on annealed scale-free networks*, submetido à Phys Pre E.
- [41] DICKMAN R.; SILVA J. K. L., *Moment Ratios for Absorbing-State Phase Transitions*. Phys. Rev. E, **58**, 1998.
- [42] BOGUÑÁ M. PASTOR-SATORRAS R.; VESPIGNANI A., *Epidemic spreading in complex networks with degree correlations*, arXiv: cond-mat/0301149v1.
- [43] PASTOR-SATORRAS R., *Epidemic Dynamics in finite size scale-free networks*. Phys. Rev. E. **65**, 035108, 2002.

- [44] PASTOR-SATORRAS R.; VESPIGNANI A., *Immunization of complex networks*, Phys. Rev. E **65**, 036104, 2003.
- [45] HILBORN R. C., *Chaos and Nonlinear Dynamics: An Introduction for Scientists and Engineers*, Oxford University Press, New York, 2001.
- [46] ABRAMOWITZ M. e STEGUN A., *Handbook of Mathematical Functions*, Dover, Nova York, 1972.
- [47] CASTELLANO C. e PASTOR-SATORRAS R., *Routes to thermodynamic limit on scale-free networks*, Phys. Rev. Lett. **100**, 1487701, 2008.
- [48] BOGUÑÁ M. CASTELLANO C.; PASTOR-SATORRAS R., *Langevin approach for the dynamics of the contact process on annealed scale-free networks*, Phys Rev E, **79**, 036110, 2009.
- [49] NOH J. D.; PARK H., *Critical behavior of the contact process in annealed scale-free networks*, Phys Rev E, **79**, 056115, 2009.
- [50] VAN KAMPEN N. G., *Stochastic process in Physics and Chemistry*, Holanda, Amsterdam, 2007.
- [51] DICKMAN R. e VIDIGAL R., *Quasi-stationary distributions for stochastic processes with an absorbing state*, Jour. Phys. A Math Gen **35**, 1147, 2002
- [52] CASTELLANO C; FORTUNATO S.; LORETO V., *Statistical physics of social dynamics*, Rev. Mod. Phys. **81**, 591, 2009.
- [53] KARDAR M., *Statistical physics of particles*, Cambridge University Press, Cambridge, 2007.
- [54] GANTMACHER F. R., *The Theory of Matrices*, volume 2, Chelsea Publishing Company, New York, 1974.
- [55] BOGUÑÁ M. PASTOR-SATORRAS R.; VESPIGNANI A., *Absence of epidemic threshold in scale-free networks with degree correlations*. Phys. Rev. Lett, **90**, 2003.
- [56] BOGUÑA M.; et. al., *Statistical Mechanics of Complex Networks*. Berlin: Springer Verlag, 2003.
- [57] BOGUÑA M.; PASTOR-SATORRAS R., *Class of correlated random networks hidden variables*. Phys. Rev. E. **68**, 036112, 2003.
- [58] NEWMAN M. E. J., *Mixing patterns in networks*. Phys. Rev. E **67**, 026126, 2003.

-
- [59] BURDA Z.; KRZYWICKI Z., *Uncorrelated Random Networks*. Phys. Rev. E **67**, 046118, 2003.
- [60] DOROGOVTSEV S. N.; MENDES J. F. F. *Evolution of Networks*. Adv. Phys., **51**, 1079, 2002.

Apêndice A

Correlação entre graus

Para computar a probabilidade condicional $P(A|B)$ de um evento A ocorrer dado o evento B , é necessário antes recordar o conceito de probabilidade conjunta.

Define-se a probabilidade conjunta $P(k_1, k_2)$ de se escolher uma ligação ao acaso e nas suas extremidades encontrar vértices com graus k_1 e k_2 . É importante deixar claro que probabilidade conjunta é um conceito diferente de probabilidade condicional. Enquanto a primeira nos fornece a probabilidade de em uma medida encontrarmos os graus k_1 e k_2 simultaneamente, na segunda, assume-se que o grau de um vértice é conhecido, por exemplo k_1 , e queremos saber qual a probabilidade de o outro vértice ter grau k_2 . Estas duas quantidades estão relacionadas por um axioma da teoria da probabilidade, isto é, a probabilidade de termos um evento A dado um evento B é dada por [26]

$$P(A|B) = \frac{P(A, B)}{P(B)} \quad (\text{A.1})$$

Seja $N_k = NP(k)$ o número de vértices com grau k , então a probabilidade de se escolher uma ligação e chegar até um nó com grau k é:

$$\frac{kN_k}{\sum_{k'} k'N_{k'}} = \frac{kNP(k)}{\sum_{k'} k'NP(k')} = \frac{kP(k)}{\langle k \rangle} \quad (\text{A.2})$$

Se a probabilidade de, ao se escolher uma ligação ao acaso, encontrarmos um vértice com grau k_1 for estatisticamente independente do grau k_2 do outro vértice, a probabilidade conjunta $P(k_1, k_2)$ pode ser escrita como:

$$P(k_1, k_2) = \frac{k_1P(k_1)}{\langle k \rangle} \frac{k_2P(k_2)}{\langle k \rangle} = \frac{k_1k_2P(k_1)P(k_2)}{\langle k \rangle^2}. \quad (\text{A.3})$$

Mas, se há correlações, $P(k_1, k_2)$ será proporcional ao número E_{k_1, k_2} de ligações entre um vértice cujo grau é k_1 e um vértice cujo grau é k_2 , e a constante de proporcionalidade é obtida

através da normalização [23]. Assim:

$$P(k_1, k_2) = \frac{E_{k_1, k_2}}{\sum_{k_1, k_2} E_{k_1, k_2}} \quad (\text{A.4})$$

O denominador da equação (A.4) é a soma de todas as ligações da rede, ou seja, $\sum_{k_1, k_2} E_{k_1, k_2} = \sum_k k N_k = N \langle k \rangle$, em que N é o número total de vértices. Então,

$$P(k_1, k_2) = \frac{E_{k_1, k_2}}{N \langle k \rangle} \quad (\text{A.5})$$

Usando a equação (A.1) podemos reescrever a probabilidade condicional da seguinte maneira:

$$P(k_1 | k_2) = \frac{E_{k_1, k_2}}{N \langle k \rangle P(k_2)} = \frac{E_{k_1, k_2}}{N_{k_2} \langle k \rangle} \quad (\text{A.6})$$

na qual N_{k_2} é o número total de vértices com grau k_2 .

A probabilidade condicional deve obedecer às duas restrições [26]. A primeira é dada pela condição de normalização

$$\sum_{k_1} P(k_1 | k_2) = 1 \quad (\text{A.7})$$

e a segunda é a distribuição do balanço detalhado,

$$k_2 P(k_1 | k_2) P(k_2) = k_1 P(k_2 | k_1) P(k_1), \quad (\text{A.8})$$

pois, em grafos não direcionados, o número de ligações que saem do vértice com grau k_1 e chegam aos vértices com grau k_2 deve ser igual ao número de ligações que saem dos vértices com grau k_2 e chegam aos nós com grau k_1 [12].

Apêndice B

Cutoffs em redes sem escala

A definição de *cutoff* mais interessante, no âmbito da física, é dada por Dorogovtsev *et. al.* [60] que o define como o valor do grau k_c acima do qual se espera encontrar no máximo um nó,

$$N \int_{k_c}^{\infty} P(k) dk = N \int_{k_c}^{\infty} A k^{-\gamma} dk \sim 1, \quad (\text{B.1})$$

em que A é a constante de normalização. Neste caso, obtemos:

$$k_c(N) \sim N^{1/(\gamma-1)} \quad (\text{B.2})$$

que é conhecido como o *cutoff* natural da rede.

É importante dizer que a forma do *cutoff* natural parte do pressuposto de que todos os graus de conectividade são independentemente. No entanto, em redes reais, os graus dos vértices não são simplesmente independentes pois devem satisfazer algumas restrições topológicas devido à estrutura da rede. Assim, devemos incluir também a estrutura de ligações quando se considera a escala do *cutoff*.

Primeiramente, vamos caracterizar alguns aspectos estruturais de redes [56, 57]. Vamos considerar uma rede não direcionada com N vértices e limite termodinâmico bem definido, ou, equivalentemente, grau médio constante $\langle k \rangle$. Seja N_k o número de vértices com grau k que satisfaz a relação $\sum_k N_k = N$ que, no limite termodinâmico $N \gg 1$, permite-nos definir a distribuição dos graus como $P(k) = N_k/N$. Essa distribuição contém toda a informação sobre as propriedades locais dos vértices, ou seja, o número de ligações que cada vértice possui. Mas também é interessante especificar como as diferentes classes dos graus estão conectadas umas com as outras. Para isso, podemos definir uma função simétrica $E_{k,k'}$, que nos fornece o número de ligações entre os vértices de grau k e k' , para $k \neq k'$ e duas vezes o número de ligações entre

os vértices da mesma classe, ou seja, $k = k'$. Essa matriz obedece às identidades:

$$\sum_{k'} E_{kk'} = kN_k \quad (\text{B.3})$$

$$\sum_{k,k'} E_{kk'} = \sum_k kN_k = \langle k \rangle N = 2E \quad (\text{B.4})$$

em que E é o número total de ligações na rede. Esta última identidade, permite-nos definir, novamente no limite $N \gg 1$, uma distribuição conjunta

$$P(k, k') = \frac{E_{kk'}}{\langle k \rangle N}, \quad (\text{B.5})$$

onde a função $(2 - \delta_{kk'})P(k, k')$ é a probabilidade de escolher aleatoriamente uma ligação que conecta dois vértices de grau k e k' . A distribuição $P(k)$ pode ser deduzida da distribuição conjunta $P(k, k')$ como:

$$P(k) = \frac{\langle k \rangle}{k} \sum_{k'} P(k, k'). \quad (\text{B.6})$$

A distribuição conjunta transmite todas as informações a respeito do grau dos vértices. O caráter associativo (disassociativo) de correlações na rede, isto é, a tendência de vértices se conectarem a outros vértices da mesma (diferente) classe, pode ser quantificado pelo coeficiente de Pearson r , definido como o coeficiente de correlação da distribuição conjunta [24, 58].

Vamos definir $r_{kk'}$ como a razão entre o número de ligações entre os vértices de grau k e k' , $E_{kk'}$, e o valor máximo possível de ligações entre eles, $m_{kk'}$. Assumindo que múltiplas ligações não são permitidas na rede, o número máximo de ligações entre duas classes é $m_{kk'} = \min\{kN_k, k'N_{k'}, N_kN_{k'}\}$ e, conseqüentemente, a razão $r_{kk'}$ pode ser escrita como:

$$r_{kk'} = \frac{E_{kk'}}{m_{kk'}} = \frac{\langle k \rangle P(k, k')}{\min\{kP(k), k'P(k'), NP(k)P(k')\}}. \quad (\text{B.7})$$

Uma questão chave é que essa razão deve ser menor ou igual a um para qualquer valor de k e k' .

Podemos usar essa observação para tirar algumas conclusões sobre o valor do *cutoff* imposto pela estrutura da rede. Vamos considerar que a curva $r_{kk'}$ no espaço $k - k'$ separa as regiões em que os pares (k, k') tomam valores possíveis ($r_{kk'} \leq 1$), da região que não é possível fisicamente, $r_{kk'} > 1$ (veja figura B.1). Seja k_s (*cutoff* estrutural) definido como o valor médio do grau que delimita a maior região quadrada de valores aceitáveis, então, ele deve ser a solução da equação implícita:

$$r_{k_s k_s} = 1 \quad (\text{B.8})$$

Vale ressaltar que $k > NP(k')$ e $k' > NP(k)$ quando consideramos que não há múltiplas conexões. Então, a expressão para $r_{kk'}$ já se reduz a:

$$r_{kk'} = \frac{\langle k \rangle P(k, k')}{NP(k)P(k')} \quad (\text{B.9})$$

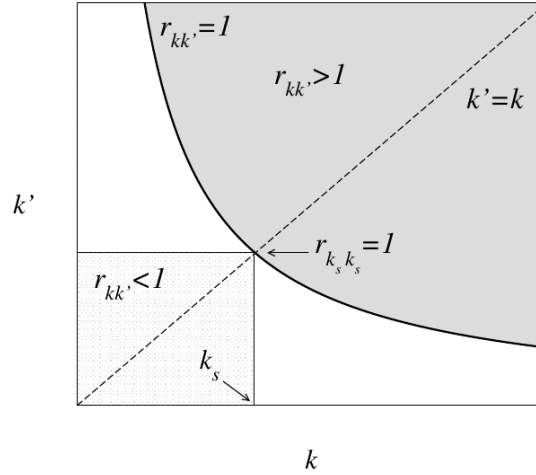


Figura B.1: Construção geométrica do *cutoff* estrutural k_s . Figura retirada da referência [32].

Para redes sem escala não correlacionadas, como é o caso da UCM, a distribuição de probabilidade conjunta se fatoriza da seguinte maneira [36]:

$$P(k, k') = \frac{kk'P(k)P(k')}{\langle k \rangle^2} \quad (\text{B.10})$$

que significa que $r_{kk'}$ se torna [32, 57]

$$r_{kk'} = \frac{kk'}{\langle k \rangle N} \quad (\text{B.11})$$

Neste caso, o *cutoff* estrutural precisa preservar a condição física $r_{kk'} \leq 1$ e então:

$$k_s(N) \sim (\langle k \rangle N)^{1/2} \quad (\text{B.12})$$

independente de $P(k)$ e do valor de γ para redes sem escala.

Para $\gamma > 3$ o *cutoff* estrutural diverge mais rápido que o cut-off natural e, por isso, o último deve ser escolhido como o apropriado [59]. Para $\gamma < 3$ no entanto, o expoente do *cutoff* natural é maior que $1/2$ e, como consequência, o *cutoff* previsto pela teoria do valor extremo está divergindo mais rápido que o *cutoff* estrutural. Em outras palavras, isso significa que redes sem escala não correlacionadas sem múltiplas conexões e com $\gamma < 3$ deve possuir o *cutoff* estrutural.