

RENAN SERVAT SANDER

**PROCESSOS EPIDÊMICOS EM REDES COMPLEXAS:  
MECANISMOS DE ATIVAÇÃO E MÉTODOS  
COMPUTACIONAIS**

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

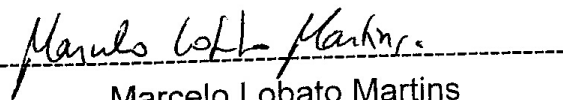
VIÇOSA  
MINAS GERAIS - BRASIL  
2016

RENAN SERVAT SANDER

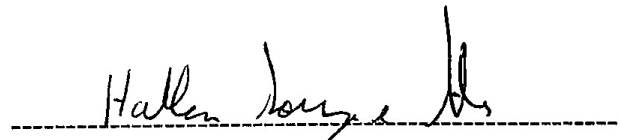
PROCESSOS EPIDÊMICOS EM REDES COMPLEXAS: MECANISMOS DE  
ATIVÇÃO E MÉTODOS COMPUTACIONAIS

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

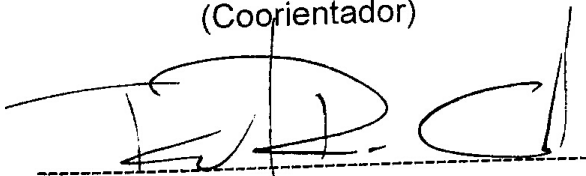
APROVADA: 29 de setembro de 2016.



Marcelo Lobato Martins  
(Coorientador)



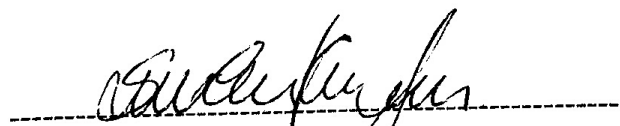
Hallan Souza Silva



Ricardo Reis Cordeiro



Marcelo Martins de Oliveira



Sílvio da Costa Ferreira Junior  
(Orientador)

**Ficha catalográfica preparada pela Biblioteca Central da  
Universidade Federal de Viçosa - Câmpus Viçosa**

T

S214p  
2016 Sander, Renan Servat, 1986-  
Processos epidêmicos em redes complexas :  
mecanismos de ativação e métodos computacionais /  
Renan Servat Sander. - Viçosa, MG, 2016.  
xi, 83f. : il. (algumas color.) ; 29 cm.

Orientador : Silvio da Costa Ferreira Junior.  
Tese (doutorado) - Universidade Federal de Viçosa.  
Referências bibliográficas: f.79-83.

1. redes complexas . 2. transições de fase .  
3. epidemias . 4. simulações. I. Universidade Federal de  
Viçosa. Departamento de Física. Programa de Pós-  
graduação em Física. II. Título.

CDD 22 ed. 530.12

Aos meus pais, João Luiz e Ivone.

# Agradecimentos

Ao meu orientador, Prof. Silvio Ferreira, por todos os valiosos ensinamentos, pela atenção e dedicação a este trabalho, apoio, imensa paciência e sobretudo confiança.

Aos meus pais, João Luiz e Ivone, meu irmão Alexandre e minha tia Denise, pelo exemplo, formação e, em geral, por tudo que sempre fizeram por mim.

Aos meus amigos da época de república em Viçosa: Samuel, Vinícius, Jackson, Dodô, Cebola, Marcelo e Sapulha.

Aos colegas da Física, em especial aos grandes amigos da sala 211 e demais amigos agregados da pós-graduação, como Thiago, Saulo, Angélica, Priscila, Aline, Bira, Fábio, Herman e outros que por ventura não estejam mencionados aqui, mas que certamente foram parte importante desta trajetória.

À minha noiva, Lícia, pelo companheirismo, amor e suporte durante os meses que antecederam a conclusão deste trabalho.

Aos professores do Departamento de Física, pela formação acadêmica.

Ao GISC pelo suporte computacional e ao Guilherme pela contribuição no trabalho com métodos de simulação.

Ao Prof. Romualdo Pastor-Satorras da Universitat Politècnica de Catalunya, pelas valiosas contribuições e parceria.

À Universidade Federal de Viçosa e à cidade de Viçosa, onde passei os melhores momentos da minha vida.

À CAPES, ao CNPq e à FAPEMIG pelo suporte financeiro.

# Sumário

<b>Lista de Figuras</b>	<b>vi</b>
<b>Resumo</b>	<b>x</b>
<b>Abstract</b>	<b>xi</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2 Redes Complexas</b>	<b>4</b>
2.1 Conceitos fundamentais em teoria de grafos . . . . .	4
2.2 Caracterização estatística de grafos . . . . .	8
<b>3 Transições de fase para estados absorventes em redes complexas</b>	<b>15</b>
3.1 Processos dinâmicos . . . . .	15
3.1.1 A equação mestra . . . . .	15
3.1.2 Transições de Fase . . . . .	17
3.2 Processos fora do equilíbrio . . . . .	19
3.3 Universalidade . . . . .	20
3.3.1 Expoentes críticos . . . . .	20
3.4 Processo de contato . . . . .	22
3.4.1 Criticalidade . . . . .	23
3.4.2 Escalonamento de tamanho finito . . . . .	26
3.4.3 Teoria de campo médio . . . . .	28
3.5 Processo de contato em redes sem escala . . . . .	31
3.6 Modelo SIS em redes sem escala . . . . .	36
<b>4 Simulação do regime quase-estacionário em redes regulares e complexas</b>	<b>41</b>

4.1	Estados quase-estacionários . . . . .	42
4.2	Método quase-estacionário padrão . . . . .	42
4.3	Método de condição de fronteira refletora . . . . .	44
4.4	Método de reativação de <i>hubs</i> . . . . .	45
4.5	Método de campo externo . . . . .	45
4.6	Algoritmos . . . . .	46
4.6.1	Caracterização numérica do ponto crítico . . . . .	47
4.6.2	Comparação entre os métodos SQS e RBC em redes regulares . . . . .	49
4.6.3	Análise numérica em redes com distribuição em lei de potência . . . . .	50
<b>5</b>	<b>Mecanismos de ativação de fases epidêmicas em redes complexas</b>	<b>58</b>
5.1	A teoria . . . . .	59
5.1.1	Um modelo epidêmico geral . . . . .	59
5.1.2	Tempo de vida de um <i>hub</i> . . . . .	59
5.1.3	Tempo para mútua infecção dos <i>hubs</i> . . . . .	62
5.2	Análise de modelos epidêmicos em redes sem escala . . . . .	63
5.2.1	O modelo SIS . . . . .	64
5.2.2	O processo de contato . . . . .	64
5.2.3	O modelo KJI . . . . .	65
5.2.4	O modelo SIRS . . . . .	69
5.3	O modelo SIRS em redes reais . . . . .	73
<b>6</b>	<b>Considerações finais</b>	<b>76</b>
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>79</b>

# Lista de Figuras

2.1	As pontes da cidade de Königsberg. Fonte: <a href="http://goo.gl/7JYXwX">goo.gl/7JYXwX</a> . . . . .	5
2.2	À esquerda, um mapa simplificado do centro da cidade de Königsberg, como era na época de Euler. À direita, sua representação como um grafo. Figuras retiradas de [13].	5
2.3	Representação gráfica de um grafo. . . . .	6
2.4	Um grafo estrela $S_8$ . . . . .	8
2.5	Gráfico $k_{nn} \times k$ gerado para $N = 10000$ e $k_0 = 6$ , mostrando a independência do grau médio dos primeiros vizinhos $k_{nn}$ em relação ao grau $k$ para quatro valores do expoente $\gamma$ .	13
2.6	Gráfico $P(k) \times k$ gerado com os mesmos parâmetros $N$ e $k_0$ da figura anterior, mostrando três exemplos de distribuição em lei de potência geradas computacionalmente. .	14
3.1	Gráfico que ilustra a transição de fase em um ferromagneto, com campo externo nulo. Figura retirada de [3]. . . . .	18
3.2	Um simples processo de três estados. Os estados <b>1</b> e <b>2</b> são transientes, enquanto o estado <b>3</b> é absorvente. . . . .	19
3.3	Densidade de partículas no estado estacionário em função da taxa de replicação para o PC. . . . .	23
3.4	Amostras do PC, começando com uma única partícula na origem de uma rede vazia. À esquerda: $\lambda < \lambda_c$ ; centro: $\lambda = \lambda_c$ ; à direita: $\lambda > \lambda_c$ . . . . .	24
3.5	Gráfico $\rho(t) \times t$ mostrando a relaxação para o estado quase-estacionário para os tamanhos de rede $L = 25, 50, 100, 200$ e $400$ (curvas na cor preta a laranja, na ordem decrescente, respectivamente), com $\lambda = \lambda_c$ . . . . .	26
3.6	Densidade de partículas no estado quase-estacionário em função da taxa de replicação para o PC unidimensional. . . . .	27
3.7	Gráfico reescalado utilizando os dados da figura 3.6. . . . .	27
3.8	Dependência de $\bar{\rho}_{qe}$ , $\tau$ e $\chi$ com o tamanho do sistema para o PC unidimensional no ponto crítico. . . . .	29

4.1	Curvas da suscetibilidade <i>versus</i> a taxa de infecção para o modelo SIS em redes com distribuição em lei de potência com $\gamma = 2, 7$ para diversos tamanhos de rede, geradas pelo método SQS. Inserção: gráficos do tempo de vida pela taxa de infecção. . . . .	48
4.2	Tempo de autocorrelação como função da taxa de infecção para o modelo SIS em reticulados bidimensionais para diferentes tamanhos. A inserção mostra o escalonamento de tamanho finito do limiar epidêmico para $d = 1, 2$ e $3$ . . . . .	49
4.3	Densidade QE como função do número de vértices para o modelo SIS na criticalidade para reticulados com $d = 1, 2$ e $3$ e RRN ( $d = \infty$ ) para os métodos SQS e RBC. As linhas tracejadas representam os expoentes de ETF para a classe de universalidade PD. . . . .	50
4.4	(a) Tempo de vida da dinâmica do modelo SIS na criticalidade em reticulados de dimensões $d = 1, 2$ e $3$ e RRN ( $d = \infty$ ). As linhas contínuas são ajustes em lei de potência previstos pelo método SQS ( $\tau_a \sim N^{z^*}$ ) e as linhas tracejadas representam ajustes para o método RBC ( $\tau_a \sim N^{z^*(1-\delta)}$ ). (b) Tempos de correlação críticos integrados como função do tamanho da rede. Linhas contínuas representam leis de potência $\tau_c \sim N^{z^*}$ com os expoentes da classe PD. . . . .	51
4.5	Comparativo das grandezas QE em redes sem escala. (a) Suscetibilidade $\chi(\lambda)$ e, (b), o parâmetro de ordem $\rho(\lambda)$ para o modelo SIS e para o PC (inserções) utilizando diferentes métodos. O expoente da distribuição de conexões é $\gamma = 2, 7$ e o tamanho da rede é $N = 10^7$ . . . . .	52
4.6	Limiares epidêmicos efetivos $\lambda_p$ como funções do tamanho da rede $N$ para o modelo SIS (curvas na parte inferior) e para o PC (curvas na parte superior) obtidas por meio de simulações utilizando os métodos SQS, RBC e HR. Os limiares para o CP foram subtraídos de uma unidade para melhor visualização. A linha contínua representa um ajuste em lei de potência, enquanto a tracejada representa o limiar epidêmico para o PC no limite de tamanhos muito grandes, de acordo com a referência [11]. O expoente da distribuição é $\gamma = 2, 7$ . . . . .	53
4.7	Escalonamento de tamanho finito dos modelos epidêmicos abordados, em redes geradas pelo algoritmo UCM com $\gamma = 2, 7$ . (a) Densidade crítica para o modelo SIS (símbolos sem preenchimento) e para o PC (símbolos preenchidos). Os valores da densidade para o PC foram divididos por um fator 10 para uma melhor visibilidade. (b) ETF dos tempos de correlação integrados ( $\tau_c$ ) e o tempo entre tentativas de visita ao estado absorvente ( $\tau_a$ ) para o modelo SIS. Os dados de simulação pelo método SQS para $\tau_a$ foram divididos por um fator 100 para melhorar a visualização e as linhas sólidas representam regressões em lei de potência. As médias foram realizadas sobre 10 redes geradas e as barras de erro obtidas a partir desta estatística são menores que os símbolos. . . . .	54

4.8	Curvas de suscetibilidade $\chi(\lambda)$ e densidade QE $\rho(\lambda)$ para o modelo SIS em redes geradas pelo algoritmo UCM ( $N = 10^7$ ) com $\gamma = 3, 5$ ((a) e (b), respectivamente) e com $\gamma = 4, 0$ ((c) e (d), respectivamente), utilizando diferentes técnicas para simular o estado quase-estacionário. As linhas tracejadas representam o tempo de vida da epidemia $\tau_a = 1/\bar{P}_1$ . . . . .	55
4.9	Limiars epidêmicos efetivos como funções do tamanho do sistema para o modelo SIS em redes geradas pelo algoritmo UCM com $\gamma = 3, 5$ (símbolos não preenchidos) e $\gamma = 4, 0$ (símbolos preenchidos) para diferentes métodos de simulação. . . . .	56
4.10	Equivalência entre os métodos RBC e com campo externo acoplado (EF) para o modelo SIS em redes UCM com expoente $\gamma = 2, 75$ . Acima, são mostradas as curvas (a) $\chi(\lambda)$ e (b) $\rho(\lambda)$ . Abaixo, temos o ETF para (c) os limiars epidêmicos e (d) densidades críticas. . . . .	57
5.1	Modelo epidêmico genérico em redes complexas. (a) Exemplo de rede complexa com sítios recuperados (R), infectados (I) e suscetíveis (S). (b) Taxas de transição de estados para a estrela em cada etapa com suas respectivas taxas. (c) Uma estrela “fonte” de grau $k$ transmite a infecção ao longo de uma cadeia de tamanho $d$ até que a mesma atinja um nó “alvo” de grau $k'$ . Figura retirada de [10]. . . . .	60
5.2	Gráficos do maior autovalor $\Lambda_m^D$ da matriz $D_{ij}$ como funções do maior grau da rede $k_{\max}$ para redes geradas pelo algoritmo UCM com expoentes $\gamma = 2, 7$ (acima) e $\gamma = 3, 5$ (abaixo), usando um grau mínimo $k_0 = 3$ e um <i>cutoff</i> estrutural $k_c \sim N^{1/2}$ . Estes resultados foram obtidos para cinco redes independentes para $\gamma = 3, 5$ e uma rede para $\gamma = 2, 7$ , com tamanhos $N = 10^3, 3 \times 10^3, 10^4, 3 \times 10^4, 10^5, 3 \times 10^5, 10^6, 3 \times 10^6, 10^7, 3 \times 10^7$ e $10^8$ . Na figura (b) as linhas contínuas representam leis de potência $k_{\max}^{\frac{1}{2}-\theta}$ , enquanto na figura (a) as linhas contínuas são proporcionais a $\Lambda_m/k_{\max}^\theta$ . . . . .	66
5.3	Tempo de vida para o modelo KJI em grafos estrela com $\lambda \langle k^{1-\theta} \rangle / \langle k \rangle = 0.2$ , confirmando o comportamento assintótico como uma função exponencial esticada, conforme esperado para $\theta < 1/2$ . . . . .	68
5.4	Limiars de ativação epidêmica para o modelo KJI com diferentes valores para $\theta$ e $\gamma = 3, 5$ . . . . .	68
5.5	(a) Tempo de vida para o modelo SIRS em grafos estrela com $k$ folhas para $\lambda = 0, 05$ , $\beta = 1$ e diferentes valores de $\alpha$ . As linhas contínuas representam leis de potência teóricas $\tau_k = k^{\alpha/\beta}$ . (b) Tempos de infecção para vértices de grau $k'$ em uma rede com $N = 10^5$ vértices na qual a epidemia começa em um vértice de grau $k = 50$ que está permanentemente infectado. A linha contínua representa o valor teórico previsto pela equação (5.18). . . . .	71

5.6	Limiars epidêmicos como funçõs do tamanho da rede para diferentes tempos de imunização $1/\alpha$ em redes em escala com expoente $\gamma = 2, 2$ (curvas inferiores) e $\gamma = 2, 7$ (curvas superiores). As linhas tracejadas representam as previsões da teoria QMF $\lambda_c = 1/\Lambda_m$ para os limiars epidêmicos. . . . .	71
5.7	Limiars epidêmicos para o modelo SIRS como funçõs do tamanho para redes geradas pelo algoritmo UCM com expoentes da distribuição de conexões $\gamma = 3, 5$ (a) e $\gamma = 4, 0$ (b), com grau mínimo $k_0 = 3$ . O limite $\alpha = \infty$ do regime tipo SIS também foi incluído para comparação. . . . .	74
5.8	Simulações das dinâmicas dos modelos SIS e SIRS em redes reais. A densidade quase-estacionária de sítios ativos como função da taxa de infecção nas redes Gowalla (a) e Amazon (b) para diferentes taxas de imunização temporária. Setas foram utilizadas para indicar as posições dos limiars obtidos por meio do método da análise de suscetibilidade e pela teoria QMF. Em (c) são mostradas as distribuições de conectividade para as redes dos sites Gowalla ( $N = 196591, k_{\max} = 14730, \gamma = 2, 4$ ) e Amazon ( $N = 334863, k_{\max} = 549, \gamma = 3, 5$ ). As linhas contínuas representam ajustes em lei de potência. . . . .	75

# Resumo

SANDER, Renan Servat, D.Sc., Universidade Federal de Viçosa, setembro de 2016. **Processos epidêmicos em redes complexas: mecanismos de ativação e métodos computacionais**. Orientador: Silvio da Costa Ferreira Junior. Coorientadores: Marcelo Lobato Martins e Tiago José de Oliveira.

Transições de fase para estados absorventes (TFEAs) são um tópico de fronteira na física estatística. A comunidade científica tem dedicado esforços ao estudo de processos que exibem TFEAs em redes complexas, já que tais redes tem sido alvo de crescente interesse por descreverem uma grande variedade de sistemas com relevância tanto tecnológica quanto intelectual. Levando em conta a natureza dinâmica e o enorme tamanho das redes reais, a abordagem da mecânica estatística mostra-se conveniente devido a sua ligação com a teoria de grafos e a caracterização de fenômenos macroscópicos emergentes em termos da dinâmica de elementos básicos que compoem o sistema. Em um dos tópicos apresentados nesta tese, utilizamos o tempo de vida da atividade nos vértices mais conectados (*hubs*) de uma rede sem escala para investigar a relação entre mecanismos de ativação de fases epidêmicas em redes complexas, baseando-se principalmente no modelo infectado-suscetível-recuperado-suscetível (SIRS) para redes sem escala sintéticas e para redes reais. Foi desenvolvido um critério geral para identificar a natureza do limiar epidêmico em redes, seja ele devido a um processo de ativação e reativação mútua dos *hubs*, levando a um limiar epidêmico nulo no limite termodinâmico, ou devido a uma ativação coletiva que gera um estado endêmico no qual a atividade encontra-se espalhada por toda a extensão da rede, correspondendo a uma transição de fase padrão ocorrendo para um valor finito da taxa de infecção. Também comparamos diferentes métodos quase-estacionários de simulação para contornar o(s) estado(s) absorvente(s) do sistema (conservando o limite termodinâmico da dinâmica original para os processos analisados), a saber, o método quase-estacionário (QE) padrão, o método de condição de fronteira refletora, em que a dinâmica retorna à configuração pré-absorvente e o método de reativação de *hubs*, no qual os nós mais conectados são reativados após uma visita a um estado absorvente. Este trabalho foi exemplificado por meio dos já bem conhecidos processo de contato (PC) e modelo suscetível-infectado-suscetível (SIS). Todas as técnicas investigadas fornecem o mesmo limiar epidêmico para ambos os modelos. Mostramos que, para o PC, os métodos são equivalentes, enquanto para o modelo SIS apenas o método QE padrão e de reativação de *hubs* são capazes de capturar fases endêmicas localizadas. Por fim, verificamos a equivalência entre o método de condição de fronteira refletora e um campo externo fraco que gera atividade espontânea na rede.

# Abstract

SANDER, Renan Servat, D.Sc., Universidade Federal de Viçosa, September, 2016. **Epidemic processes on complex networks: activation mechanisms and computational methods.** Adviser: Silvio da Costa Ferreira Junior. Co-Advisers: Marcelo Lobato Martins and Tiago José de Oliveira.

Phase transitions to absorbing states (APTs) are a topic at the frontier of statistical physics. The scientific community has dedicated efforts to the study of processes exhibiting APTs in complex networks, since such networks have been subject of increasing interest to describe a wide variety of systems with both technological and intellectual relevances. Considering the dynamic nature and huge size of real networks, the statistical mechanics approach has proved to be convenient due to its connection with graph theory and the characterization of emerging macroscopic phenomena in terms of the dynamics of basic elements constituting the system. In one of the topics presented on this thesis, we used the lifespan of the activity at the most connected vertices (hubs) of a scale-free network to investigate the relation between activation mechanisms of epidemic phases in complex networks, based mainly on the susceptible-infected-recovered-susceptible (SIRS) model in synthetic and real scale-free networks. We developed a general criterion to identify the nature of the epidemic threshold on networks, due to a collective activation and reactivation process of the hubs, leading to a vanishing threshold at the thermodynamic limit, or due to a collective activation which generates an endemic state where activity spreads out through the whole network, corresponding to a standard phase transition taking place at a finite value of the infection rate. We also compared different quasi-stationary simulation methods to circumvent the absorbing state(s) of the system (preserving the thermodynamic limit of the original dynamics for the analyzed processes), namely, the standard quasi-stationary (QS) method, the reflecting boundary condition, in which the dynamics returns to the pre-absorbing configuration and the hub reactivation method, in which the most connected vertices are reactivated after a visit to an absorbing state. These methods were applied to the well-known contact process (CP) and susceptible-infected-susceptible (SIS) models. All the investigated techniques provide the same epidemic threshold for both models. We showed that, for the CP, all methods are equivalent, while for the SIS model only the standard QS and hub reactivation methods are able to capture localized endemic phases. Finally, we verified the equivalence between the reflecting boundary condition method and a weak external field which generates spontaneous activity in the network.

# Capítulo 1

## Introdução

Nas últimas décadas tornou-se notório o fato de que vários conceitos da física estatística podem ser aplicados além do contexto termodinâmico [1]; foram desenvolvidas teorias gerais de fenômenos críticos e transições de fase, unificando a compreensão teórica de fenômenos já bem conhecidos experimentalmente, como transições magnéticas, transições gás-líquido, cristais líquidos e outros sistemas que podem ter seu comportamento crítico descrito de maneira similar. Esta grande atividade foi acompanhada por desenvolvimentos paralelos em sistemas fora do equilíbrio e até em sistemas sem termodinâmica, para os quais os conceitos de energia e trabalho não podem ser aplicados sequer de maneira aproximada. Dentre os desenvolvimentos da Física que foram exportados para outras áreas do conhecimento, certamente as ideias e o tratamento formal das transições de fase se destacam como parte das que deram melhores resultados; seus conceitos são utilizados desde a teoria da computação, inteligência artificial até a teoria de populações biológicas. Definimos uma transição de fase de maneira informal, mas adequada para propósitos introdutórios, como uma mudança singular e abrupta das propriedades macroscópicas de um sistema composto por muitos entes interagentes, em função de um ou mais parâmetros de controle. Os sistemas já familiares da termodinâmica estão inclusos nesta descrição, assim como os sistemas fora do equilíbrio, dentre os quais percolação e processos epidêmicos são bons exemplos.

Uma classe de processos dinâmicos que desperta grande interesse, e para a qual esta tese volta seu foco, é a de modelos com estados absorventes [2]. Transições de fase para estados absorventes (TFEAs), configurações do sistema das quais o sistema não pode escapar, são um tópico na fronteira da física estatística fora do equilíbrio devido à sua ampla aplicação em áreas de interesse multidisciplinar. Inicialmente, estudos sistemáticos destes processos foram realizados em redes de topologia regular e homogênea. Nestes substratos, espera-se que transições de fase para estados absorventes em modelos com um parâmetro de ordem escalar positivo, interações de curto alcance e sem simetrias adicionais ou desordem congelada pertençam à classe de universalidade da percolação direcionada (PD) [3]. Vale observar que o interesse neste tipo de transição de fase aumentou após a observação experimental desta classe de universalidade em transições para estados absorventes [4, 5]. Por outro lado, mesmo sendo esta a classe de universalidade mais robusta para este tipo de transição de fase, a determinação numérica precisa dos

expoentes críticos de um modelo específico pode ser “mascarada” por fatores tais como difusão e desordem congelada.

É natural que se queira estender o estudo de modelos que apresentam TFEAs para o caso em que os mesmos ocorram sobre redes que representem a realidade de maneira mais fiel, dado o modo como os diversos tipos de rede existentes estão presentes, sendo responsáveis, em parte, pelo modo como pensamos e agimos. Cabe aqui definir, de modo geral, que uma rede é basicamente qualquer sistema que pode ser representado matematicamente por um grafo: um conjunto de nós conectados aos pares por ligações que representam algum tipo de relação ou interação. Particularmente, redes complexas têm sido alvo de crescente interesse da comunidade científica, haja visto que descrevem uma grande variedade de sistemas que possuem relevância tanto tecnológica quanto intelectual [6]. Tome como exemplo a Internet, uma rede complexa composta por roteadores e computadores conectados por ligações cabeadas ou sem fio; ideias e fatos se espalham rapidamente por redes sociais, cujos nós representam pessoas e as conexões representam um certo tipo de relação social (como podemos observar nas redes sociais do Twitter, Facebook, Instagram e assim por diante); a *World Wide Web* (WWW) é uma rede virtual gigantesca composta de páginas da Web conectadas por hiperlinks. De fato, os dados disponíveis para estudo passam por diversas áreas multidisciplinares do conhecimento. Portanto, é de grande interesse caracterizar e analisar sistematicamente as propriedades fundamentais destas redes.

Impulsionado por recentes desenvolvimentos que se tornaram possíveis devido à análise de um grande banco de dados já disponível acerca de redes reais, uma grande variedade de novos conceitos e medidas de diferentes grandezas têm sido propostos e investigados. Dentre estes, no contexto deste trabalho, em relação ao modo como atualmente pensamos sobre redes complexas, destacamos: a **distribuição de conectividade**<sup>1</sup> e a **propriedade de mundo pequeno**<sup>2</sup>.

Ao levarmos em conta a natureza dinâmica e o enorme tamanho das redes complexas reais, nota-se que a abordagem da física estatística é muito conveniente devido à sua relação com a teoria de grafos e a possibilidade de caracterizar fenômenos macroscópicos que emergem a partir da evolução dinâmica de elementos básicos que compõem o sistema e regras de interação relativamente simples. Os avanços recentes no sentido de compreender as propriedades de grandes redes complexas têm atraído a atenção da comunidade científica para as implicações que a sua estrutura topológica possa ter sobre questões importantes a respeito de processos dinâmicos ocorrendo sobre tais redes. Apesar de as definições básicas de cada modelo permanecerem inalteradas, existe a necessidade de investigar rigorosamente e comparar o impacto dos vários tipos de rede sobre as características de processos de equilíbrio e de não equilíbrio [7].

Inicialmente esperava-se que teorias de campo médio para processos dinâmicos com TFEAs em redes complexas funcionassem corretamente [8], devido à dimensionalidade infinita destas

---

<sup>1</sup> $P(k)$  é a probabilidade de que um nó escolhido ao acaso esteja conectado com outros  $k$  nós e está relacionada diretamente com o nível de heterogeneidade da rede.

<sup>2</sup>Nas redes que apresentam esta propriedade, a distância média entre dois nós quaisquer cresce logaritmicamente com o número total de nós.

redes e às suas propriedades de mundo pequeno. Para verificar essa suposição, foram desenvolvidas teorias de campo médio heterogêneas (HMF<sup>3</sup>) para analisar o comportamento de modelos já bem conhecidos em redes regulares. Levando em consideração sua relevância para este trabalho, destacamos dois modelos, o modelo suscetível-infectado-suscetível (SIS) e o processo de contato (PC), exemplos clássicos de processos dinâmicos simples que pertencem à classe PD em redes regulares. No modelo SIS, indivíduos infectados em um substrato podem curar-se espontaneamente com taxa fixa ou infectar cada um de seus vizinhos suscetíveis com uma taxa que chamaremos de  $\lambda$ . No PC a infecção ocorre com uma taxa efetiva igual a  $\lambda$  dividido pelo número de conexões feitas pelo vértice em questão. Resultados anteriores [11] mostram que o PC é bem descrito por uma teoria HMF e apresenta uma transição a um limiar finito para um estado endêmico que está relacionado a uma ativação coletiva dos nós da rede, enquanto no modelo SIS o valor do limiar epidêmico de transição tende a zero e um estado ativo persistente é sustentado pela mútua ativação entre os nós mais conectados da rede (*hubs*). O modelo SIS é um caso particular do modelo suscetível-infectado-recuperado-suscetível (SIRS), que acrescenta um terceiro estado possível, o de “recuperado”, a fim de emular um efeito de imunização temporária em um contexto epidêmico. Variando a taxa de recuperação, o modelo SIRS tem os modelos SIR<sup>4</sup> e SIS (cotas inferior e superior desta taxa, respectivamente) como casos limite.

Nesta tese, os objetivos principais são: estudar analiticamente e numericamente a relação entre ativação de *hubs* e ativação coletiva na rede por meio de uma análise da criticalidade do modelo SIRS em topologias complexas e comparar diferentes técnicas de simulação do estado quase-estacionário, em que lidamos com os estados absorventes de maneira adequada a atingir o limite termodinâmico da dinâmica original do processo. O trabalho está organizado da seguinte maneira: no capítulo 2, apresentamos uma breve revisão sobre redes complexas (com ênfase nas propriedades mais relevantes para este trabalho e alguns modelos clássicos para o estudo de processos dinâmicos). No capítulo 3 revisamos os principais conceitos e resultados sobre o estudo das transições de fase e, particularmente, para estados absorventes em redes complexas. No capítulo 4, cujos resultados foram publicados no periódico *Physical Review E* [9], discutimos três diferentes métodos de simulação do estado quase-estacionário e, no capítulo 5, cujos resultados foram publicados também no periódico *Physical Review E* [10], analisamos mecanismos de ativação, baseando-se principalmente na dinâmica do modelo SIRS. Reservamos o capítulo 6 para as conclusões acerca deste trabalho.

---

<sup>3</sup>Do inglês, *heterogeneous mean field*.

<sup>4</sup>Modelo suscetível-infectado-recuperado (ou removido), que invariavelmente tende a um estado estacionário em que todos os sítios encontram-se recuperados ou suscetíveis.

# Capítulo 2

## Redes Complexas

Descrevendo de modo geral, uma rede é qualquer sistema que pode ser matematicamente representado como um grafo cujos nós identificam os elementos do sistema e o conjunto de ligações existentes representa uma interação ou relação entre estes elementos. Tal nível de abstração aplica-se a uma grande variedade de sistemas e, no âmbito teórico, o conceito de redes permite uma boa representação das inter-relações em sistemas complexos cuja caracterização requer o mapeamento das interações entre um grande número de indivíduos.

A linguagem matemática utilizada para descrever redes é a da teoria de grafos. No entanto, estudos recentes de redes muito grandes trouxe a necessidade de definir novas métricas e observáveis estatísticos especificamente voltados para o estudo de sistemas de grande escala. Este capítulo baseia-se principalmente na dissertação de mestrado *Transições de fase para estados absorventes: um estudo em redes regulares e complexas* (R. S. Sander) [12]. Nele serão introduzidas algumas noções fundamentais, definições e a notação básica utilizadas em teoria de redes. Também será analisado o caso especial das redes sem escala e, por fim, revisaremos alguns modelos clássicos de rede que surgem naturalmente ou que são úteis no estudo de processos dinâmicos.

### 2.1 Conceitos fundamentais em teoria de grafos

A teoria de grafos, um vasto campo de estudo da matemática, tem sua origem no trabalho pioneiro de Leonhard Euler (1707-1783) ao resolver a famosa questão das pontes de Königsberg, um problema popular entre os cientistas de seu tempo. Este consiste no seguinte questionamento: partindo do centro de Königsberg (atual Caliningrado, Rússia), é possível dar um passeio pela cidade atravessando cada uma das sete pontes (figura 2.1) uma única vez?

A situação é mostrada esquematicamente na figura 2.2 (à esquerda) e sua solução geral requer certa abstração matemática. A ideia de Euler foi abordar o problema utilizando um mapa simplificado de Königsberg (figura 2.2, à direita). Nesta representação, distâncias reais são grandezas irrelevantes para o caso em questão: partes distintas da cidade serão tratadas como

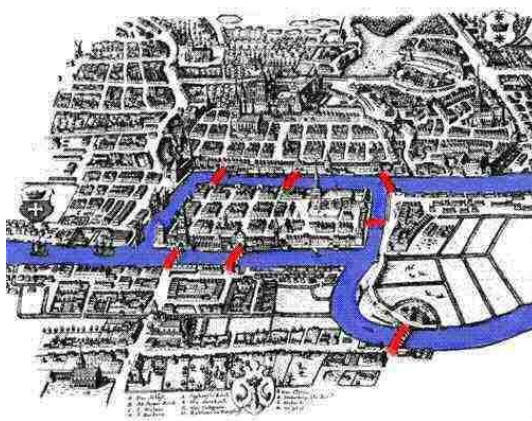


Figura 2.1: As pontes da cidade de Königsberg. Fonte: [goo.gl/7JYXwX](http://goo.gl/7JYXwX).

**nós**, ou **vértices**; se uma parte da cidade está conectada a outra por uma das pontes, traçamos uma linha, ou **ligação**, entre estes vértices. Agora, o mapa da cidade tornou-se um grafo e, de posse deste novo formalismo, o problema assume uma forma mais abstrata: será possível encontrar um caminho que passa por todas as ligações, apenas uma vez em cada uma delas?

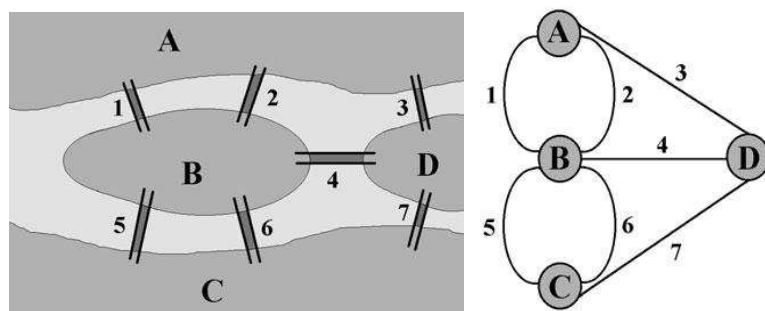


Figura 2.2: À esquerda, um mapa simplificado do centro da cidade de Königsberg, como era na época de Euler. À direita, sua representação como um grafo. Figuras retiradas de [13].

Note que, de certa forma, esse procedimento facilita a resolução do problema, já que agora todas as partes da cidade são descritas exatamente da mesma maneira (como vértices do grafo). Assim, uma solução, se existir, deve depender diretamente das propriedades intrínsecas deste grafo. Uma grandeza intrínseca deste objeto é o **grau** de um nó  $i$ , ou número de conexões de um vértice, que será denotado por  $k_i$ . Se  $k_i$  for par, percebe-se que o vértice é um ponto de cruzamento, ou seja, pode-se entrar no nó por uma ligação e sair pela outra. Se o grau do vértice for ímpar, este só pode ser um ponto de início ou de término do caminho. O requisito para passar por cada ponte apenas uma vez só é satisfeito se não houver nenhum vértice de grau ímpar (de modo que os pontos de início e término coincidam) ou se houverem apenas dois vértices com grau ímpar (nesse caso, os pontos de início e término do caminho são distintos). Temos então a solução para o problema das pontes de Königsberg: observando o grafo da figura 2.2 nota-se que todos os vértices possuem grau ímpar, não satisfazendo portanto as condições acima. Logo, não existe caminho possível que passe apenas uma vez por cada uma das sete pontes. O estudo

deste tipo de problema contribuiu para que a teoria de grafos evoluísse desde então e, como veremos adiante, para grafos muito grandes (com muitos vértices), fez-se necessário o uso de conceitos estatísticos para descrevê-los. A seguir, trataremos de alguns aspectos do formalismo matemático utilizado para descrever tais objetos.

Define-se um grafo não direcionado como um par de conjuntos dado por  $G(V, E)$ , em que  $V$  é um conjunto não vazio e contável de elementos, ditos vértices (ou nós), enquanto  $E$  é um conjunto não ordenado de pares de vértices, ditos ligações (ou conexões). Ao longo desta tese, iremos nos referir a um vértice pela sua ordem  $i$  no conjunto  $V$ . A conexão  $(i, j)$  une os vértices  $i$  e  $j$ , que são ditos adjacentes ou conectados<sup>1</sup>. Denota-se por  $N$  o número total de nós do grafo e esta grandeza define a ordem do grafo.

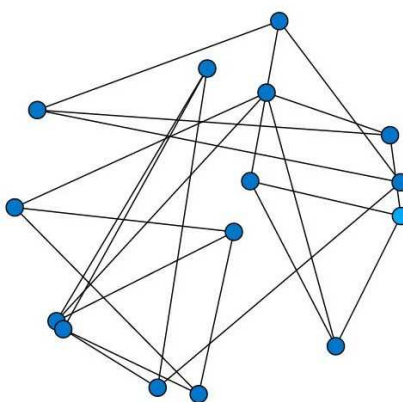


Figura 2.3: Representação gráfica de um grafo.

Para um grafo de ordem  $N$ , o número máximo de ligações é dado pelo número de maneiras como podemos escolher dois deles em um total de  $N$ , ou seja,  $\binom{N}{2} = N(N - 1)/2$ . Um grafo em que todos os possíveis pares de nós estão conectados é chamado de **grafo completo**. Graficamente, costuma-se expressar um grafo como um conjunto de pontos, representando os vértices, com linhas unindo-os, representando as conexões (figura 2.3). Também podemos definir um grafo matematicamente de maneira conveniente utilizando a **matriz de adjacência**  $\Lambda_N = \{x_{ij}\}$ . Trata-se de uma matrix  $N \times N$  definida do seguinte modo:

$$x_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{se } (i, j) \in E \\ 0 & \text{se } (i, j) \notin E \end{cases} \quad (2.1)$$

Para grafos não direcionados a matriz de adjacência é simétrica ( $x_{ij} = x_{ji}$ ), logo contém informações redundantes.

Um aspecto importante acerca da estrutura de grafos é a acessibilidade dos nós, isto é, a possibilidade de sair de um vértice e chegar em outro seguindo as conexões presentes na rede. Analisaremos as propriedades de conectividade definindo um caminho  $P_{i_0, i_n}$  em um dado grafo

<sup>1</sup>Também é comum chamar vértices conectados como **primeiros vizinhos** ou **vizinhos mais próximos**.

$G = (V, E)$  como uma coleção ordenada de  $n + 1$  vértices  $V_P = \{i_0, i_1, \dots, i_n\}$  e  $n$  conexões  $E_P = \{(i_0, i_1), (i_1, i_2), \dots, (i_{n-1}, i_n)\}$ , de modo que  $i_\alpha \in V$  e  $(i_{\alpha-1}, i_\alpha) \in E$  para todo  $\alpha$ . O caminho  $P_{i_0, i_n}$  conecta os nós  $i_0$  e  $i_n$  e o **comprimento** deste caminho é dado por  $n$ . Um ciclo, ou *loop*, é um caminho fechado ( $i_0 = i_n$ ) no qual todos os nós e todas as ligações são distintas. Diz-se que um grafo é conectado se existe um caminho que conecta quaisquer dois vértices da rede.

O conceito de “caminho” é a base da definição de distância entre nós. A medida natural da distância entre dois vértices  $i$  e  $j$  é definida como o número de nós que o **menor caminho**  $l_{ij}$  entre ambos cruza. Usando o comprimento do menor caminho como uma medida de distância entre vértices, é possível definir o tamanho típico e o **diâmetro** de um grafo, em que o diâmetro é definido como

$$d_G = \max_{i,j} l_{ij} \quad (2.2)$$

Outra definição aceita para o tamanho linear de um grafo é o **menor caminho médio**, definido como o valor médio de  $l_{ij}$  sobre todos os pares de vértices na rede

$$\langle l \rangle = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{ij} l_{ij} \quad (2.3)$$

Exemplos simples de distâncias em grafos incluem o grafo completo, em que  $\langle l \rangle = 1$  e a rede hipercúbica em  $D$  dimensões com  $N$  vértices:  $\langle l \rangle \sim N^{1/D}$ . Na maior parte dos grafos aleatórios, o menor caminho médio cresce com o logaritmo do número de nós como  $\langle l \rangle \sim \log N$ , ou até mais lentamente. Trata-se de um crescimento bem mais lento do que aquele observado para redes hipercúbicas. O fato de que quaisquer dois nós estão conectados por um caminho que possui um valor relativamente baixo constitui o chamado **efeito de mundo pequeno**.

Em particular, para este trabalho, um tipo especial de grafo apresenta grande relevância<sup>2</sup>, o **grafo estrela**. Em teoria de grafos, uma estrela  $S_k$  é o grafo bipartido completo  $K_{1,k}$ [14]: uma árvore com um nó interno, formando  $k$  ligações com outros nós que estão conectados apenas ao nó central (ou seja, uma árvore com número  $k$  de folhas). Alternativamente, alguns autores definem  $S_k$  como sendo a árvore de ordem  $k$  com diâmetro máximo igual a 2. Neste caso, uma estrela com  $k > 2$  apresenta  $k - 1$  folhas.

---

<sup>2</sup>Como veremos adiante, sua importância neste trabalho se dá em um contexto de espalhamento e sustentação de uma epidemia. Outra aplicação importante é na modelagem de problemas em computação distribuída.

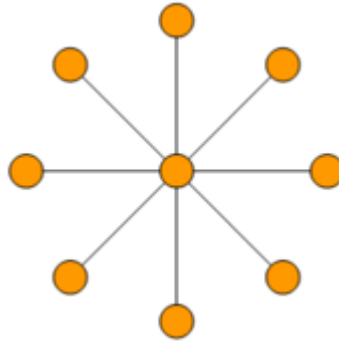


Figura 2.4: Um grafo estrela  $S_8$ .

## 2.2 Caracterização estatística de grafos

O recente desenvolvimento da ciência de redes deu-se em parte devido ao fato de que, nas últimas décadas, foi possível a aquisição sistemática e manipulação de uma grande quantidade de dados para redes de grande escala. Porém, a análise de sistemas grandes não pode ser feita apenas observando elementos ou propriedades locais pois isso é impraticável. Ou seja, para levar em conta o comportamento global de certas grandezas, devemos lançar mão de medidas estatísticas.

Começaremos a nossa descrição introduzindo a distribuição de conexões  $P(k)$ , que é definida como sendo a probabilidade de que um nó escolhido ao acaso tenha conectividade (ou grau)  $k$ , ou seja, a chance de que este nó faça ligação com outros  $k$  nós. Podemos obter esta distribuição construindo um histograma normalizado dos graus dos vértices da rede. Definimos o grau médio de um grafo não direcionado como

$$\langle k \rangle = \frac{1}{N} \sum_i k_i = \sum_k k P(k) \equiv \frac{2E}{N}, \quad (2.4)$$

já que cada ligação contribui para o grau de um nó. De maneira análoga ao que foi feito para  $\langle k \rangle$ , definimos o  $n$ -ésimo momento da distribuição de conexões como

$$\langle k^n \rangle = \sum_k k^n P(k). \quad (2.5)$$

Veremos adiante que as propriedades de  $P(k)$  são fundamentais para identificarmos diferentes classes de rede.

De acordo com  $P(k)$ , é comum classificar as redes em duas grandes classes: **homogêneas** ou **heterogêneas**. Nas redes homogêneas, observa-se que  $P(k)$  decai rapidamente (é frequente dizer que uma distribuição deste tipo apresenta uma “cauda leve”). Exemplos de distribuições que apresentam essa propriedade são a Gaussiana e a de Poisson. O segundo tipo corresponde a redes que possuem uma heterogeneidade estatística intrínseca (distribuições com “cauda pe-

sada”) e, em geral, a distribuição de conexões para tais redes apresenta um decaimento em lei de potência da forma

$$P(k) \sim k^{-\gamma}. \quad (2.6)$$

Assim, note que é possível, mesmo que pouco provável, encontrarmos nós com grau  $k$  tal que  $k \gg \langle k \rangle$ .

Para obtermos uma melhor compreensão sobre o significado de tal heterogeneidade, observemos os dois primeiros momentos de  $k$ . Aproximando  $k$  como uma variável contínua (o que é plausível no limite termodinâmico, em que  $N \rightarrow \infty$ ), podemos obter o primeiro momento pela expressão

$$\langle k \rangle \approx \int_m^{k_c} k P(k) dk, \quad (2.7)$$

em que  $k_c \leq N$  é o maior grau existente para um nó na rede e  $k_0 \geq 1$  é o menor grau existente. Assim, usando  $P(k)$  (normalizado, com  $k_c \rightarrow \infty$ ) de acordo com a equação (2.6), obtém-se:

$$\begin{aligned} \langle k \rangle &\approx (\gamma - 1) k_0^{\gamma-1} \int_{k_0}^{k_c} k^{-\gamma+1} dk \\ &= \frac{\gamma - 1}{\gamma - 2} (k_0^{2-\gamma} - k_c^{2-\gamma}). \end{aligned} \quad (2.8)$$

Agora, fazendo  $k_c \rightarrow \infty$  e  $\gamma > 2$  obtém-se

$$\langle k \rangle = \frac{\gamma - 1}{\gamma - 2} k_0^{2-\gamma}, \quad (2.9)$$

que é um valor finito e bem definido no limite termodinâmico. Calculando o segundo momento, obtemos

$$\langle k^2 \rangle \sim k_c^{3-\gamma}. \quad (2.10)$$

Define-se a variância normalizada da distribuição  $P(k)$  como  $\sigma^2 / \langle k \rangle^2$ , em que a variância  $\sigma^2$  é igual a  $\langle k^2 \rangle - \langle k \rangle^2$ . Mas, ao tomarmos o limite assintótico para redes infinitas ( $k_c \rightarrow \infty$ ) nota-se que, para  $\gamma < 3$ ,  $\langle k^2 \rangle \rightarrow \infty$ . Ou seja, nestas condições as flutuações se tornam infinitas! É daí que surge o termo **rede sem escala**: como estas flutuações divergem no intervalo  $2 < \gamma \leq 3$ , o valor médio não pode ser interpretado como uma escala característica para este sistema.

Pode-se definir um parâmetro  $\kappa$  para determinar o grau de heterogeneidade da rede como

$$\kappa = \frac{\langle k^2 \rangle}{\langle k \rangle}. \quad (2.11)$$

Como foi observado anteriormente, a rede é sem escala se  $\kappa \rightarrow \infty$ . Entretanto, para redes homogêneas,  $\kappa \sim \langle k \rangle$ . Assim, levando em conta que na natureza (e até mesmo computacionalmente) não existem redes infinitas, podemos dizer que redes sem escala são aquelas nas quais  $\kappa \gg \langle k \rangle$  [13].

Apesar de a distribuição  $P(k)$  ter atraído a atenção da comunidade científica como um fator

determinante para compreender a estrutura de redes de grande escala, hoje é claro que esta é apenas uma dentre várias grandezas estatísticas que podem ser usadas para caracterizar a organização estrutural e hierárquica de um grafo. Sendo mais específico, não é de se esperar que vértices conectem-se uns aos outros independentemente de seu tipo ou de suas propriedades. De fato, em muitos casos observa-se, através da coleta de dados de redes reais, justamente o contrário. Um comportamento padrão típico bem conhecido nas áreas de ciências sociais<sup>3</sup>, ecologia e epidemiologia como **associatividade** refere-se à uma tendência que os vértices têm de se conectar com outros vértices que têm propriedades similares. De maneira análoga, podemos definir um padrão de **desassociatividade**, que ocorre quando os constituintes da rede preferem ligar-se com outros que possuem diferentes atributos. Tais padrões exercem um efeito significativo nas propriedades topológicas de um grafo, afetando o modo como são formados grupos na rede e sendo determinantes em relação ao arranjo das conexões entre os vértices.

Padrões de associatividade podem ser definidos com relação a qualquer propriedade dos nós. Porém, no caso de estruturas de grande escala, o foco dos pesquisadores tem sido no estudo da associatividade com relação ao grau dos vértices. Na situação em que os nós tendem a conectar-se com outros de grau similar, dizemos que a rede é *associativa*. Em contraste a isso, observa-se que conexões em muitas redes biológicas e tecnológicas são mais propensas a unir vértices com grau consideravelmente diferente. Nesse caso, diz-se que o grafo é *desassociativo*. Apesar de outras possibilidades, as correlações são frequentemente caracterizadas de acordo com a probabilidade condicional  $P(k', k'', \dots, k^{(n)} \mid k)$  de que um vértice de grau  $k$  esteja simultaneamente conectado a outros  $n$  vértices com graus  $k', k'', \dots, k^{(n)}$ . Dizemos que uma rede é não correlacionada quando a probabilidade condicional acima é independente da estrutura do grafo, caso no qual a única função relevante é a distribuição de conectividade  $P(k)$ .

A probabilidade condicional  $P(k' \mid k)$ , a probabilidade de um vértice de grau  $k$  estar conectado a um vértice de grau  $k'$ , fornece detalhes sobre a correlação de graus na rede. Apesar de simples, o cálculo direto desta função a partir de dados empíricos geralmente é uma tarefa muito trabalhosa. Uma grandeza mais prática para estudarmos a estrutura da rede é dada pela média dos graus dos vizinhos mais próximos de um nó  $i$ :

$$k_{nn,i} = \frac{1}{k_i} \sum_{j \in \mathcal{V}(i)} k_j, \quad (2.12)$$

em que a soma é feita sobre os vértices que são vizinhos mais próximos de  $i$ . A partir desta grandeza, obtemos uma medida conveniente para investigar o comportamento da função de correlação de graus a partir do grau médio dos vizinhos mais próximos,  $k_{nn}(k)$ , para vértices

---

<sup>3</sup>É uma observação comum neste contexto o fato que pessoas tendem a se associar com outras que compartilham dos mesmos interesses.

de grau  $k$ :

$$k_{nn}(k) = \frac{1}{N_k} \sum_{i/k_i=k} k_{nn,i}, \quad (2.13)$$

em que  $N_k$  é o número de nós com grau  $k$ . Esta última quantidade é relacionada às correlações entre os graus de vértices que estão conectados e também pode ser escrita como

$$k_{nn}(k) = \sum_{k'} k' P(k' | k). \quad (2.14)$$

Se os graus dos vértices vizinhos forem descorrelacionados,  $P(k' | k)$  é uma função apenas de  $k'$  e, portanto,  $k_{nn}(k)$  é uma constante. Se houver correlações, identificamos duas classes gerais de redes analisando o comportamento de  $k_{nn}(k)$ . Se  $k_{nn}$  for uma função crescente de  $k$ , vértices com grau elevado tem uma probabilidade significativamente maior de estarem conectados a vértices que também possuam grau elevado e isso corresponde a uma rede associativa. Por outro lado, um comportamento decrescente da função  $k_{nn}(k)$  define uma rede desassociativa, no sentido que vértices com alto grau possuem uma vizinhança composta de vértices com grau baixo e o contrário é verdade para nós com menor grau.

É importante frisar, entretanto, que dada uma certa distribuição de conexões, uma rede de tamanho finito completamente descorrelacionada com relação a graus nem sempre é possível por causa de vínculos estruturais, tais como a existência de múltiplas ou autoconexões. Qualquer rede com tamanho finito apresenta um *cutoff* estrutural<sup>4</sup>  $k_c$  e redes com distribuições delimitadas e segundo momento  $\langle k^2 \rangle$  finito apresentam um grau máximo  $k_{max}$  necessariamente abaixo do *cutoff* estrutural.

Para o caso de redes não correlacionadas, podemos obter uma forma explícita para a probabilidade condicional  $P(k' | k)$ . Conforme já mencionado, esta probabilidade não depende de  $k$  e sua relação funcional em termos de  $k'$  pode ser obtida calculando a probabilidade de que um dado vértice aponta para um outro vértice com grau  $k'$ . Esta probabilidade é dada pelo número total de ligações saindo de nós com grau  $k'$  dividido pelo número total de conexões que saem dos nós de qualquer grau. Já que cada um dos  $N_{k'}$  nós possui  $k'$  ligações, obtemos

$$P_{nc}(k' | k) = \frac{k' N_{k'}}{\sum_{k''} k'' N_{k''}}. \quad (2.15)$$

Considerando que  $P(k) = N_k/N$ , temos

$$P_{nc}(k' | k) = \frac{1}{\langle k \rangle} k' P(k'). \quad (2.16)$$

Segundo esta expressão, mesmo em uma rede descorrelacionada, a probabilidade de que qualquer ligação aponte para um nó com dado grau  $k'$  não é uniforme, mas proporcional ao próprio grau. Ou seja, seguindo qualquer conexão aleatoriamente é mais provável que terminemos em

---

<sup>4</sup>Valor máximo para o grau que um nó pode ter em uma dada rede.

um nó com grau elevado (*hub*). Em um grafo, quanto mais conectado se é, mais fácil é de ser encontrado. Este resultado é especialmente relevante para o caso de redes em que os valores atribuídos para os graus variam muito e será particularmente útil em diversos cálculos analíticos onde a natureza heterogênea da rede afeta processos de equilíbrio e de não equilíbrio, mesmo no caso não correlacionado. Para este caso, o comportamento de  $k_{nn}(k)$  é facilmente obtido quando substituímos a equação (2.16) na equação (2.14):

$$k_{nn}^{nc}(k) = \frac{\langle k^2 \rangle}{\langle k \rangle}. \quad (2.17)$$

Logo, em uma rede aleatória não correlacionada, o grau médio dos vizinhos mais próximos não depende de  $k$  e assume um valor constante determinado pelos dois primeiros momentos da distribuição  $P(k)$ .

Foi observado que a maioria das redes reais apresentam correlações entre graus. No entanto, para muitos propósitos, as redes aleatórias não correlacionadas são importantes, especialmente para o tratamento analítico de sistemas dinâmicos, cujas soluções geralmente estão disponíveis somente para este tipo de rede [15].

O algoritmo mais difundido para construir redes aleatórias com uma distribuição  $P(k)$  arbitrária é o **modelo de configurações** (*configuration model*, ou CM). Pela definição original do algoritmo, atribui-se a cada vértice  $i$  (dentre  $N$  vértices) um número  $k_i$  de ligações que este nó irá fazer, de acordo com a distribuição  $P(k)$ , com  $k_0 \leq k_i \leq N$  e impondo a condição de que  $\sum_i k_i$  seja um número par. Completa-se a rede unindo estas ligações entre pares de nós escolhidos ao acaso. Desse modo, ao fim do procedimento, teremos uma rede com distribuição de conexões  $P(k)$  que, em princípio, não apresenta correlações entre graus, pois os nós foram escolhidos aleatoriamente.

Este procedimento funciona muito bem para redes nas quais  $\langle k^2 \rangle$  é finito. Porém, para redes sem escala, deve-se tomar um certo cuidado. De fato pode-se mostrar que, para estas redes, é possível construir uma rede não correlacionada apenas assinalando aleatoriamente os graus para cada nó de acordo com a distribuição desejada. No entanto, procedendo deste modo, haverá uma fração de auto-conexões e conexões múltiplas, que são perfeitamente aceitáveis no contexto da teoria de grafos, mas, em geral, não servem para a modelagem de sistemas reais. Normalmente bastaria impor restrições para evitar múltiplas e auto-conexões durante o processo de construção do sistema, porém, isso acaba por introduzir correlações na rede.

De acordo com [15], para construirmos uma rede não correlacionada, evitando auto-conexões e ligações múltiplas, o *cutoff*  $k_c$  da rede deve crescer no máximo tão rapidamente quanto  $N^{1/2}$ . De fato, para uma rede com distribuição em lei de potência, o grau do vértice mais conectado escala com o tamanho da rede como [15]

$$k_{max}(N) \sim N^{1/(\gamma-1)}. \quad (2.18)$$

Se tomarmos  $\gamma < 3$  obtemos  $k_{max} \gg N^{1/2}$ , o que explica o fato de haverem correlações quando utilizamos este algoritmo. Para  $\gamma \geq 3$  esse problema não ocorre, já que neste caso  $k_{max}(N) \ll N^{1/2}$ .

Assim, já que o problema está na forma como  $k_{max}$  escala com o tamanho da rede, foi proposto [15] o algoritmo do modelo de configurações não correlacionado (originalmente, *uncorrelated configuration model*, ou UCM), que baseia-se nos seguintes passos:

- Assinale para cada vértice  $i$  (de um conjunto de  $N$  vértices desconectados), um número  $k_i$  de ligações a serem realizadas por este vértice, de acordo com a distribuição  $P(k) \sim k^{-\gamma}$ , impondo que  $\sum_i k_i$  seja par e  $k_0 \leq k_i \leq N^{1/2}$ .
- Construa a rede efetuando as ligações em pares de nós escolhidos aleatoriamente de acordo com uma distribuição de probabilidades uniforme, evitando auto-conexões e conexões múltiplas.

Conforme discutido anteriormente neste capítulo, para redes não correlacionadas o grau médio dos primeiros vizinhos  $k_{nn}(k)$  deve ser independente de  $k$ . Isso pode ser observado no gráfico da figura 2.5. Na figura 2.6 mostramos a distribuição de conexões para alguns valores de  $\gamma$ . Neste trabalho, o algoritmo UCM será utilizado no estudo de um processo dinâmico em redes sem escala.

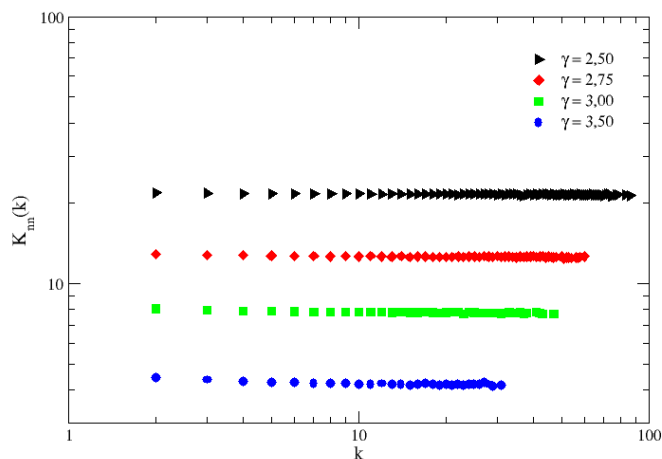


Figura 2.5: Gráfico  $k_{nn} \times k$  gerado para  $N = 10000$  e  $k_0 = 6$ , mostrando a independência do grau médio dos primeiros vizinhos  $k_{nn}$  em relação ao grau  $k$  para quatro valores do expoente  $\gamma$ .

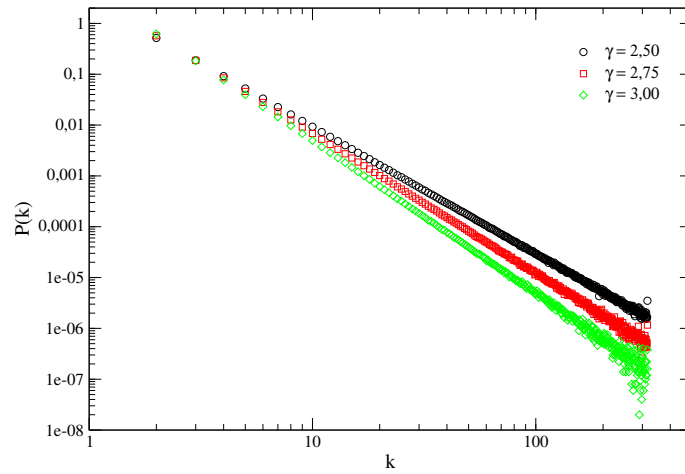


Figura 2.6: Gráfico  $P(k) \times k$  gerado com os mesmos parâmetros  $N$  e  $k_0$  da figura anterior, mostrando três exemplos de distribuição em lei de potência geradas computacionalmente.

# Capítulo 3

## Transições de fase para estados absorventes em redes complexas

O objetivo deste capítulo é apresentar de maneira geral algumas idéias e conceitos que serão utilizados ao longo desta tese, tais como ferramentas para o estudo de fenômenos críticos (tanto no equilíbrio quanto fora do equilíbrio) e a descrição de um sistema de partículas por meio de equações mestras. Enfatizaremos processos nos quais há transição de fase para um estado absorvente, utilizando como exemplos principais o *processo de contato* e o *modelo SIS*. Inicialmente os conceitos serão apresentados de maneira mais geral e, em seguida, para o caso de redes complexas sem escala.

### 3.1 Processos dinâmicos

Para descrever a dinâmica de um sistema de partículas estocástico associaremos a cada sítio  $i$  da rede uma variável  $\sigma_i$ , que caracteriza o seu estado dinâmico. Se cada nó representa um indivíduo, a variável  $\sigma_i$  pode representar um certo atributo particular deste indivíduo. Por exemplo, considere o caso típico do espalhamento de uma epidemia: nesse cenário,  $\sigma_i$  indica se o indivíduo  $i$  está saudável ou infectado por uma certa enfermidade. Para cada nó, podemos enumerar todos os estados possíveis  $\sigma_i = 0, 1, 2, \dots, \alpha$  e o conhecimento da variável de estado de todos os nós da rede nos permite definir um estado microscópico do sistema (microestado), ou seja, podemos representar uma configuração particular no tempo  $t$  pelo conjunto  $\sigma(t) = (\sigma_1(t), \sigma_2(t), \dots, \sigma_N(t))$ , em que  $i = 1, 2, \dots, N$ .

#### 3.1.1 A equação mestra

Em geral, não é possível seguir estritamente a dinâmica microscópica de sistemas muito grandes devido ao enorme número de variáveis envolvidas e à natureza estocástica intrínseca da

maioria dos fenômenos em questão. A dinâmica do processo é dada por meio de transições instantâneas  $\sigma \rightarrow \sigma'$ , que ocorrem espontaneamente a uma taxa  $W_{\sigma \rightarrow \sigma'} \geq 0$ . Sendo assim, temos que o estado inicial, o conjunto de todas as configurações e as taxas de transição descrevem por completo o modelo estocástico a ser estudado.

Seja  $P(\sigma, t)$  a probabilidade de, no instante  $t$ , encontrarmos o sistema no microestado  $\sigma$ . Considere que  $W_{\sigma \rightarrow \sigma'}$  é a taxa por unidade de tempo<sup>1</sup> com que ocorre a transição de um estado  $\sigma$  para um estado  $\sigma'$ . Se a evolução temporal de  $P(\sigma, t)$  pode ser determinada completamente pela distribuição de probabilidade no tempo  $t$  (sem depender do histórico da evolução do sistema) diz-se que o processo dinâmico apresenta a propriedade *markoviana*.

Podemos descrever a dinâmica de um sistema estocástico na forma de uma **equação mestra**, que será formulada em termos das taxas  $W$  de transição entre cada estado. Trata-se de uma equação diferencial linear que descreve o fluxo de probabilidade “entrando” e “saindo” de uma certa configuração  $\sigma$ . A equação de evolução temporal para  $P(\sigma, t)$ , ou equação mestra, é dada por

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\sigma, t) = \underbrace{\sum_{\sigma'} W_{\sigma' \rightarrow \sigma} P(\sigma')}_{\text{entrando}} - \underbrace{\sum_{\sigma'} W_{\sigma \rightarrow \sigma'} P(\sigma)}_{\text{saindo}}. \quad (3.1)$$

Note que há termos de fluxo de probabilidade de entrada e saída do estado  $\sigma$  no tempo  $t$ , de modo que deve ser obedecida a condição de normalização

$$\sum_{\sigma} P(\sigma, t) = 1. \quad (3.2)$$

A princípio, de posse da solução da equação mestra podemos calcular os valores esperados de todas as grandezas de interesse do sistema. Dada qualquer função de estado  $A(\sigma)$ , obtém-se prontamente seu valor médio no tempo  $t$  como

$$\langle A(t) \rangle = \sum_{\sigma} A(\sigma) P(\sigma, t), \quad (3.3)$$

em que  $\langle A(t) \rangle$  representa a média de  $A(\sigma)$  no instante  $t$ . Esta grandeza pode ser vista como uma média sobre diferentes realizações estocásticas da evolução de um mesmo sistema, que começam a partir das mesmas condições iniciais. Neste contexto, há um interesse particular por sistemas que possuam um limite assintótico bem definido:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P(\sigma, t) = P_{\infty}(\sigma). \quad (3.4)$$

Então dizemos que o sistema está em um **estado estacionário**, no qual a média sobre a distribuição estacionária vale como representação do sistema após um certo tempo transiente.

A equação mestra descreve um **processo de Markov**, que não depende dos estados anteri-

---

<sup>1</sup>Vale ressaltar que, em geral, os coeficientes  $W$  não são probabilidades. Logo, podem ser maiores que 1.

ores do sistema. Em sistemas que apresentam um número finito de estados, esta característica garante a unicidade do estado estacionário[3]. Em geral, para a maioria dos sistemas (mesmo aqueles muito simples), não é possível obter uma solução analítica da equação mestra. Assim, é comum empregar métodos aproximados para a obtenção de uma solução. A aproximação de **campo médio** (CM) é uma das abordagens mais comuns e consiste em substituir as variáveis microscópicas pelos seus valores médios, sejam estes temporais ou espaciais. Estes modelos de CM levam a equações cinéticas que apesar de serem, em geral, acopladas e não lineares, podem ser analisadas numericamente.

Uma outra possibilidade, que será muito utilizada nesta tese, é o estudo dos modelos estocásticos por meio de simulações numéricas, nas quais taxas e probabilidades são representadas em um computador por meio da utilização de geradores de números aleatórios. Calcula-se numericamente a distribuição de estados do processo através da escolha randômica dentre as possíveis transições para um estado, associando uma certa probabilidade a cada uma destas transições. Ao fim de cada transição, tipicamente incrementa-se o tempo em unidades que são múltiplos de *passos de Monte Carlo*[16]. Espera-se que o sistema atinja o estado estacionário após um certo número de passos e que a distribuição dos estados convirja para a distribuição que é solução estacionária da equação mestra que descreve tal processo.

Um processo markoviano obedece à condição de balanço detalhado se a equação

$$W_{\sigma' \rightarrow \sigma} P(\sigma') = W_{\sigma \rightarrow \sigma'} P(\sigma) \quad (3.5)$$

é verdadeira para todo par de estados  $\sigma$  e  $\sigma'$ . Esta é uma condição forte que, em outras palavras, nos diz que cada par de termos de “entrada” e “saída” tem contribuição nula na equação mestra. No equilíbrio devemos ter

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\sigma, t) = 0, \quad (3.6)$$

logo, conclui-se que o balanço detalhado é uma condição suficiente para o equilíbrio. Processos fora do equilíbrio não satisfazem esta condição, pelo menos não localmente. Na maioria dos casos, este tipo de processo está sujeito a forças e correntes externas, adição de energia ou novas partículas, ou até mesmo apresenta dissipação. Por consequência, em geral, a distribuição estacionária de probabilidade fora do equilíbrio é desconhecida<sup>2</sup>. A condição de balanço detalhado nos diz se o sistema é reversível microscopicamente ou não.

### 3.1.2 Transições de Fase

Há muito tempo a física estatística tem dedicado esforços para compreender o fenômeno das transições de fase: na medida em que variamos um **parâmetro de controle**, ocorre uma

---

<sup>2</sup>Note que a falta de balanço detalhado não implica a ausência de um estado estacionário.

mudança no comportamento macroscópico do sistema em questão. O exemplo mais comum, porém não-trivial, de uma transição de fase é a transformação física pela qual a água passa entre as fases líquida, sólida e gasosa, quando varia-se a sua temperatura: na pressão atmosférica, a água torna-se gelo sólido precisamente a  $0^{\circ}C$  e sofre ebulição a  $100^{\circ}C$ . Outro exemplo é a mudança de fase em um material ferromagnético: ao elevar a temperatura acima de uma temperatura crítica, o material muda da fase ferromagnética para a fase paramagnética. Neste exemplo, a magnetização é o **parâmetro de ordem** do sistema, a temperatura é o parâmetro de controle e a temperatura crítica na qual ocorre a transição de fase denominamos **ponto de transição**.

Segundo a fenomenologia de Landau, em uma transição contínua o parâmetro de ordem varia continuamente entre as fases do sistema, enquanto que em uma transição descontínua o parâmetro de ordem apresenta um “salto” no ponto de transição.

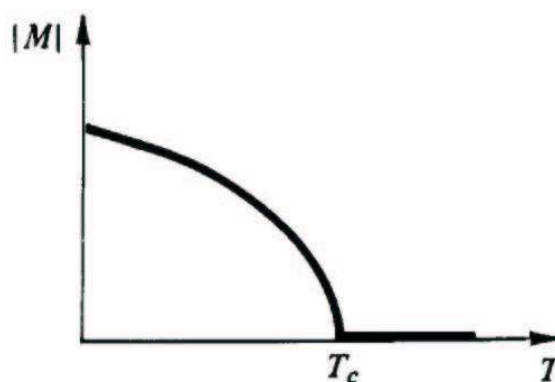


Figura 3.1: Gráfico que ilustra a transição de fase em um ferromagneto, com campo externo nulo. Figura retirada de [3].

No ponto de transição, os potenciais termodinâmicos tornam-se não analíticos (suas derivadas divergem acima de uma certa ordem), caracterizando a transição de fase. Quando uma derivada primeira da energia livre é descontínua temos uma transição de fase de primeira ordem e, quando a singularidade ocorre na derivada segunda da energia livre, temos uma transição de fase de segunda ordem, caracterizada por um **ponto crítico**. Esta não-analiticidade não aparece para sistemas pequenos. A causa de tal comportamento singular é dada por flutuações microscópicas que atingem escalas macroscópicas, originando um comportamento coletivo que fica melhor caracterizado quando a correlação entre os constituintes do sistema é investigada. No exemplo do processo de solidificação da água, a entropia do sistema (uma derivada primeira da energia livre de Gibbs) é descontínua, caracterizando uma transição de fase de primeira ordem. No caso do ferromagneto, a transição é classificada como sendo de segunda ordem, pois a singularidade ocorre na segunda derivada da energia livre.

Sistemas estacionários fora do equilíbrio podem sofrer transições de fase. Entretanto, diferentemente de sistemas em equilíbrio termodinâmico, geralmente não é possível relacionar as grandezas relevantes do problema a derivadas das energias livres[17]. Conhecemos estas tran-

sições por transições cinéticas, ou transições de não-equilíbrio[18, 19].

## 3.2 Processos fora do equilíbrio

Um processo é considerado fora do equilíbrio se sua dinâmica microscópica viola o princípio da reversibilidade microscópica (ou balanço detalhado). De um modo geral, todos os sistemas macroscópicos que estão submetidos a uma força externa não-conservativa ou a uma fonte de energia encontram-se fora do equilíbrio. Isso geralmente é devido ao fato de que, mesmo no estado estacionário, a transição para um certo subconjunto pode ser favorecida. Existem processos que violam o princípio da reversibilidade microscópica de tal modo que não podemos aplicar os conceitos da mecânica estatística de equilíbrio sequer de maneira aproximada. Estes processos são chamados de processos **longe do equilíbrio**.

Em particular, temos sistemas com **estados absorventes**. Esta denominação é atribuída a uma configuração na qual um sistema fora do equilíbrio pode ficar “aprisionado” em definitivo durante sua evolução. Um estado absorvente pode ser atingido a partir de outros estados, mas qualquer outro estado não pode ser atingido a partir do estado absorvente. Para um sistema finito com pelo menos um estado absorvente acessível, os estados não absorventes são chamados de estados transientes. Processos com estados absorventes são um tipo de processo longe do equilíbrio.

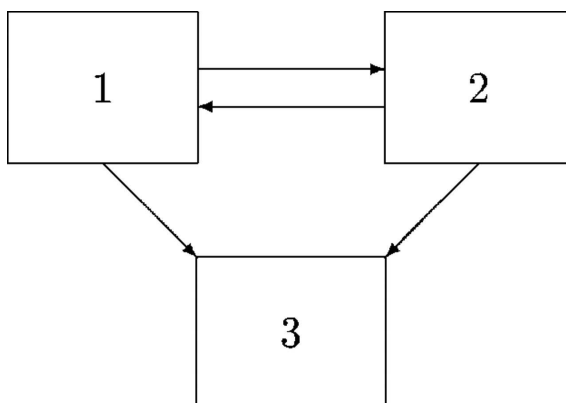


Figura 3.2: Um simples processo de três estados. Os estados **1** e **2** são transientes, enquanto o estado **3** é absorvente.

Para exemplificar, considere um processo simples que possui apenas 3 estados possíveis. As possíveis transições são exibidas de maneira esquemática na figura 3.2. Note que é possível acessar os estados **2** e **3** a partir do estado **1**, assim como é possível fazer a transição para os estados **1** ou **3** a partir de **2**. Ou seja, para este modelo, partindo de **1** ou **2** é possível acessar qualquer outra configuração do sistema, fato que caracteriza estes estados como sendo transientes. Porém, uma vez que o sistema atinge o estado **3**, jamais sairá desta configuração.

Empregando linguagem coloquial, pode-se dizer que a dinâmica do sistema foi “absorvida” no instante em que foi atingido o estado absorvente **3**.

Um tipo especial de transição de fase fora do equilíbrio é a que ocorre em sistemas com estados absorventes que admitem um ou mais estados estacionários ativos (não-triviais) além do estado estacionário absorvente. Denotamos estas transições por **transições de fase para estados absorventes**.

Processos com estados absorventes aparecem com frequência na modelagem de fenômenos em diversas áreas do conhecimento, tais como reações químicas, epidemiologia e dinâmica populacional.

### 3.3 Universalidade

O conceito de universalidade [20] é importante para o estudo de transições de fase, tanto no equilíbrio quanto longe dele. Em Mecânica Estatística, universalidade é a observação de que existem propriedades do sistema que não dependem dos seus detalhes dinâmicos e isso é verdadeiro para uma grande classe de processos. Com este conceito, espera-se que o comportamento crítico de tais transições possa ser associado a um conjunto finito de possíveis classes, as quais denotamos **classes de universalidade**. Este conceito foi proposto originalmente por físicos experimentais cujo objetivo era descrever sistematicamente a observação de que vários sistemas, aparentemente não relacionados, apresentavam o mesmo tipo de comportamento singular em uma transição de fase. Transições contínuas são caracterizadas pela ausência de um comprimento característico que, em geral, são caracterizados por leis de potência. Analisamos as classes de universalidade em termos de expoentes e funções de escala definidos próximos da criticalidade. Logo, uma estimativa precisa destes expoentes é fundamentalmente importante

os

#### 3.3.1 Expoentes críticos

Na Mecânica Estatística de equilíbrio, descrevemos as transições de fase em termos de uma teoria de escala fenomenológica. Por exemplo, considerando que um dado campo externo  $H$  é nulo temos que, abaixo de uma certa temperatura crítica<sup>3</sup>  $T_c$ , um ferromagneto ideal apresenta uma magnetização  $M$  não nula. Observa-se que, na fase ordenada ( $T < T_c$ ), na medida em que nos aproximamos de  $T_c$ , essa magnetização espontânea vai a zero seguindo uma lei de potência

$$|M| \sim (T_c - T)^\beta. \quad (3.7)$$

---

<sup>3</sup>Esta temperatura crítica é conhecida como a *temperatura de Curie*.

O expoente  $\beta$  é um **expoente crítico**.

Também foram introduzidos outros expoentes para descrever o comportamento de grandezas tais como o calor específico  $C$  e a susceptibilidade magnética  $\chi$  que, na criticalidade, também apresentam comportamentos em leis de potência:

$$C \sim |T_c - T|^{-\alpha} \quad (3.8)$$

$$\chi \sim |T_c - T|^{-\gamma}. \quad (3.9)$$

Sabemos que grandezas físicas como calor específico, susceptibilidade magnética e magnetização são propriedades macroscópicas da matéria, fazendo parte da descrição termodinâmica de um sistema. Mas, como nosso objetivo é estudar o comportamento do sistema próximo a uma transição de fase, é necessário entender o que acontece neste sistema na escala microscópica.

Para o fim de obter uma descrição microscópica dessa transição de fase ferromagnética, a interação entre *spins* é o elemento mais importante. O modelo microscópico mais simples utilizado para descrever a transição de fases em um ferromagneto é o **modelo de Ising**, cuja hamiltoniana é definida como

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j, \quad (3.10)$$

em que  $J$  é a constante de troca,  $\sigma_i = \pm 1$  é a variável de *spin* que representa o momento magnético em cada sítio e o índice  $\langle i, j \rangle$  indica que a soma deve ser feita sobre sítios  $i$  e  $j$  que sejam primeiros vizinhos. Devido a sua simplicidade, o modelo de Ising tem sido estudado extensivamente tanto em situações nas quais os elementos do sistema estão localizados em reticulados  $D$ -dimensionais, quanto no caso em que todos estão conectados uns aos outros. O primeiro caso corresponde a situações mais próximas da realidade dos materiais magnéticos; por outro lado, no segundo caso, cada *spin* está submetido à mesma “influência” (ou campo médio) com relação aos outros.

É útil definir uma função de correlação,  $c(r)$ ,

$$c(r) = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \quad (3.11)$$

em que  $r = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ . Esta função permite analisar como a variável de estado em uma posição correlaciona-se com o estado de um sítio que está a uma distância  $r$ . Assim, se fizermos  $r \rightarrow \infty$ ,  $c(r)$  vai a zero. Para valores longe do ponto crítico,  $c(r)$  decai exponencialmente como

$$c(r) \sim e^{-r/\xi}, \quad (3.12)$$

em que  $\xi$  é o **comprimento de correlação** do sistema, que depende da temperatura.

Para temperaturas próximas de  $T_c$ , é observado o aparecimento de correlações de longo

alcance (ou seja,  $\xi \rightarrow \infty^4$ ) e, nessas condições, a função de correlação decai como

$$c(r) \sim \frac{1}{r^{d-2-\eta}}, \quad (3.13)$$

em que  $d$  é a dimensão do sistema e  $\eta$  é um expoente crítico associado à função de correlação.

Isso quer dizer que, fora da criticalidade, um sistema composto por muitos corpos apresenta correlações entre seus constituintes que estão limitadas por um comprimento  $\xi$ . Na criticalidade, as correlações decaem lentamente, sem que haja qualquer comprimento característico. Quando  $T \rightarrow T_c$ , o comprimento de correlação diverge como

$$\xi \sim |T - T_c|^{-\nu}, \quad (3.14)$$

em que  $\nu$  é outro expoente crítico. De fato, caracterizamos o ponto crítico pela inexistência de uma escala de comprimento, tornando o sistema invariante sob transformações de escala.

No caso das transições de fase para estados absorventes ocorre algo similar. Entretanto, sistemas longe do equilíbrio devem necessariamente possuir uma dinâmica, de modo que passam a existir dois comprimentos de correlação diferentes: o **comprimento de correlação espacial**  $\xi$  e o **comprimento de correlação temporal**, ou **tempo característico**,  $\tau$ , juntamente com os respectivos expoentes associados  $\nu_{\perp}$  e  $\nu_{\parallel}$ . Chama-se a razão entre esses expoentes,  $z = \nu_{\parallel}/\nu_{\perp}$ , de **expoente dinâmico** por relacionar as escalas espacial e temporal na criticalidade.

### 3.4 Processo de contato

O Processo de contato (PC) foi proposto por T. E. Harris em 1974 como um modelo simples para propagação epidêmica, consolidando-se posteriormente como um dos processos dinâmicos mais simples a apresentar uma transição de fase para um estado absorvente. Na interpretação do modelo, cada sítio  $i$  de uma rede (em um caso típico, uma rede hipercúbica  $d$ -dimensional) representa um indivíduo que pode estar em um de dois estados: infectado ( $\sigma_i = 1$ ) ou saudável ( $\sigma_i = 0$ ). Para este modelo diz-se que sítios infectados são **sítios ativos** e estes, por sua vez, transmitem a infecção através do contato com os vizinhos mais próximos. Um sítio saudável somente pode tornar-se infectado ( $\sigma_i(t) = 0 \rightarrow \sigma_i(t) = 1$ ) se houver um primeiro vizinho que está ocupado. Esta ocupação se dá a uma taxa  $\lambda m$ , em que  $\lambda$  é a **taxa de infecção** (ou taxa de replicação) para o sistema e  $m$  é a fração de primeiros vizinhos do sítio  $i$  que está infectada. Por sua vez, sítios infectados se recuperam a uma taxa unitária e prontamente estão suscetíveis à reinfecção. Consequentemente, é fácil perceber que o estado  $\sigma_i = 0, \forall i$  é um estado absorvente.

Pode-se interpretar o PC como um processo no qual uma certa condição transiente ou excita-

---

<sup>4</sup>Esta divergência de  $\xi$  é a origem primária de todos os fenômenos que são associados à criticalidade.

ção no sistema se espalha através de uma influência de curto alcance [2] e, se este espalhamento não for suficientemente rápido, tal excitação desaparece. A fronteira existente entre a persistência e a extinção da atividade é marcada por um ponto crítico finito, não nulo,  $\lambda_c$  bem definido.

No PC o parâmetro de ordem, de maneira análoga à magnetização no modelo de Ising, é a densidade de sítios ativos (ou partículas) no estado estacionário,  $\bar{\rho}$ , que é nula no estado absorvente. Na medida em que  $\lambda$  aumenta além de  $\lambda_c$ , ocorre uma transição de fase contínua do estado absorvente para um estado ativo estacionário, como ilustrado na figura 3.3.

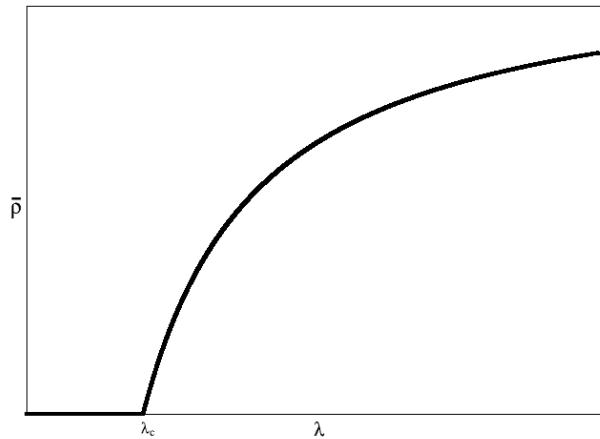


Figura 3.3: Densidade de partículas no estado estacionário em função da taxa de replicação para o PC.

Este modelo não possui solução analítica conhecida, mas várias propriedades importantes associadas a ele estão rigorosamente bem estabelecidas e seus parâmetros críticos são conhecidos com elevada precisão por meio de estudos numéricos. Assim, é comum dizer que o PC é o “modelo de Ising” das transições de fase para estados absorventes, servindo como ponto de partida para o estudo de problemas de não equilíbrio.

### 3.4.1 Criticalidade

No estado estacionário, quando o sistema se encontra próximo ao ponto crítico, observa-se que a densidade de sítios ativos segue uma lei de potência

$$\bar{\rho} \sim |\lambda - \lambda_c|^\beta, \quad (3.15)$$

em que  $\bar{\rho} = \rho(\infty)$  e  $\beta$  é o expoente crítico associado ao parâmetro de ordem.

Podemos analisar a evolução temporal do PC (figura 3.4.1) começando a dinâmica do sistema a partir de uma configuração pré-absorvente simples: uma única partícula no centro da rede vazia. Sendo assim, um ensaio (ou amostra) pode simplesmente cair no estado absorvente

após o primeiro passo de tempo, mas também pode “sobreviver” por um tempo grande. Cada amostra de simulação termina no instante de tempo até o qual o sistema permaneceu sem cair no estado absorvente. Nesta simulação de espalhamento, as grandezas mais básicas para a análise são o **número médio de partículas**

$$n(t) = \left\langle \sum_i \sigma_i(t) \right\rangle \quad (3.16)$$

e a **probabilidade de sobrevivência** média  $P_S(t)$ , que é a probabilidade de, no instante  $t$ , o sistema encontrar-se em um estado ativo. Na criticalidade, observa-se a lei de potência

$$P_S(\infty) \sim |\lambda - \lambda_c|^{\beta'}. \quad (3.17)$$

Para o PC,  $\beta = \beta'$  [21]. Isso implica que, quando  $t \rightarrow \infty$ ,  $P_S$  se torna proporcional a  $\rho$ .



Figura 3.4: Amostras do PC, começando com uma única partícula na origem de uma rede vazia. À esquerda:  $\lambda < \lambda_c$ ; centro:  $\lambda = \lambda_c$ ; à direita:  $\lambda > \lambda_c$ .

Considere a função de correlação para pares de pontos

$$C(\mathbf{x}) = \langle \sigma_{\mathbf{x}} \sigma_0 \rangle - \bar{\rho}^2 \quad (3.18)$$

e a função de correlação temporal

$$C_S(t) \equiv \text{Probabilidade}[\sigma_0(t_0 + t) = 1; \sigma_0(t) = 1] - \bar{\rho}^2, \quad (3.19)$$

assumindo  $\lambda > \lambda_c$  e  $t_0 \rightarrow \infty$ . Quando as variáveis  $\mathbf{x}$  e  $t$  assumem valores muito altos, espera-se que estas correlações decaiam exponencialmente como

$$C(\mathbf{x}) \propto e^{-|\mathbf{x}|/\xi} \quad (3.20)$$

e

$$C_S(t) \propto e^{-t/\tau}. \quad (3.21)$$

Tanto o comprimento de correlação espacial  $\xi$  quanto o temporal  $\tau$  (tempo característico) divergem na medida em que  $\lambda \rightarrow \lambda_c$  e seus comportamentos críticos são caracterizados pelos expoentes  $\nu_\perp$  e  $\nu_\parallel$ , respectivamente. Assim, na vizinhança de  $\lambda_c$ , temos as leis de potência:

$$\xi \sim |\lambda - \lambda_c|^{-\nu_\perp}, \quad (3.22)$$

$$\tau \sim |\lambda - \lambda_c|^{-\nu_\parallel}. \quad (3.23)$$

Outras quantidades que fornecem informações relevantes acerca do processo são: o espalhamento médio das partículas a partir da partícula de origem

$$R^2 \equiv \frac{1}{n(t)} \left\langle \sum_{\mathbf{r}} r^2 \sigma_{\mathbf{r}} \right\rangle \quad (3.24)$$

e a variância da densidade de sítios ativos no estado estacionário

$$\chi \equiv N(\langle \rho^2 \rangle - \langle \rho \rangle^2), \quad (3.25)$$

em que  $N$  é o número de sítios do sistema. Essa variância nos fornece uma medida das flutuações do parâmetro de ordem. Na vizinhança do ponto crítico, estas flutuações tornam-se muito grandes, de acordo com a seguinte lei de potência:

$$\chi \sim |\lambda - \lambda_c|^{-\gamma}. \quad (3.26)$$

No regime subcrítico ( $\lambda < \lambda_c$ ),  $P_S(t)$  quanto  $n(t)$  decaem exponencialmente. As partículas geradas a partir da partícula original se espalham difusivamente via sequências nas quais uma partícula gera outra em um sítio vizinho e desaparece logo em seguida. Nestas condições,  $R^2(t) \sim t$ .

No regime supercrítico ( $\lambda > \lambda_c$ ), uma amostra pode sobreviver por tempo indefinido ( $P_S(t) \rightarrow P_S(\infty) > 0$ , quando  $t \rightarrow \infty$ ). E, no ponto crítico, as grandezas  $P_S(t)$ ,  $n(t)$  e  $R^2(t)$  seguem as leis de potência:

$$P_S(t) \sim t^{-\delta}, \quad (3.27)$$

$$n(t) \sim t^\eta, \quad (3.28)$$

$$R^2(t) \sim t^{2/z}. \quad (3.29)$$

As três equações acima são válidas para tempos longos e requerem que o sistema seja grande o suficiente para que nenhuma partícula atinja a fronteira.

### 3.4.2 Escalonamento de tamanho finito

Quando o sistema encontra-se nas proximidades do ponto crítico, suas propriedades intensivas apresentam grande dependência com relação ao seu tamanho. De fato, para fins práticos de análise numérica utilizando simulações, o sistema necessariamente terá um tamanho finito. A técnica de **escalonamento de tamanho finito** (ETF) nos permite localizar o ponto crítico e fazer estimativas dos expoentes críticos com base em dados para sistemas com vários tamanhos [22]. Esta teoria baseia-se na hipótese de que, próximo à criticalidade, a dependência com  $L$  das propriedades intensivas é dada unicamente por meio da razão  $L/\xi$ , que representaremos por  $\Delta L^{1/\nu_\perp}$ .

Sabemos que, para modelos com estados absorventes em redes de tamanho finito, que portanto possuem um número finito de configurações, o único estado estacionário é justamente o estado absorvente. Por essa razão, quando desejamos obter informações acerca do estado estacionário por meio de simulações, analisamos o **estado quase-estacionário** (QE), como será visto em detalhes no Capítulo 4. Em uma amostra de simulação, o estado QE é atingido após um certo transiente, que é uma função da distância ao ponto crítico  $\Delta = |\lambda - \lambda_c|$ , do tamanho do sistema e da condição inicial. Quando tomamos uma amostragem grande para calcular as grandezas relevantes, o estado QE é contabilizado apenas com as amostras que não atingiram o estado absorvente até o instante  $t$ . Na figura 3.5 vemos como a densidade média de partículas no estado quase-estacionário  $\bar{\rho}_{qe}$  (ou **densidade quase-estacionária**) atinge um valor constante após um certo tempo. A figura 3.6 ilustra como os valores obtidos para  $\bar{\rho}_{qe}$  em função de  $\lambda$  convergem para o seu valor estacionário na medida em que  $L$  cresce, tornando a transição de fase cada vez mais evidente.

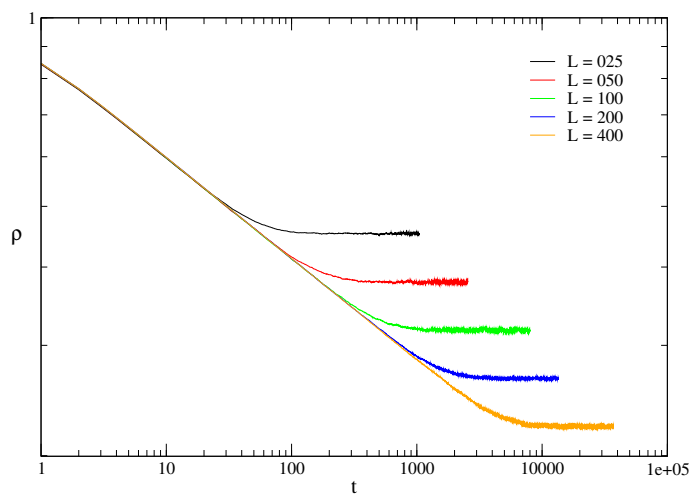


Figura 3.5: Gráfico  $\rho(t) \times t$  mostrando a relaxação para o estado quase-estacionário para os tamanhos de rede  $L = 25, 50, 100, 200$  e  $400$  (curvas na cor preta a laranja, na ordem decrescente, respectivamente), com  $\lambda = \lambda_c$

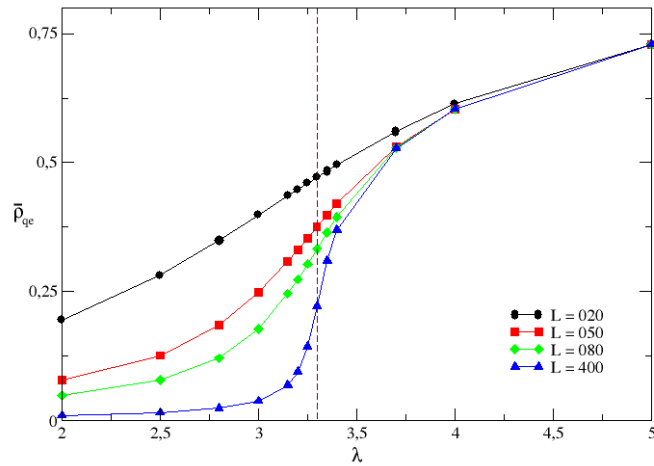


Figura 3.6: Densidade de partículas no estado quase-estacionário em função da taxa de replicação para o PC unidimensional.

Para  $\lambda \approx \lambda_c$ , com  $L$  grande, podemos escrever a densidade de sítios ativos no regime QE,  $\bar{\rho}_{qe}(\Delta, L)$ , como

$$\bar{\rho}_{qe}(\Delta, L) \sim L^{-\beta/\nu_\perp} f(\Delta L^{1/\nu_\perp}) \quad (3.30)$$

A função de escala  $f(x)$  deve escalar como  $f(x) \sim x^\beta$  para valores grandes de  $x$  (ou seja,  $L \gg \xi$ ), já que  $\bar{\rho} \sim \Delta^\beta$ . Então, de acordo com esta forma de escala, se traçarmos um gráfico  $L^{\beta/\nu_\perp} \bar{\rho}_{qe} \times \Delta L^{1/\nu_\perp}$  devemos observar que curvas para diversos valores de  $L$  devem coincidir. E de fato isso acontece, como podemos verificar na figura 3.7, em que os dados da figura 3.6 colapsam perfeitamente na curva  $f(x)$ . Quando não conhecemos  $\lambda_c$  e/ou os expoentes podemos variar seus valores de modo a produzir o melhor colapso [23].

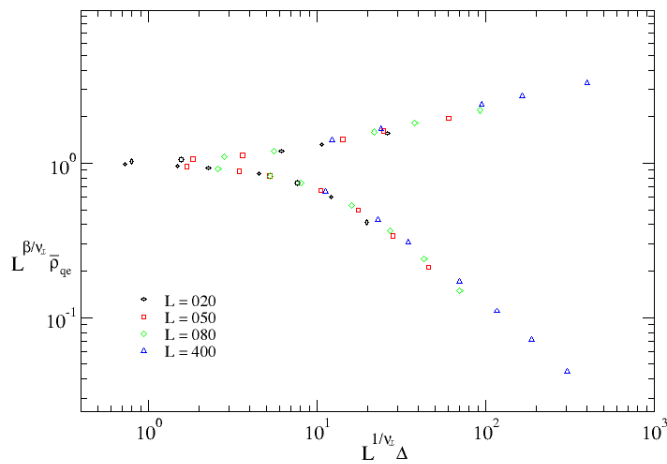


Figura 3.7: Gráfico reescalado utilizando os dados da figura 3.6.

Pela análise de ETF, podemos determinar o ponto crítico usando a dependência de  $\bar{\rho}_{qe}$  em

$L$ . No ponto crítico, pela equação (3.30), temos

$$\bar{\rho}_{qe}(L) \sim L^{-\beta/\nu_{\perp}}. \quad (3.31)$$

Logo, para  $\lambda = \lambda_c$ , a inclinação de um gráfico  $\ln \bar{\rho}_{qe} \times \ln L$  nos fornece o valor do expoente  $\beta/\nu_{\perp}$ . Quando fora do ponto crítico, não encontramos uma lei de potência, mas sim curvas com concavidades para cima no regime supercrítico ( $\lambda > \lambda_c$ ) e concavidades para baixo no regime subcrítico ( $\lambda < \lambda_c$ ). Uma análise de curvatura neste tipo de gráfico pode ser utilizada para determinar o valor de  $\lambda_c$ .

Se aplicarmos a técnica de ETF para a variância da densidade quase-estacionária, obtemos

$$\chi(\Delta, L) \sim L^{\gamma/\nu_{\perp}} g(\Delta L^{1/\nu_{\perp}}), \quad (3.32)$$

de modo que agora temos a função de escala  $g(x) \sim x^{-\gamma}$  para valores grandes de  $x$ . No ponto crítico,

$$\chi(L) \sim L^{\gamma/\nu_{\perp}}. \quad (3.33)$$

Agora, considere a evolução do sistema partindo de uma rede com todos os sítios ocupados. Podemos caracterizar o tempo de vida do sistema de diversas maneiras como, por exemplo, por meio do tempo  $\tau_m$  necessário para que a probabilidade de sobrevivência caia pela metade. Para tamanhos de sistema muito maiores que o comprimento de correlação, essa grandeza escala como  $\tau_m \sim \Delta^{-\nu_{\parallel}}$ . Seguindo um procedimento similar ao anterior, temos

$$\tau_m(\Delta, L) \sim L^{\nu_{\parallel}/\nu_{\perp}} G(\Delta L^{1/\nu_{\perp}}) \quad (3.34)$$

em que  $G(x) \sim x^{-\nu_{\parallel}}$  para  $x$  muito grande. Para  $\lambda = \lambda_c$ ,  $\tau_m \sim L^{\nu_{\parallel}/\nu_{\perp}}$ . Note que, para  $\lambda > \lambda_c$ ,  $\tau_m$  cresce exponencialmente e, para  $\lambda < \lambda_c$ , um valor constante é atingido na medida em que  $L \rightarrow \infty$ . Novamente, podemos realizar um estudo de curvatura sobre  $\tau_m$  como função de  $L$  e  $\lambda$ , determinar  $\lambda_c$  e obter o expoente  $\nu_{\parallel}/\nu_{\perp}$ .

Na figura 3.8, resultados de simulações confirmam algumas leis de potência que esperávamos para o PC.

### 3.4.3 Teoria de campo médio

Conforme discutido anteriormente, podemos escrever uma equação mestra para o PC a fim de analisar a evolução temporal de  $\rho(\mathbf{x}, t)$ , sendo que  $\rho(\mathbf{x}, t) = \text{Prob}[\sigma_{\mathbf{x}}(t) = 1]$ . Consequentemente,

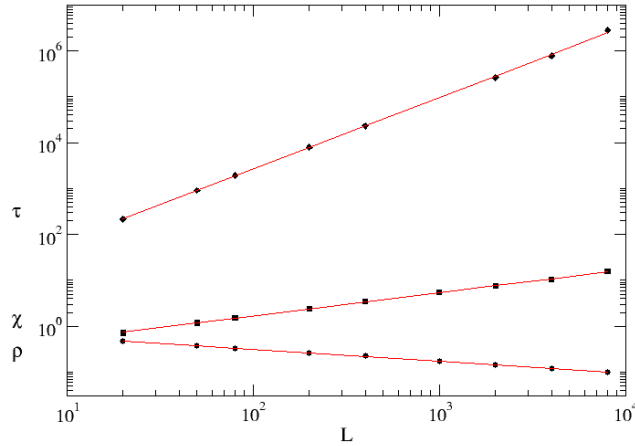


Figura 3.8: Dependência de  $\bar{\rho}_{qe}$ ,  $\tau$  e  $\chi$  com o tamanho do sistema para o PC unidimensional no ponto crítico.

mente,  $1 - \rho(\mathbf{x}, t) = \text{Prob}[\sigma_{\mathbf{x}}(t) = 0]$ . Tal equação de movimento é dada por

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{x}, t) = -\rho(\mathbf{x}, t) + \frac{\lambda}{q} \sum_{\mathbf{y}} \text{Prob}[\sigma_{\mathbf{y}}(t) = 1, \sigma_{\mathbf{x}}(t) = 0], \quad (3.35)$$

em que  $\mathbf{y}$  são os vizinhos mais próximos de  $\mathbf{x}$ ,  $q$  é o número de coordenação da rede<sup>5</sup> e  $\text{Prob}[\sigma_{\mathbf{y}}(t) = 1, \sigma_{\mathbf{x}}(t) = 0]$  é a probabilidade de que o sítio em  $\mathbf{x}$  esteja vazio, dado que o sítio vizinho em  $\mathbf{y}$  está ocupado. O primeiro termo no lado direito desta equação representa a aniquilação de partículas, enquanto o segundo termo representa a criação de uma partícula no sítio em  $\mathbf{x}$  pela partícula em  $\mathbf{y}$ .

A equação acima é exata, porém não podemos resolvê-la analiticamente, já que há uma dependência com a probabilidade conjunta de dois sítios, mas esta, por sua vez, depende de três sítios e assim por diante, de modo que há uma hierarquia infinita. A aproximação de campo médio usual, assume que a probabilidade de ocupação  $p$  para um dado sítio é independente dos seus primeiros vizinhos. Assim, tem-se que

$$p(\sigma_i = 1 | \sigma_j = 0) = p(\sigma_i = 1)p(\sigma_j = 0). \quad (3.36)$$

Substituindo a equação (3.36) na equação (3.35) encontramos

$$\frac{d}{dt} \rho(t) = \rho(\lambda - 1) - \lambda \rho^2, \quad (3.37)$$

onde definimos  $p(\sigma_i = 1) = \rho(t)$  e  $p(\sigma_j = 0) = 1 - \rho(t)$ . A expressão acima é conhecida como *equação de Malthus-Verhulst* e modela, por exemplo, a evolução temporal do tamanho de uma população cujo crescimento é limitado pela oferta finita de recursos no ambiente [2].

<sup>5</sup>Para reticulados hipercúbicos,  $q = 2d$ .

Tomando o limite do estado estacionário,  $d\rho/dt = 0$ , temos que  $\rho(t) \rightarrow \bar{\rho}$ , em que

$$\bar{\rho} = 0 \quad \text{ou} \quad \bar{\rho} = \frac{\lambda - 1}{\lambda}. \quad (3.38)$$

Para todo  $\lambda$  tal que  $\lambda \leq 1$ , a única solução estacionária é a solução trivial, ou seja, o estado absorvente  $\bar{\rho} = 0$ . Entretanto, para  $\lambda > 1$ , existe um estado estacionário ativo dado pela equação (3.38). Desse modo,  $\lambda_c = 1$  marca o ponto crítico onde o parâmetro de ordem sofre uma mudança contínua, conforme foi visto no diagrama de fases para o PC.

Para  $\Delta > 0$ , a equação (3.37) nos mostra que

$$\bar{\rho} = \Delta/\lambda \quad (3.39)$$

Próximo ao ponto crítico, o parâmetro de ordem escala como  $\bar{\rho} \sim \Delta^\beta$ . Logo, a teoria de campo médio fornece  $\beta = 1$ . Analisemos agora a solução geral da equação (3.37)

$$\rho(t) = \frac{\lambda - 1}{\lambda - e^{-(\lambda-1)t}}, \quad (3.40)$$

em que consideramos como condição inicial todos os sítios da rede ocupados ( $\rho(0) = 1$ ). Na região subcrítica,  $\rho(t)$  decai a zero exponencialmente como

$$\rho(t) = Ae^{-(1-\lambda)t}, \quad (3.41)$$

quando  $t \gg 1/(1 - \lambda)$ . Na região supercrítica,  $\rho(t)$  relaxa para  $\bar{\rho}$  como

$$\rho(t) = \frac{\lambda - 1}{\lambda} - Be^{-(\lambda-1)t}. \quad (3.42)$$

De maneira mais sucinta, para  $\lambda \neq 1$ , tem-se

$$\rho(t) - \bar{\rho} \sim \exp(-|1 - \lambda|t). \quad (3.43)$$

Logo,  $\tau = |1 - \lambda|^{-1}$ .

Agora, substituindo  $\lambda_c$  na equação (3.37), obtem-se

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -\rho^2. \quad (3.44)$$

Portanto, no ponto crítico, a densidade de partículas sofre um decaimento assintótico em lei de potência como

$$\rho(t) \sim t^{-1}, \quad (3.45)$$

No ponto crítico, temos que  $\rho(t) \sim t^{-\delta}$ , em que  $\delta = \beta/\nu_{\parallel}$  e, portanto,  $\nu_{\parallel} = 1$ .

Resta agora obter o expoente  $\nu_{\perp}$ , relacionado ao comprimento de correlação  $\xi$  e, por con-

sequência, com a escala espacial do sistema. O procedimento para fazer isso é escrever a equação (3.37) na sua forma contínua [2], de modo que a função  $\phi(\mathbf{x}, t)$  representa a densidade local de partículas. Acrescentando um termo de difusão para levar em conta flutuações espaciais, temos a equação

$$\frac{\partial}{\partial t}\phi(\mathbf{x}, t) = (\lambda - 1)\phi(\mathbf{x}, t) - \lambda\phi^2(\mathbf{x}, t) + D\nabla^2\phi(\mathbf{x}, t), \quad (3.46)$$

sendo  $D > 0$ . Impondo a hipótese de invariância de escala, é possível mostrar[2] que  $\beta/\nu_{\perp} = 2$ , logo  $\nu_{\perp} = 1/2$ .

Então, lembrando, os valores obtidos para os expoentes críticos pela teoria de campo médio são

$$\begin{aligned} \beta &= 1 \\ \nu_{\parallel} &= 1 \\ \nu_{\perp} &= 1/2 \end{aligned}$$

Por meio de outros métodos também podemos obter estes expoentes, para fins comparativos. Ao fazer isso, nota-se que os valores obtidos pela teoria de campo médio são quantitativamente incompatíveis com aqueles obtidos por métodos mais sofisticados, como uma expansão em série [24]. A explicação para isso é o fato de que, na teoria de campo médio, desprezamos as correlações dinâmicas entre os sítios, tratando-os como estatisticamente independentes, e estas correlações são tão fortes quanto menor for a dimensionalidade do sistema. Considere o processo ocorrendo em um reticulado hipercúbico: para  $d = 1$ , foi encontrado o valor  $\lambda_c = 3,297848(20)$  (por meio de expansões em série) para o ponto crítico do PC, que é distante do valor  $\lambda_c = 1$  previsto pela teoria de campo médio. Porém, do ponto de vista qualitativo, a teoria fornece bons resultados. Ao analisar o modelo em redes regulares com  $d = 2$  e  $d = 3$ , observa-se que o valor para o ponto crítico e dos expoentes aproxima-se cada vez mais dos valores de campo médio. Para  $d \geq 4$ , em reticulados, os expoentes previstos pela aproximação de campo médio são exatos. Nesse caso, diz-se que  $d_c = 4$ , em que  $d_c$  é a *dimensão crítica superior* do modelo.

### 3.5 Processo de contato em redes sem escala

Nesta seção, trataremos do processo de contato em uma rede heterogênea. Sendo mais específico, mostraremos uma teoria de campo médio para o PC em redes sem escala de acordo com os trabalhos das referências [8, 25, 26, 27].

Nos últimos anos, o estudo de processos dinâmicos em redes complexas tem recebido

grande atenção na comunidade científica. Para redes regulares a abordagem por teoria de campo médio mostrou-se importante, descrevendo qualitativamente a maioria das transições de fase. Para estas redes, em baixas dimensões, não podemos desprezar o efeito causado pelas flutuações, mas, acima da dimensão crítica para o modelo em questão, a teoria torna-se quantitativamente correta com relação aos expoentes críticos obtidos. Para o caso das redes complexas, como a maioria delas apresenta a propriedade de mundo pequeno, podemos tratá-las como sendo sistemas de dimensão infinita. Logo, é de se esperar que a teoria de campo médio forneça uma descrição correta para processos dinâmicos neste tipo de substrato.

Obteremos agora a equação para a evolução temporal de  $\rho_k$  [8], a densidade de sítios com grau  $k$  que estão ocupados. A densidade total de sítios ocupados é obtida por meio da relação  $\rho(t) = \sum_k \rho_k P(k)$ . Considere uma rede caracterizada por uma distribuição de conexões  $P(k)$  e correlações entre graus dadas pela probabilidade condicional  $P(k'|k)$ . Sendo assim, tem-se

$$\frac{d}{dt}\rho_k(t) = -\rho_k(t) + \lambda k [1 - \rho_k(t)] \sum_{k'} \frac{P(k'|k)\rho_{k'}(t)}{k'} \quad (3.47)$$

Como no caso de redes regulares, o termo de aniquilação de partículas em vértices de grau  $k$  é proporcional à  $\rho_k(t)$ . Já o termo de criação é proporcional à taxa de criação  $\lambda$ , à probabilidade de que um nó de grau  $k$  esteja vazio  $[1 - \rho_k(t)]$ , que este nó esteja conectado a outro nó ocupado de grau  $k'$  e finalmente que o vizinho escolha criar a nova partícula no vértice de grau  $k$  que estamos considerando (fator  $1/k'$  no somatório).

Assumindo que a rede não apresenta correlação entre graus, temos que a equação  $P(k'|k) = k'P(k')/\langle k \rangle$  é válida, de modo que a equação de taxa toma a forma

$$\frac{d}{dt}\rho_k(t) = -\rho_k(t) + \lambda \frac{k}{\langle k \rangle} [1 - \rho_k(t)] \rho(t). \quad (3.48)$$

A solução da equação acima depende da forma de  $P(k)$ . Para redes homogêneas (nas quais  $P(k)$  decai exponencialmente para grandes valores de  $k$ ), todos os vértices são aproximadamente equivalentes. Sendo assim, temos  $\rho_k(t) \simeq \rho(t)$  e  $k \simeq \langle k \rangle$ . Desse modo, temos

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -\lambda \rho^2(t) + (\lambda - 1)\rho(t) \quad (3.49)$$

Esta equação descreve o PC em uma rede de dimensão infinita, caracterizado por um ponto crítico  $\lambda_c = 1$ , de modo que  $\beta = 1$  e  $\nu_{\parallel} = 1$ .

Para redes heterogêneas, a distribuição  $P(k)$  apresenta cauda pesada. Assim, é necessário considerar explicitamente o modo como as densidades parciais  $\rho_k$  dependem de  $k$ . Impondo a condição do limite estacionário à equação (3.48), obtemos as soluções

$$\bar{\rho}_k = \frac{\lambda k \bar{\rho} / \langle k \rangle}{1 + \lambda k \bar{\rho} / \langle k \rangle}. \quad (3.50)$$

Para determinar o comportamento de  $\bar{\rho}(\lambda)$ , devemos analisar a equação auto-consistente para esta grandeza, que é obtida combinando a equação (3.50) com a expressão para  $\rho$  em função de  $\rho_k$ . Daí, temos

$$\bar{\rho} = \frac{\lambda \bar{\rho}}{\langle k \rangle} \sum_k \frac{k P(k)}{1 + \lambda k \bar{\rho} / \langle k \rangle}, \quad (3.51)$$

que depende explicitamente da distribuição de conectividade. Conforme foi visto no capítulo 2, para redes sem escala e tomando  $k$  como sendo uma variável contínua, esta distribuição é expressa como

$$P(k) = (\gamma - 1) m^{\gamma-1} k^{-\gamma}, \quad (3.52)$$

em que  $m$  é o menor grau da rede. A solução da equação auto-consistente depende diretamente do expoente  $\gamma$ . Ao substituir o somatório da equação por uma integral, no limite de tamanho infinito

$$\bar{\rho} = F \left[ 1, \gamma - 1, \gamma, -\frac{1}{\lambda \bar{\rho} m / \langle k \rangle} \right], \quad (3.53)$$

em que  $F[a, b, c, z]$  é a função hipergeométrica de Gauss. Utilizando a expansão assintótica da função hipergeométrica para  $z \rightarrow \infty$ , podemos inverter a expressão 3.53 e assim analisar a criticalidade para valores pequenos de  $\bar{\rho}$ . Procedendo desta maneira, temos

$$\begin{aligned} \bar{\rho}(\lambda) &\sim (\lambda - 1)^{1/(\gamma-2)}, & 2 < \gamma < 3 \\ \bar{\rho}(\lambda) &\sim \lambda - 1, & \gamma > 3 \end{aligned}$$

A partir disso,  $\lambda_c = 1$  tanto para  $2 < \gamma < 3$  quanto para  $\gamma > 3$  e o expoente crítico  $\beta$  é dado por

$$\begin{aligned} \beta &= \frac{1}{\gamma - 2}, & 2 < \gamma < 3 \\ \beta &= 1, & \gamma > 3 \end{aligned}$$

Agora, devemos considerar para o sistema os efeitos de tamanho finito, que devem afetar os resultados obtidos até o momento. No caso de redes sem escala infinitas, temos  $k \in [m, \infty]$ . Porém, para uma rede finita com um certo tamanho  $N$ , existe um grau máximo  $k_c$ , de modo que agora  $k \in [m, k_c]$ . Este  $k_c$  apresenta uma dependência com o tamanho da rede e, para redes não correlacionadas geradas pelo algoritmo UCM,  $k_c \sim N^{1/2}$  [15]. Então, para redes finitas e novamente tomando  $k$  contínuo, a equação (3.51) nos leva a

$$\bar{\rho} = F \left[ 1, \gamma - 1, \gamma, -\frac{1}{\lambda \bar{\rho} m / \langle k \rangle} \right] - \left( \frac{k_c}{m} \right)^{1-\gamma} F \left[ 1, \gamma - 1, \gamma, -\frac{1}{\lambda \bar{\rho} k_c / \langle k \rangle} \right]. \quad (3.54)$$

Para obter o comportamento crítico de campo médio, a expressão acima será resolvida para o limite em que  $\bar{\rho} \rightarrow 0$  para um certo valor de  $\bar{\rho} k_c$ . Feito isso, tem-se

$$\bar{\rho} = \frac{\langle k \rangle}{\lambda k_c} f \left( \frac{\langle k \rangle (\lambda - 1) k_c^{\gamma-2}}{\lambda m^{\gamma-1}} \right), \quad (3.55)$$

em que  $f(x)$  é a inversa da função

$$g(x) = \frac{F[1, \gamma - 1, \gamma, -1/x] + \Gamma(\gamma)\Gamma(2 - \gamma)x^{\gamma-1}}{x}. \quad (3.56)$$

Para  $x \gg 1$ ,  $f(x)$  diverge como  $x^{1/(\gamma-2)}$ , que concorda com o limite de tamanho infinito. Para valores pequenos de  $x$ ,  $f(x) \rightarrow 0$  para  $x \rightarrow x_0^+$ , tal que  $x_0 > 0$ . Então, se a quantidade  $\lambda - 1$  é diminuída abaixo de um valor que seja proporcional a  $k_c^{2-\gamma}$ , então  $\bar{\rho} = 0$ .

Daqui em diante, para prosseguir com a análise, utilizaremos a técnica de ETF. Porém, alguns cuidados devem ser tomados neste momento. Pelo que já se conhece do PC em redes regulares uma idéia inicial aparentemente coerente seria assumir que a densidade quase-estacionária de partículas na rede  $\rho_{qe}(\Delta, N)$  fosse expressa como [8]

$$\rho_{qe} = N^{-\beta/\nu_\perp} f(\Delta N^{1/\nu_\perp}), \quad (3.57)$$

ou seja, isso equivale a afirmar que, em uma rede sem escala descorrelacionada com relação a graus, os efeitos de tamanho finito que este processo apresenta só dependem do tamanho  $N$  do sistema. Entretanto, existe uma outra classe de processos, os quais apresentam uma anomalia nos efeitos de tamanho finito [25]: além da dependência com  $N$ , suas propriedades dependem de maneira explícita e independente também do grau de corte  $k_c$  da distribuição  $P(k)$ . Anteriormente foram publicados estudos feitos em redes infinitas, porém com a imposição de um cutoff artificial [28]. Foi encontrada uma dependência com  $k_c$  e isso levou a um comportamento crítico completamente diferente daquele previsto para redes infinitas. Note que levar em conta o verdadeiro “limite termodinâmico” para redes sem escala equivale a tomar  $N \rightarrow \infty$  e  $k_c \rightarrow \infty$  simultaneamente. Quando  $k_c$  é fixado, o segundo momento  $\langle k^2 \rangle$  torna-se finito até mesmo para  $\gamma < 3$ . Desse modo, a rede passa a ter escala característica. Assim, vemos que o modo de atingir tal limite não é único. Os valores que podemos escolher para  $k_c$  podem ser expressos como

$$k_c \sim N^{1/\omega}, \quad 2 \leq \omega < \infty. \quad (3.58)$$

Ocorre que a teoria de campo médio para o PC em redes heterogêneas exhibe este comportamento de escala anômalo, o que no fim das contas explica as discrepâncias entre a teoria de campo médio e simulações realizadas em redes com vizinhança aleatória que foram encontradas na literatura [29]. Está demonstrado que alguns estudos nos quais foi empregada a técnica de ETF padrão (que presume uma dependência exclusiva em  $N$ ) estão incompletos.

Para compreender de fato os efeitos de tamanho finito do PC utilizaremos a idéia de que, no regime de campo médio e com baixas densidades, este processo pode ser visto como uma simulação do processo de espalhamento<sup>6</sup>, idêntico àquele que foi analisado para redes regulares (iniciando com uma única partícula ativa na rede). As taxas de transição para este processo são

<sup>6</sup>Mais rigorosamente, a nível de campo médio, o PC será mapeado em um processo de um passo (um passeio aleatório tendencioso).

dadas por [27]

$$\begin{aligned} W_{n \rightarrow n-1} &= n \\ W_{n \rightarrow n+1} &= \lambda n \left[ 1 - \frac{\sum_k k \rho_k P(k)}{\langle k \rangle} \right], \end{aligned} \quad (3.59)$$

em que um fator  $W_{n \rightarrow m}$  denota a taxa com que ocorre a transição de um estado com  $n$  partículas para um estado com  $m$  partículas. Então, sabendo que, próximo a  $\lambda_c$ ,  $\bar{\rho}$  é muito pequeno tal que  $\rho(t) \ll \langle k \rangle / k$ , o termo com  $k$  no denominador da equação (3.50) pode ser desprezado. Assim, esta equação toma a forma

$$\bar{\rho}_k \simeq \lambda k \bar{\rho} / \langle k \rangle. \quad (3.60)$$

Agora, considerando que  $\bar{\rho} = n/N$  e substituindo a expressão aproximada para  $\bar{\rho}_k$  nas equações de taxa, obtém-se

$$\begin{aligned} W_{n \rightarrow n-1} &= n \\ W_{n \rightarrow n+1} &= \lambda n \left( 1 - \lambda g \frac{n}{N} \right), \end{aligned} \quad (3.61)$$

em que  $g = \langle k^2 \rangle / \langle k \rangle^2$ . Com base em evidências numéricas e argumentos de escala (que, mais tarde foram confirmados mais rigorosamente nas referências [26, 30]), foram propostas as seguintes leis de escala para o tempo característico  $\tau$  e a densidade estacionária  $\bar{\rho}$ :

$$\tau \sim (N/g)^{1/2}, \quad (3.62)$$

$$\bar{\rho} \sim (Ng)^{-1/2}. \quad (3.63)$$

Para uma rede com expoente da distribuição de conexões  $\gamma$ , um grau de corte dado como na equação (3.58) e tomando  $N$  grande, temos as seguintes leis de escala para  $g$ :

$$g \sim k_c^{3-\gamma}, \quad 2 < \gamma < 3$$

$$g \sim \text{constante}. \quad \gamma > 3$$

Consequentemente,

$$\bar{\rho} \sim N^{-\hat{\nu}}, \quad \text{em que } \hat{\nu} = \frac{1}{2} + \max\left(\frac{3-\gamma}{2\omega}, 0\right), \quad (3.64)$$

enquanto, para o tempo característico, obtém-se

$$\tau \sim N^{\hat{\alpha}}, \quad \text{em que } \hat{\alpha} = \frac{1}{2} - \max\left(\frac{3-\gamma}{2\omega}, 0\right) \quad (3.65)$$

No regime supercrítico de campo médio foi verificado que  $\bar{\rho} \sim \Delta^\beta$ , em que  $\beta = 1/(\gamma - 2)$ , com  $\Delta = \lambda - \lambda_c$ . De acordo com [26], a densidade QE para sistemas finitos tem um comportamento

anômalo dado por

$$\bar{\rho}(\Delta, N) = \frac{1}{\sqrt{gN}} G\left(\Delta\sqrt{\frac{N}{g}}\right), \quad \text{com } \frac{\Delta}{g} \ll \frac{\lambda\langle k \rangle}{k_c}, \quad (3.66)$$

em que  $G(x) \sim x$ , para  $x \gg 1$  e  $G(x) = \text{constante}$  para  $x \ll 1$ .

Estes resultados foram verificados por simulações [27], que confirmam as leis de escala acima. Na aproximação HMF de um sítio, alguns aspectos importantes tais como o ponto de transição e correções ao escalonamento finito, observadas em simulações, não são reproduzidos de maneira quantitativa. Para capturar estes aspectos, na referência [11] foi realizado um estudo detalhado baseado em uma teoria HMF utilizando uma aproximação por pares, que é a teoria mais simples a levar em conta correlações dinâmicas entre nós da rede. No limite de tamanho infinito, os expoentes críticos obtidos são os mesmos da aproximação de um sítio, porém as correções de tamanho finito obtidas para o escalonamento de tamanho finito na aproximação por pares permitiram uma excelente concordância com simulações QE para expoentes dentro da faixa  $2,3 \leq \gamma \leq 3,5$  no intervalo de tamanhos de rede investigados  $10^3 \leq N \leq 10^7$ , inclusive eliminando desvios observados nas leis de escala para valores baixos de  $\gamma$ .

### 3.6 Modelo SIS em redes sem escala

O modelo suscetível-infetado-suscetível (SIS) é um processo dinâmico simples proposto para modelagem de propagação epidêmica, que difere do processo de contato no que diz respeito à taxa de infecção. Na interpretação do modelo, novamente cada sítio  $i$  de uma rede representa um indivíduo que pode estar em um de dois estados: infectado (sítio ativo) ou suscetível (sítio inativo). Os sítios ativos são responsáveis por transmitir a infecção pelo sistema na rede, o que ocorre através do contato com os vizinhos mais próximos. Portanto, um sítio suscetível somente pode tornar-se infectado se houver ao menos um primeiro vizinho infectado, o que se dá a uma taxa  $\lambda$ . Sítios infectados recuperam-se a uma taxa  $\mu$  e prontamente estão suscetíveis à reinfecção. Daqui em diante, será estabelecido  $\mu = 1$  (definindo assim uma escala de tempo). É fácil perceber que o estado  $\sigma_i = 0, \forall i$  é um estado absorvente.

Mostraremos brevemente uma teoria de campo médio heterogênea, de acordo com os trabalhos das referências [31, 32]. Para isso, obteremos a equação para  $\rho_k(t)$ , a densidade total de sítios com grau  $k$  que se encontram infectados no instante  $t$ . A densidade total de sítios infectados pode ser obtida facilmente por meio da relação  $\rho(t) = \sum_k \rho_k P(k)$ . Considere uma rede caracterizada por uma distribuição de conexões  $P(k)$  e correlações entre graus dadas pela probabilidade condicional  $P(k'|k)$ . Sendo assim, temos a equação de evolução temporal

$$\frac{d}{dt} \rho_k(t) = -\rho_k(t) + \lambda k [1 - \rho_k(t)] \Theta_k(t), \quad (3.67)$$

em que

$$\Theta_k(t) = \sum_{k'} P(k'|k) \rho_{k'}(t). \quad (3.68)$$

O primeiro termo no lado direito da equação (3.67), que representa a aniquilação de partículas em vértices de grau  $k$ , é proporcional à  $\rho_k(t)$ . Já o termo de criação é proporcional à taxa de criação  $\lambda$ , à probabilidade de que um nó de grau  $k$  esteja vazio  $[1 - \rho_k(t)]$  e que este nó esteja conectado a outro nó ocupado de grau  $k'$ .

Assumindo que a rede não apresenta correlação entre graus, temos que a equação  $P(k'|k) = k'P(k')/\langle k \rangle$  é válida, de modo que o termo  $\Theta_k$  toma a forma

$$\Theta_k(t) = \frac{1}{\langle k \rangle} \sum_{k'} k' P(k') \rho_{k'}(t), \quad (3.69)$$

que é independente de  $k$ :  $\Theta_k = \Theta$ . Podemos obter informação a respeito do limite  $t \rightarrow \infty$  impondo à equação (3.67) a condição de estacionariedade  $d\rho_k(t)/dt = 0$ :

$$\rho_k = \frac{\lambda k \Theta}{1 + \lambda k \Theta}. \quad (3.70)$$

Este conjunto de equações mostra que quanto mais alto for o grau de um vértice, maior é a sua probabilidade de estar infectado. Substituindo 3.70 em 3.69 obtemos a equação de auto-consistência

$$\Theta = \frac{1}{\langle k \rangle} \sum_k k P(k) \frac{\lambda k \Theta}{1 + \lambda k \Theta} \quad (3.71)$$

cuja solução nos permite calcular  $\Theta$  (e, conseqüentemente,  $\rho_k$ ) como uma função da taxa de infecção  $\lambda$ .

Na referência [6], é utilizado um argumento geométrico para calcular o limiar epidêmico  $\lambda_c^{HMF}$  a partir da equação (3.71). Assim, obtém-se o limiar

$$\lambda_c^{HMF} = \frac{\langle k \rangle}{\langle k^2 \rangle}. \quad (3.72)$$

Este resultado confirma que quanto maior forem as flutuações topológicas da rede, menor será o limiar epidêmico.

De certo modo, é possível computar explicitamente o comportamento da densidade estacionária de indivíduos infectados  $\bar{\rho} = \lim_{t \rightarrow \infty} \rho(t)$  como uma função de  $\lambda$  em redes sem escala não correlacionadas. Considere uma rede que, na aproximação de  $k$  contínuo, apresenta uma distribuição de conexões normalizada  $P(k) = (\gamma - 1)k_0^{\gamma-1}k^{-\gamma}$  e grau médio  $\langle k \rangle = (\gamma - 1)k_0/(\gamma - 2)$ , em que  $k_0$  é o menor grau da rede. De acordo com o resultado geral 3.72, o limiar epidêmico para redes infinitas é inversamente proporcional ao segundo momento da distribuição  $P(k)$  e é

dado, como uma função de  $\gamma$ , por

$$\lambda_c^{HMF} = \begin{cases} \frac{\gamma-3}{k_0(\gamma-2)} & \text{se } \gamma > 3 \\ 0 & \text{se } \gamma \leq 3 \end{cases} \quad (3.73)$$

O comportamento de  $\bar{\rho}$  pode ser obtido resolvendo explicitamente a equação auto-consistente para  $\Theta$  no limite em que  $\lambda \rightarrow \lambda_c^{HMF}$ . O cálculo completo nos leva a diferentes casos, dependendo da faixa de valores do expoente  $\gamma$  em questão [31]: Quando  $2 < \gamma < 3$ , considerando os termos dominantes em  $\lambda$  da solução, temos

$$\bar{\rho} \sim \lambda^{1/(3-\gamma)}. \quad (3.74)$$

Esta relação não apresenta qualquer limiar epidêmico e nos dá, no limite estacionário, um valor de  $\rho$  não nulo para todos os valores de  $\lambda$ . Note que o expoente  $1/(3-\gamma)$  é maior do que 1. Isto implica que, para  $\lambda$  pequeno, o valor de  $\bar{\rho}$  cresce muito devagar, ou seja existe uma grande faixa de valores de  $\lambda$  para os quais  $\bar{\rho} \ll 1$ .

Para  $\gamma = 3$ , correções logarítmicas dominam a forma de escala da solução, de modo que

$$\bar{\rho} \sim e^{-1/k_0\lambda} \quad (3.75)$$

Neste caso também há ausência de limiar epidêmico e  $\bar{\rho}$  vai a zero continuamente, apresentando um valor exponencialmente pequeno para uma grande faixa de valores de  $\lambda$ .

Considerando o caso  $3 < \gamma < 4$  e tomando a solução não nula para  $\Theta$ , temos

$$\bar{\rho} \sim \left( \lambda - \frac{\gamma-3}{k_0(\gamma-2)} \right)^{1/(\gamma-3)}, \quad (3.76)$$

em que uma persistência de  $\bar{\rho}$  em lei de potência é observada. Isto está associado à existência de um limiar epidêmico não nulo, de acordo com a equação (3.73).

Por fim, quando  $\gamma > 4$ , os termos mais relevantes da expansão para  $\Theta$  agora revelam o comportamento

$$\bar{\rho} \sim \lambda - \frac{\gamma-3}{k_0(\gamma-2)}, \quad (3.77)$$

que resgata o resultado já conhecido para redes homogêneas [6].

Apesar de bem sucedida por quase dez anos, alguns resultados da teoria HMF para o modelo SIS foram postos em cheque por abordagens teóricas recentes que obtiveram novos resultados. Chatterjee e Durrett [33, 34] provaram de maneira rigorosa que, para tamanhos infinitos, o limiar epidêmico é nulo para qualquer expoente  $\gamma$  da distribuição de conexões. Ainda na década passada, uma nova abordagem de campo médio foi proposta por Wang *et al* [35, 36]. Esta nova aproximação foi denotada por **teoria de campo médio quenched**<sup>7</sup> (*quenched mean-field*, QMF)

<sup>7</sup>Denota-se uma rede que não evolui no tempo como uma rede *quenched*.

[37]. A idéia fundamental desta aproximação é determinar a equação de evolução temporal para a probabilidade  $\rho_i$  de que um certo sítio  $i$  esteja infectado, levando em conta todas as conexões da rede como aparecem na matriz de adjacência. Esta abordagem prevê, para qualquer grafo, um limiar epidêmico dado por

$$\lambda_c^{QMF} = \frac{1}{\Lambda_N} \quad (3.78)$$

em que  $\Lambda_N$  é o maior autovalor da matriz de adjacência. Este resultado, combinado com a expressão para  $\Lambda_N$  obtida por Chung *et al* [38]

$$\Lambda_N \sim \max[\sqrt{k_{max}}, \langle k^2 \rangle / \langle k \rangle], \quad (3.79)$$

nos dá o limiar

$$\lambda_c^{QMF} \simeq \begin{cases} 1/\sqrt{k_{max}} & \text{para } \gamma > 5/2 \\ \frac{\langle k \rangle}{\langle k^2 \rangle} & \text{para } 2 < \gamma < 5/2 \end{cases} \quad (3.80)$$

em que  $k_{max}$  é o maior grau da rede. Esta relação concorda com o resultado exposto na referência [33], já que o limiar epidêmico vai a zero para  $N \rightarrow \infty$  desde que  $k_{max}$  divirja com  $N$  independente do valor de  $\gamma$ .

Vale ressaltar que, apesar de a equação (3.78) representar um avanço em relação ao resultado da teoria HMF<sup>8</sup>, ela não é exata. Ambas as abordagens baseiam-se em uma aproximação de campo médio que fatoriza a probabilidade de os sítios vizinhos estarem infectados como o produto das probabilidades dos sítios individualmente. Assim ficam negligenciadas correlações dinâmicas, que podem ser relevantes, entre os estados de nós adjacentes. Por esta razão, a real precisão da equação (3.78) precisa ser verificada caso a caso.

Recentemente, Mata e Ferreira desenvolveram uma extensão da teoria QMF, a **aproximação de campo médio quenched por pares**<sup>9</sup> (PQMF) [39] e compararam os resultados com as teorias HMF e QMF. Nesta referência, os limiares para redes com distribuição em lei de potência foram obtidos a partir de soluções numéricas para um problema de autovalor. Foi mostrado que o escalonamento dos limiares epidêmicos com o tamanho do sistema na teoria PQMF ocorre de acordo com o escalonamento da teoria QMF. Porém, em relação à teoria *quenched* original, os limiares encontrados utilizando a aproximação de pares são quantitativamente muito mais próximos daqueles obtidos via simulação.

Resumindo o conteúdo teórico que foi apresentado até o momento, conclui-se que: para  $\gamma < 3$ , existe um consenso a respeito dos limiares epidêmicos do modelo SIS: as teorias QMF e HMF são equivalentes e semelhantemente precisas para  $\gamma < 5/2$ ; no regime  $5/2 < \gamma < 3$  somente a teoria QMF funciona corretamente; para  $\gamma > 3$  a teoria HMF prevê um limiar epidêmico finito, enquanto a teoria QMF prevê um limiar nulo, o mesmo que previu para valores de

<sup>8</sup>A expressão para  $\lambda_c^{HMF}$  pode ser obtida a partir da equação (3.78) inserindo o maior autovalor para a rede *annealed*.

<sup>9</sup>Note que esta teoria é um aprimoramento em relação à teoria QMF, pois a aproximação por pares passa a considerar a correlação de estados entre nós adjacentes.

$\gamma$  em todas as outras faixas [37, 39].

Ainda a respeito desta controvérsia, Lee *et al* [40] propuseram que, para uma faixa de valores  $\lambda_c^{QMF} < \lambda < \lambda_c$  (com  $\lambda_c$  não nulo) os *hubs* em uma rede aleatória tornam-se infectados, porém a atividade na rede fica restrita à vizinhança dos mesmos. Sítios altamente conectados são responsáveis por domínios locais de atividade que são independentes quando estes sítios não estão conectados entre si. Os tamanhos destes domínios ativos crescem com o aumento de  $\lambda$  eventualmente levando a uma superposição destes domínios e à uma fase endêmica da epidemia quando  $\lambda > \lambda_c$ . Note que, em redes onde quase todos os *hubs* estão conectados entre si diretamente, é possível manter uma fase endêmica na rede até mesmo para valores de  $\lambda$  muito pequenos devido a frequentes eventos de mútua reinfecção entre os *hubs* conectados. Inspirados pelos argumentos de Lee *et al* [40], Boguñá *et al* [41] propuseram uma abordagem semi-analítica levando em consideração um mecanismo de reinfecção de longo alcance e obtiveram um limiar epidêmico que tende a zero para  $\gamma > 3$ . Para isso, os autores compararam suas previsões teóricas com simulações começando a partir de um único sítio infectado na rede e utilizaram um critério de *lifespan* (tempo de vida) divergente para determinar os limiares epidêmicos.

## Capítulo 4

# Simulação do regime quase-estacionário em redes regulares e complexas

Quando se trata da simulação de processos dinâmicos que apresentam transições de fase para estados absorventes, o maior problema a ser contornado é o fato de que tais análises numéricas devem ser, necessariamente, realizadas em sistemas finitos. E, se considerarmos tempos suficientemente longos, inevitavelmente um estado absorvente será visitado pelo sistema por flutuações estatísticas e devido ao fato de haver um número finito de configurações acessíveis. Isso implica que os únicos estados estacionários reais para sistemas finitos são estados absorventes. Além disso, algumas técnicas bastante difundidas, como simulações dinâmicas de espalhamento [2], não podem ser aplicadas para redes complexas devido à propriedade de mundo pequeno destas redes<sup>1</sup>. Uma alternativa é considerar o estado quase-estacionário (QE), no qual a dinâmica original é perturbada para contornar o estado absorvente de tal modo que esta perturbação seja irrelevante em relação às grandezas de interesse e o limite termodinâmico correto (assim como seu conjunto de expoentes críticos) seja obtido por meio de uma técnica adequada de escalonamento de tamanho finito. Neste capítulo, iremos comparar majoritariamente, em redes regulares e complexas, os resultados de quatro métodos de simulação, a saber, o **método quase-estacionário padrão** ( $SQS^2$ ), o **método de condição de fronteira refletora** ( $RBC^3$ ), o **método de reativação dos hubs** ( $HRB^4$ ) e o **método de campo externo** ( $EF^5$ ). Simulações foram realizadas para dois processos dinâmicos bem conhecidos que apresentam estados absorventes: o processo de contato e o modelo SIS. Os resultados deste capítulo foram publicados em outubro de 2016, no periódico *Physical Review E* [9].

---

<sup>1</sup>Tais simulações requerem um sistema que seja grande o suficiente para que a dinâmica não atinja uma das fronteiras da rede, o que explicitaria a finitude do sistema.

<sup>2</sup>Do inglês, *standard quasistationary method*.

<sup>3</sup>Do inglês, *reflecting boundary condition*.

<sup>4</sup>Do inglês, *hub reactivation method*.

<sup>5</sup>Do inglês, *external field*.

## 4.1 Estados quase-estacionários

Comumente, a terminologia QE, em um contexto de simulações, é atribuída às médias apenas das amostras que não visitaram um estado absorvente durante a execução da dinâmica original. Entretanto, aqui, este termo será empregado em um contexto mais geral, sendo interpretado como uma perturbação na dinâmica, que é aplicada ao sistema para evitar que o mesmo fique preso ao estado absorvente, enquanto as grandezas QE intensivas convergem para os valores estacionários correspondentes no limite termodinâmico.

Antes de prosseguir para o detalhamento das técnicas específicas para simular o estado QE, é necessário compreender alguns conceitos básicos. Para este fim, considere um processo de um passo [42]  $X_t$ , que será o processo estocástico original (este inclui o estado absorvente com  $n = 0$  sítios ativos<sup>6</sup>). Agora, seja  $X_t^*$  um processo similar, no qual a possibilidade de haver um estado absorvente é excluída. Para  $X_t^*$ , a evolução temporal é a mesma que a de  $X_t$  quando  $n > 0$ , a menos de uma mudança nas regras que deverá ser desprezível no limite termodinâmico da fase ativa. Assim, após um tempo finito, o processo  $X_t^*$  retorna para uma fase ativa sempre que houver uma tentativa de visita a um estado absorvente.

Sejam  $P_n$  e  $P_n^*$  a probabilidade de que hajam  $n$  sítios ativos nas dinâmicas original e perturbada, respectivamente. Em acordo com conceitos do capítulo anterior, a equação mestra para o processo original é dada por

$$\frac{dP_n}{dt} = \sum_m w_{n,m} P_m - \sum_n w_{m,n} P_n, \quad (4.1)$$

em que  $w_{n,m}$  é a taxa de transição de estados com  $m$  para  $n$  sítios ativos. Introduzindo a fonte de atividade perturbativa, que remove os estados absorvente, chega-se à nova equação dinâmica<sup>7</sup>

$$\frac{dP_n^*}{dt} = \sum_m w_{n,m} P_m^* - \sum_n w_{m,n} P_n^* + F(P_0^*, \dots, P_n^*, \dots), \quad (4.2)$$

em que a relação funcional  $F$  irá depender do método QE em particular. A partir da distribuição QE  $\bar{P}_n$ , que é a solução estacionária da equação (4.2), podemos extrair as grandezas quase-estacionárias básicas.

## 4.2 Método quase-estacionário padrão

Conforme mencionado anteriormente, este método consiste em calcular médias apenas sobre as amostras que estão no estado ativo até um instante de tempo  $t$ . Para o processo dinâmico

---

<sup>6</sup>Nessa análise, são permitidos múltiplos estados absorventes.

<sup>7</sup>Neste caso esta equação não será necessariamente uma equação mestra, já que termos não lineares podem ser incluídos.

original, a distribuição QE é dada por

$$\bar{P}_n = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{P_n(t)}{P_s(t)}, \quad n > 0 \quad (4.3)$$

em que

$$P_s(t) = \sum_{n \geq 1} P_n(t) = 1 - P_0(t) \quad (4.4)$$

é a probabilidade de sobrevivência do sistema, ou seja, a probabilidade de que o processo não tenha atingido o estado absorvente até o instante  $t$ . De um ponto de vista prático essa estratégia pode ser problemática, já que, para valores críticos e subcríticos do parâmetro de controle  $\lambda$  o sistema acessa o estado absorvente com muita frequência, resultando em intervalos curtos e ruidosos para os dados estacionários. No ano de 2005, De Oliveira e Dickman propuseram uma estratégia eficiente para contornar este tipo de problema: sempre que houver uma tentativa de visita ao estado absorvente, o sistema assumirá uma configuração ativa selecionada ao acaso a partir da distribuição QE. Em outras palavras, o fluxo de probabilidade para o estado absorvente é redirecionado para configurações ativas pelas quais o sistema passou ao longo da simulação, de modo que o termo de fonte  $F$  na equação (4.2) é dado por

$$F = w_0 P_n^* \quad (4.5)$$

em que  $w_0 = \sum_{m \neq 0} w_{0,m}$  é a taxa total de entrada para os estados estacionários. Verifica-se que a solução estacionária da equação (4.2) com este termo de fonte em particular corresponde à solução QE da equação (4.1) [43].

Tomando-se a derivada temporal da equação (4.4) e assumindo a existência do regime quase-estacionário quando  $t \rightarrow \infty$ , obtemos

$$\frac{dP_s}{dt} = -\frac{dP_0}{dt} = -\bar{P}_1 P_s(t), \quad (4.6)$$

em que usamos a equação mestra 4.1 com a condição  $n = 0$  e  $P_n = \bar{P}_n P_s$  para  $n > 0$ . A solução é  $P_s \sim \exp(-t/\tau_a)$ , em que

$$\tau_a = \frac{1}{\bar{P}_1} \quad (4.7)$$

é o tempo típico de relaxação para passar de um estado QE ativo para um estado absorvente.

Um empecilho para a realização de amostras de simulação utilizando esta técnica é o fato de que a distribuição QE não é conhecida previamente. Porém, este problema é resolvido construindo-se uma lista (histograma) com  $M$  configurações ativas (pelas quais o sistema passou ao longo da simulação), que será utilizada para escolher ao acaso um novo estado após cada tentativa de entrada no estado absorvente. Para que a distribuição deste histograma convirja para a distribuição QE do processo [44], a lista é atualizada constantemente substituindo-se uma configuração aleatória pela configuração atual do sistema com uma probabilidade  $p_r$  a cada passo

de tempo.

### 4.3 Método de condição de fronteira refletora

Nesta técnica, evita-se o estado absorvente retornando o sistema à configuração ativa na qual ele se encontrava no passo exatamente anterior à tentativa de visita ao estado absorvente<sup>8</sup>, representando uma fronteira refletora [45]. O termo de fonte para a equação dinâmica 4.2 torna-se, então,

$$F = (\delta_{1,n} - \delta_{0,n})P_0^*. \quad (4.8)$$

A distribuição QE é dada por  $\bar{P}_n = \lim_{t \rightarrow \infty} P_n^*$  e, para  $n = 0$ , a equação (4.2) assume a forma simplificada

$$\frac{dP_0^*}{dt} = P_1^* - P_0^*. \quad (4.9)$$

No limite estacionário,  $P_0^*$  torna-se constante, de modo que  $\bar{P}_1 = \bar{P}_0$ . Aqui,  $\bar{P}_0$  é a probabilidade de o sistema encontrar-se no estado absorvente, no regime estacionário. Logo, o sistema está na fase ativa com a probabilidade complementar  $1 - \bar{P}_0$ . Para calcular o tempo de vida (*lifespan*), considere uma dinâmica com tempo discreto, de passo  $\tau_0 = 1$ , interpretado como sendo o tempo médio que o sistema permanece na fase absorvente. A probabilidade de que o sistema esteja em um estado com  $n > 0$  para  $s - 1$  passos e retorne ao estado  $n = 0$  no passo  $s$  é  $(1 - \bar{P}_0)^{s-1} \bar{P}_0$ . Assim, o tempo médio entre duas visitas ao estado absorvente é dado por

$$\tau_a = \tau_0 \sum_{t=0}^{\infty} t(1 - \bar{P}_0)^{t-1} \bar{P}_0 = \frac{\tau_0}{\bar{P}_0} = \frac{1}{\bar{P}_1}, \quad (4.10)$$

recuperando a equação (4.7). É importante observar que, conceitualmente, este tempo difere daquele para o método SQS, já que este é o tempo médio para visitar o estado absorvente partindo de um único sítio ativo. Logo, as propriedades de escalonamento podem ser diferentes ao compararmos os dois métodos. Considere um processo epidêmico ocorrendo em um reticulado  $d$ -dimensional. Em grafos homogêneos (o que inclui reticulados) o processo de contato e o modelo SIS podem ser mapeados um no outro e apresentam a mesma criticalidade, pertencendo ambos à classe de universalidade da percolação direcionada [2]. A probabilidade de que a epidemia esteja ativa em um instante  $t$ , tendo iniciado com um único sítio infectado é dada pela probabilidade de sobrevivência  $P_s$  e, no ponto crítico  $\lambda_c$ , esta probabilidade segue a relação de escala

$$P_s \sim t^{-\delta} \exp(-t/t_s)[2], \quad (4.11)$$

em que a finitude da rede é “sentida” em um tempo característico  $t_s \sim N^{z^*}$ , sendo que  $N = L^d$  é o número de sítios para uma rede de dimensão linear  $L$ . Assim, o tempo médio entre duas

<sup>8</sup>Estados com  $n = 0$  são acessados neste caso, porém o processo retorna ao estado anterior com taxa igual a 1.

visitas ao estado absorvente é dado por

$$\tau_a = \int_0^\infty t \frac{dP_0}{dt} dt = \int_0^\infty P_s dt \sim N^{z^*(1-\delta)} \quad (4.12)$$

para  $d$  menor que a dimensão crítica superior  $d_c = 4$ , para a qual  $\delta < 1$ . A última integral foi resolvida utilizando o método do ponto de sela. Acima da dimensão crítica superior, correspondente ao campo médio de maior interesse para este trabalho [46, 47], tem-se que  $\delta = 1$  e  $t_s \sim N^{1/2}$ . Resolvendo a integral explicitamente, encontra-se um valor de  $\tau_a$  que aumenta com o logaritmo do tamanho do sistema.

## 4.4 Método de reativação de hubs

Para o caso de redes heterogêneas, investigou-se também uma alternativa ao método RBC, que consiste no seguinte procedimento: após visitar o estado absorvente, a atividade sempre recomeça a partir do sítio mais conectado da rede.

## 4.5 Método de campo externo

Neste método, um campo externo acoplado ao sistema cria atividade com uma taxa  $f$  escolhida de modo a se anular no limite  $N \rightarrow \infty$  [48]. Para esta técnica, o termo de fonte na equação (4.2) é dado por

$$F = f(N - n + 1)P_{n-1}^* - f(N - n)P_n^*, \quad n > 0 \quad (4.13)$$

Este termo já leva em conta o fluxo de entrada e saída em  $P_n^*$  devido à criação espontânea pelo campo externo acoplado. Para o estado absorvente, temos

$$\frac{dP_0^*}{dt} = P_1^* - fNP_0^*. \quad (4.14)$$

O regime estacionário é atingido para tempos longos, o que implica em  $\bar{P}_1^* = fN\bar{P}_0^*$ . Logo,

$$\tau_a = \frac{\tau_0}{\bar{P}_0^*} = \frac{1}{\bar{P}_1^*} \quad (4.15)$$

onde levamos em conta que o tempo médio que o sistema permanece no estado absorvente é dado por  $\tau_0 = 1/(fN)$ .

A densidade crítica de sítios ativos produzida por um campo externo fraco  $f$  segue a re-

lação de escala  $\bar{\rho}_{EF} \sim N^{-\beta^*}$ . Impondo a condição de que esta densidade crítica torna-se desprezível quando comparada com a densidade QE e assumindo  $f \sim N^{-\alpha}$ , temos que a condição  $\bar{\rho}_{EF} \ll \bar{\rho}_{QE}$  é satisfeita se  $\alpha > \beta^* \delta_h \geq 1$  também for<sup>9</sup>. Verifica-se esta última desigualdade utilizando os conjuntos de expoentes críticos  $\beta^* = (0, 252; 0, 398; 0, 464; 0, 500)$  e  $\delta_h = (9, 23; 3, 72; 2, 52; 2, 00)$  da classe da percolação direcionada para  $d = 1, 2, 3$  e  $d \geq 4$ , respectivamente. Dessa maneira, a taxa total de criação tende a zero no limite termodinâmico e o sistema permanece no estado absorvente durante intervalos de tempo que divergem neste limite. Como veremos adiante, para a implementação computacional isso não será um problema, já que isso é implementado com um passo de tempo  $\Delta t = 1/(fN)$ . Apenas deve-se observar que, nesse caso, as distribuições QE devem ser construídas usando apenas as configurações na fase ativa das simulações como

$$\bar{P}_n \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{P_n^*}{\sum_{m>0} P_m^*} \quad (4.16)$$

e  $\bar{P}_0 \equiv 0$ . Neste limite, os métodos RBC e EF tornam-se equivalentes.

## 4.6 Algoritmos

Os algoritmos para simulação nos métodos SQS, RBC e HR, no modelo SIS, são implementados da seguinte maneira [37]: A cada passo de tempo, é computado o número de sítios infectados  $N_i$  e o número total de ligações que estes sítios fazem  $N_n$ . Com probabilidade  $N_i/(N_i + \lambda N_n)$  um sítio infectado, selecionado ao acaso, torna-se suscetível. Com a probabilidade complementar  $\lambda N_n/(N_i + \lambda N_n)$ , seleciona-se uniformemente ao acaso uma conexão partindo de um sítio infectado (cada um dos sítios ativos tem a mesma chance de ser escolhido) e a infecção é enviada no sentido do outro componente da ligação, possivelmente em estado suscetível. O número de nós infectados e as conexões relacionadas a eles são atualizados de maneira apropriada, o tempo é incrementado por um fator  $\Delta t = 1/(N_i + \lambda N_n)$  e o processo todo é iterado.

Para a simulação com o método EF há um terceiro evento possível: a infecção espontânea de um sítio ao acaso com taxa  $f$ . Neste caso, o primeiro evento mencionado no parágrafo anterior (cura) passa a ocorrer com probabilidade  $N_i/(N_i + \lambda N_n + fN)$ , o segundo evento (possível transmissão da infecção) ocorrerá com probabilidade  $\lambda N_n/(N_i + \lambda N_n + fN)$ , enquanto o evento adicional (infecção espontânea) ocorre com a probabilidade complementar  $fN/(N_i + \lambda N_n + fN)$ . O incremento de tempo passa a ser  $\Delta t = 1/(N_i + \lambda N_n + fN)$ .

As simulações para o processo de contato são realizadas utilizando um procedimento padrão [2]: A cada passo de tempo, computa-se o número de indivíduos infectados  $N_i$ . Um sítio

<sup>9</sup> $\delta_h$  é um expoente da classe de universalidade PD, definido quando há um campo externo fraco acoplado ao sistema [2]

infectado é selecionado ao acaso com probabilidade uniforme e tenta infectar um dos vizinhos mais próximos, novamente selecionado aleatoriamente com probabilidade  $\lambda/(1 + \lambda)$ . Com a probabilidade complementar  $1/(1 + \lambda)$  ocorre a cura de um sítio infectado selecionado ao acaso. O tempo aumenta de uma quantidade  $\Delta t = 1/(N_i + \lambda N_i)$  e, mais uma vez, o processo é iterado. Para o método EF as probabilidades de infecção espontânea, infecção devido a um vizinho próximo e cura espontânea são, respectivamente,  $fN/(N_i + \lambda N_i + fN)$ ,  $\lambda N_i/(N_i + \lambda N_i + fN)$  e  $N_i/(N_i + \lambda N_i + fN)$  e o incremento de tempo é  $\Delta t = 1/(N_i + \lambda N_i + fN)$ .

As grandezas QE relevantes são calculadas durante um tempo de média  $t_m$ , decorrido após um tempo de relaxação  $t_r$ . Durante o intervalo  $t_m$ , é computada a distribuição  $\bar{P}_n$ , de modo que cada configuração com  $n$  sítios ativos contribui para a distribuição QE com uma probabilidade que é proporcional ao seu tempo de vida. Em redes complexas, foram usados tempos de média da ordem de  $10^8$ , tempos de relaxação da ordem de  $10^6$  e  $p_r = 10^{-2}$  (para o método SQS). Para reticulados, foi adotado  $t_r > 10^7$ .

#### 4.6.1 Caracterização numérica do ponto crítico

O comportamento crítico de processos tanto de equilíbrio quanto fora dele, apresenta comprimentos de correlação espacial e temporal que divergem no limite termodinâmico devido à flutuações no espaço e no tempo que são, por si só, divergentes. A análise de um comprimento de correlação em redes complexas deixa de fazer sentido, já que este tipo de rede apresenta a propriedade de mundo pequeno, fazendo que com que a distância média entre dois vértices cresça, no máximo, logaritmicamente [49]. Entretanto, correlações temporais com flutuações divergentes ainda podem ser aplicadas para identificar transições de fase para estados absorventes [50, 11, 37]. A suscetibilidade em relação ao parâmetro de ordem

$$\chi = \frac{\langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2}{\langle n \rangle} = N \frac{\langle \rho^2 \rangle - \langle \rho \rangle^2}{\langle \rho \rangle} \quad (4.17)$$

exibe uma clara divergência em um ponto de transição para o modelo SIS em redes com expoente  $\gamma < 3$  [39, 37] e para o PC [11] em redes complexas. Este pico na curva  $\chi \times \lambda$  será usado para estimar os limiares epidêmicos efetivos  $\lambda_p$ , como funções do tamanho da rede. A figura 4.1 mostra a suscetibilidade  $\chi(\lambda)$  e o tempo de vida  $\tau_a(\lambda)$  (inserção), obtidos usando o método SQS para  $\gamma = 2, 7$ . Para as análises numéricas, adotaremos  $\tau_a > t_{av}$  como um tempo de vida divergente, correspondendo à fase ativa do sistema. Note que todas as curvas para  $\tau_a$  mostram uma divergência aproximadamente no mesmo ponto  $\lambda_p$  em que se localizam os picos da suscetibilidade  $\chi$ . Assim, observa-se que não é possível usar o tempo de vida como um parâmetro de ordem, devido a essa divergência na fase ativa. Por essa razão, utilizaremos o tempo de autocorrelação na próxima subseção. No caso da ocorrência de múltiplos picos nas curvas de suscetibilidade [37], o limiar epidêmico será definido como sendo aquele que ocorre mais

próximo do ponto em que o tempo de vida diverge [50].

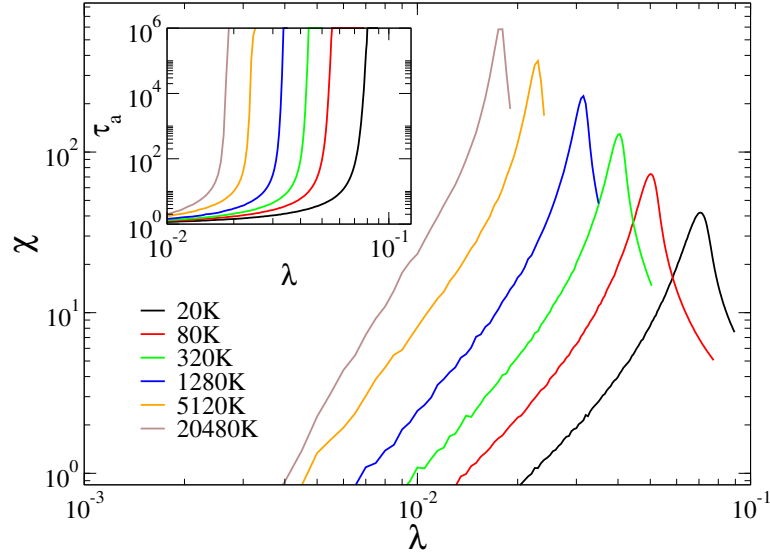


Figura 4.1: Curvas da suscetibilidade *versus* a taxa de infecção para o modelo SIS em redes com distribuição em lei de potência com  $\gamma = 2, 7$  para diversos tamanhos de rede, geradas pelo método SQS. Inserção: gráficos do tempo de vida pela taxa de infecção.

O tempo de autocorrelação de uma série temporal é definido como [51]

$$\tau_c = \frac{1}{2} \sum_{s=0}^{t_{av}} C(s), \quad (4.18)$$

em que  $C(s)$  é a função de autocorrelação dada por

$$C(s) = \frac{\langle \tilde{\rho}(s' + s) \tilde{\rho}(s') \rangle}{\langle \tilde{\rho}^2 \rangle}, \quad (4.19)$$

em que  $\tilde{\rho}(s) = \rho(s) - \langle \rho \rangle$  é uma série temporal construída para armazenar a densidade quase-estacionária entre intervalos de tempo  $\Delta t = 1$ . Aqui, os *brackets*  $\langle \rangle$  representam médias sobre o tempo. Para evitar comportamentos espúrios, especialmente na fase subcrítica para o método SQS, a série temporal deve estar isenta de grandes saltos (*gaps*): sempre que uma nova configuração for selecionada ao acaso para substituir o estado absorvente, um intervalo da série temporal é descartado de tal modo que a diferença no número de sítios infectados antes e depois da reposição seja no máximo de<sup>10</sup>  $\Delta n = 1$ . Séries temporais grandes (com pelo menos  $10^7$  pontos) foram usadas para calcular  $\tau_c$  próximo e abaixo dos limiares epidêmicos. A função de autocorrelação para séries temporais longas é computada de maneira eficiente como sendo a transformada de Fourier inversa do espectro de potências da série [51].

Para validar o método, realizamos simulações do modelo SIS no regime crítico em reticulados hipercúbicos de dimensões  $d = 1, 2$  e  $3$  com condições de contorno periódicas. A figura 4.2

<sup>10</sup>Para os métodos RBC e EF não existe esse problema

mostra o gráfico do tempo de autocorrelação como função da taxa de infecção para o modelo SIS em redes quadradas de diferentes tamanhos, no qual observa-se um pico bem pronunciado, que diverge na medida em que o tamanho da rede aumenta. A posição do pico  $\lambda_p$  converge para o valor esperado do limiar epidêmico para o modelo SIS  $\lambda_c$  em dimensões 1, 2 e 3, de acordo com o escalonamento de tamanho finito padrão [52]:

$$\lambda_p - \lambda_c \sim L^{-1/\nu_\perp}, \quad (4.20)$$

em que  $\nu_\perp$  é o expoente crítico associado com a divergência do comprimento de correlação, como visto na seção 3.3.1. A inserção da figura 4.2 mostra este escalonamento em lei de potência. Note que para redes regulares, em que todos os vértices fazem o mesmo número de conexões  $k$ , os pontos críticos para o modelo SIS e para o PC estão relacionados por  $\lambda_c^{SIS} = \lambda_c^{PC}/k$ . Usando os limiares conhecidos para o PC em redes hipercúbicas [52], temos  $\lambda_c^{SIS} = 1, 648924, 0, 41219$  e  $0, 21948$  para  $d = 1, 2$  e  $3$ , respectivamente.

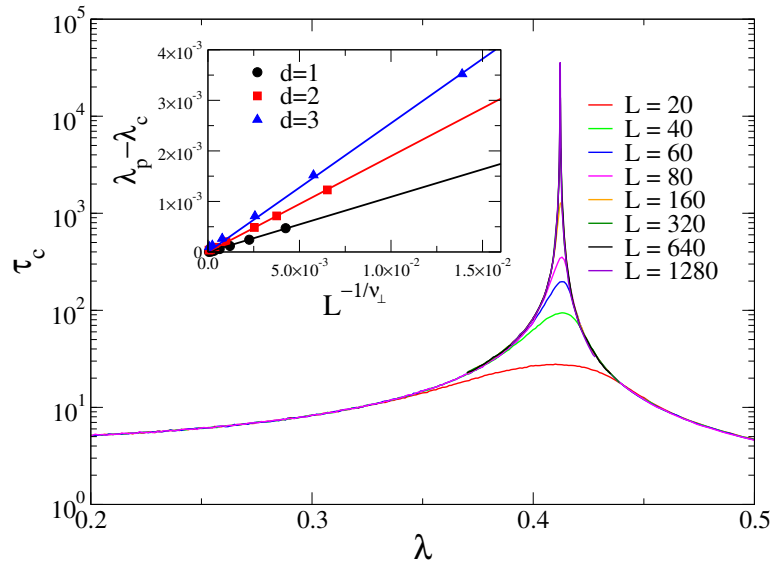


Figura 4.2: Tempo de autocorrelação como função da taxa de infecção para o modelo SIS em reticulados bidimensionais para diferentes tamanhos. A inserção mostra o escalonamento de tamanho finito do limiar epidêmico para  $d = 1, 2$  e  $3$ .

#### 4.6.2 Comparação entre os métodos SQS e RBC em redes regulares

A figura 4.3 mostra a densidade QE para o modelo SIS na criticalidade como função do número de nós da rede  $N$  (para reticulados,  $N = L^d$ ) em reticulados hipercúbicos  $d$ -dimensionais e redes regulares aleatórias<sup>11</sup> (RRN)[53], nas quais todos os vértices tem o mesmo grau  $k = 3$  e as conexões são realizadas aleatoriamente. Tanto para o método SQS quanto para o método

<sup>11</sup>Do inglês, *random regular networks*. São redes com dimensão infinita, onde cada nó faz o mesmo número de ligações, porém as mesmas são distribuídas aleatoriamente.

RBC, foram observados decaimentos em leis de potência na forma  $\bar{\rho} \sim N^{-\beta^*}$  com os expoentes esperados<sup>12</sup> para a classe de universalidade PD  $\beta^* = 0,2521, 0,3978, 0,4640$  e  $1/2$  em dimensões  $d = 1, 2, 3$  [52] e  $\infty$  [46].

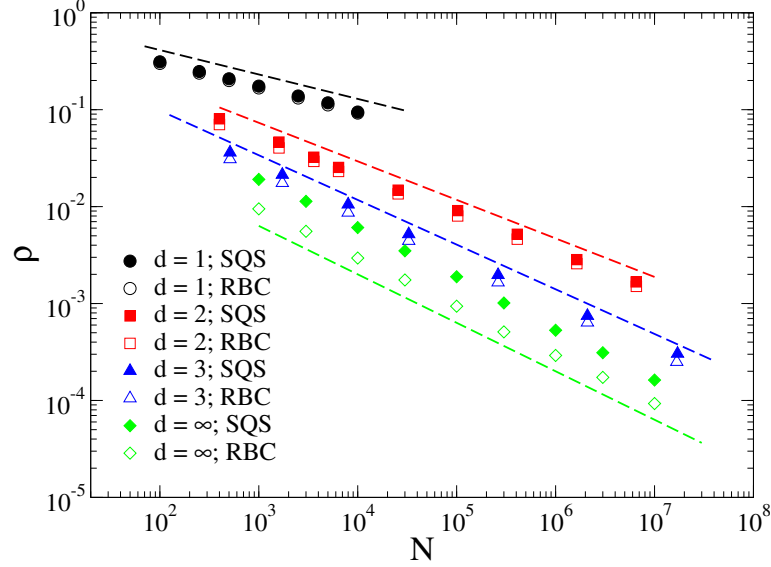


Figura 4.3: Densidade QE como função do número de vértices para o modelo SIS na criticidade para reticulados com  $d = 1, 2$  e  $3$  e RRN ( $d = \infty$ ) para os métodos SQS e RBC. As linhas tracejadas representam os expoentes de ETF para a classe de universalidade PD.

Na figura 4.4, o tempo de vida crítico da epidemia  $\tau_a(N)$  é comparado para os métodos SQS e RBC. As leis de escalonamento finito da classe PD  $\tau \sim N^{z^*}$ , com  $z^* = 1,5807, 0,8830$  e  $1/2$  para  $d = 1, 2$  e  $\infty$ , respectivamente, são confirmadas para o método SQS, enquanto os expoentes<sup>13</sup> da classe PD  $z^*(1 - \delta) = 1,3285, 0,4852$  e  $0$  (logarítmico) foram observados para o método RBC, estes últimos de acordo com o que prevê a equação (4.12). A figura 4.4(b) compara os tempos de autocorrelação integrados para os métodos SQS e RBC no ponto crítico. Nota-se que a mesma lei de escala  $\tau_c \sim N^{z^*}$  é encontrada em ambos os métodos, evidenciando que esta grandeza de fato fornece um tempo de relaxação característico que diverge como  $\tau_c \sim |\lambda - \lambda_c|^{-\nu_{\perp}}$  para ambos os métodos.

### 4.6.3 Análise numérica em redes com distribuição em lei de potência

Aqui, consideraremos redes complexas com distribuição de conexões em lei de potência na forma  $P(k) \sim k^{-\gamma}$ , geradas usando o algoritmo do modelo UCM (redes UCM). Na construção das redes, impomos o grau mínimo  $k_0 = 3$  e o *cutoff* estrutural  $k_c = N^{1/2}$  na distribuição, garantindo a ausência de correlações entre graus para qualquer valor do expoente  $\gamma > 2$  [54]. Foram analisados valores de  $\gamma$  para os quais o modelo SIS apresenta comportamentos distintos

<sup>12</sup> $\beta^*$  é definido como  $\beta^* \equiv \beta/d\nu_{\perp}$  [9]

<sup>13</sup> $z^*$  é definido como  $z^* \equiv \nu_{\parallel}/d\nu_{\perp}$  [9]

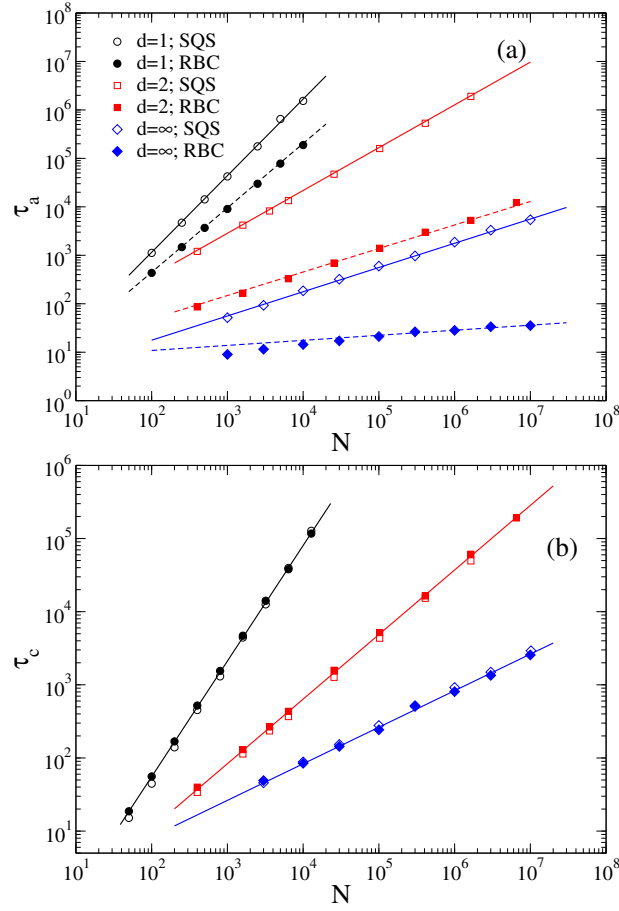


Figura 4.4: (a) Tempo de vida da dinâmica do modelo SIS na criticalidade em reticulados de dimensões  $d = 1, 2$  e  $3$  e RRN ( $d = \infty$ ). As linhas contínuas são ajustes em lei de potência previstos pelo método SQS ( $\tau_a \sim N^{z^*}$ ) e as linhas tracejadas representam ajustes para o método RBC ( $\tau_a \sim N^{z^*(1-\delta)}$ ). (b) Tempos de correlação críticos integrados como função do tamanho da rede. Linhas contínuas representam leis de potência  $\tau_c \sim N^{z^*}$  com os expoentes da classe PD.

em redes UCM de tamanhos finitos [10]. Para  $\gamma < 3$ , o modelo SIS apresenta uma única transição, bem definida, que ocorre em um limiar epidêmico tendendo à zero no limite de tamanhos infinitos. Para  $\gamma > 3$ , o modelo exibe fases ativas localizadas, levando a múltiplas transições de fase no limite de tamanhos grandes [50, 55]. No caso do PC encontra-se uma transição, que ocorre em um limiar finito para qualquer valor do expoente  $\gamma$  [56, 11]. Sendo assim, levaremos em consideração apenas os casos em que  $\gamma > 3$ , para os quais os expoentes críticos apresentam dependência com o valor de  $\gamma$ .

Uma comparação entre as curvas de suscetibilidade obtidas com os métodos RBC, SQS e de reativação de *hubs* (HR<sup>14</sup>) para o SIS e PC é mostrada na figura 4.5(a) para uma rede com  $N = 10^7$  vértices e expoente  $\gamma = 2, 7$ . Estas técnicas se mostraram equivalentes para o PC, sendo que a única diferença é que a transição para o PC é levemente menos pronunciada no método SQS em relação à observada para os métodos RBC e HR<sup>15</sup>. Já para o modelo SIS, o pico de suscetibilidade obtido para o método RBC é claramente mais destacado do que aquele para o

<sup>14</sup>Do inglês, *hub reactivation*.

<sup>15</sup>De fato, indistinguível nestes dois últimos.

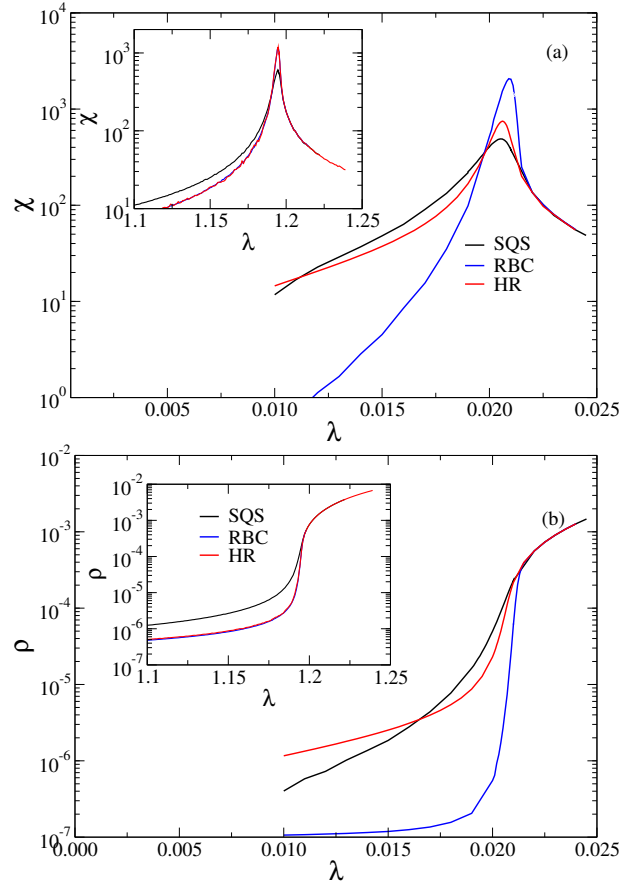


Figura 4.5: Comparativo das grandezas QE em redes sem escala. (a) Suscetibilidade  $\chi(\lambda)$  e, (b), o parâmetro de ordem  $\rho(\lambda)$  para o modelo SIS e para o PC (inserções) utilizando diferentes métodos. O expoente da distribuição de conexões é  $\gamma = 2, 7$  e o tamanho da rede é  $N = 10^7$ .

método HR, a despeito da similaridade existente entre seus algoritmos: o último apresenta curva de suscetibilidade próxima àquela obtida pelo método SQS, evidenciando uma suavização destas curvas em relação à correspondente ao método RBC. Este fenômeno também é reforçado nas curvas da densidade  $\rho$  como função da taxa de infecção  $\lambda$  mostradas na figura 4.5(b), nas quais os valores subcríticos da densidade para os métodos SQS e HR apresentam-se em uma faixa mais larga de valores do que no método RBC.

Observe que a posição dos picos de suscetibilidade é praticamente independente do método utilizado, como mostra a figura 4.6. No caso do SIS, o método RBC fornece picos de suscetibilidade um pouco acima dos outros, diferenças estas que não são percebidas no gráfico. Realizando um ajuste nos dados para uma lei de potência do tipo  $\lambda_p \sim N^{-\phi}$ , o expoente  $\phi = 0, 20$  foi encontrado para os três métodos. Para o PC, neste mesmo modelo de rede e para ambos os métodos, foi verificada a convergência do ponto crítico para um valor fixo constante, relatada na referência [11].

A figura 4.7(a) mostra o escalonamento de tamanho finito do parâmetro de ordem  $\rho$ , tomado na posição do pico de suscetibilidade  $\lambda_p(N)$  [11] com o valor de expoente  $\gamma = 2, 7$ . Assumindo

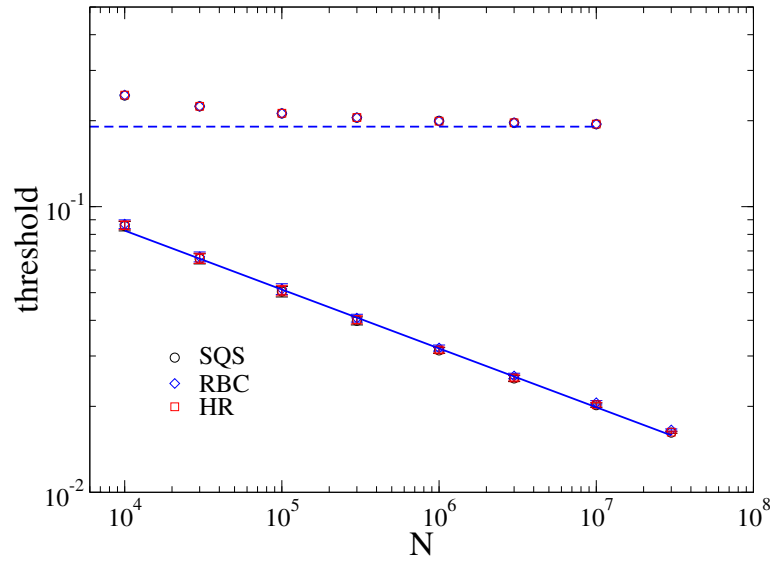


Figura 4.6: Limiares epidêmicos efetivos  $\lambda_p$  como funções do tamanho da rede  $N$  para o modelo SIS (curvas na parte inferior) e para o PC (curvas na parte superior) obtidas por meio de simulações utilizando os métodos SQS, RBC e HR. Os limiares para o CP foram subtraídos de uma unidade para melhor visualização. A linha contínua representa um ajuste em lei de potência, enquanto a tracejada representa o limiar epidêmico para o PC no limite de tamanhos muito grandes, de acordo com a referência [11]. O expoente da distribuição é  $\gamma = 2,7$ .

uma função de escala na forma  $\rho \sim N^{-\beta^*}$ , o ETF para o PC fornece<sup>16</sup>  $\beta^* = 0,60(2)$  para os métodos RBC e SQS, em concordância com os resultados para redes regulares. Entretanto, para o modelo SIS foi encontrado  $\beta^* = 0,69(2)$  para o método RBC, em contraste com o valor  $\beta^* = 0,61(2)$ , obtido para o método SQS. Note que, dentro da margem de erro com que trabalhamos, os expoentes obtidos para o SIS e PC com o método SQS são os mesmos. O ETF do tempo de autocorrelação e do tempo entre sucessivas tentativas de visita ao estado absorvente é mostrado na figura 4.7(b). Como no caso das redes RRN, observamos que o tempo de vida  $\tau_a$  cresce logaritmicamente para os métodos RBC e HR. Por outro lado, os tempos de autocorrelação fornecem o mesmo expoente para RBC, HR e SQS, em concordância com o escalonamento de  $\tau_a$ , obtido pelo método SQS. Assumindo para  $\tau$  uma lei de escala do tipo  $\tau \sim N^{z^*}$ , encontramos, para os três métodos, o mesmo expoente  $z^* = 0,33(1)$  para  $\tau_c$  e  $\tau_a$  (no último caso, para a técnica SQS). Resultados equivalente foram obtidos para o PC, tendo sido encontrado o expoente  $z^* = 0,40(1)$ .

Agora, vamos esclarecer a diferença que existe entre as simulações do modelo SIS pelos métodos RBC e HR. Para a técnica RBC, a probabilidade de retornar à configuração absorvente logo após o reinício da epidemia é dada por

$$p_{abs} = \frac{1}{1 + \lambda_c k}, \quad (4.21)$$

<sup>16</sup>Os valores numéricos entre parênteses representam incertezas obtidas por regressões.

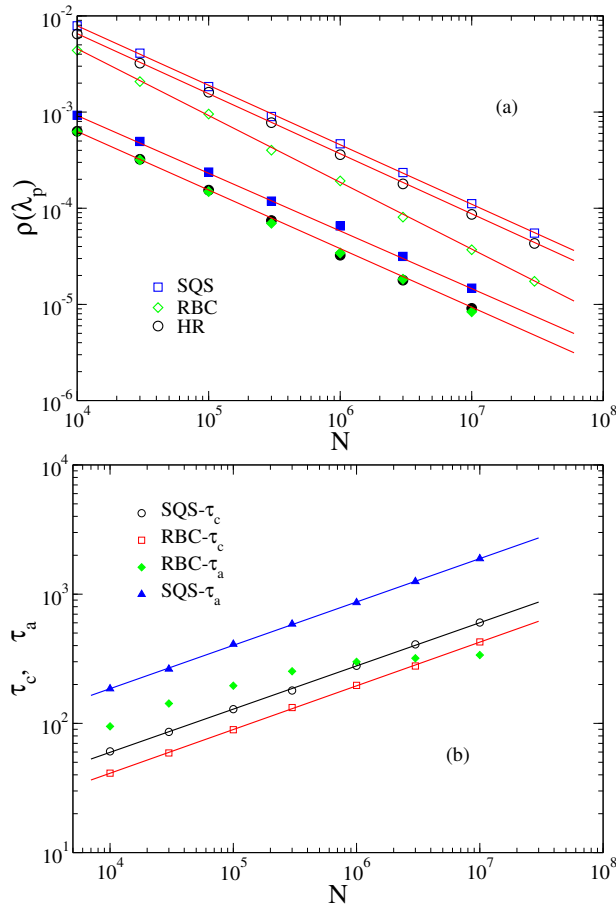


Figura 4.7: Escalonamento de tamanho finito dos modelos epidêmicos abordados, em redes geradas pelo algoritmo UCM com  $\gamma = 2, 7$ . (a) Densidade crítica para o modelo SIS (símbolos sem preenchimento) e para o PC (símbolos preenchidos). Os valores da densidade para o PC foram divididos por um fator 10 para uma melhor visibilidade. (b) ETF dos tempos de correlação integrados ( $\tau_c$ ) e o tempo entre tentativas de visita ao estado absorvente ( $\tau_a$ ) para o modelo SIS. Os dados de simulação pelo método SQS para  $\tau_a$  foram divididos por um fator 100 para melhorar a visualização e as linhas sólidas representam regressões em lei de potência. As médias foram realizadas sobre 10 redes geradas e as barras de erro obtidas a partir desta estatística são menores que os símbolos.

em que  $k$  é o número de conexões que faz o vértice no qual a atividade encerrou-se e voltou a ocorrer logo em seguida. Haja visto que, com alta probabilidade, o estado pré-absorvente consiste na existência de atividade em um vértice com grau baixo (pois estes representam a maioria dos vértices na rede) e lembrando que  $\lambda_c \rightarrow 0$  no limite termodinâmico, a chance de que o sistema adentre o estado absorvente novamente no próximo passo vai para 1. No método HR, a atividade retorna para um vértice de grau  $k = k_c \sim N^{1/2}$  de modo que  $\lambda_c(N)k \gg 1$  e a probabilidade de que surja um surto epidêmico com  $n > 1$  vértices infectados tende a 1. Desse modo, conclui-se que o método HR é equivalente ao método SQS ao invés do RBC, já que o regime quase-estacionário do primeiro é constituído de um número grande de configurações com  $n \gg 1$ , com várias delas situando-se no entorno de *hubs*, o que aumenta a probabilidade de que um *hub* seja reativado. É importante observar que, na dinâmica do PC, o sistema retorna

para o estado pré-absorvente com probabilidade

$$p_{abs} = \frac{1}{1 + \lambda_c} < \frac{1}{2} \quad (\lambda_c > 1), \quad (4.22)$$

que é independente do grau do vértice e um novo surto com  $n > 1$  ocorre com probabilidade finita tanto no método RBC quanto no HR. Além do mais, a autocorrelação é insensível a este detalhe e fornece os mesmos expoentes de ETF para todos os métodos analisados.

Para  $\gamma > 3$ , a distribuição de conexões do modelo UCM possui uma variância finita, mas

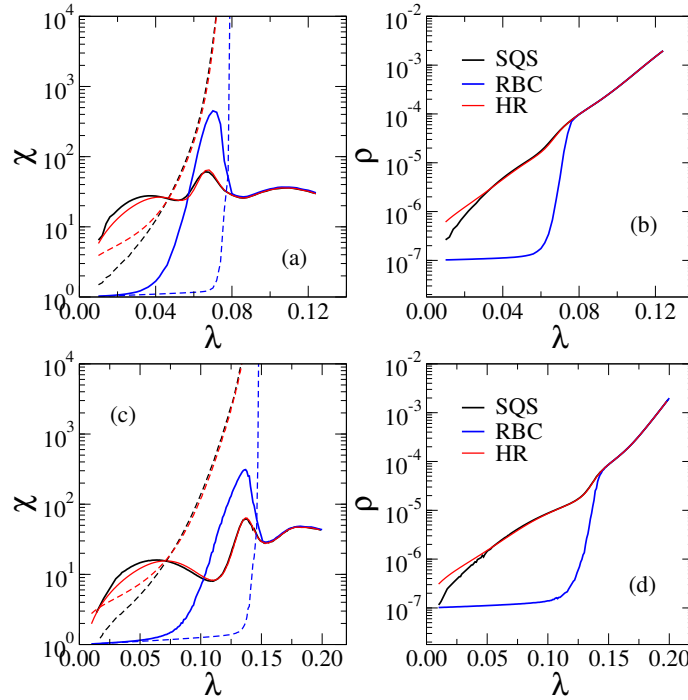


Figura 4.8: Curvas de suscetibilidade  $\chi(\lambda)$  e densidade QE  $\rho(\lambda)$  para o modelo SIS em redes geradas pelo algoritmo UCM ( $N = 10^7$ ) com  $\gamma = 3,5$  ((a) e (b), respectivamente) e com  $\gamma = 4,0$  ((c) e (d), respectivamente), utilizando diferentes técnicas para simular o estado quase-estacionário. As linhas tracejadas representam o tempo de vida da epidemia  $\tau_a = 1/\bar{P}_1$ .

apresenta alguns poucos vértices com grau muito maior do que o restante dos nós na rede. Chamaremos estes nós muito conectados de *outliers*, de acordo com discussões realizadas nas referências [50, 11]. Estes *outliers* geram setores localizados que podem ser ativados de maneira independente, dando origem a múltiplos picos de transição nas curvas de suscetibilidade para o modelo SIS, quando simulado em redes grandes pelo método SQS [50, 39, 37]. A figura 4.8 mostra curvas de suscetibilidade comparando os diferentes métodos para uma mesma rede. Uma diferença marcante ocorre no que diz respeito ao pico observado para valores pequenos de  $\lambda$  nas curvas geradas para as simulações com o método SQS, que ocorre devido à atividade localizada no vértice mais conectado da rede e sua vizinhança. Esta transição localizada não é observada no método RBC, porém ocorre também no método HR. Os picos secundários são associados à divergência no tempo de vida do processo [50]. Os métodos SQS e RBC são equivalentes, confirmando o fato de que a ativação do vértice mais conectado não é capturada

pelo método RBC, mas é para os outros métodos. Uma suavização da transição [55, 57, 58] é observada para os métodos SQS e HR em relação às simulações com  $\gamma = 2, 7$ . Como esperado, acima do limiar epidêmico, que é marcado pela divergência no tempo de vida, todos os métodos de simulação tornam-se equivalentes já que o estado absorvente não é visitado ao longo das realizações numéricas. Vale observar que múltiplas transições de fase não são características exclusivas do método SQS, aparecendo também nas simulações utilizando as técnicas RBC e HR.

A figura 4.9 mostra o comportamento de escala dos limiares epidêmicos, dados pelo pico

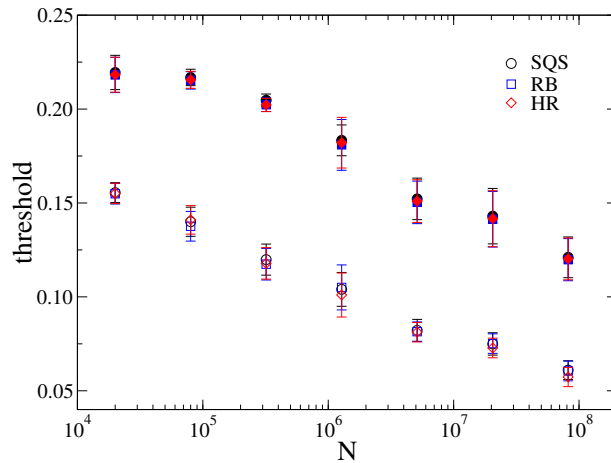


Figura 4.9: Limiares epidêmicos efetivos como funções do tamanho do sistema para o modelo SIS em redes geradas pelo algoritmo UCM com  $\gamma = 3, 5$  (símbolos não preenchidos) e  $\gamma = 4, 0$  (símbolos preenchidos) para diferentes métodos de simulação.

de suscetibilidade próximo ao ponto de divergência do tempo de vida, para  $\gamma = 3, 5$  e  $\gamma = 4, 0$  como funções do tamanho da rede. Pode-se notar que as dependências funcionais são similares para os três métodos e as diferenças encontram-se dentro das margens de incerteza.

Por fim, no limite do campo externo acoplado fraco, os eventos de criação raramente ocorrem na fase ativa. Logo, o método EF torna-se equivalente ao RBC em reticulados [48]. Entretanto, algumas diferenças relevantes são permitidas em redes altamente heterogêneas, já que estados pré-absorventes são, geralmente, configurações com atividade nas imediações de um *hub*. Isso pode aumentar a chance de um surto epidêmico no método RBC devido à possibilidade de reinício da epidemia nas proximidades de um *hub*, em contraste com o que ocorre no método EF, em que a infecção retorna através de um vértice selecionado ao acaso. Foram realizadas simulações usando o método de campo externo com uma fonte  $f = N^{-1,25}$ . Na figura 4.10, mostramos uma comparação dos métodos para o modelo SIS e a completa equivalência entre os mesmos.

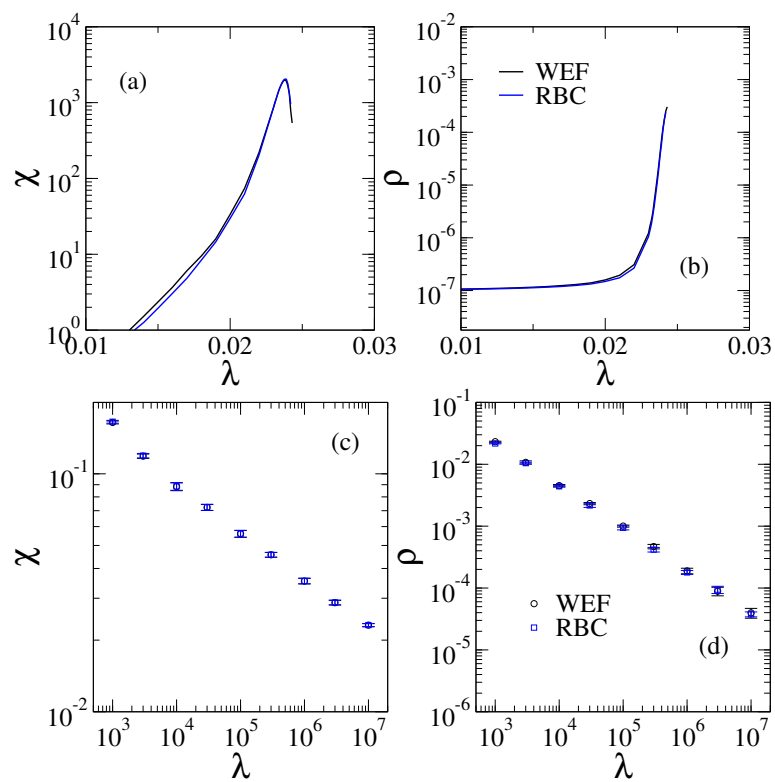


Figura 4.10: Equivalência entre os métodos RBC e com campo externo acoplado (EF) para o modelo SIS em redes UCM com expoente  $\gamma = 2,75$ . Acima, são mostradas as curvas (a)  $\chi(\lambda)$  e (b)  $\rho(\lambda)$ . Abaixo, temos o ETF para (c) os limiares epidêmicos e (d) densidades críticas.

## Capítulo 5

# Mecanismos de ativação de fases epidêmicas em redes complexas

Como visto na seção 3.6, resultados numéricos [59, 37, 41] indicam que a teoria QMF está qualitativamente correta para redes sem escala, implicando que o limiar epidêmico tende a zero no limite de tamanho infinito, em que o maior grau da rede  $k_{max}$  diverge, independente do expoente  $\gamma$  da distribuição de conectividade  $P(k)$ . Na referência [41], foi dada à origem deste limiar nulo uma interpretação física ao levar em consideração explicitamente a interação recíproca entre o tempo de vida  $\tau_k^{rec}$  da atividade em um *hub* de grau  $k$  e a escala de tempo  $\tau_{k,k'}^{inf}$ , com a qual um *hub* infectado de grau  $k$  transmite a infecção para outro *hub* de grau  $k'$ . O fato de que  $\tau_k^{rec}$  diverge com relação ao grau  $k$  mais rapidamente do que  $\tau_{k,k'}^{inf}$  para qualquer valor da taxa de infecção  $\lambda$  seria a explicação definitiva para o limiar epidêmico nulo do modelo SIS [33, 41, 60]. No entanto, outros processos dinâmicos e modelos de propagação epidêmica ocorrendo em redes complexas com distribuição em lei de potência, em particular o PC [8], que é definido por uma taxa de infecção inversamente proporcional ao grau do nó infectado como  $\lambda/k$ , apresentam um limiar finito que é melhor explicado em termos de uma teoria de campo médio heterogênea (HMF) [56, 11]. Esta observação motiva a busca por uma compreensão mais completa acerca do mecanismo que governa as transições de fase em modelos epidêmicos, especialmente em relação às condições sob as quais o limiar epidêmico se anula ou permanece constante.

Os resultados obtidos por Boguñá *et al* [41] são de grande importância no sentido de compreender o mecanismo responsável pelo comportamento do limiar epidêmico no limite  $N \rightarrow \infty$ , porém, são aplicados estritamente ao modelo SIS. Desenvolveremos aqui um formalismo geral adequado a modelos epidêmicos mais complexos e realistas, que apresentam transições de fase para um, ou mais, estados absorventes. Como será mostrado a seguir, isso será feito por meio da determinação das escalas de tempo para recuperação e infecção de *hubs*  $\tau^{rec}$  e  $\tau^{inf}$ , respectivamente, para modelos epidêmicos genéricos que incluem imunização temporária e taxas de infecção arbitrárias dependentes do padrão de conexões. Com base nos resultados obtidos, propomos uma forma quantitativa de classificar transições de fase para estados endêmicos em redes complexas. Como evidência, analisaremos o modelo suscetível-infectado-removido-suscetível (SIRS) [61], uma extensão do modelo SIS que incorpora uma imunização temporária dos vér-

tices. Para verificar a aplicabilidade geral da teoria, também a aplicamos para modelos sem imunização como o PC [8] e o modelo SIS generalizado, proposto por Karsai, Juhász e Iglói (KJI) [62], que atribui pesos à taxa de infecção de acordo com o grau de conectividade dos vértices.

## 5.1 A teoria

### 5.1.1 Um modelo epidêmico geral

Para desenvolver a nossa teoria, estudaremos um modelo de propagação epidêmica generalizado, ocorrendo em uma rede onde cada vértice pode encontrar-se em um de três estados possíveis: suscetível ou saudável ( $S$ ), infectado ( $I$ ) e imune ou recuperado ( $R$ ). Indivíduos infectados recuperam-se espontaneamente,  $I \rightarrow R$ , com taxa  $\beta$ . Indivíduos tornam-se novamente suscetíveis espontaneamente (já que a imunização adquirida é temporária),  $R \rightarrow S$ , com uma taxa  $\alpha$ . Vértices infectados de grau  $k$  transmitem a doença para cada um dos nós adjacentes suscetíveis com grau  $k'$  a uma taxa de infecção heterogênea  $\lambda_{k,k'}$ . As figuras 5.1(a) e 5.1(b) ilustram graficamente este modelo. A partir deste modelo generalizado, processos dinâmicos clássicos podem ser obtidos como casos assintóticos: o modelo SIS ( $\alpha \rightarrow \infty$ ,  $\lambda_{k,k'} = \lambda$ ); o PC [8] ( $\alpha \rightarrow \infty$ ,  $\lambda_{k,k'} = \lambda/k$ ); o modelo SIRS ( $\alpha$  finito,  $\lambda_{k,k'} = \lambda$ ); o modelo SIR [6] ( $\alpha \rightarrow 0$ ,  $\lambda_{k,k'} = \lambda$ ); o modelo KJI [62] ( $\alpha \rightarrow \infty$ ,  $\lambda_{k,k'} = \lambda/(kk')^\theta$ ) etc.

Para ser usada posteriormente, definimos a taxa média de infecção produzida,  $\lambda_k^{out}$  e recebida,  $\lambda_k^{in}$ , por um vértice de grau  $k$  como

$$\lambda_k^{out} = \sum_{k'} \lambda_{k,k'} P(k'|k), \quad \lambda_k^{in} = \sum_{k'} \lambda_{k',k} P(k'|k), \quad (5.1)$$

respectivamente, em que  $P(k'|k)$  é a probabilidade de que um vértice de grau  $k$  esteja conectado a um vértice de grau  $k'$  [63].

### 5.1.2 Tempo de vida de um *hub*

Inicialmente, voltaremos nosso foco para o tempo de vida para um *hub*  $\tau_k^{rec}$ , que é definido com o tempo médio que um *hub* de grau  $k$ , começando a partir de uma configuração com um único nó infectado, leva para atingir a configuração na qual este *hub* e seus primeiros vizinhos estão todos suscetíveis. A fim de estimar o valor dessa grandeza, aproximaremos a dinâmica de um *hub* de conectividade  $k$  como sendo a mesma de um grafo estrela, composto por um vértice central conectado a outros  $k$  vértices (“folhas”) de grau arbitrário (os vértices em vermelho na

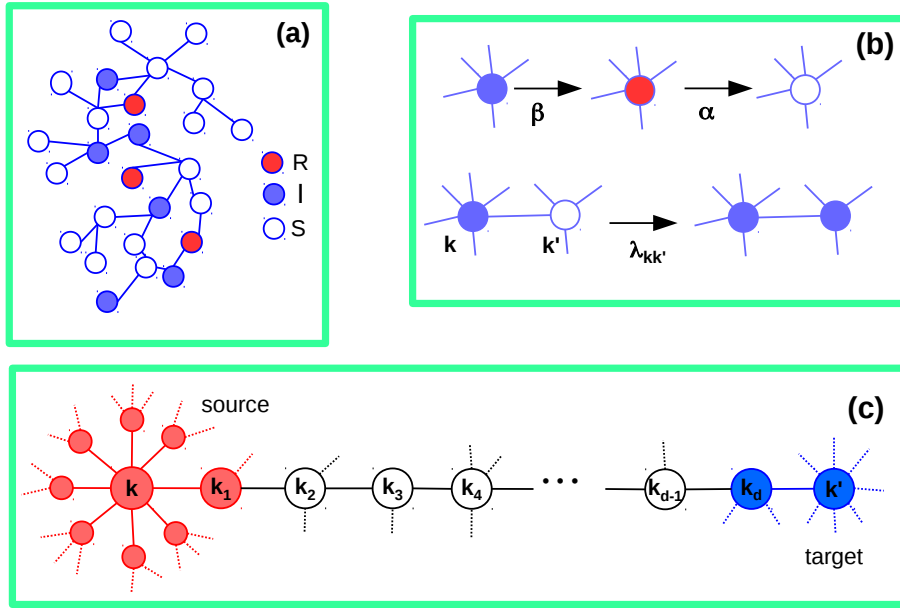


Figura 5.1: Modelo epidêmico genérico em redes complexas. (a) Exemplo de rede complexa com sítios recuperados (R), infectados (I) e suscetíveis (S). (b) Taxas de transição de estados para a estrela em cada etapa com suas respectivas taxas. (c) Uma estrela “fonte” de grau  $k$  transmite a infecção ao longo de uma cadeia de tamanho  $d$  até que a mesma atinja um nó “alvo” de grau  $k'$ . Figura retirada de [10].

figura 5.1(c), onde desprezamos a infecção que vem da parte externa desta estrela). Para que possamos tratar o problema analiticamente, consideraremos um processo epidêmico genérico simplificado com dois estados,  $S$  e  $I$ , nas folhas e três estados,  $S$ ,  $I$  e  $R$ , no nó central da estrela. A taxa de infecção ao longo de uma conexão que parte de uma folha e segue no sentido do vértice central será aproximada por  $\lambda_k^{in}$ , enquanto aquela partindo do centro e indo à folha, por  $\lambda_k^{out}$ , de acordo com a equação (5.1). Ou seja, levaremos em consideração o efeito das folhas como uma média sobre seus possíveis valores de conectividade  $k'$ , com respectivos pesos atribuídos pela probabilidade condicional  $P(k'|k)$ . As transições  $I \rightarrow S$  (folhas),  $I \rightarrow R$  e  $R \rightarrow S$  (centro) ocorrem com as taxas constantes  $\beta$ ,  $\beta$  e  $\alpha$ , respectivamente. O tempo de vida para esta dinâmica é maior do que o do modelo real, em que as folhas também poderiam assumir o estado  $R$ , de modo a fornecer uma cota superior para o verdadeiro valor de  $\tau_k^{rec}$ .

Assim, aproximamos esta dinâmica proposta na estrela em quatro passos:

(i) No instante inicial  $t = 0$  o centro encontra-se infectado e todas as folhas estão no estado suscetível.

(ii) No instante  $t_1 = 1/\beta$  o centro torna-se recuperado e  $n_1$  folhas estão infectadas com probabilidade

$$P_1(n_1|k) = \binom{k}{n_1} p_1^{n_1} (1 - p_1)^{k-n_1}, \quad (5.2)$$

em que  $p_1 = 1 - \exp(-\lambda_k^{out}/\beta)$  é a probabilidade<sup>1</sup> de que cada folha tenha sido infectada pelo centro no intervalo  $t < t_1$ .

<sup>1</sup>A probabilidade  $p_1$  apresenta esta forma funcional devido ao fato do processo de infecção ser um processo de Poisson.

(iii) No instante  $t = t_1 + t_2$ , em que  $t_2$  tem a distribuição  $\rho_2(t_2) = \alpha \exp(-\alpha t_2)$ , o centro torna-se suscetível e  $n_2$  folhas permanecem infectadas com probabilidade

$$P_2(n_2|n_1) = \binom{n_1}{n_2} p_2^{n_2} (1 - p_2)^{n_1 - n_2}, \quad (5.3)$$

em que  $p_2 = \exp(-\beta t_2)$  é a probabilidade de que cada folha onde haja atividade permaneça infectada durante um intervalo de tempo  $t_2$ .

(iv) No instante  $t = t_1 + t_2 + t_3$ , em que  $t_3 = 1/\beta$ , todas as  $n_2$  folhas infectadas no instante  $t_2$  tornam-se suscetíveis de maneira sincronizada e o centro é reinfestado com probabilidade

$$P_3(n_2) = 1 - (1 - p_3)^{n_2}, \quad (5.4)$$

em que  $p_3 = 1 - \exp(-\lambda_k^{\text{in}}/\beta)$  é a probabilidade de que cada folha envie a infecção até o centro durante um intervalo de tempo  $t_3$ .

Os passos (ii) e (iv) são, em essência, uma aproximação para a dinâmica do modelo SIS em grafos estrela [41], na qual o caráter estocástico do tempo de infecção e múltiplas infecções das folhas são desprezados, enquanto o passo (iii) não envolve qualquer aproximação. Tratar o terceiro passo como estocástico é fundamental, já que eventos raros nos quais apenas algumas poucas folhas infectadas sobrevivem não podem ser negligenciados. A probabilidade de que a estrela retorne ao seu estado inicial em um passo com tempos entre eventos  $t_1$ ,  $t_2$  e  $t_3$  é dada por

$$q_k(t_2) = \sum_{n_1=1}^k P_1(n_1|k) \sum_{n_2=1}^{n_1} P_2(n_2|n_1) P_3(n_2). \quad (5.5)$$

Tomando a média de  $q_k(t_2)$  sobre  $\rho_2(t_2)$ , obtemos

$$Q_k = 1 - \alpha \int_0^\infty e^{-\alpha t_2} [1 - e^{-\beta t_2} A]^k dt_2, \quad (5.6)$$

em que

$$A = (1 - e^{-\lambda_k^{\text{out}}/\beta})(1 - e^{-\lambda_k^{\text{in}}/\beta}). \quad (5.7)$$

A probabilidade de que esta dinâmica sobreviva por um número  $s$  de passos com duração média  $\tau_0 = t_1 + \langle t_2 \rangle + t_3 = 2/\beta + 1/\alpha$  é

$$P(s) = Q_k^{s-1} (1 - Q_k) \quad (5.8)$$

e o número médio de passos para a sobrevivência é

$$\langle s \rangle = \sum_{s=1}^{\infty} s P(s) = 1/(1 - Q_k). \quad (5.9)$$

Assim, obtemos o resultado final

$$\tau_k^{\text{rec}} \equiv \tau_0 \langle s \rangle = \frac{\tau_0}{1 - Q_k}. \quad (5.10)$$

Levando em consideração a ausência de imunidade temporária e inserindo na equação (5.6) o limite  $\lim_{\alpha \rightarrow \infty} \alpha e^{-\alpha t} = \delta(t)$ , em que  $\delta(t)$  é a função delta de Dirac, e assumindo  $\lambda_k^{\text{in}}/\beta, \lambda_k^{\text{out}}/\beta \ll 1$ , obtemos

$$\tau_k^{\text{rec}} \sim \exp(k \lambda_k^{\text{in}} \lambda_k^{\text{out}} / \beta^2). \quad (5.11)$$

Para o caso em que  $\alpha$  é finito, a equação (5.6) torna-se, após a mudança de variável  $u = Ae^{-\beta t}$ ,

$$Q_k = 1 - \frac{\alpha}{\beta A^{\alpha/\beta}} \int_0^A u^{a-1} (1-u)^k du. \quad (5.12)$$

Pode-se estimar o comportamento de  $Q_k$  no limite de grandes valores para  $k$  utilizando

$$(1-u)^k = \exp[k \ln(1-u)] \simeq e^{-uk}, \quad (5.13)$$

que é válida para  $A < 1$  e

$$\int_0^A u^{a-1} e^{-uk} du \simeq \int_0^\infty u^{a-1} e^{-uk} du = k^{-a} \Gamma(a), \quad (5.14)$$

em que  $\Gamma(z)$  é a função gama [64], para a qual a extensão do limite superior da integral tendendo a infinito é válida para valores grandes de  $kA$ . Assim, pela equação (5.12), obtemos

$$Q_k \simeq 1 - \frac{\alpha}{\beta A^{\alpha/\beta}} \Gamma\left(\frac{\alpha}{\beta}\right) k^{-\alpha/\beta}. \quad (5.15)$$

Deste resultado, e pela equação (5.11), segue que, no limite de valores altos para  $k$ ,

$$\tau_k^{\text{rec}} \sim k^{\alpha/\beta} \left[ (1 - e^{-\lambda_k^{\text{out}}/\beta})(1 - e^{-\lambda_k^{\text{in}}/\beta}) \right]^{\alpha/\beta}. \quad (5.16)$$

### 5.1.3 Tempo para mútua infecção dos *hubs*

Para estimar o tempo de infecção  $\tau_{k,k'}^{\text{inf}}$ , consideraremos duas estrelas, de grau  $k$  (a “fonte” de infecção, localizada na coordenada  $i = 0$ ) e  $k'$  (o “alvo”, localizado na coordenada  $i = 1, 2, \dots, d$ ), conectadas por um caminho composto por  $d$  vértices com grau arbitrário, como ilustrado na figura 5.1(c). As seguintes hipóteses serão utilizadas na derivação para o caso  $\tau_k^{\text{rec}} \gg 1/\lambda_k^{\text{out}}$ .

(i) O vértice com grau  $k$  à esquerda (coordenada  $i = 0$ ) nunca é recuperado (ou seja, fica permanentemente ativo) e transmite a infecção para o seu primeiro vizinho à direita, em  $i = 1$ , a uma taxa média  $\lambda_k^{\text{out}}$  e, em média, um novo surto epidêmico começa em  $i = 1$  a cada  $1/\lambda_k^{\text{out}}$

unidades de tempo.

(ii) Assumiremos aqui que, simultaneamente,  $\lambda_{kk'}/\beta \ll 1$  e  $\lambda_{kk'}/\alpha \ll 1$  e consideraremos apenas as rotas epidêmicas nas quais um vértice infectado sempre transmite a infecção para seu vizinho à direita antes de tornar-se recuperado ou suscetível [41]. Além do mais, tomaremos que a taxa média de transmissão para todas as conexões dentro da cadeia ( $i = 1, \dots, d-1$ )  $\bar{\lambda} = \sum_{k'} \lambda_k^{\text{out}} P(k)$ , que leva a uma probabilidade média de transmissão por ligação dada por  $\bar{q} = \bar{\lambda}/(\bar{\lambda} + \beta)$ .

(iii) A taxa com a qual um vértice infectado localizado na coordenada  $i = d$  transmite a infecção para o *hub* de grau  $k'$  mais à direita em  $i = d+1$  é aproximada por  $\lambda_k^{\text{in}}$ . A probabilidade média de transmitir a infecção para  $i = d+1$  antes da recuperação em  $i = d$  é, portanto,  $\bar{q}_{k'} = \lambda_k^{\text{in}}/(\lambda_k^{\text{in}} + \beta)$ .

(iv) A probabilidade de que uma infecção que iniciou-se em  $i = 1$  atinja o *hub* mais à direita, em  $i = d+1$ , de acordo com o que estamos assumindo, é dada por  $\bar{q}^{d-2} \bar{q}_{k'}$ . Consequentemente, a taxa de transmissão vale  $\lambda_k^{\text{out}} \bar{q}^{d-2} \bar{q}_{k'}$ .

Para redes com  $N$  vértices que apresentam a propriedade de mundo pequeno, a distância média entre vértices de grau  $k$  e  $k'$  é [65]

$$d = 1 + \frac{\ln(N\langle k \rangle/kk')}{\ln \kappa}, \quad (5.17)$$

em que  $\kappa = \langle k^2 \rangle / \langle k \rangle - 1$ , resultando em uma cota superior para o tempo de infecção (igual ao inverso da taxa), dada por

$$\tau_{k,k'}^{\text{inf}} \lesssim \tau_{kk'} = \frac{\bar{q}_{k'}}{\lambda_k^{\text{out}} \bar{q}} \left( \frac{N\langle k \rangle}{kk'} \right)^{b(\bar{\lambda})}, \quad (5.18)$$

em que  $b(\bar{\lambda}) = \ln(1 + \beta/\bar{\lambda})/\ln \kappa$ .

Para o caso em que  $\tau_k^{\text{rec}} < 1/\lambda_k^{\text{out}}$ , a estrela mais à esquerda recupera-se antes que possa produzir o primeiro surto epidêmico em  $i = 1$ , de modo que o tempo de infecção torna-se infinito.

## 5.2 Análise de modelos epidêmicos em redes sem escala

Nesta seção, apresentaremos a análise de diferentes modelos epidêmicos em redes sem escala caracterizadas por uma distribuição de conexões  $P(k) \sim k^{-\gamma}$  que, em uma rede de tamanho finito  $N$  apresenta grau máximo dado por [54]

$$k_{\text{max}}(N) \sim \begin{cases} N^{1/2} & \text{for } \gamma < 3 \\ N^{1/(\gamma-1)} & \text{for } \gamma > 3 \end{cases}. \quad (5.19)$$

Nestas redes, temos

$$\kappa \sim \begin{cases} k_{\max}^{3-\gamma} \simeq N^{(3-\gamma)/2} & \text{for } \gamma < 3 \\ \text{const.} & \text{for } \gamma > 3 \end{cases} \quad (5.20)$$

Em particular usaremos aqui redes geradas pelo algoritmo UCM [15].

### 5.2.1 O modelo SIS

O modelo SIS é definido por  $\alpha = \infty$  e  $\lambda_{k,k'} = \lambda$ , independente de  $k$  e  $k'$ , fornecendo  $\lambda_k^{in} = \lambda_k^{out} = \lambda$ . Esses valores implicam, pela equação (5.11), em  $\tau_k^{\text{rec,SIS}} \sim \exp(\lambda^2 k / \beta)$ . Por outro lado, pela equação (5.18) e usando a equação (5.20), obtemos um valor constante para  $\tau_k^{\text{inf,SIS}}$  quando  $\gamma < 3$  ( $b \rightarrow \infty$ ), enquanto, para  $\gamma > 3$  ( $b \rightarrow \text{constante}$ ) nota-se um crescimento algébrico que, para os maiores *hubs* com grau  $k_{\max}$  dados pela equação (5.19), assume a forma  $\tau_k^{\text{inf,SIS}} \sim N^{\frac{\gamma-3}{\gamma-1}b(\lambda)}$ . Ambas as expressões foram confirmadas por meio de simulações deste modelo realizadas por Boguñá *et al* [41]. Portanto, temos que, para o modelo SIS,  $\tau_k^{\text{rec,SIS}}$ , isto é, os *hubs* sobrevivem por tempos muito mais longos do que seria necessário para que eles reinfectassem uns aos outros. Assim, existe um cenário plausível no qual a transição para um estado endêmico localizado é governada por uma dinâmica de ativação de *hubs*. Essa possibilidade é reforçada por uma análise da dinâmica do modelo SIS quando leva-se em conta, a um nível de campo médio, a dinâmica de recuperação de *hubs* e a mútua reinfeção, levando a um limiar epidêmico tendendo a zero que segue uma lei de escala com o tamanho da rede, em concordância qualitativa com as previsões da teoria QMF [41].

### 5.2.2 O processo de contato

No caso do PC [8] temos  $\alpha = \infty$  e  $\lambda_{k,k'} = \lambda/k$ , implicando em  $\lambda_k^{in} = \lambda/\langle k \rangle$  e  $\lambda_k^{out} = \lambda/k$ . Pela equação (5.11),  $\tau_k^{\text{rec,PC}} \sim \text{constante}$ . Por outro lado, pela equação (5.18) e usando a equação (5.20), obtemos que  $\tau_k^{\text{inf,PC}}$  diverge algebricamente. Assim, para qualquer valor de  $\gamma$ ,  $\tau_k^{\text{rec,PC}} \ll \tau_k^{\text{inf,PC}}$ . Este resultado indica que é impossível termos um cenário no qual a transição é ditada pela sucessiva ativação e reativação de *hubs*. Além do mais, a transição epidêmica associada deve ser guiada por um fenômeno coletivo, que envolve necessariamente a ativação da rede como um todo. Esta transição coletiva é consistente com o limiar finito observado numericamente no PC em redes sem escala [27, 11], em concordância com as predições da teoria HMF [8, 11]. É interessante observar que, no caso do PC, a previsão da teoria QMF [66] coincide com a da teoria HMF [8] ( $\lambda_c = 1$ ), indicando um limiar epidêmico completamente independente da estrutura da rede. Esta predição teórica não é completamente observada em simulações numéricas, as quais mostram um limiar constante que é modulado pela heterogeneidade da rede

[8, 27, 11].

### 5.2.3 O modelo KJI

O modelo KJI é definido por  $\alpha \rightarrow \infty$  e uma taxa de infecção heterogênea que decresce em função do grau tanto do nó infectado que transmite a doença, quanto do nó suscetível ligado a ele. Mostraremos a seguir uma aproximação de campo médio em redes complexas.

Na definição do modelo KJI [62], a infecção é transmitida por meio de uma ligação que parte de um vértice  $j$  para um vértice  $i$  à uma taxa variável

$$\lambda_{ij} = \frac{\lambda A_{ij}}{(k_i k_j)^\theta}, \quad (5.21)$$

em que  $\theta$  é um parâmetro de controle sob a restrição<sup>2</sup>  $0 \leq \theta \leq 1$ . A teoria HMF para o modelo KJI é descrita em termos da probabilidade de que um nó de grau  $k$  encontre-se infectado com probabilidade  $I_k$  e suscetível com a probabilidade complementar  $1 - I_k$ . A variação temporal da probabilidade  $I_k$  é escrita como [62, 6, 7]

$$\frac{dI_k}{dt} = -I_k + k(1 - I_k) \sum_{k'} \frac{\lambda}{(kk')^\theta} I_{k'} P(k'|k), \quad (5.22)$$

em que  $P(k'|k)$  é a probabilidade usual de que uma ligação partindo de um nó de grau  $k$  aponte para um nó de grau  $k'$ . O limiar epidêmico é obtido linearizando-se a equação (5.22) em torno do ponto fixo  $I_k = 0$ , o que fornece, para uma rede descorrelacionada gerada pelo algoritmo UCM,

$$\frac{dI_k}{dt} = \sum_{k'} L_{kk'} I_{k'}, \quad (5.23)$$

com um Jacobiano

$$L_{kk'} = -\delta_{kk'} + \frac{\lambda(kk')^{1-\theta} P(k)}{\langle k \rangle}. \quad (5.24)$$

O estado absorvente  $I_k = 0$  perde estabilidade quando o maior autovalor de  $L_{kk'}$  é nulo. Desse modo obtém-se, para o estado ativo, um limiar na forma

$$\lambda_c^{\text{HMF,KJI}} = \frac{\langle k \rangle}{\langle k^2(1-\theta) \rangle}. \quad (5.25)$$

Como podemos concluir a partir desta equação,  $\theta = 0$  fornece o limiar epidêmico do modelo SIS dependendo indiretamente do valor de  $\gamma$ , enquanto  $\theta = 1/2$  leva ao limiar epidêmico do processo de contato, independente da estrutura da rede. Para valores gerais de  $\theta$ , um limiar finito de campo médio heterogêneo é esperado para  $\gamma > 3 - 2\theta$  e um limiar nulo é esperado

<sup>2</sup>Um fator constante encontrado na definição original [62] foi incorporado ao valor de  $\lambda$ .

para  $\gamma < 3 - 2\theta$ .

Do ponto de vista da teoria QMF, que baseia-se na probabilidade microscópica  $I_i$  de que o nó  $i$  esteja infectado, a equação de taxa associada pode ser escrita como [14]:

$$\frac{dI_i}{dt} = -I_i + \lambda(1 - I_i) \sum_j I_j \frac{A_{ij}}{(k_i k_j)^\theta}, \quad (5.26)$$

em que  $A_{ij}$  é a matriz de adjacência da rede. Após o procedimento de linearização, uma análise de estabilidade fornece um limiar que é inversamente proporcional ao maior autovalor  $\Lambda_m^D$  da matriz

$$D_{ij} = \frac{A_{ij}}{(k_i k_j)^\theta}, \quad (5.27)$$

na forma

$$\lambda_c^{\text{QMF,KJI}} = \frac{1}{\Lambda_m^D}. \quad (5.28)$$

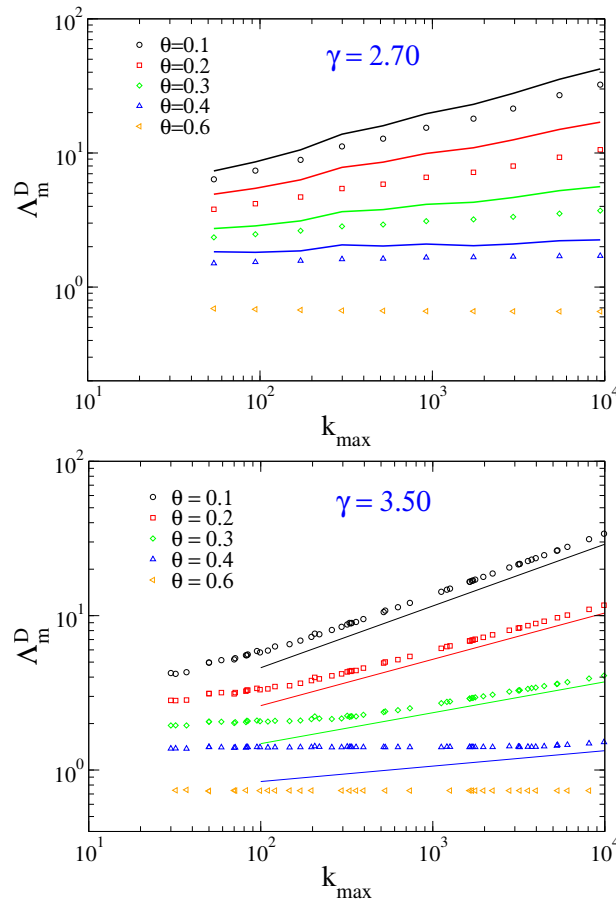


Figura 5.2: Gráficos do maior autovalor  $\Lambda_m^D$  da matriz  $D_{ij}$  como funções do maior grau da rede  $k_{\max}$  para redes geradas pelo algoritmo UCM com expoentes  $\gamma = 2, 7$  (acima) e  $\gamma = 3, 5$  (abaixo), usando um grau mínimo  $k_0 = 3$  e um *cutoff* estrutural  $k_c \sim N^{1/2}$ . Estes resultados foram obtidos para cinco redes independentes para  $\gamma = 3, 5$  e uma rede para  $\gamma = 2, 7$ , com tamanhos  $N = 10^3, 3 \times 10^3, 10^4, 3 \times 10^4, 10^5, 3 \times 10^5, 10^6, 3 \times 10^6, 10^7, 3 \times 10^7$  e  $10^8$ . Na figura (b) as linhas contínuas representam leis de potência  $k_{\max}^{\frac{1}{2}-\theta}$ , enquanto na figura (a) as linhas contínuas são proporcionais a  $\Lambda_m/k_{\max}^\theta$ .

Infelizmente, não dispomos de uma expressão analítica geral para o maior autovalor desta matriz de adjacência. Portanto, a determinação desta grandeza foi realizada numericamente para redes sem escala geradas pelo algoritmo UCM, como mostrado na figura 5.2. Obtivemos que

$$\Lambda_m^D \sim \frac{\Lambda_m}{k_{max}^\theta} \quad (5.29)$$

para  $\theta < 1/2$ , em que  $\Lambda_m$  é o maior autovalor da matriz  $A_{ij}$ , e um valor constante para  $\theta > 1/2$ . Para  $\gamma > 3$ , já que  $\Lambda_m \sim \sqrt{k_{max}}$  [38], temos

$$\Lambda_m^D \sim k_{max}^{\frac{1}{2}-\theta} \quad (5.30)$$

para  $\theta < 1/2$  e

$$\Lambda_m^D \sim \text{constante} \quad (5.31)$$

para  $\theta \geq 1/2$ . O comportamento do maior autovalor neste caso é marcado por fortes efeitos de tamanho finito próximo a  $\theta = 1/2$ . Estes efeitos de tamanho podem ser observados no cruzamento de uma região plana à de um regime de escala  $k_{max}^{\frac{1}{2}-\theta}$  para  $\theta < 1/2$ , com tal cruzamento ocorrendo para valores maiores de  $k_{max}$  quando  $\theta$  aproxima-se de  $1/2$ . Estas observações indicam que, para  $\theta < 1/2$ , um limiar nulo é obtido no limite termodinâmico, independente do expoente  $\gamma$ . Para  $\theta > 1/2$ , deve ocorrer um limiar epidêmico finito.

Aplicando a equação (5.1) ao modelo KJI, obtemos

$$\lambda_k^{\text{in}} = \lambda_k^{\text{out}} = \frac{\lambda \langle k^{1-\theta} \rangle}{\langle k \rangle k^\theta}, \quad (5.32)$$

que, à luz da equação (5.11), leva a um tempo de recuperação dos *hubs*

$$\tau_k^{\text{rec,KJI}} \sim \exp(\text{constante} \cdot k^{1-2\theta}), \quad (5.33)$$

que é finito para  $\theta > 1/2$  e diverge como uma exponencial esticada para  $\theta < 1/2$ . Estes resultados são reforçados por simulações do modelo em grafos estrela, como mostra a figura 5.3.

O tempo para infecção mútua entre *hubs* para  $\theta < 1/2$  escala de maneira similar à dinâmica conhecida para o modelo SIS (seção 5.2.1), de modo que

$$\tau^{\text{inf,KJI}} \sim N^{\frac{\gamma-3}{\gamma-1} b(\bar{\lambda})}, \quad (5.34)$$

para  $\gamma > 3$  e

$$\tau^{\text{inf,KJI}} \sim \text{constante} \quad (5.35)$$

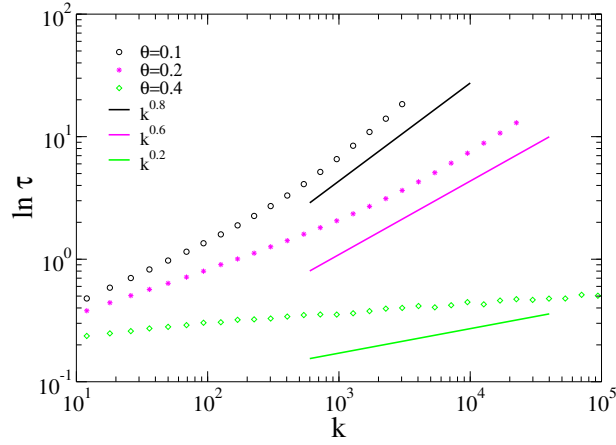


Figura 5.3: Tempo de vida para o modelo KJI em grafos estrela com  $\lambda \langle k^{1-\theta} \rangle / \langle k \rangle = 0.2$ , confirmando o comportamento assintótico como uma função exponencial esticada, conforme esperado para  $\theta < 1/2$ .

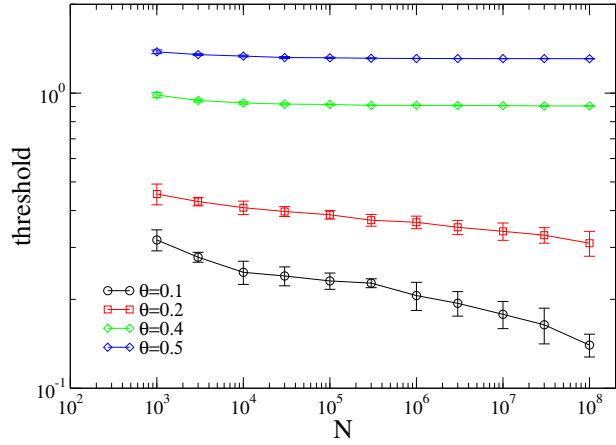


Figura 5.4: Limiares de ativação epidêmica para o modelo KJI com diferentes valores para  $\theta$  e  $\gamma = 3, 5$ .

para  $\gamma < 3$ , de modo que a única diferença encontra-se no fator

$$\bar{\lambda} = \frac{\lambda \langle k^{-\theta} \rangle \langle k^{1-\theta} \rangle}{\langle k \rangle} \quad (5.36)$$

Para  $\theta \geq 1/2$ , temos  $\tau^{\text{inf}, \text{KJI}}$  divergindo como no caso do processo de contato. Assim, no caso  $\gamma > 3$ , para os quais as previsões das teorias HMF e QMF são diferentes, com  $\theta < 1/2$  obtemos que, para esta faixa de valores de  $\theta$ , a transição é ditada por um mecanismo de ativação de *hubs*, já que, nesta região  $\tau^{\text{rec}} \gg \tau^{\text{inf}}$ , correspondendo a um limiar que tende a zero, o que concorda qualitativamente com a teoria QMF, que prevê um limiar epidêmico que escala com o maior grau da rede como  $\lambda_c^{\text{QMF}, \text{KJI}} \sim k_{\text{max}}^{\theta-1/2}$ . Já para  $\theta > 1/2$ , por outro lado, o tempo de vida dos *hubs* é finito; isto é compatível com uma transição devido a uma ativação coletiva dos vértices da rede, em concordância tanto com a teoria HMF quanto com a teoria QMF. Estas previsões são verificadas na figura 5.4 através de simulações do modelo KJI em redes sem escala, usando o método quase-estacionário padrão (SQS) [27, 43], com o qual estimamos o limiar epidêmico

efetivo para cada tamanho de rede como a posição do pico principal<sup>3</sup> da suscetibilidade  $\chi$  (como definida anteriormente). Para valores de  $\theta$  próximos a  $1/2$ , entretanto, longos *crossovers* foram encontrados para o limiar, comportamento análogo ao observado para o tempo de vida em grafos estrela. De fato, após um cruzamento que pode ser bastante longo na medida em que  $\theta$  aproxima-se de  $1/2$ , o tempo de vida da epidemia no modelo KJI em estrelas cada vez maiores atinge o regime assintótico de uma função exponencial esticada (veja na figura 5.3). Estes *crossovers*, que também são observados na estimativa numérica do limiar epidêmico, explicam o limiar epidêmico aparentemente constante que é observado na figura 5.4 para  $\theta = 0, 4$ . Situações equivalentes podem ser delineadas para  $\gamma < 3$  quando tomamos valores críticos na faixa  $\theta < 1/2$ .

## 5.2.4 O modelo SIRS

O modelo SIRS é uma extensão do modelo SIS, com a mesma taxa de infecção  $\lambda_{k,k'} = \lambda$  constante, porém com uma taxa finita de imunização temporária para levar em consideração processos epidêmicos mais realistas. Na teoria de campo médio heterogênea, as densidades de sítios com grau  $k$  que estão infectados, recuperados e suscetíveis são representadas por  $I_k$ ,  $R_k$  e  $S_k$ , respectivamente, e obedecem à condição de normalização  $I_k + R_k + S_k = 1$ . As equações dinâmicas, fixando  $\beta = 1$ , são dadas por [67, 7, 6]

$$\frac{dI_k}{dt} = -I_k + \lambda k S_k \sum_{k'} I_{k'} P(k'|k), \quad (5.37)$$

e

$$\frac{dR_k}{dt} = -\alpha R_k + I_k. \quad (5.38)$$

Para determinar o limiar no qual um estado ativo torna-se estável, realizamos uma análise de estabilidade linear em torno do ponto fixo  $I_k = R_k = 0$ , que corresponde ao estado absorvente. Já que estamos interessados no regime de tempos longos, aplicamos uma aproximação quase-estática [68]  $\frac{dR_k}{dt} \approx 0$  para obter

$$I_k = \alpha R_k. \quad (5.39)$$

Inserindo este resultando na equação (5.37) obtemos uma equação linearizada com o Jacobiano

$$L_{kk'} = -\delta_{kk'} + \lambda k P(k'|k). \quad (5.40)$$

O estado absorvente perde estabilidade quando o maior autovalor de  $K_{k,k'}$  é nulo. Assim, para redes descorrelacionadas, como as que trabalhamos aqui, obtém-se que o estado infectado é

---

<sup>3</sup>Nos referimos aqui ao pico que ocorre no ponto onde o tempo de vida passa a divergir.

estável para [67]

$$\lambda > \lambda_c^{\text{HMF}} = \frac{\langle k \rangle}{\langle k^2 \rangle}. \quad (5.41)$$

No paradigma da teoria QMF, o processo é definido em termos das probabilidades de que um vértice  $i$  esteja infectado,  $I_i$ , recuperado,  $R_i$  ou suscetível,  $S_i$ , de modo a satisfazer as equações dinâmicas

$$\frac{dI_i}{dt} = -I_i + \lambda S_i \sum_j I_j A_{ij}, \quad (5.42)$$

e

$$\frac{dR_i}{dt} = -\alpha R_i + I_i, \quad (5.43)$$

em que  $A_{ij}$  é a matriz de adjacência e  $I_i + R_i + S_i = 1$  é a condição de normalização. Aplicando a aproximação quase-estática às equações 5.42 e 5.43, obtemos a equação linearizada

$$\frac{dI_i}{dt} = \sum_j L_{ij} I_j, \quad (5.44)$$

com o Jacobiano

$$L_{ij} = -\delta_{ij} + \lambda A_{ij}, \quad (5.45)$$

o que implica em um limiar epidêmico dado por [39]

$$\lambda_c^{\text{QMF}} = \frac{1}{\Lambda_m}, \quad (5.46)$$

em que  $\Lambda_m$  é o maior autovalor da matriz de adjacência. Note que ambas as teorias padrão de campo médio expostas aqui conduzem ao mesmo resultado obtido para o modelo SIS. Assim, novamente temos duas previsões teóricas contraditórias para o modelo SIRS em redes sem escala para  $\gamma > 3$ . No modelo SIRS, pela equação (5.16) e dado que  $\lambda_k^{\text{in}} = \lambda_k^{\text{out}} = \lambda$ , obtemos

$$\tau_k^{\text{rec,SIRS}} \sim k^{\alpha/\beta}, \quad (5.47)$$

representando um crescimento algébrico do tempo de recuperação dos *hubs* como função do grau  $k$ , modulado pelos expoentes  $\alpha$  e  $\beta$ . Esta previsão analítica é confirmada em simulações numéricas do modelo SIRS usando o método QE, como mostrado na figura 5.5(a). As simulações do modelo SIRS, pelo método QE, foram realizadas adaptando o procedimento descrito no capítulo anterior fixando  $\beta = 1$ : a cada passo de tempo são computados o número de nós infectados  $N_i$ , o número de ligações partindo destes nós  $N_k$  e o número de nós recuperados  $N_r$ , enquanto o tempo é incrementado em passos de valor  $dt = 1/(N_i + \lambda N_k + \alpha N_r)$ . Seleciona-se um nó infectado ao acaso com probabilidade  $N_i/(N_i + \lambda N_k + \alpha N_r)$  para torná-lo recuperado. Com probabilidade  $\alpha N_r/(N_i + \lambda N_k + \alpha N_r)$ , um sítio recuperado é selecionado e o mesmo torna-se suscetível, enquanto com probabilidade  $\lambda N_k/(N_i + \lambda N_k + \alpha N_r)$  é realizada uma tentativa de infecção em dois passos: (i) Um vértice infectado  $j$  é selecionado probabili-

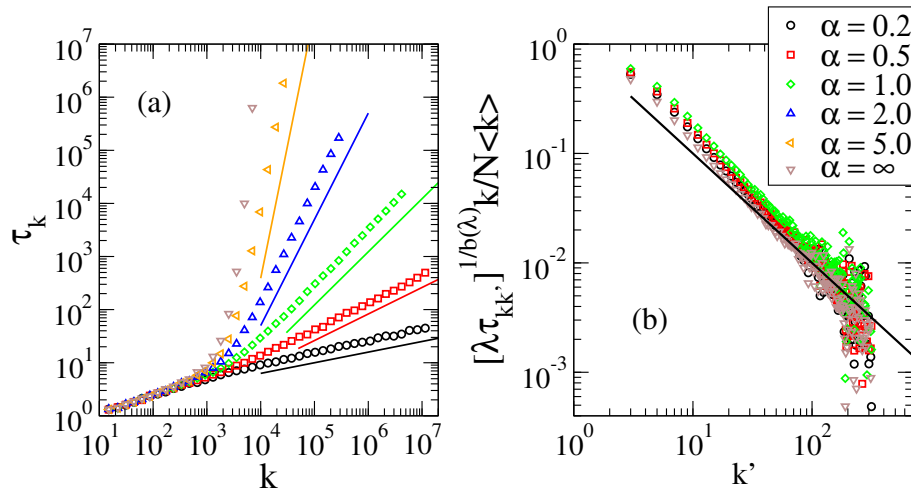


Figura 5.5: (a) Tempo de vida para o modelo SIRS em grafos estrela com  $k$  folhas para  $\lambda = 0,05$ ,  $\beta = 1$  e diferentes valores de  $\alpha$ . As linhas contínuas representam leis de potência teóricas  $\tau_k = k^{\alpha/\beta}$ . (b) Tempos de infecção para vértices de grau  $k'$  em uma rede com  $N = 10^5$  vértices na qual a epidemia começa em um vértice de grau  $k = 50$  que está permanentemente infectado. A linha contínua representa o valor teórico previsto pela equação (5.18).

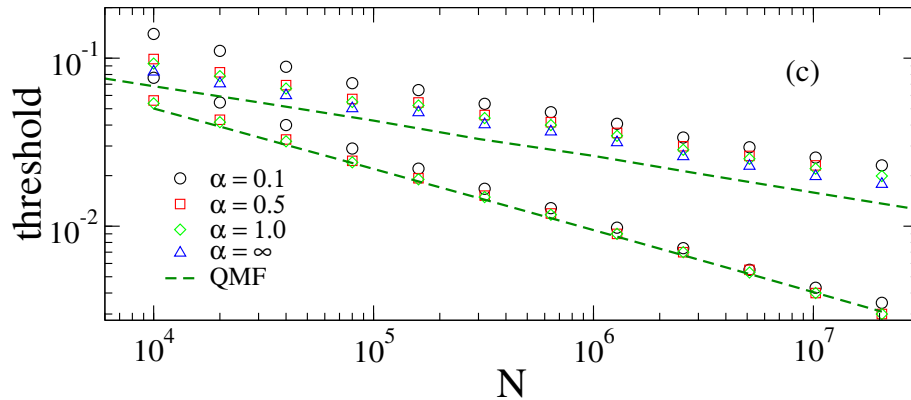


Figura 5.6: Limiares epidêmicos como funções do tamanho da rede para diferentes tempos de imunização  $1/\alpha$  em redessem escala com expoente  $\gamma = 2,2$  (curvas inferiores) e  $\gamma = 2,7$  (curvas superiores). As linhas tracejadas representam as previsões da teoria QMF  $\lambda_c = 1/\Lambda_m$  para os limiares epidêmicos.

dade proporcional ao seu grau de conexões e (ii) um dos primeiros vizinhos de  $j$  é selecionado com probabilidade uniforme e, se estiver suscetível, torna-se infectado<sup>4</sup>. A cada passo, atualiza-se o número de nós infectados e recuperados, o número de ligações partindo dos nós infectados de acordo com as mudanças que ocorreram nestas grandezas e o processo todo é repetido no passo de tempo seguinte. Nas simulações, armazenamos um número de configurações  $M = 70$ , com  $p_r = 10^{-2}$  (a cada passo uma configuração da lista é substituída pela configuração atual com probabilidade  $p_r \Delta t$ ). Após um tempo de relaxação  $t_r$ , computamos as médias sobre um tempo  $t_{av}$ . Tipicamente, em simulações de processos dinâmicos realizadas pelo método QE, um estado quase-estacionário é atingido para tempos  $t \gtrsim 10^4$ . Desse modo, adotamos  $t_r = 10^5$  para todas as simulações. Por outro lado, as médias das grandezas de interesse foram tomadas sobre

<sup>4</sup>Se o vizinho selecionado estiver infectado ou recuperado nada acontece e a simulação avança em um passo de tempo.

tempos variando de  $10^6$  (taxas de infecção mais altas) a  $10^8$  (taxas de infecção mais baixas).

A concordância que foi observada é esperada para valores baixos de  $\lambda$ , já que poucas folhas encontram-se infectadas em cada passo, de modo que o fato de desprezar as folhas recuperadas ao fim de cada passo torna-se uma boa aproximação. A aplicação da equação (5.18) fornece o mesmo resultado já obtido anteriormente para o modelo SIS, isto é, um tempo de infecção finito para  $\gamma < 3$  e um crescimento algébrico para  $\gamma > 3$ . Este resultado, que é independente da taxa  $\alpha$ , é numericamente confirmado como mostra a figura 5.5(b). Com relação a isso, vale observar que a hipótese fundamental utilizada em nossa análise (ver seção 5.1.2), que considera apenas as rotas epidêmicas nas quais os sítios infectados sempre transmitem a infecção para o seu vizinho à direita antes de tornarem-se recuperados ou suscetíveis [41], é mais precisa para períodos longos de imunização ( $\alpha$  pequeno), já que múltiplas infecções de um vértice ocorrem raramente neste caminho. Isso implica que a equação para  $\tau_{k,k'}^{\text{inf}}$  para o modelo SIRS é uma estimativa tão boa, ou melhor, que para o modelo SIS.

Pela combinação dos resultados anteriores percebe-se que, para  $\gamma < 3$ , o tempo de recuperação dos *hubs* é sempre maior que o tempo de infecção dos *hubs*. A mesma situação é observada no modelo SIS, com a diferença de que o crescimento de  $\tau_k^{\text{rec}}$  é mais rápido (exponencial) para o caso do SIS. O que espera-se para esta faixa de valores do expoente  $\gamma$  é, portanto, uma transição tipo SIS, com o mecanismo de reinfecção dos *hubs* em funcionamento e um limiar epidêmico que tende a zero, em concordância com a teoria QMF. Para checar esta previsão, realizamos simulações numéricas do modelo SIRS em redes sem escala usando o método QE. Na figura 5.6(c) mostramos que, para  $\gamma < 3$ , mesmo um pequeno valor para a razão  $\alpha/\beta$  resulta em um escalonamento do limiar epidêmico (como função do tamanho da rede) em ótima concordância com a previsão da teoria QMF.

Para  $\gamma > 3$ , por outro lado, a situação torna-se mais complexa e o comportamento do limiar epidêmico para tamanhos finitos depende do valor de  $\alpha$ . Pela divergência do grau máximo na equação (5.19), obtemos

$$\tau^{\text{inf,SIRS}} \sim N^{\frac{\gamma-3}{\gamma-1}b(\lambda)} \quad (5.48)$$

e

$$\tau^{\text{rec,SIRS}} \sim N^{\frac{\alpha/\beta}{\gamma-1}}, \quad (5.49)$$

ou seja, crescimentos algébricos como funções do tamanho da rede em ambos os casos. Um regime tipo SIS, em que o mecanismo de reinfecção dos *hubs* é responsável pela epidemia marcada por um limiar que decresce com  $N$ , é esperado sempre que

$$1/\beta \ll \tau^{\text{inf,SIRS}} \ll \tau^{\text{rec,SIRS}}, \quad (5.50)$$

que corresponde a

$$b(\lambda) < \frac{\alpha}{\beta(\gamma-3)} \ln \kappa \quad (5.51)$$

ou, equivalentemente,

$$\lambda > \beta\vartheta(\alpha, \gamma) \equiv \beta / [\kappa^{\alpha/[\beta(\gamma-1)]} - 1]. \quad (5.52)$$

Esta igualdade é violada, a não ser que  $\alpha$  seja suficientemente pequeno e/ou  $\gamma$  seja suficientemente grande, de modo que o tempo de vida dos *hubs* é menor do que o tempo de infecção dos mesmos. Isso indica que um cenário de ativação dos *hubs* não é viável e, analogamente ao processo de contato, o comportamento aponta no sentido de um limiar finito. Entretanto, para valores pequenos de  $\vartheta(\alpha, \gamma)$ , podemos observar uma faixa de valores de  $\lambda$  para os quais há predominância do mecanismo de ativação de *hubs*, conduzindo a um limiar epidêmico efetivo que decresce com o tamanho da rede  $N$ . Uma condição suficiente para que este comportamento efetivo tipo SIS seja observado é dada por

$$\beta\vartheta(\alpha, \gamma) < \lambda_c^{\text{SIS}}(N), \quad (5.53)$$

em que  $\lambda_c^{\text{SIS}}(N)$  é o limiar efetivo para o modelo SIS na rede de tamanho  $N$ . Em outras palavras: se a dinâmica do modelo SIS não é capaz de ativar *hubs* em uma rede, a dinâmica do modelo SIRS também não o faz, devido ao efeito supressor da imunização. Assumindo um escalonamento do tipo

$$\lambda_c^{\text{SIS}}(N) \sim k_{\text{max}}^{-\mu}, \quad (5.54)$$

em que  $\mu = 1/2$  para a teoria QMF [59], este comportamento tipo SIS deve ser observado para tamanhos

$$N \ll N_c \equiv [\beta\vartheta(\alpha, \gamma)]^{(\gamma-2)/\mu}, \quad (5.55)$$

em cruzamento para um limiar epidêmico constante quando  $N \gg N_c$ .

A figura 5.7 mostra limiares numéricos para  $\gamma > 3$ . Como podemos ver, para  $\alpha$  suficientemente pequeno ( $\alpha \geq 1$  para  $\gamma = 4$ ), pode-se notar um limiar constante para valores altos de  $N$ . Para valores altos de  $\alpha$  a tendência ainda é decrescente, mas o platô no gráfico surge apenas para tamanhos do sistema que não foram possíveis de simular com os recursos computacionais disponíveis.

### 5.3 O modelo SIRS em redes reais

Os resultados apresentados até o momento foram verificados em redes artificiais descorrelacionadas. Mas eles podem, entretanto, ser utilizados para a análise e interpretação de fenômenos epidêmicos em redes reais que apresentam correlações entre os nós, caracterizadas por uma dependência não trivial da probabilidade condicional  $P(k'|k)$  com  $k$  [69]. Voltando o foco para o modelo SIRS, nas figuras 5.8(a) e 5.8(b) apresentamos resultados de simulações numéricas em duas redes sem escala reais. Em particular, consideramos a rede social Gowalla [70] e a rede de compras de produtos relacionados do site da loja virtual Amazon [71], que possuem expoente

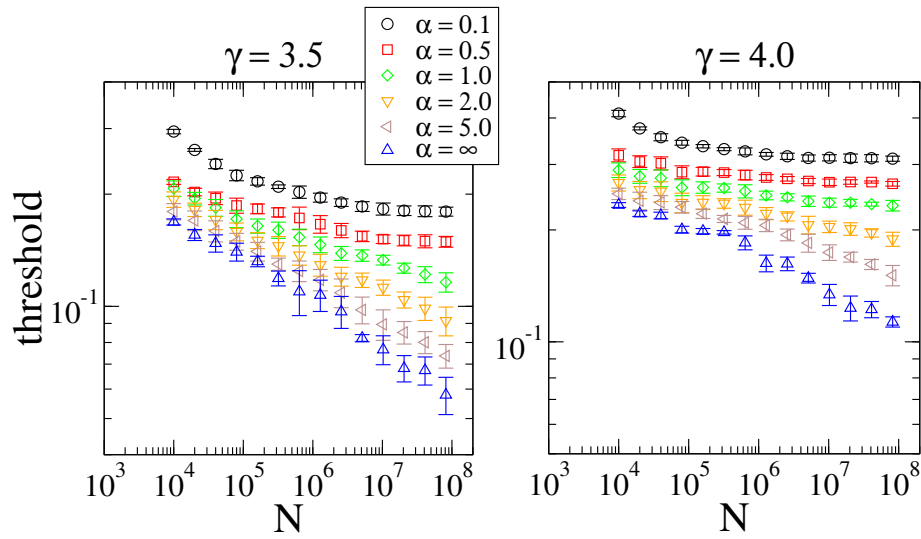


Figura 5.7: Limiares epidêmicos para o modelo SIRS como funções do tamanho para redes geradas pelo algoritmo UCM com expoentes da distribuição de conexões  $\gamma = 3, 5$  (a) e  $\gamma = 4, 0$  (b), com grau mínimo  $k_0 = 3$ . O limite  $\alpha = \infty$  do regime tipo SIS também foi incluído para comparação.

$\gamma < 3$  e  $\gamma > 3$ , respectivamente (figura 5.8(c)).

De acordo com a teoria QMF, os limiares para estas redes são iguais ao inverso do maior autovalor de suas matrizes de adjacência. Utilizando diagonalização numérica de matrizes, obtivemos os valores  $\lambda_c^{\text{QMF}, \text{Gowalla}} = 0,0059$  e  $\lambda_c^{\text{QMF}, \text{Amazon}} = 0,042$ . Nossas simulações mostram, para o caso da rede social Gowalla, com  $\gamma \simeq 2,4$ , que limiares estimados numericamente são essencialmente independentes de  $\alpha$  e muito próximos à previsão da teoria QMF. Este comportamento é consistente com a expectativa teórica a respeito de uma dinâmica ditada pelo mecanismo de ativação de *hubs*, a ser observado no regime em que  $\gamma < 3$  (figura 5.8(a)). Por outro lado, para a rede do site de comércio online da loja Amazon, com  $\gamma \simeq 3,5$ , observamos limiares epidêmicos efetivos que diminuem com o aumento de  $\alpha$ , aproximando-se da previsão da teoria QMF para  $\alpha \rightarrow \infty$ . Novamente, este comportamento está em concordância com a previsão teórica para o modelo SIRS em redes sem escala com  $\gamma > 3$ . Isso indica que há um limiar epidêmico finito para valores baixos de  $\alpha$ , em contraste com a previsão da teoria QMF a respeito da independência destes limiares.

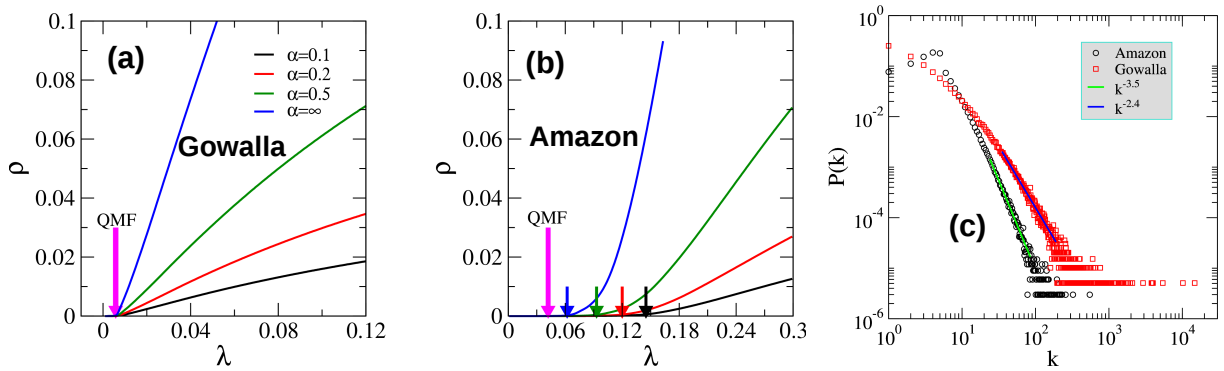


Figura 5.8: Simulações das dinâmicas dos modelos SIS e SIRS em redes reais. A densidade quase-estacionária de sítios ativos como função da taxa de infecção nas redes Gowalla (a) e Amazon (b) para diferentes taxas de imunização temporária. Setas foram utilizadas para indicar as posições dos limites obtidos por meio do método da análise de suscetibilidade e pela teoria QMF. Em (c) são mostradas as distribuições de conectividade para as redes dos sites Gowalla ( $N = 196591$ ,  $k_{\max} = 14730$ ,  $\gamma = 2, 4$ ) e Amazon ( $N = 334863$ ,  $k_{\max} = 549$ ,  $\gamma = 3, 5$ ). As linhas contínuas representam ajustes em lei de potência.

# Capítulo 6

## Considerações finais

A relação entre propriedades estruturais de redes complexas e a evolução dinâmica de processos epidêmicos ocorrendo em redes com alto grau de heterogeneidade constitui um problema básico do ponto de vista teórico da ciência de redes e epidemiologia. Em conjunto com as técnicas de análise teórica, métodos de simulação numérica são ferramentas fundamentais para a validação de tais teorias e conjecturas, bem como para estabelecer novas bases de compreensão física e analítica. Simulações no regime próximo à criticalidade, nas imediações do limiar epidêmico, constituem um grande desafio já que, em redes finitas, um estado absorvente (no qual a doença encontra-se erradicada) sempre será atingido devido a finitude do número de configurações acessíveis [2].

Objetivando investigar processos epidêmicos com estados estacionários é necessário recorrer a abordagens para analisar o estado quase-estacionário (que não mais apresenta estados absorventes) e às técnicas analíticas adequadas para tamanhos finitos. Em tais abordagens, é introduzida uma perturbação (desprezível no limite termodinâmico  $N \rightarrow \infty$ ) na dinâmica original do processo. Investigamos métodos distintos para simular estados quase-estacionários: o método SQS, no qual a amostragem é restrita às configurações ativas do sistema; o método RBC, no qual a dinâmica do processo retorna à configuração imediatamente anterior à visita ao estado absorvente; o método HR, em que a epidemia é reiniciada em um dos vértices mais conectados da rede; o método EF, que introduz o evento de autoinfecção espontânea. Dois modelos epidêmicos distintos foram considerados nesta investigação de técnicas simulacionais: o processo de contato e o modelo SIS. A natureza da(s) transição(ões) de fase nestes modelos é distinta [10]: no modelo SIS a transição é marcada por uma ativação de *hubs*, enquanto no processo de contato ocorre uma ativação coletiva da rede, caracterizando uma transição de fase padrão. Concluímos que todos os métodos são equivalentes para o processo de contato, fornecendo os mesmos limiares epidêmicos e expoentes de escalonamento de tamanho finito para as grandezas quase-estacionárias críticas. Para o modelo SIS, foram obtidos os mesmos limiares para todos os métodos, mas a análise de tamanho finito da densidade de sítios ativos provém expoentes críticos para os métodos RBC e EF que são diferentes daqueles obtidos para os métodos SQS e HR. Além do mais, os métodos RBC e EF não capturam a atividade epidêmica localizada no vértice mais conectado da rede. Então, se for desejável uma análise livre de epi-

demias localizadas, o método RBC é indicado. Porém, se for necessário capturar os efeitos de localização, os métodos SQS e HR são mais apropriados. Dentre estes dois últimos, o método SQS é mais bem fundamentado teoricamente [42, 47], porém seu algoritmo é mais complicado e menos eficiente do ponto de vista computacional quando comparado às outras técnicas investigadas. Uma grande vantagem do método SQS é que ele fornece diretamente um tempo de vida para a epidemia, calculado a partir das distribuições de probabilidade quase-estacionárias, que está de acordo com o tempo de relaxação característico tanto na fase crítica quanto subcrítica (situação esta última na qual ocorrem grandes dificuldades quando aplica-se um método de simulação convencional) do processo dinâmico em questão [43]. Na fase supercrítica, na qual o tempo de vida do processo não é um tempo característico de relaxação, a análise do tempo de autocorrelação para séries de estados quase-estacionários mostrou-se muito útil para o cálculo do tempo característico. Encontramos o mesmo expoente de escalonamento de tamanho finito para todos os métodos de simulação estudados neste trabalho. Em particular, aplicando o método de autocorrelação ao modelo SIS em reticulados de dimensões  $d = 1, 2$  e  $3$ , bem como na rede RRN ( $d = \infty$ ), obtivemos os expoentes que caracterizam a classe de universalidade da percolação direcionada.

Neste trabalho também procuramos estudar algumas questões fundamentais de nossa área, tais como sobre que condições um dado modelo epidêmico apresenta limiar epidêmico finito ou nulo (ambos considerados no limite termodinâmico) e como as propriedades observadas nas transições de fase para estados endêmicos, locais e globais, podem ser melhor descritas do ponto de vista teórico. Por meio de uma extensão da teoria apresentada por Boguñá *et al* [41], propusemos um critério geral para compreender a natureza dos limiares epidêmicos em processos dinâmicos deste tipo. Este critério baseia-se na comparação das escalas de tempo para a recuperação dos *hubs* da rede e para sua reinfecção. Quando o tempo de vida é maior do que o tempo de infecção, a dinâmica é marcada por um processo de ativação de *hubs*, como no ocorre no modelo SIS: estes *hubs* permanecem ativos por tempos muito longos e são capazes se reinfecar mutuamente de modo a estabelecer um estado endêmico de longa duração. Este cenário conduz a um limiar epidêmico que tende a zero quando o tempo de vida diverge mais rapidamente que o tempo de reinfecção no limite termodinâmico. Neste caso, as teorias QMF mostram-se corretas qualitativamente pelo fato de as mesmas levarem explicitamente em consideração a estrutura topológica completa da rede, capturando os efeitos do domínio dos nós mais conectados do sistema. Por outro lado, para um tempo de vida menor que a escala do tempo de infecção, este mecanismo de ativação de *hubs* não pode mais ser sustentado e possíveis transições de fase para estados endêmicos resultam a partir de um processo de ativação coletiva global na rede, levando a uma transição de fase padrão que ocorre em um limiar epidêmico finito, como no caso do processo de contato. Neste último cenário, teorias de campo médio heterogêneas devem mostrar-se corretas do ponto de vista qualitativo, devido ao fato de estas funcionarem na aproximação de redes *annealed*, nas quais cada nó interage com todos os outros seguindo uma probabilidade dependente do grau de conectividade [7].

Para verificar a validade do critério proposto, investigamos um modelo epidêmico genérico com certa taxa de recuperação espontânea, imunização temporária e taxas de infecção dependentes do grau de conectividade local em redes sem escala, para as quais é possível determinar expressões analíticas para as escalas de tempo de recuperação e infecção dos *hubs*. Este modelo tem como casos particulares alguns modelos fundamentais para a modelagem de processos epidêmicos, como os modelos SIS, SIR, SIRS, PC e até mesmo alguns mais complexos como o modelo SIS generalizado proposto por Karsai *et al* [62]. Após exemplificarmos nossa análise teórica com os casos bem conhecidos do modelo SIS e PC, apresentamos uma discussão mais detalhada do modelo SIRS, uma extensão do modelo SIS que leva em conta efeitos de imunização temporária. Enquanto as abordagens analíticas anteriores (teorias HMF e QMF) previam para o modelo SIRS o mesmo comportamento do modelo SIS, o resultado principal do nosso trabalho mostra que, mesmo o efeito de uma pequena taxa de imunização temporária, é capaz de levar a um limiar epidêmico finito (embora possivelmente afetado por fortes efeitos de tamanho finito) em redes sem escala com  $\gamma > 3$ . Este resultado entra em conflito com a teoria QMF, válida para o modelo SIS neste regime, e concorda com a teoria HMF. Nossas previsões foram corroboradas por meio de resultados de simulações numéricas realizadas em redes sem escala artificiais sem correlação entre graus dos vértices e em redes reais correlacionadas.

O critério apresentado representa um passo adiante para a compreensão das propriedades das transições de fase que ocorrem em modelos epidêmicos, abrindo caminho assim para o estudo de modelos mais realistas e gerais. Nesse sentido, a aplicação para modelos mais complexos é direta, sendo apenas impedida pelas dificuldades que possam surgir ao extrair expressões analíticas para as escalas dos tempos de vida e infecção dos *hubs*. Mas vale observar que estas escalas de tempo podem ser estimadas numericamente a partir de simulações diretas em grafos estrela, como exemplificado neste trabalho.

# Referências Bibliográficas

- [1] DICKMAN A. G.; DICKMAN R.; BARBOSA F. A. *Transições de fase sem termodinâmica*. Rev. Bras. Ens. Fis., **28**, 23-33, 2006.
- [2] MARRO J.; DICKMAN R., *Nonequilibrium Phase Transition in Lattice Models*. Cambridge: Cambridge University Press, 1999.
- [3] 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.
- [4] TAKEUCHI K. A.; KURODA M.; CHATÉ H.; SANO M., *Directed percolation criticality in turbulent liquid crystals*, Phys. Rev. Lett., **99**, 2007
- [5] CORTÉ L.; CHAIKIN P. M.; GOLLUB J. P.; PINE D. J., *Random Organization in periodically driven systems*, Nature Physics, **4**, 420-424, 2008.
- [6] BARRAT A.; BARTHÉLEMY M.; VESPIGNANI A., *Dynamical process on complex networks*, Cambridge: Cambridge University Press, 2008.
- [7] DOROGOVTSEV S. N.; GOLTSEV A. V.; MENDES J. F. F., *Critical phenomena in complex networks*, Rev. Mod. Phys. **80**, 1275, 2008
- [8] CASTELLANO C.; PASTOR-SATORRAS R., *Non Mean-Field Behavior of the Contact Process on Scale-Free Networks*, Phys. Rev. Lett. **96**, 038701, 2006.
- [9] SANDER R. S.; COSTA G. S.; FERREIRA S. C., *Sampling methods for the quasistationary regime of epidemic processes on regular and complex networks*. Phys Rev. E **94**, 042308, 2016
- [10] FERREIRA S. C.; SANDER R. S.; PASTOR-SATORRAS R., *Collective versus hub activation of epidemic phases on networks*, Phys. Rev. E **93**, 032314, 2016
- [11] MATA A. S.; FERREIRA R. S.; FERREIRA S. C., *Heterogeneous pair-approximation for the contact process on complex networks*. New J. Phys. **16**, 053006, 2014
- [12] SANDER R. S., *Transições de fase para estados absorventes: um estudo em redes regulares e complexas*. 2009. Dissertação (Mestrado em Física Aplicada) - Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, MG, 2009.

- [13] CALDARELLI G., *Scale-free Networks - complex webs in nature and technology*, Oxford: Oxford University Press, 2007.
- [14] NEWMAN M. E. J., *Networks: An Introduction*, Oxford: Oxford University Press, 2010.
- [15] CATANZARO M. BOGUÑA M.; PASTOR-SATORRAS, *Generation of uncorrelated random scale-free networks*. Phys. Rev. E **71**, 027103, 2005.
- [16] BINDER K., *Finite-size scaling analysis of Ising-model block distribution functions*. Z. Phys. B Con. Mat., **43**, 119-140, 1981.
- [17] DERRIDA B.; LEBOWITZ J. L.; SPEER E. R., *Free Energy Functional For Nonequilibrium Systems: An Exactly Soluble Case*. Phys. Rev. Lett, **87**, 150601, 2001.
- [18] HAKEN H., *Synergetics*. Nova Iorque:Springer-Verlag, 1983.
- [19] NICOLIS G.; PRIGOGINE I., *Self-organization in Nonequilibrium Systems*. Nova Iorque:Wiley Interscience, 1977.
- [20] STANLEY H. E., *Scaling, universality, and renormalization: Three pillars of modern critical phenomena*. Rev. Mod. Phys., **71**, S358-S366, 1999.
- [21] GRASSBERGER P.; DE LA TORRE A., *Reggeon field-theory (schlogl 1st model) on a lattice - monte-carlo calculations of critical behavior*. Ann. Phys., **122**, 373-396, 1979.
- [22] PRIVMAN V., *Nonequilibrium Statistical Mechanics in One Dimension*. Cambridge:Cambridge University Press, 2005.
- [23] AUKRUST T.; BROWNE D. A.; WEBMAN I., *Critical behavior of an autocatalytic reaction model*. Phys. Rev. A, **41**, 5294-5301, 1990.
- [24] JENSEN I.; DICKMAN R., *Time-dependent perturbation-theory for nonequilibrium lattice models*. J. Stat. Phys., **71**, 89-127, 1993.
- [25] CASTELLANO C. e PASTOR-SATORRAS R., *Routes to thermodynamic limit on scale-free networks*, Phys. Rev. Lett. **100**, 1487701, 2008.
- [26] BOGUÑA 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.
- [27] FERREIRA S. C.; FERREIRA R. S.; PASTOR-SATORRAS R. *Quasistationary analysis of the contact process on annealed scale-free networks*, Phys. Rev. E, **83**, 066113, 2011.
- [28] PASTOR-SATORRAS R., *Epidemic Dynamics in finite size scale-free networks*. Phys. Rev. E. **65**, 035108, 2002.

- [29] CASTELLANO C.; PASTOR-SATORRAS R., *Reply to Ha et al.* Phys. Rev. Lett. **98**, 029802, 2007.
- [30] NOH J. D.; PARK H., *Critical behavior of the contact process in annealed scale-free networks.* Phys. Rev. E **79**, 056115, 2009
- [31] PASTOR-SATORRAS R.; VESPIGNANI A., *Epidemic dynamics in finite size scale-free networks.* Phys. Rev. E **65**, 035108(R), 2002
- [32] BOGUÑÁ M.; PASTOR-SATORRAS R.; VESPIGNANI A., *Absence of Epidemic Threshold in Scale-Free Networks with Degree Correlations.* Phys. Rev. Lett. **90**, 028701, 2003
- [33] CHATTERJEE S., DURRET R., *Contact processes on random graphs with power law degree distributions have critical value 0,* Ann. Probab. **37**, 2332, 2009
- [34] DURRET R., *Some features of the spread of epidemics and information on a random graph.* Proc. Natl. Acad. Sci. USA **107**, 4491, 2010
- [35] WANG Y.; CHAKRABARTI D.; WANG C.; FALOUTSOS C., *in 22nd International Symposium on Reliable Distributed Systems. SRDS '03,* IEEE Computer Society, Los Alamitos, 2003
- [36] CHAKRABARTI D.; WANG Y.; WANG C.; LESKOVEC J.; FALOUTSOS C., *Epidemic Thresholds in Real Networks.* ACM Trans. Inf. Syst. Secur. **10**, 1, 2008
- [37] FERREIRA S.C.; CASTELLANO C.; PASTOR-SATORRAS R., *Epidemic thresholds of the susceptible-infected-susceptible model on networks: a comparison of numerical and theoretical results* Phys. Rev. E **86**, 041125, 2012
- [38] CHUNG F.; LU L.; VU V., *Spectra of random graphs with given expected degrees.* Proc. Natl. Acad. Sci. USA **100**, 2003
- [39] MATA A. S.; FERREIRA S. C., *Pair quenched mean-field theory for the susceptible-infected-susceptible model on complex networks,* Eur. Phys. Lett., **103**, 48003, 2013
- [40] LEE H. K.; SHIM P.-S.; NOH J. D., *Epidemic threshold of the susceptible-infected-susceptible model on complex networks.* Phys. Rev. E **87** 062812, 2013
- [41] BOGUÑÁ M.; CASTELLANO C.; PASTOR-SATORRAS R., *Nature of the Epidemic Threshold for the Susceptible-Infected-Susceptible Dynamics in Networks,* Phys. Rev. Lett. **111**, 068701, 2013
- [42] VAN KAMPEN N. G. *Stochastic processes in chemistry and physics,* North Holland, Amsterdam, 1981.

- [43] OLIVEIRA M. M.; DICKMAN R., *How to simulate the quasistationary state*, Phys. Rev. E **71**, 016129, 2005.
- [44] BLANCHET J.; GLYNN P.; ZHENG S., *Theoretical analysis of a stochastic approximation approach for computing quasi-stationary distributions*, arXiv:1401.0364, 2014
- [45] DICKMAN R.; TOMÉ T.; DE OLIVEIRA M. J., *Sandpiles with height restrictions*, Phys. Rev. E **66**, 016111, 2002
- [46] LÜBECK S.; JANSSEN H. K., *Finite-size scaling of directed percolation above the upper critical dimension*, Phys. Rev. E **016119**, 2005
- [47] DICKMAN R.; VIDIGAL R., *Quasi-stationary distributions for stochastic processes with an absorbing state*. J. Phys. A: Math Gen **35**, 1147, 2002
- [48] PRUESSNER G., *Equivalence of conditional and external field ensembles in absorbing-state phase transitions*, Phys. Rev. E **76**, 061103, 2007
- [49] BARABÁSI A.; ALBERT R., *Emergence of scaling in random networks*. Science, **286**, 509-512, 1999.
- [50] MATA A. S.; FERREIRA S. C., *Multiple Transitions of the susceptible-infected-susceptible epidemic model on complex networks*, Phys. Rev. E **91**, 012816, 2015
- [51] PRESS W. H.; TEUKOLSKY S. A.; VETTERLING W. T.; FLANNERY B. P., *Numerical Recipes 3rd Edition: The Art of Scientific Computing*, 3rd ed., Cambridge University Press, New York, NY, USA, 2007
- [52] HENKEL M.; HINRICHSEN H.; LÜBECK S., *Nonequilibrium phase transition: Absorbing Phase Transitions*, Springer Verlag, Netherlands, 2008
- [53] FERREIRA R. S.; FERREIRA S. C., *Critical behavior of the contact process on small-world networks*, Eur. Phys. J. B **86**, 462, 2013
- [54] BOGUÑÁ M.; PASTOR-SATORRAS R.; VESPIGNANI A., *Cut-offs and finite-size effects in scale-free networks*, Eur. Phys. J. B **38**, 205, 2004
- [55] COTA W.; FERREIRA S. C.; ÓDOR G., *Griffiths effects of the susceptible-infected-susceptible epidemic model on random power-law networks*, Phys. Rev. E **93**, 032322, 2016
- [56] FERREIRA S. C.; FERREIRA R. S.; CASTELLANO C.; PASTOR-SATORRAS R., *Quasi-stationary simulations of the contact process on quenched networks*, Phys. Rev. E **84**, 066102, 2011

- [57] VOJTA T., *Rare region effects at classical, quantum and nonequilibrium phase transitions*, J. Phys. A: Math. Gen. **39**, R143, 0602312, 2006
- [58] ÓDOR G.; PASTOR-SATORRAS R., *Slow dynamics and rare-region effects in the contact process on weighted tree networks*, Phys. Rev. E **86**, 026117, 2012
- [59] CASTELLANO C.; PASTOR-SATORRAS R., *Thresholds for Epidemic Spreading in Networks*, Phys. Rev. Lett. **105**, 218701, 2010
- [60] MOUTFORD T.; MOURRAT J. C.; VALESIN D.; YAO Q., *Exponential extinction time of the contact process on finite graphs*. Stoch. Proc. Appl. **126**, 1974-2013, 2016
- [61] ANDERSON R. M.; MAY R. M., *Infectious Diseases in Humans*, Oxford University Press, Oxford, England, UK, 1992
- [62] KARSAI M.; JUHÁSZ R.; IGLÓI F., *Nonequilibrium phase transitions and finite-size scaling in weighted scale-free networks*, Phys. Rev. E **73**, 036116, 2006
- [63] PASTOR-SATORRAS R.; VÁZQUEZ A.; VESPIGNANI A., *Dynamical and Correlation Properties of the Internet*, Phys. Rev. Lett. **87**, 258701, 2001
- [64] ABRAMOVITZ M.; STEGUN I. A., *Handbook of Mathematical Functions*, Dover, New York, NY, USA, 1972
- [65] HOLYST J. A.; SIENKIEWICZ J.; FRONCZAK A.; FRONCZAK P.; SUCHECKI K., *Universal scaling of distances in complex networks*, Phys. Rev. E **72**, 026108, 2005
- [66] GÓMEZ S.; ARENAS A.; BORGE-HOLTHOEFER J.; MELONI S.; MORENO Y., *Discrete-time Markov chain approach to contact-based disease spreading in complex networks*, Europhys. Lett. **89**, 38009, 2010
- [67] BANCAL J. -D.; PASTOR-SATORRAS R., *Steady-state dynamics of the forest fire model on complex networks*, Eur. Phys. J. B **76**, 109, 2010
- [68] CATANZARO M. BOGUÑA M.; PASTOR-SATORRAS, *Diffusion-annihilation processes in complex networks*. Phys. Rev. E **71**, 056104, 2005.
- [69] DOROGOVTSEV S. N.; MENDES J. F. F., *Evolution of networks*, Adv. Phys. **51**, 1079, 2002
- [70] CHO E.; MYERS A.; LESKOVEC J., *Proceedings of the 17th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, KDD '11*, pp. 1082-1090, ACM, New York, 2011
- [71] YANG J.; LESKOVEC J., *Defining and evaluating network communities based on ground-truth*, Inf. Syst. **42**, 181-213, 2015