

Universidade Estadual de Campinas

Instituto de Física "Gleb Wataghin"

# Processos Dinâmicos em Redes Complexas

Dissertação de Mestrado

David Dobrigkeit Chinellato

orientado por Marcus A. M. de Aguiar

**Banca Examinadora:**

Prof. Dr. Marcus A. M. de Aguiar – DFMC/IFGW/UNICAMP

Prof. Dr. José Fernando Fontanari – IFSC/USP

Prof. Dr. Fernando Cerdeira – IFGW/UNICAMP

Este exemplar corresponde à  
redação final da Tese de Mestrado  
defendida pelo aluno DAVID  
Dobrigkeit Chinellato e aprovada  
pela comissão julgadora



30/04/2008

**FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA  
BIBLIOTECA DO IFGW - UNICAMP**

C441p	<p>Chinellato, David Dobrigkeit Processos dinâmicos em redes complexas / David Dobrigkeit Chinellato. -- Campinas, SP : [s.n.], 2007.</p> <p style="text-align: center;">Orientador: Marcus A . M. de Aguiar. Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física "Gleb Wataghin".</p> <p style="text-align: center;">1. Redes complexas. 2. Modelo do eleitor. 3. Dinâmica de redes. 4. Deriva genética. 5. Ising, Modelo de. I. Aguiar, Marcus Aloizio Martinez de. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Física "Gleb Wataghin". III. Título.</p> <p style="text-align: right;">(vsv/ifgw)</p>
-------	---

- **Título em inglês:** Dynamic processes in complex networks
- **Palavras-chave em inglês (Keywords):**
  1. Complex networks
  2. Voter model
  3. Network dynamics
  4. Genetic drift
  5. Ising model
- **Área de concentração:** Física Estatística e Termodinâmica
- **Titulação:** Mestre em Física
- **Banca examinadora:**

Prof. Marcus Aloizio Martinez de Aguiar  
Prof. Fernando Cerdeira  
Prof. José Fernando Fontanari
- **Data da defesa:** 24.05.2007
- **Programa de Pós-Graduação em:** Física

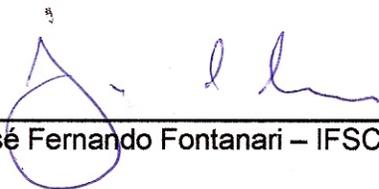
MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE Mestrado DE **DAVID DOBRIGKEIT CHINELLATO** - RA 008464 APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA "GLEB WATAGHIN", DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 24 / 05 / 2007.

**COMISSÃO JULGADORA:**



---

Prof. Dr. Marcus Aloizio Martinez de Aguiar (Orientador do Candidato) -  
DFMC/IFGW/UNICAMP



---

Prof. Dr. José Fernando Fontanari - IFSC/USP



---

Prof. Dr. Fernando Cerdeira - DFMC/IFGW/UNICAMP

# Resumo

Nesta tese, estudamos as propriedades estatísticas de processos dinâmicos de influência em redes complexas sujeitas a perturbações externas. Consideramos redes cujos nós admitem dois estados internos, digamos 0 e 1. Os estados internos se alteram de acordo com os estados dos nós vizinhos. Supomos que há  $N_1$  nós com estado interno fixo em 1,  $N_0$  elementos com estado interno fixo em 0 e outros  $N$  elementos com estado interno livre. Os nós com estado interno fixo podem ser interpretados como perturbações externas à subrede de  $N$  elementos livres. Este sistema é uma generalização do modelo do eleitor [25] e pode descrever diversas situações interessantes, indo de sistemas sociais [26] para a física e a genética. Neste trabalho, calcularemos analiticamente a evolução de um sistema de rede totalmente conectada, obtendo expressões para as distribuições de equilíbrio de uma rede qualquer e também de todas as probabilidades de transição.

Em seguida, generalizamos os resultados para o caso em que  $N_0$  e  $N_1$  são menores do que 1, representando um acoplamento fraco do sistema com um reservatório externo. Mostramos que os resultados exatos são excelentes aproximações para várias outras redes, incluindo redes aleatórias, reticuladas, livres de escala, estrela e mundo pequeno, e estudamos a dinâmica destas outras redes numericamente. Finalmente, demonstramos que, se os dois parâmetros da solução para redes totalmente conectadas,  $N_0$  e  $N_1$ , forem alterados para valores efetivos para cada tipo de rede específico, o nosso resultado analítico explica satisfatoriamente todas as dinâmicas e estados assintóticos de outras topologias. O nosso modelo é portanto bastante geral, se aplicado cuidadosamente.

# Abstract

We study the statistical properties of influence networks subjected to external perturbations. We consider networks whose nodes have internal states that can assume the values 0 or 1. The internal states can change depending on the state of the neighboring nodes. We let  $N_1$  nodes be frozen in the state 1,  $N_0$  be frozen in the state 0 and the remaining  $N$  nodes be free to change their internal state. The frozen nodes are interpreted as external perturbations to the sub-network of  $N$  free nodes. The system is a generalization of the voter model [25] and can describe a variety of interesting situations, from social systems [26] to physics and genetics. In this thesis, we calculate analytically the equilibrium distribution and the transition probabilities between any two states for arbitrary values of  $N$ ,  $N_1$  and  $N_0$  for the case of fully connected networks.

Next we generalize the results for the case where  $N_0$  and  $N_1$  are smaller than 1, representing the weak coupling of the network to an external reservoir. We show that our exact results are excellent approximations for several other topologies, including random, regular lattices, scale-free, star and small world networks, and study the dynamics of these other networks numerically. We then proceed to show that, by appropriately tuning the two parameters from the solution from fully connected networks,  $N_0$  and  $N_1$ , to effective values when dealing with other, more sophisticated network types, we can easily explain their asymptotic network behaviour. Our model is therefore quite general in applicability, if used consciously.

# Agradecimentos

Agradeço ao Professor Marcus A. M. de Aguiar, que esteve sempre presente para me ajudar ao longo deste trabalho. Sempre que precisei, ele estava disposto a ajudar, com seu bom humor de sempre e com excelentes idéias e cálculos. Este trabalho definitivamente não teria sido possível se não pelo Marcus. Foi um grande prazer trabalhar com ele.

Agradeço também a todos que, de uma forma ou de outra, me apoiaram durante o trabalho de mestrado. Agradeço a paciência do grupo de estudos por ouvirem sobre meu trabalho repetidas vezes e pelos comentários produtivos. O ambiente de trabalho da salinha de estudos do DFMC pode não ter janelas, mas apesar disso é muito receptivo e é sempre agradável encontrar o pessoal de lá. Também sou grato aos funcionários do instituto, sempre simpáticos e dispostos a ajudar; em particular, à secretaria do DFMC e secretaria de pós-graduação, que certamente teve bastante paciência comigo. Sou grato a muitas pessoas, mas por medo de cometer injustiças evitarei listar aqui estas pessoas por nome.

Finalmente, agradeço a meus pais, Carola Dobrigkeit e José Augusto Chinellato, por todo tipo de suporte que me deram neste período. Eles me ajudaram bastante, não só neste período, mas na minha formação geral. Agradeço também meu irmão pelo apoio que tem dado, e agradeço particularmente à Rafaella pelo companheirismo, amizade e bons momentos.

Agradeço também à FAPESP pelo apoio financeiro.

# Sumário

<b>Resumo</b>	<b>I</b>
<b>Abstract</b>	<b>I</b>
<b>Agradecimentos</b>	<b>II</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
1.1 Introdução . . . . .	1
<b>2 Topologias de Rede</b>	<b>4</b>
2.1 Caracterização . . . . .	4
2.2 Categorias Usuais de Redes . . . . .	6
2.2.1 Rede Totalmente Conectada . . . . .	6
2.2.2 Rede Aleatória . . . . .	6
2.2.3 Rede Reticulada . . . . .	10
2.2.4 Rede Mundo Pequeno . . . . .	11
2.2.5 Rede Estrela . . . . .	12
2.2.6 Rede Livre de Escala . . . . .	14
<b>3 Dinâmicas</b>	<b>16</b>
3.1 Introdução . . . . .	16
3.2 Dinâmica em Rede Totalmente Conectada . . . . .	18
3.2.1 Introdução . . . . .	18
3.2.2 Abordagem Numérica . . . . .	20
3.2.3 Resolução Analítica . . . . .	38
3.2.4 Generalização para $N_0$ e $N_1$ não-inteiros . . . . .	48
3.2.5 Análise de redes complexas através de valores efetivos de $N_0$ e $N_1$ . . . . .	50
3.3 Dinâmica em Rede Aleatória . . . . .	51
3.3.1 Criando a Rede . . . . .	51
3.3.2 Abordagem Numérica . . . . .	52
3.4 Dinâmica em Rede Reticulada . . . . .	54
3.4.1 Criando a Rede . . . . .	54
3.4.2 Resolução analítica de redes reticuladas unidimensionais . . . . .	55
3.4.3 Abordagem Numérica . . . . .	59
3.5 Dinâmica em Rede Mundo Pequeno . . . . .	63

3.5.1	Criando a Rede . . . . .	63
3.5.2	Abordagem Numérica . . . . .	63
3.6	Dinâmica em Rede Estrela . . . . .	66
3.6.1	Criando a Rede . . . . .	66
3.6.2	Abordagem Numérica . . . . .	66
3.7	Dinâmica em Redes Livres de Escala . . . . .	74
3.7.1	Criando a Rede . . . . .	74
3.7.2	Abordagem Numérica . . . . .	75
<b>4</b>	<b>Conclusão</b>	<b>85</b>

# Capítulo 1

## Introdução

### 1.1 Introdução

A aplicação de métodos e técnicas de mecânica estatística em problemas de Biologia tem se tornado cada vez mais freqüente. No campo da Ecologia, em particular, processos do tipo predador-presa ou parasita-hospedeiro são modelados por meio de equações diferenciais ou por equações a diferenças finitas [1], [2], [3]. Inúmeras aplicações podem também ser encontradas em genética de populações sexuadas ou assexuadas [4], [5], [6], [7].

Existem várias maneiras de modelar sistemas ecológicos, dependendo do que se quer observar e da situação específica que se tem em mente. Em modelos do tipo campo médio consideram-se populações cujos indivíduos se misturam totalmente, de tal forma que podem interagir uns com os outros de maneira uniforme. Esses modelos são descritos por equações diferenciais simples cujas variáveis representam as quantidades de indivíduos de cada tipo. Modelos espaciais já levam em conta a posição geográfica dos indivíduos, possibilitando sua interação apenas com indivíduos mais próximos. Neste caso, são feitas descrições por equações parciais ou por equações a diferença finita, considerando o espaço e o tempo discretos. Uma terceira forma de modelagem trata de genética de populações e considera os indivíduos como nós de uma rede abstrata. Conexões entre estes nós representam a possibilidade de interação reprodutiva entre os indivíduos conectados. É então possível estudar a dinâmica reprodutiva e, mais especificamente, o fenômeno de deriva genética, no qual determinado alelo acaba, efetivamente, sendo selecionado aleatoriamente para fixação genética.

O modelo para o estudo da deriva genética é construído da seguinte forma: consideramos uma população panmítica (i.e., onde os indivíduos podem se reproduzir associando-se uns com os outros de maneira uniforme) com  $N$  indivíduos haplóides (com apenas uma cópia de cada cromossomo) que se reproduzem sexuadamente. Ol-

hamos para um único gene da população, que assumimos existir em duas formas (alelos), que chamamos de 0 e 1. A cada passo de tempo, um indivíduo da população (a “mãe”) é escolhido de forma aleatória para reproduzir. No final da reprodução este indivíduo morre e é substituído pelo “filho”. A mãe escolhe aleatoriamente um parceiro (o “pai”) e o filho tem probabilidade  $p$  de assumir o alelo da mãe e  $(1 - p)$  de assumir o alelo do pai. Esse processo pode ser imediatamente mapeado na dinâmica de uma rede da seguinte forma: Seja uma rede genérica com  $N$  nodos. A cada nodo  $i$  associamos um estado interno  $\sigma_i$  que pode assumir os valores 0 ou 1. A cada passo de tempo o estado do nodo é atualizado de acordo com a seguinte regra: ou o estado não muda, o que ocorre com probabilidade  $p$ , ou, com probabilidade  $(1 - p)$ , ele copia o estado de um dos nodos aos quais está conectado. Uma das vantagens de tratar o problema de deriva genética como um problema dinâmico sobre redes é que podemos agora considerar populações estruturadas (ao invés de panmíticas). Nesse caso, os indivíduos têm conexões apenas com uma parcela finita da rede e pode-se estudar o efeito da topologia dessas conexões no processo.

Este modelo bastante simples de dinâmica aparece ainda em vários outros contextos. Em particular, nas Ciências Sociais essa interação por influência é chamada de *modelo do eleitor*. Neste caso, o estado interno do nodo representa a intenção de voto no candidato 0 ou no candidato 1. Mas o que ocorre se, neste modelo, há alguns nós cujo estado interno não pode ser alterado? Para o modelo do eleitor, esses nodos fixos representam indivíduos com opiniões definidas, que podem influenciar os outros mas não podem ser influenciados. No caso da deriva genética, a influência dos nodos fixos fará o papel de mutações. O estudo da dinâmica de influências sujeita à presença de nodos fixos é a proposta inicial deste trabalho. Vamos considerar redes nas quais há  $N$  elementos com estado interno variável 0 ou 1,  $N_0$  elementos cujo estado interno é fixo em 0 e  $N_1$  elementos cujo estado interno é fixo em 1. Nesta nova rede, com  $N + N_0 + N_1$  nós, consideraremos uma dinâmica de influências na qual apenas os  $N$  elementos com estado interno variável podem ser selecionados para atualização em um dado passo da dinâmica.

Como este modelo é geral, resta ainda a questão de como vamos dispor as conexões da nossa rede. Em um esforço para realizar um trabalho completo, vamos estudar seis topologias de rede diferentes: redes totalmente conectadas, redes aleatórias, redes reticuladas, redes mundo pequeno, redes livres de escala e redes estrela. O início deste texto descreve em detalhes estas seis redes; então, discorreremos sobre os estudos das dinâmicas em cada uma destas redes.

É portanto um dos nossos objetivos entender o papel da topologia da rede nos resultados da dinâmica, particularmente nas escalas de tempo características dos processos

de equilíbrio, assim como nos estados assintóticos destas redes. Pretendemos ainda generalizar a dinâmica estudada em [8], que descreve processos de deriva genética em populações homogêneas, ou panmíticas, para incluir mutações.

Esta dissertação está organizada da seguinte forma: no capítulo dois, veremos uma introdução às seis diferentes topologias de redes que estudaremos. No capítulo três, definiremos a dinâmica com a qual trabalharemos, e procederemos a uma análise caso-a-caso de cada uma das topologias e um subsequente estudo de suas características dinâmicas. Ainda neste terceiro capítulo, realizaremos sempre análises numéricas, e deduziremos soluções analíticas para a dinâmica sempre que possível. Todos os resultados deste capítulo são, até onde sabemos, inéditos na literatura e foram desenvolvidos ao longo do mestrado. Finalmente, as nossas observações finais estarão retratadas no quarto capítulo, a conclusão.

## Capítulo 2

# Topologias de Rede

### 2.1 Caracterização

Uma análise da topologia de qualquer rede complexa requer conceitos e medidas que sejam representativos das características da rede e, se possível, que sejam também indicativos de princípios de organização. Várias formas de medir diferentes características foram propostas recentemente, mas há três idéias centrais bem-estabelecidas que são cruciais e que representam quantidades prontamente mensuráveis de quaisquer redes para as quais se tenha informações de conectividade.

**Coefficiente de Agrupamento** Em redes reais, é muito comum observar que existem grupos de elementos com grande número de conexões entre si. Este fenômeno foi primeiramente observado por sociólogos em estudos de relações humanas, que formam redes nas quais os nós representam pessoas e as conexões estão presentes entre dois nós se as duas pessoas correspondentes se conhecerem. Neste caso, é muito comum a formação de um conjunto de pessoas que se conheçam todas entre si, mas que tenham consideravelmente menos conhecimento de pessoas fora deste conjunto. Estes indivíduos possivelmente são, digamos, colegas de trabalho ou estudo, e diz-se dessas redes sociais que há um considerável agrupamento.

Perfaz-se a necessidade de quantificar este princípio de organização de uma forma que seja útil em redes reais de muitos elementos. Definimos então o coeficiente de agrupamento do  $i$ -ésimo nó da rede,  $C_i$ , como sendo a razão entre o número de conexões  $E_i$  existentes entre os  $k_i$  vizinhos conectados a este nó e o número máximo de elos possíveis,  $k_i(k_i - 1)/2$ :

$$C_i = \frac{2E_i}{k_i(k_i - 1)}. \quad (2.1)$$

De acordo com esta definição, o  $i$ -ésimo elemento terá coeficiente de agrupamento

$C_i = 0$  se nenhum de seus vizinhos estiver conectado entre si e  $C_i = 1$  se todos os seus vizinhos estiverem interconectados, o que é razoável.

Finalmente, para medir o agrupamento de uma rede por inteiro, definimos o coeficiente de agrupamento da rede,  $C$ , como sendo simplesmente a média dos  $C_i$  para todos os nós da rede.

$$C = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N C_i. \quad (2.2)$$

Desta forma, é possível calcular o coeficiente de agrupamento de quaisquer redes sobre as quais se tenha as informações topológicas de forma imediata.

**Caminho Mínimo Médio** Na maioria das redes reais, é marcante que quaisquer dois elementos da rede estão conectados por um caminho mínimo tipicamente curto em comparação com o número de elementos que compõem a rede. A ocorrência mais famosa deste conceito é a do psicólogo social Stanley Milgram (1967), que, ao estudar redes de relações humanas, concluiu que entre quaisquer dois cidadãos dos EUA havia um caminho mínimo de, na média, seis conhecidos, apesar do fato de se tratar de uma rede com muitos milhões de elementos constituintes.

A medida da grandeza de caminho mínimo médio é, uma vez tidos os dados topológicos de uma rede, um problema de múltiplas otimizações para encontrar o menor caminho e depois o cálculo da média do número de conexões entre dois dados elementos. Infelizmente, trata-se de problema custoso computacionalmente, uma vez que devem ser realizadas  $N(N - 1)/2$  otimizações, uma para cada par de elementos da rede. Não entraremos em maiores detalhes a respeito destes cálculos aqui; nossa intenção é meramente ilustrativa. Além disso, a importância desta grandeza não deve ser superestimada, uma vez que ela não é realmente indicativa de um princípio de organização da rede.

**Distribuição de Grau** É evidente que, em uma rede real, nem todos os nós têm o mesmo número de conexões com o resto da rede. É portanto interessante investigar a probabilidade de, selecionado um elemento aleatório  $i$  da rede, este tenha um certo número de conexões, ou grau,  $k_i$ ; para tanto, é útil estudar a distribuição de grau  $P(k)$  da rede. Esta é uma função que representa a probabilidade de selecionar um nó ao acaso que tenha  $k$  conexões.

Por exemplo, em uma rede aleatória, na qual cada nó tem uma certa probabilidade  $p$  de estar conectado com cada um dos outros elementos, a distribuição de grau será uma distribuição binomial, por definição, uma vez que a existência ou não de uma conexão é independente da existência de qualquer outra e os nós da rede são indistinguíveis.

Recentemente, análises da distribuição de grau de enormes redes reais mostrou resultados bastante surpreendentes. Em particular, para redes como a Internet e para outros sistemas reais, a distribuição de grau é consideravelmente diferente de uma distribuição típica de uma rede aleatória de mesmas dimensões e de mesmo número médio de conexões, mostrando que redes aleatórias não são, apesar de sua praticidade, suficientemente representativas.

## 2.2 Categorias Usuais de Redes

### 2.2.1 Rede Totalmente Conectada

Uma das redes mais simples é a rede totalmente conectada, na qual cada um dos elementos está conectado a todos os outros da mesma rede.

O coeficiente de agrupamento de redes totalmente conectadas é, naturalmente, 1, uma vez que a rede inteira perfaz um grupo. As suas outras características são igualmente simples: a distribuição de grau é tal que todos os elementos têm  $N - 1$  conexões e, finalmente, a distância entre quaisquer dois elementos é sempre de uma conexão. A particularidade mais interessante desta rede é que, topologicamente, todos os elementos são indistinguíveis.

Apesar das características aparentemente triviais destas redes e do fato de que não há muitas ocorrências reais delas, elas são bastante úteis para realizar cálculos analíticos gerais que seriam impossibilitados por outras topologias mais complexas, como ficará evidente no capítulo 3. Além disto, estas redes são boas aproximações para subconjuntos de alto agrupamento dentro de redes reais.

### 2.2.2 Rede Aleatória

Em termos matemáticos, uma rede pode ser representada como um grafo, que nada mais é do que um par de conjuntos no qual um dos conjuntos contém os  $N$  nós da rede e o outro conjunto contém todas as conexões entre eles. Tradicionalmente, grafos são representados graficamente de forma intuitiva através de um conjunto de pontos ligados por segmentos de reta.

Grafos aleatórios, nos quais as conexões são distribuídas de forma aleatória, já foram extensivamente estudados. Isto porque muitas redes com topologias complexas e de organização desconhecida parecem ser aleatórias em primeira aproximação, mas veremos que essa pode ser uma simplificação extrema e pouco útil. De qualquer forma, a teoria clássica de grafos aleatórios foi desenvolvida por Erdős e Rényi ([9, 10, 11]) nos anos de 1959, 1960 e 1961 e teve alguns resultados bastante significativos para a área de redes complexas. Aqui, cobriremos apenas alguns poucos tópicos associados à

teoria de grafos aleatórios que são mais relevantes para o nosso estudo de dinâmica de redes complexas.

**Estudo do Aparecimento de Propriedades** Erdős e Rényi estudaram probabilisticamente a presença de propriedades em grafos para os quais  $N \rightarrow \infty$ . O resultado mais surpreendente de Erdős e Rényi foi que muitas propriedades relevantes aparecem repentinamente, se variada a probabilidade de conexão  $p$ ; desta forma, em redes grandes e finitas, para cada propriedade  $Q$  destas deve existir uma probabilidade crítica  $p_c$  a partir da qual  $Q$  (ou não  $Q$ ) quase sempre está presente se  $p > p_c$ , e quase nunca está presente se  $p < p_c$ .

Em particular, uma propriedade interessante é a presença de subgrafos específicos, onde definimos subgrafos de um grafo  $G$  como sendo grafos de dimensão menor cujos pontos e conexões estão contidos em  $G$ . Os três tipos mais imediatos de subgrafos podem ser vistos na figura 2.1 e podem todos ser caracterizados simplesmente contando o número de nós e o número de conexões presentes em cada um deles. Por exemplo, é um (sub)grafo do tipo árvore qualquer figura que tenha  $N$  nós e  $N - 1$  conexões; para ciclos, há  $N$  nós e também  $N$  conexões e, finalmente, para subgrafos completos, há  $N$  nós e  $N(N - 1)/2$  conexões.

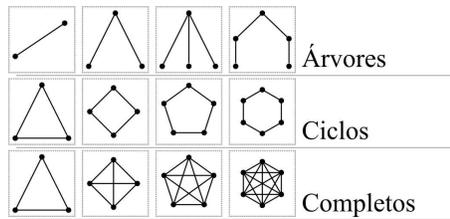


Figura 2.1: Tipos de Subgrafos

Nos estudos de grafos aleatórios, é interessante determinar a probabilidade crítica de conexão  $p_c$  a partir da qual quase todos os grafos gerados têm um subgrafo de algum tipo dado em sua estrutura. De fato, foi demonstrado (Bollobás, 1985,[12]) que esta probabilidade crítica pode ser calculada para qualquer subgrafo com, digamos,  $k$  nós e  $l$  conexões. Para tanto, vamos inicialmente escrever o número médio de subgrafos deste tipo (especificado por  $k$  e  $l$  apenas) em uma rede. Note que os  $k$  elementos podem ser escolhidos dos  $N$  nós da rede de  $C_N^k$  vezes diferentes, onde  $C_N^k = N! / ((N - k)!k!)$  é o número de combinações contendo  $k$  elementos selecionados dentro de  $N$  possíveis, e os  $l$  elos têm probabilidade  $p^l$  de serem formados. Além disso, os  $k$  nós podem ser permutados de  $k!/a$  maneiras diferentes, onde  $a$  representa o número de permutações isomorfas. Desta forma, o número médio de subgrafos  $E$  de tipo definido pelos números  $k$  e  $l$  pode ser dado como:

$$E = C_N^k \frac{k!}{a} p^l \simeq \frac{N^k p^l}{a}. \quad (2.3)$$

Nesta expressão, a aproximação feita considera subgrafos de dimensões pequenas, isto é,  $k$  e  $l$  tipicamente muito menores do que o número de nós da rede,  $N$ , e então  $C_N^k \approx N^k/k!$  é uma aproximação razoável. É claro que este é um valor médio, mas é provável que os valores observados não sejam muito diferentes deste. Para tentar chegar em um valor razoável para a probabilidade crítica, vamos supor que desejamos que haja um número apreciável  $c'$  de ocorrências de um determinado subgrafo definido por  $k$  e  $l$ . Então, pela dependência de 2.3, temos:

$$\frac{N^k p^l}{a} \sim c' \rightarrow p_c \sim c'' N^{-\frac{k}{l}}. \quad (2.4)$$

Nesta equação, vemos que a probabilidade crítica depende crucialmente dos valores de  $k$  e  $l$ , o que de fato parece razoável. Verifica-se que, de fato, há o aparecimento de subgrafos de crescente complexidade quando  $p$  cresce para redes apreciavelmente grandes, como podemos ver na figura 2.2. De imediato, nota-se que, inicialmente, a rede apresenta apenas árvores com  $k = 2$  e  $l = 1$ ; então, à medida em que são considerados valores de  $p$  maiores, vão aparecendo árvores de maior dimensão. Então, quando  $p \sim N^{-1}$ , aparecem todos os ciclos, e é apenas para  $p \sim N^{-\frac{2}{3}}$  que começam a surgir subgrafos completos com  $k > 3$ .

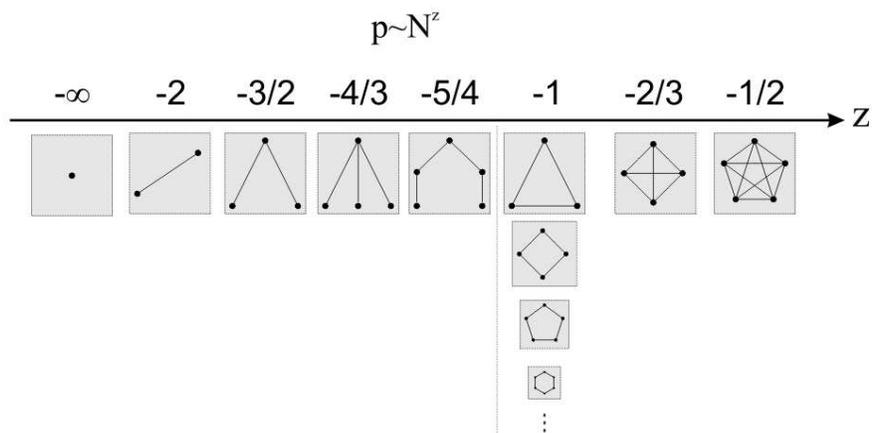


Figura 2.2: Aparecimento de subgrafos em grafo aleatório de acordo com  $p$ , onde  $z$  é o expoente da dependência em  $N$ . Veja que  $z = -k/l$ .

Há ainda uma transição muito marcante quando, se  $p \sim N^z$ , o expoente  $z$  se

aproxima de  $-1$ . Para  $z < -1$ , o grafo é composto apenas de árvores desconectadas, mas, quando  $z \approx -1$ , há uma mudança súbita na estrutura do grafo. O maior subgrafo totalmente conectado deixa de ser uma pequena árvore e passa a abranger quase a rede inteira - trata-se de um bloco conectado de cerca de  $N^{\frac{2}{3}}$  nós. Esta transição é bastante similar com a transição de fase associada ao fenômeno de percolação<sup>1</sup>, também já bastante estudado, que ocorre em redes geográficas com conectividade aleatória.

Para o nosso estudo de dinâmica de redes complexas, esta informação é particularmente útil ao gerar redes aleatórias. Basicamente, o fato de que um grafo só passa a ter elementos realmente conectados entre si de forma significativa se  $p > N^{-1}$  mostra que apenas as redes geradas com estes  $p$ 's são representativas de problemas que existem na realidade em topologias aleatórias. Desta forma, as redes analisadas aqui foram todas geradas com  $p \gg N^{-1}$ , uma suposição razoável.<sup>2</sup>

As redes aleatórias têm características especialmente marcantes. Primeiramente, o coeficiente de agrupamento destas redes é imediatamente dado por  $C = p$ , uma vez que esta é, na média, a fração de conexões que se estabelecerá na rede inteira e, portanto, também em quaisquer vizinhos de quaisquer elementos.

O caminho mínimo médio de redes aleatórias tem uma dependência logarítmica com a dimensão da rede e pode ser aproximado por:

$$l_{aleat} \sim \frac{\ln(N)}{\ln(\langle k \rangle)}. \quad (2.5)$$

Nesta relação,  $l_{aleat}$  é o próprio caminho mínimo médio,  $N$  é o número de elementos da rede e  $\langle k \rangle = p$  é o número médio de conexões apresentado pelos nós da rede. Note que a dependência logarítmica de 2.5 faz com que sempre haja um caminho mínimo razoavelmente pequeno, mesmo em redes aleatórias de grandes dimensões.

Finalmente, a distribuição de grau de redes aleatórias segue uma regra binomial bastante simples:

$$P(k_i = k) = C_N^k p^k (1 - p)^{N-1-k}. \quad (2.6)$$

Esta expressão pode ser aproximada por uma distribuição de Poisson no limite de  $N$  grande e  $p$  pequeno.

A equação 2.6 é característica marcante de redes aleatórias e é mais representativa desta topologia do que, digamos, o caminho mínimo médio dado em 2.5. Em análises empíricas de redes reais, conclui-se que há consideráveis diferenças entre a distribuição

<sup>1</sup>Trata-se da aparição de um grupo de elementos todos conectados que, no caso da percolação, abrangem a rede inteira de uma forma extensa.

<sup>2</sup>Foi feita uma tentativa de analisar redes aleatórias que não seguissem esta regra, mas os resultados indicam que a dinâmica de sistemas assim é totalmente imprevisível. A rede pode apresentar aspecto distinto a cada vez que é gerada novamente, tornando o problema desinteressante e pouco representativo, uma vez que não se chega em conclusão alguma olhando as dinâmicas.

de grau de redes aleatórias e os dados reais, mostrando que de fato há pouco que possa ser adequadamente representado por uma rede deste tipo.

### 2.2.3 Rede Reticulada

Uma outra categoria de redes de simplicidade memorável é a de redes reticuladas. Estas, bastante intuitivas, são aquelas em que os nós se dispõem regularmente e periodicamente no espaço, como em um cristal cúbico tridimensional, e há conexões entre os vizinhos mais próximos ou que estejam a uma distância inferior a  $D$ , um parâmetro característico da rede<sup>3</sup>. Podemos considerar, por simplicidade, redes unidimensionais ou redes bidimensionais também; a dimensão do espaço do reticulado é qualquer.

Nestas redes, o coeficiente de agrupamento sempre pode ser calculado numericamente pensando nos vizinhos com distância inferior a  $D$  de qualquer um dos elementos do reticulado. A periodicidade desta topologia garante que  $C \approx C_i$ , e portanto só é necessário calcular um dos  $C_i$ . Caso apenas os vizinhos mais próximos estejam conectados, o coeficiente de agrupamento é nulo, uma vez que os nós vizinhos a um certo nó não possuem conexões entre si; porém, se  $D$  for consideravelmente maior do que a distância entre os vizinhos mais próximos, o coeficiente de agrupamento tende a ser muito superior ao de redes aleatórias com número médio de conexões comparável.

De qualquer forma, a característica fundamental destas redes é o fato de serem extensas, o que afeta principalmente o caminho mínimo médio entre dois elementos quaisquer da rede. Este passa a depender, além de  $N$ , do número de dimensões  $\chi$  do reticulado no qual os nós estão dispostos:

$$l_{retic} \sim N^{\frac{1}{\chi}}. \quad (2.7)$$

Assim, em um reticulado tridimensional, o caminho mínimo médio deverá depender de  $N^{\frac{1}{3}}$ . Este resultado é razoável se pensarmos que  $N$  é grandeza que mede o volume da rede toda, uma vez que então o caminho mínimo médio deve depender linearmente das distâncias lineares típicas, ou, digamos, da aresta de um cubo  $\chi$ -dimensional. Em comparação com outras redes, as redes reticuladas têm caminhos mínimos médios bastante grandes.

Finalmente, a distribuição de grau destas redes é simples para redes com condições de contorno periódicas: devido à regra de conexão, todos os elementos da rede têm o mesmo número de conexões, e portanto  $P(k) = \delta(k - k_0)$ , onde  $k_0$  é o número de nós que estão a uma distância inferior a  $D$  de um dado elemento da rede. Para redes

---

<sup>3</sup>Claro que, se  $D$  for da ordem do tamanho da rede toda, teremos uma rede totalmente conectada novamente. Para evitar isto, tomamos, em geral,  $D \ll N^\delta$ , onde  $\delta$  é o número de dimensões do espaço em que está o reticulado.

sem condições de contorno periódicas, há efeitos de borda que reduzem os  $k_i$  dos nós próximos das extremidades da rede, e a distribuição de grau torna-se pouco trivial. Nestes casos, é interessante calcular pelo menos  $\langle k \rangle$  para obter-se uma medida da influência do efeito de borda.

### 2.2.4 Rede Mundo Pequeno

Nas duas redes não-triviais que vimos até agora, temos algumas características marcantes. As redes aleatórias apresentam coeficiente de agrupamento baixo em redes típicas com  $p$  pequenos; além disso, exibem caminho mínimo médio bastante curto. Em contraste, as redes reticuladas têm tanto coeficiente de agrupamento quanto caminho mínimo médio bastante grandes.

Em um esforço para representar sistemas nos quais há agrupamento considerável, mas os caminhos mínimos são tipicamente curtos, foi desenvolvida uma categoria nova de redes chamada de Mundo Pequeno. Estas redes são definidas pelo seu modelo gerador, desenvolvido por Watts e Strogatz (1998, [13]), que é o seguinte:

1. Considere uma rede reticulada em uma dimensão com condições periódicas de contorno, i.e. uma rede em anel com  $N$  elementos. Estes nós estão conectados com os seus  $d$  vizinhos mais próximos ( $d/2$  de cada lado). Para ter uma rede reticulada de agrupamento considerável, mas ainda extensa, tomamos  $N \gg d \gg \ln(N) \gg 1$ .
2. Realoque agora cada uma das conexões já existentes com probabilidade  $p$ . Se realocada, uma dada conexão passa a ligar um elemento da rede com qualquer outro, independente da distância geográfica. Isto introduzirá  $pN(d/2)$  conexões de longo alcance cujo objetivo é basicamente reduzir o caminho mínimo médio, como veremos.

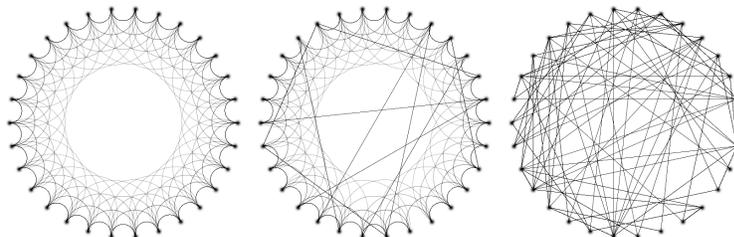


Figura 2.3: Exemplo Uma rede reticulada com  $N = 40$  e  $d = 8$  (esquerda) na qual foi aplicada o algoritmo de Watts-Strogatz com  $p = 0.1$  (meio) e com  $p = 1.0$  (direita). Note que este último é equivalente a uma rede aleatória.

Seguindo estas regras, uma rede gerada com  $p = 0$  seria uma rede reticulada unidimensional, e uma com  $p = 1$  seria uma rede aleatória. O processo gerador está indicado

na figura 2.3. De cálculos numéricos com redes geradas assim, nota-se que, à medida em que há mais e mais realocações de conexões existentes, o caminho mínimo médio cai vertiginosamente (veja figura 2.4) sem que haja muita alteração no coeficiente de agrupamento, o que seria de se esperar. Isso ocorre porque a topologia geral da rede ainda é reticulada e portanto admite grande agrupamento, mas há atalhos que percorrem grandes distâncias e que afetam muito os caminhos possíveis entre quaisquer dois nós da rede.

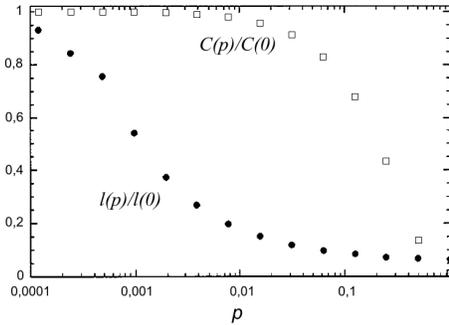


Figura 2.4: O comportamento das grandezas caminho mínimo médio  $l$  e coeficiente de agrupamento  $C$  como funções da probabilidade de realocação de conexões  $p$  no modelo de Watts-Strogatz. (figura proveniente diretamente do artigo [13])

Há como discutir de forma mais extensa o comportamento de  $l$  e  $C$  como funções de  $p$ , mas não o faremos aqui. Para os nossos interesses, a figura 2.4 já contém todos os dados desejados. Notamos apenas que a distribuição de conectividade de uma rede deste tipo se comporta de uma forma razoavelmente intuitiva: quando  $p = 0$ , a distribuição é uma função  $P(k) = \delta(k - d)$ , uma vez que todos têm um número  $d$  de vizinhos; então, à medida em que  $p$  cresce, vão se adicionando outros valores de  $k \sim d \pm \varepsilon$  de uma forma exponencial, fazendo com que, finalmente, quando  $p = 1$ , recuperemos a distribuição binomial esperada para uma rede aleatória, centrada justamente em  $k = d$ .

### 2.2.5 Rede Estrela

Uma rede recorrente em Biologia é a rede estrela, na qual alguns poucos nós ocupam uma posição central e privilegiada e há muitos nós periféricos que copiam os estados do centro. O modelo que adotamos para estas redes aqui é de redes com  $N$  elementos<sup>4</sup>, dos quais  $m_0$  fazem parte de um núcleo totalmente conectado e  $N - m_0$  são elementos periféricos que estão conectados apenas a todos os nós do núcleo, como na figura 2.5.

É aparente que redes criadas com este método têm coeficiente de agrupamento

<sup>4</sup>Posteriormente, os  $N$  elementos aqui citados vão se mapear aos  $N + N_0 + N_1$  do problema com nós com estado interno fixo. Para mais detalhes, consulte o capítulo 3.

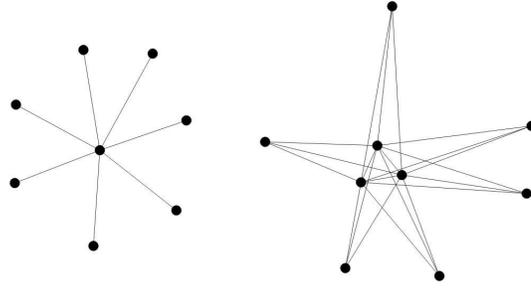


Figura 2.5: Exemplos de redes estrela com  $N = 8$  e  $m_0 = 1$  (esquerda) e  $m_0 = 3$  (direita).

calculável. Se  $m_0 > 1$ , os elementos centrais têm  $m_0 - 1$  vizinhos com todas as  $(m_0 - 1)(m_0 - 2)/2$  conexões possíveis entre si, e  $N - m_0$  vizinhos periféricos sem nenhuma conexão entre si; logo, das  $(N - 1)(N - 2)/2$  conexões possíveis para os elementos centrais, temos apenas as  $(m_0 - 1)(m_0 - 2)/2$ . Os elementos periféricos têm  $m_0$  vizinhos conectados entre si, o que resulta em um coeficiente de agrupamento igual a 1. A média dos coeficientes de agrupamento pode ser calculada prontamente:

$$C = \frac{m_0}{N} C_{\text{nós centrais}} + \frac{(N - m_0)}{N} C_{\text{nós periféricos}}$$

$$C = \left(\frac{m_0}{N}\right) \left[\frac{(m_0 - 1)(m_0 - 2)}{(N - 1)(N - 2)}\right] + \left(\frac{N - m_0}{N}\right) \quad (2.8)$$

No caso em que a rede tem  $m_0 = 1$ , o fator de agrupamento 2.2 não deve ser utilizado para o cálculo. Neste caso, deve ser considerado que  $C = 0$ , pois nenhum dos vizinhos de qualquer nó admite qualquer conexão entre si.

Quanto ao caminho mínimo médio, este pode ser calculado analiticamente. Para dois elementos periféricos, o caminho é de duas conexões; para quaisquer outros elementos, o caminho mínimo é de uma conexão apenas. Os elementos periféricos têm  $(N - m_0)(N - m_0 - 1)/2$  pares possíveis, e a rede inteira admite  $N(N - 1)/2$  pares para medida de caminho mínimo. A média de caminho mínimo então deve ser simplesmente:

$$l_{estrela} = 1 + \frac{(N - m_0)(N - m_0 - 1)}{N(N - 1)}. \quad (2.9)$$

Esta expressão tem comportamento razoável: se  $m_0 = 1$  e  $N = 8$ , o caminho mínimo médio resulta em  $l_{estrela} = 15/8 = 1,88$ ; se então consideramos um núcleo maior, de  $m_0 = 3$ , temos um  $l_{estrela}$  menor, igual a  $19/14 = 1,36$ . De qualquer forma, a equação 2.9 nos mostra que  $l_{estrela} < 2$ .

A distribuição de grau destas redes também é simples de calcular, uma vez que todos os elementos do núcleo têm  $N - 1$  conexões com os outros elementos e os nós

periféricos têm  $m_0$  conexões, uma com cada nó do centro da estrela. Temos então:

$$P(k) = \frac{N - m_0}{N} \delta(k - m_0) + \frac{m_0}{N} \delta(k - (N - 1)). \quad (2.10)$$

### 2.2.6 Rede Livre de Escala

Recentemente, avanços em computação permitiram que redes complexas fossem analisadas de forma sem precedentes. Nestes estudos, talvez a mais importante descoberta foi que a distribuição de grau de muitas redes reais de larga escala segue, de fato, uma regra exponencial do tipo:

$$P(k) \sim k^{-\gamma}. \quad (2.11)$$

com  $\gamma$  sendo um valor real positivo que foi medido para várias redes reais. Redes que seguem regras como 2.11 são chamadas de redes livres de escala. O interesse científico em redes deste tipo adquiriu muita força depois de um estudo sobre a Internet, considerando como nós da rede cada um dos *sites* e conexões sendo os *hyperlinks*. Neste estudo, (Broder et al, 2000 [14]) foi verificado, com o uso de programas automatizados, que esta rede segue bastante bem uma regra exponencial como 2.11 ao longo de cinco ordens de grandeza de  $k$ .

Foram então procuradas explicações para a função  $P(k)$  admitir este comportamento. Dois ingredientes são cruciais para redes livre de escala: *crescimento*, pois as redes reais observadas que seguem 2.11 todas apresentam algum mecanismo de adicionar nós à rede, e *conexão preferencial*, o que quer dizer que novos nós da rede têm uma tendência maior a associar-se àqueles elementos que já apresentam grande número de conexões com outros elementos.

Inspirados nestes dois ingredientes, Albert-Lászlo Barabási e Réka Albert ([15]) propuseram um algoritmo para criar uma rede livre de escala que reproduz a distribuição de grau tão característica. O algoritmo é bastante simples:

1. *Crescimento*: É criada uma rede com  $m_0$  elementos totalmente conectados<sup>5</sup>. Então, adicionamos nós novos individualmente, conectando estes a  $m$  (com  $m < m_0$ ) nós já existentes.
2. *Conexão Preferencial*: Ao escolher as  $m$  conexões de cada elemento novo da rede, vamos assumir que a probabilidade  $\Pi$  de que um novo nó se conecte com o  $i$ -ésimo nó já existente da rede depende do grau  $k_i$  deste nó de forma tal que:

---

<sup>5</sup>Não é rigorosamente necessário que estes nós iniciais estejam totalmente conectados: a rede apresentará aspecto livre de escala de qualquer forma.

$$\Pi(k_i) = \frac{k_i}{\sum k_i}. \quad (2.12)$$

Desta forma, um nó sendo adicionado tem uma probabilidade grande de se conectar com um elemento que tenha  $k_i$  apreciavelmente grande. Simulações numéricas deste algoritmo de crescimento de rede mostram que redes produzidas desta forma seguem 2.11 com  $\gamma = 3$  fixo e independente de  $m$  e  $m_0$ .

Para as outras propriedades de redes geradas desta forma, como coeficiente de agrupamento e caminho mínimo médio, não há previsões analíticas. Neste momento, há apenas alguns trabalhos numéricos que procuram aproximar estas propriedades de alguma forma.

Ao comparar o modelo de Barabási-Albert com redes reais, para as quais em geral  $2 < \gamma < 3$ , verifica-se que este algoritmo não reproduz corretamente os  $\gamma$ 's. Várias correções foram propostas para reduzir este expoente, mas nenhum trabalho até o momento foi realmente completo e decisivo em relação a este assunto. As principais correções propostas envolvem formas diferentes da função de conexão preferencial 2.12. Neste trabalho, consideraremos apenas redes geradas com o algoritmo clássico de Barabási-Albert, e portanto não discorreremos sobre as muitas outras possibilidades e variações deste modelo.

# Capítulo 3

## Dinâmicas

### 3.1 Introdução

Tendo definido algumas topologias de redes que são do nosso interesse, vamos agora introduzir um tipo de dinâmica entre os elementos de uma rede que seja significativa para a descrição de alguns fenômenos reais. Consideremos inicialmente uma rede genérica com  $N + N_0 + N_1$  nodos. A cada nodo  $i$ , com  $0 \leq i \leq N + N_0 + N_1 - 1$ , associaremos um estado interno  $\sigma_i$  que, para  $N$  nós da rede, pode assumir os valores 0 ou 1, para  $N_0$  elementos da rede está fixo em  $\sigma_i = 0$  e para  $N_1$  elementos da rede está fixo em  $\sigma_i = 1$ . Note que a necessidade de índices  $i$  é relevante e ressalta o fato de que os nós da rede são todos distinguíveis a partir de seu posicionamento na topologia da rede. Escolhemos desde já os índices  $i$  de forma tal que os nós com estado interno livre estão rotulados com  $0 \leq i \leq N - 1$ , os nós com estado interno fixo em 1 têm índices  $N \leq i \leq N + N_1 - 1$  e os nós com estado interno fixo em 0 têm índices  $N + N_1 \leq i \leq N + N_0 + N_1 - 1$ .

A cada passo de tempo o estado de um dos  $N$  nós de estado interno variável é atualizado de acordo com a seguinte regra: ou o estado não muda, o que ocorre com probabilidade  $p$ , ou, com probabilidade  $(1 - p)$ , o nó assume o estado de um dos vizinhos aos quais está conectado. Esse processo descreve, por exemplo, o comportamento de um grupo de pessoas tentando decidir se vota no candidato A ou no candidato B em uma eleição, considerando que há algumas pessoas que simplesmente não mudarão de opinião. No caso de  $N_0 = N_1 = 0$  e  $p = 0$ , esse modelo é conhecido como modelo do eleitor. A consideração de que uma parte da rede tem estado interno fixo é uma de nossas principais contribuições para um modelo abstrato que, se não por isso, já foi estudado anteriormente para algumas das topologias que abordaremos. Esta consideração pode ser representativa de muitas situações, incluindo influências perturbativas externas à rede ou uma rede interagindo através de um vínculo limitado, mas

de posicionamento aleatório dentro da topologia da rede, com outra rede de dimensões muito superiores, cuja dinâmica ocorra muito mais lentamente. Este modelo também pode ser de especial interesse para a representação de taxas de mutação na descrição de genética de populações sexuadas, se considerarmos que existe a possibilidade de tomar  $N_0$  e  $N_1$  não inteiros.

A rede como um todo possui  $2^N$  estados distintos que podem ser rotulados por uma cadeia de zeros e uns descrevendo o estado de cada nodo em seqüência:  $(\sigma_N \sigma_{N-1} \cdots \sigma_1 \sigma_0)$ . Alternativamente, os estados podem ser mapeados de forma mais compacta por inteiros via  $x = \sum_{j=0}^{N-1} 2^j \sigma_j$ , com  $x$  variando entre 0 e  $2^N - 1$ . Desta forma, a cada  $x$  associa-se inequivocamente apenas um estado da rede como um todo, de forma inteiramente análoga à especificação de um número inteiro positivo no sistema binário.

A resolução de um problema deste tipo consiste em encontrar a probabilidade  $P_t(x; x_0)$  de que, dado um estado inicial  $x_0$ , a rede esteja em um estado  $x$  depois de  $t$  passos da dinâmica. Supomos que a rede evolui de forma assíncrona, onde um único nodo é selecionado de forma aleatória para ser atualizado a cada passo de tempo. Para encontrar como essa probabilidade varia com o tempo, definimos um estado auxiliar  $\tilde{x}_i$  que é igual a  $x$  em todos os nodos exceto no nodo  $i$ , que tem o estado interno oposto. A probabilidade de encontrar a rede no estado  $x$  no instante  $t + 1$  pode então ser escrita como uma soma de três termos: (a) a probabilidade de que a rede estava no estado  $x$  no tempo  $t$  e que o nodo selecionado não mudou de estado; (b) a probabilidade de que a rede estava no estado  $x$  no tempo  $t$  e que o nodo selecionado copiou o estado de um vizinho idêntico (e portanto seu estado não mudou); (c) a probabilidade de que a rede estava no estado  $\tilde{x}_i$  no tempo  $t$  e que o nodo  $i$  foi selecionado e seu estado  $\tilde{\sigma}_i = 1 - \sigma_i$  mudou para  $\sigma_i$ :

$$P_{t+1}(x) = pP_t(x) + \frac{(1-p)}{N} \sum_i \{P_t(x) P[\sigma_i \rightarrow \sigma_i] + P_t(\tilde{x}_i) P[\tilde{\sigma}_i \rightarrow \sigma_i]\}. \quad (3.1)$$

Veja que a somatória em  $i$  designa todas as atualizações possíveis, e a divisão por  $N$  remonta na probabilidade de escolher um dado elemento  $i$ . Neste ponto, torna-se necessário conhecer algo mais a respeito da topologia da rede tratada. Definimos aqui a matriz de conectividade  $\zeta$ , uma matriz simétrica  $(N + N_0 + N_1) \times (N + N_0 + N_1)$  cujos elementos  $\zeta_{ij}$  são 1 se os nodos  $i$  e  $j$  estiverem conectados e 0 caso contrário. A matriz de conectividade tem seus elementos diagonais nulos por definição.

Com o auxílio da matriz de conectividade, podemos reescrever as probabilidades acima de forma mais prática. Por definição, a probabilidade  $P[\sigma_i \rightarrow \sigma_i]$  é simplesmente a razão entre o número de vizinhos do nodo  $i$  no estado  $\sigma_i$  e o número total de vizinhos

deste nodo,  $k_i$ :

$$k_i = \sum_{j=0}^{N+N_0+N_1-1} \zeta_{ij}. \quad (3.2)$$

Note que a idéia de  $k_i$  já foi utilizada na caracterização de redes para a definição de distribuição de grau. Podemos agora escrever  $P[\sigma_i \rightarrow \sigma_i]$  como sendo a razão entre o número de vizinhos de  $i$  com o mesmo estado interno de  $i$  e o número de vizinhos conectados a  $i$ ,  $k_i$ :

$$P[\sigma_i \rightarrow \sigma_i] = \frac{1}{k_i} \sum_{j=0}^{N+N_0+N_1-1} \zeta_{ij} |1 - \sigma_i - \sigma_j|. \quad (3.3)$$

Nesta última expressão, note que cada par de nodos  $i$  e  $j$  contribui apenas se houver conexão entre eles e se os seus estados forem iguais, como seria mesmo de se esperar. Além disso, de forma bastante prática, a expressão 3.3 também pode ser usada para a probabilidade  $P[\tilde{\sigma}_i \rightarrow \sigma_i]$ , porque então  $\tilde{\sigma}_i = 1 - \sigma_i$  e  $\tilde{\sigma}_j = \sigma_j$  para  $i \neq j$ . Neste caso, só haverá contribuição se os dois sítios  $i$  e  $j$  estiverem em estados opostos. Considerando portanto as equações 3.1 e 3.3, podemos reescrever a equação probabilística recursiva:

$$P_{t+1}(x) = pP_t(x) + \frac{(1-p)}{N} \sum_{i=0}^{N-1} \frac{1}{k_i} \sum_{j=0}^{N+N_0+N_1-1} \{\zeta_{ij} |1 - \sigma_i - \sigma_j| [P_t(x) + P_t(\tilde{x}_i)]\} \quad (3.4)$$

Esta é a equação mestra da dinâmica de redes. Ela é de difícil solução para topologias arbitrárias, mas alguns casos podem eventualmente ser tratados analiticamente, como o caso de uma rede totalmente conectada, que veremos a seguir.

## 3.2 Dinâmica em Rede Totalmente Conectada

### 3.2.1 Introdução

Um caso que apresenta uma matriz de conectividade simples é o caso de uma rede na qual cada nodo está conectado a todos os outros da rede, ou seja,  $\zeta_{ij} = 1 - \delta_{ij}$ , fazendo uso de uma delta de Kronecker. Neste caso, ocorrerão muitas simplificações com a equação mestra da dinâmica 3.4. A consequência mais evidente é que  $k_i = N + N_0 + N_1 - 1$  (usando 3.2).

Além disso, temos agora a vantagem da indistinguibilidade dos nós, o que permite que um dado estado da rede seja totalmente caracterizado através da contagem do número de nodos de estado interno livre com determinado estado interno - digamos,

o estado 1. Desta forma, podemos descrever inequivocamente o estado da rede toda em um determinado instante de tempo com o número  $n(x)$ :<sup>1</sup>

$$n(x) = \sum_{i=0}^{N-1} \sigma_i. \quad (3.5)$$

Podemos relacionar a probabilidade de encontrar a rede no estado  $n(x)$  com a probabilidade de encontrá-la no estado  $x$  através do coeficiente binomial correspondente ao número total de permutações de estados internos que mantêm fixo  $n(x)$ :

$$P(n(x)) = P(x) \binom{N}{n} = P(x) \frac{N!}{n!(N-n)!}. \quad (3.6)$$

Esta expressão assume que todos os estados de mesmo  $n$  são equiprováveis e equivalentes. Note que 3.5 e 3.6 podem ser usadas para reescrever a equação mestra 3.4, mas é necessário realizar uma análise caso-a-caso para evitar as expressões de valor absoluto. Após um pouco de manipulação algébrica, tem-se:

$$P_{t+1}(n) = \xi_0(n) P_t(n) + \xi_+(n) P_t(n-1) + \xi_-(n) P_t(n+1) \quad (3.7)$$

$$\begin{cases} \xi_0 = p + \frac{1-p}{N(N+N_0+N_1-1)} [n(n-1+N_1) + (N-n)(N-n-1+N_0)] \\ \xi_+ = \frac{1-p}{N(N+N_0+N_1-1)} (N-n+1)(n-1+N_1) \\ \xi_- = \frac{1-p}{N(N+N_0+N_1-1)} (N-n-1+N_0)(n+1) \end{cases}. \quad (3.8)$$

Podemos pensar nas probabilidades de encontrar a rede com  $n$  nós no estado  $\sigma = 1$ ,  $P_t(n)$ , como sendo as  $N+1$  componentes de um vetor no espaço  $(N+1)$ -dimensional, uma vez que  $0 \leq n \leq N$ :

$$\vec{P}_t = \begin{pmatrix} P_t(0) \\ P_t(1) \\ \vdots \\ P_t(N-1) \\ P_t(N) \end{pmatrix}. \quad (3.9)$$

Desta forma, pode-se escrever a equação recursiva 3.7 na forma matricial. Definimos

---

<sup>1</sup>Note que indexamos os elementos livres da rede com  $1 \leq i \leq N$ , como pode ser visto na página 16. Além disso, poderíamos, naturalmente, ter escolhido  $n(x) = N_1 + \sum_{i=1}^N \sigma_i$ , o que representaria o número *total* de nós da rede com estado interno 1, *incluindo* os  $N_1$  elementos da rede com estado interno fixo. Optamos por definir 3.5 porque desta forma é possível realizar comparações com teorias já estabelecidas mais facilmente.

aqui a matriz tridiagonal de evolução temporal,  $U$ , e escrevemos:

$$\vec{P}_{t+1} = U\vec{P}_t. \quad (3.10)$$

$$U = \begin{pmatrix} \xi_0(0) & \xi_-(0) & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \xi_+(1) & \xi_0(1) & \xi_-(1) & \ddots & & \vdots \\ 0 & \xi_+(2) & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \xi_-(N-2) & 0 \\ \vdots & & \ddots & \xi_+(N-1) & \xi_0(N-1) & \xi_-(N-1) \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & \xi_+(N) & \xi_0(N) \end{pmatrix}. \quad (3.11)$$

Portanto, o problema de avaliar a dinâmica da rede está todo contido nas expressões 3.10 e 3.11. É nosso objetivo conseguir prever o comportamento do sistema probabilisticamente, ou seja, encontrar o vetor  $\vec{P}_t$  para qualquer  $t$ , dado um certo vetor probabilidade inicial  $\vec{P}_0$ . Note que  $t$  será chamado daqui em diante de "tempo", sendo que na realidade é um número inteiro correspondente ao número de passos de dinâmica realizados.

Na seqüência, será realizada uma análise numérica do problema, o que permitirá uma caracterização imediata do comportamento da rede. Após esta análise numérica, passaremos para uma resolução analítica do problema de redes totalmente conectadas conforme definido até este ponto.

### 3.2.2 Abordagem Numérica

Embora sofisticada do ponto de vista analítico, a dinâmica geral de uma rede totalmente conectada deste tipo pode ser prontamente simulada com métodos numéricos. Inicialmente, resolveremos numericamente a evolução temporal de uma rede totalmente conectada, considerando apenas a dinâmica mais básica e obtendo assim um resultado simulado. Para calcular as probabilidades desejadas, por se tratar de processo aleatório, vamos realizar várias repetições da simulação e depois analisar os resultados estatisticamente.

De forma mais rigorosa, o cálculo deverá ocorrer da seguinte forma: digamos que sejam efetuadas  $N_{sims}$  simulações. Então coletaremos como dado relevante o número de vezes em que todo estado  $n$  foi ocupado em certo tempo  $t$  e chamaremos este número de freqüência de  $n$  no tempo  $t$ , denotando-o por  $f(n;t)$ . Portanto, serão tomados vetores de freqüência que seguem a forma 3.12 :

$$\vec{f}_t = \begin{pmatrix} f_t(0;t) \\ f_t(1;t) \\ \vdots \\ f_t(N-1;t) \\ f_t(N;t) \end{pmatrix}. \quad (3.12)$$

Em nossas simulações, notamos que são necessários muitos passos da dinâmica para obter alteração significativa do estado da rede. Por isso, não seria prático armazenar um vetor de frequências como 3.12 a cada passo da dinâmica e optamos por espaçar os  $\vec{f}_t$  regularmente no tempo com intervalo  $\Delta t$  que corresponde a um número inteiro de passos a ser realizados entre amostras de  $\vec{f}_t$  e serão tomados até um certo limite de tempo  $t_f = \Delta t \cdot n_f$ , onde  $t_f$  é o tempo final de interesse para nós e  $n_f$  é o número de múltiplos de  $\Delta t$  correspondente a  $t_f$ . Desta forma, serão tomados  $n_f + 1$  vetores de frequência em seqüência:  $\vec{f}_0, \vec{f}_{\Delta t}, \vec{f}_{2\Delta t}, \dots, \vec{f}_{t_f}$ .

Já que estes são vetores de frequências, o cálculo dos vetores de probabilidade é simplesmente:

$$\vec{P}_t = \frac{\vec{f}_t}{N_{sims}} = \begin{pmatrix} \frac{f_t(0;t)}{N_{sims}} \\ \frac{f_t(1;t)}{N_{sims}} \\ \vdots \\ \frac{f_t(N-1;t)}{N_{sims}} \\ \frac{f_t(N;t)}{N_{sims}} \end{pmatrix}. \quad (3.13)$$

Se tomarmos as duas grandezas  $\Delta t$  e  $t_f$  apropriadas para cada caso, teremos então uma seqüência de  $n_f+1$  vetores de probabilidade espaçados de forma tal que a dinâmica possa ser caracterizada. Consideraremos então como parâmetros do nosso problema os valores da tabela 3.1.

Parâmetro	Descrição
$N$	Número de elementos livres da Rede
$N_0$	Número de elementos da rede com estado interno fixo em 0
$N_1$	Número de elementos da rede com estado interno fixo em 1
$n_0$	Número de elementos livres da rede com estado interno 1 no início da simulação
$p$	Probabilidade de não ocorrer nada em um passo da dinâmica
$N_{sims}$	Número de simulações a efetuar, cada uma com os dois parâmetros abaixo
$\Delta t$	Espaçamento de tempo entre amostras do vetor de probabilidade
$n_f$	Múltiplo de $\Delta t$ final; designa conclusão de uma simulação

Tabela 3.1: Parâmetros de Simulação.

Ressaltamos aqui que estes valores serão constantes usadas para gerar as simulações. Vamos investigar o comportamento de uma quantidade representativa de casos com diferentes parâmetros. As simulações serão efetuadas com um algoritmo muito simples que representa a dinâmica adequadamente.

**Algoritmo** Para efetuar a dinâmica, definimos um vetor de estados  $\sigma_i$ , com  $1 \leq i \leq N + N_0 + N_1$ , contendo os estados 0 ou 1 de cada um dos elementos numerados pelo índice  $i$ . A dinâmica então deve realizar uma cópia de estado, selecionando um dos índices  $i$  dentre os índices dos elementos de estado interno variável para atualizar e outro índice  $j$  de algum vizinho conectado, necessariamente distinto de  $i$ , para copiar. Enquanto a seleção do índice para atualizar é aleatória e simples, devemos escolher o índice para copiar dentre uma lista de índices que inclui todos os vizinhos conectados ao  $i$ -ésimo nó. Para cada elemento  $i$  possível, essa lista de índices é distinta; para o nosso programa, armazenaremos cada uma destas listas em uma matriz de vizinhos  $v(i, j)$ , onde cada valor de  $v$  é o índice do  $j$ -ésimo vizinho do elemento indexado  $i$ . Note aqui que nos vizinhos de  $i$  estão incluídos todos os  $N_0$  e  $N_1$  elementos com estado interno fixo, ou seja,  $1 \leq j \leq N + N_0 + N_1 - 1$ . Além disso, armazenaremos também os valores  $k_i$  de números de conexões que cada elemento possui com os outros da rede.

Para evidenciar estas idéias, citaremos aqui um exemplo de matriz de vizinhos e valores de  $k_i$  para uma rede na qual  $N + N_0 + N_1 = 5$  e as conexões são conforme a figura 3.1:

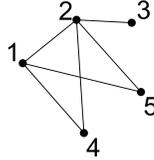


Figura 3.1: Exemplo de rede utilizado para matriz de vizinhos.

$$v = \begin{pmatrix} 2 & 4 & 5 & 0 \\ 1 & 3 & 4 & 5 \\ 2 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.14)$$

$$\begin{aligned} k_1 &= 3, & k_2 &= 4, & k_3 &= 1, \\ k_4 &= 2, & k_5 &= 2. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Veja que as linhas da matriz  $v(i, j)$  de 3.14 correspondem ao índice  $i$  do elemento, e contêm os índices dos nós conectados ao  $i$ -ésimo elemento. Por exemplo, o nó de

índice 2 está conectado aos nós 1, 3, 4 e 5; assim, a segunda linha da matriz  $v$  contém os elementos (1, 3, 4, 5) e seu grau é  $k_2 = 4$ .

Em uma rede totalmente conectada, a matriz de vizinhança é totalmente preenchida, mas continua não perfeitamente quadrada porque nenhum elemento pode ser vizinho de si mesmo. Além disso, em redes totalmente conectadas, o grau de todos os elementos é  $k_i = N + N_0 + N_1 - 1$ , fixo. As definições de 3.14 e 3.15 vão auxiliar tremendamente mais tarde, pois serão eventualmente necessárias no estudo de topologias mais complexas do que a totalmente conectada.

Além das variáveis  $v(i, j)$  e  $k_i$ , faz-se necessário o uso de algumas outras variáveis especificadas na tabela 3.2.

Variável	Descrição
$\sigma_i$	Estado interno do $i$ -ésimo elemento numerado da rede. Pode ser 0 ou 1, com $0 \leq i \leq N + N_0 + N_1 - 1$ .
$v(i, j)$	Índice correspondente ao $j$ -ésimo elemento numerado vizinho ( $0 \leq j \leq N + N_0 + N_1 - 2$ ) do $i$ -ésimo elemento (com $0 \leq i \leq N - 1$ )
$i_{at}$	Índice do elemento numerado a atualizar, usado como valor temporário a cada passo da dinâmica
$i_{cop}$	Índice do elemento numerado a copiar, usado como valor temporário a cada passo da dinâmica
$k$	Múltiplo de $\Delta t$ que indica quanto tempo passou, em múltiplos de $\Delta t$
$f(n; t)$	Tabela de frequências para cada estado $n$ em cada tempo $t$ ; tamanho $(N + 1) \times (n_f + 1)$

Tabela 3.2: Variáveis de Simulação.

Assim, é nossa intenção executar  $N_{sim}$  simulações, cada uma com  $\Delta t \cdot t_f$  passos da dinâmica, com cada passo modificando apenas o número  $n$ . O programa deve também registrar o número  $n$  somando uma ocorrência em  $f(n; t)$  sempre que  $t = k(\Delta t)$ , com  $k = 0, 1, 2, \dots, t_f$ .

O algoritmo utilizado para realizar esse procedimento não é muito extenso. Suponhamos que as variáveis tenham sido declaradas como mencionado até agora. Então, uma vez gerada a topologia e determinados os dados  $v(i, j)$ , executar uma simulação inteira é feito da seguinte forma:

1. Iniciando a simulação. Fazemos  $n = n_0$ .
2. Contagem inicial: adiciona-se 1 ao valor de  $f(n_0; 0)$ .
3. Coloque  $k = 0$ .
4. Inicialize  $\sigma_i$  com  $\sigma_i = 1$  para  $1 \leq i \leq n_0$ ,  $\sigma_i = 0$  para  $n_0 + 1 \leq i \leq N$ ,  $\sigma_i = 1$  para  $N + 1 \leq i \leq N + N_1$  e, finalmente,  $\sigma_i = 0$  para  $N + N_1 + 1 \leq i \leq N + N_0 + N_1$ , de acordo com o indexamento proposto na página 16.

5. Repetir as seguintes operações  $n_f$  vezes:
  - (a) Adicione 1 a  $k$ .
  - (b) Repetir as seguintes operações  $\Delta t$  vezes:
    - i. Sorteie valor  $z$  entre 0 e 1. Se  $z > p$ , então pule para o passo (c). Se ocorrer que  $z < p$ , continue.
    - ii. Sorteie  $i_{at}$ , índice do nó a ser atualizado, inteiro entre 1 e  $N$ , inclusive extremos.
    - iii. Sorteie  $i_{cop}$ , índice do nó a ser copiado pelo  $i_{at}$ -ésimo nó, inteiro entre 1 e  $k_{i_{at}}$ , inclusive extremos.
    - iv. Faça com que  $\sigma_{i_{at}} = \sigma_{v(i_{at}, i_{cop})}$ .
  - (c) Efetue somatória  $\sum \sigma_i$  para encontrar  $n$ .
  - (d) Adicione 1 ao valor de  $f(n; k)$ .

Neste algoritmo, veja que os passos contidos em b representam adequadamente um passo da dinâmica. Além disso, dividimos a dinâmica em  $n_f$  blocos, cada um com  $\Delta t$  passos da dinâmica. Os passos descritos aqui devem ser naturalmente repetidos  $N_{sim}$  vezes para que seja possível efetuar uma análise estatística com os valores de  $f(n; t)$ , que serão, por praticidade, salvados em disco.

A principal ocupação de memória é feita pela matriz de variáveis  $v(i, j)$ , que é uma matriz de números inteiros e que deve inevitavelmente estar definida se desejarmos efetuar a dinâmica sem condicionais<sup>2</sup>. Ela depende apenas da topologia da rede e deve ser pré-estabelecida antes das simulações ocorrerem.

**Implementação** Assim que foi implementado o algoritmo básico descrito na seção anterior, notamos um problema fundamental. A convergência das simulações é bastante lenta, e a análise estatística requer um grande número delas; torna-se então necessário obter a melhor performance possível.

---

<sup>2</sup>Foi estudada a opção de realizar a dinâmica sem utilizar a matriz de vizinhos, o que requer menos memória, mas mais expressões condicionais, que são sempre comparativamente lentas. Esta opção é mais rápida apenas em máquinas com acesso à memória central lento, nas quais a utilização menor de memória faz com que o programa fique todo contido no cache do processador, que é acessado muito mais rapidamente. Então, apenas nestes casos, apesar das condicionais, o programa fica mais rápido. Nestas máquinas, o passo iv é substituído pela seqüência:

1. Se  $i_{at} > n$  e  $i_{cop} \leq n$  então adicione 1 a  $n$ .
2. Se  $i_{at} \leq n$  e  $i_{cop} \geq n$  então subtraia 1 de  $n$ .

Em um esforço para obter grande performance, além da otimização do programa, foi implementada uma versão em paralelo do algoritmo básico, ou seja, um computador com dois processadores poderia realizar duas simulações simultaneamente e com o dobro da performance, pelo menos na teoria.

Para que obtivéssemos o dobro da performance de fato, utilizamos dois processos distintos, cada um equipado com o seu próprio gerador de números pseudo-aleatórios (PRNG, de “*Pseudo-Random Number Generator*”). Esse é um ponto importante: para que seja obtido o dobro da performance, não devem existir conflitos pelos mesmos endereços de memória, pois a resolução em hardware destes conflitos é bastante demorada.

Cada um dos geradores de números pseudo-aleatórios é local e é alimentado com uma semente aleatória gerada por um terceiro gerador de números aleatórios, sendo que este é sistêmico e utiliza como sua própria semente aleatória a data, o que garante aleatoriedade suficiente. A execução do programa ocorre de acordo com a seguinte figura:

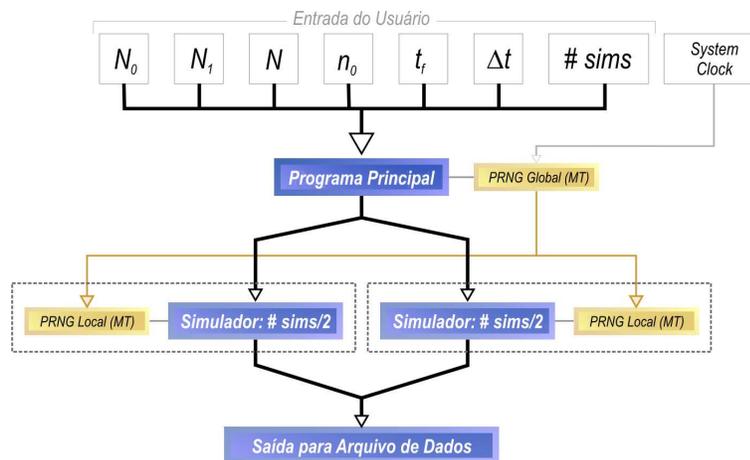


Figura 3.2: Esquema para paralelização.

De fato, com esta idéia básica de paralelização, nós conseguimos obter uma performance excelente: de 195-200% da performance típica de um processo isolado. Destacamos que o sucesso foi grande devido à natureza de fácil paralelização da tarefa: estamos apenas realizando estatística entre milhões de simulações distintas. De qualquer forma, além de aumentar a eficácia de nossos estudos, foi uma excelente oportunidade para aprender uma ferramenta nova muito útil.

A implementação e acabamento do programa de simulações paralelo, assim como todos os detalhes a respeito, não serão pormenorizados aqui. Utilizamos sempre um compilador moderno C++, o GNU C++ 4.0.3. Notamos apenas que, com o uso bem-sucedido das otimizações e do paralelismo, obtivemos um desempenho que, para um

caso típico, era de cerca de  $2 - 5ms$  para cada simulação, o que nos permite realizar análises estatísticas bastante boas.

**Visualização dos Resultados** Há ainda uma outra questão bastante importante para uma boa análise dos resultados obtidos das nossas simulações. Uma vez obtida a tabela de freqüências  $f(n; t)$ , que é salva em disco rígido, vamos calcular as probabilidades conforme explicitado em 3.13. Então, teremos algumas amostras de probabilidades de encontrar um estado futuro  $n$  para uma determinada rede com  $N + N_0 + N_1$  elementos que comece sua dinâmica com  $n_0$  elementos com estado interno 1. Agora, precisamos visualizar e interpretar os resultados de uma forma significativa.

Note que temos resultados de freqüências para valores de  $n$  e  $t$  que perfazem uma matriz de resultados de dimensão  $(N + 1) \times (n_f + 1)$ , e seria desejável que fosse possível visualizar todos os dados de probabilidade simultaneamente. Desta forma, queremos basicamente visualizar uma função escalar  $P_t(n)$ , que é campo escalar de domínio bidimensional e imagem unidimensional. Uma primeira opção, mais óbvia, seria utilizar gráficos tridimensionais, já que estes são tradicionalmente utilizados para a visualização de funções que seguem o padrão  $f(x, y)$ . Uma outra opção seria considerar um gráfico bidimensional que representa cada valor de probabilidade com uma cor específica. A figura 3.3 mostra um exemplo de uma representação construída desta forma<sup>3</sup>.

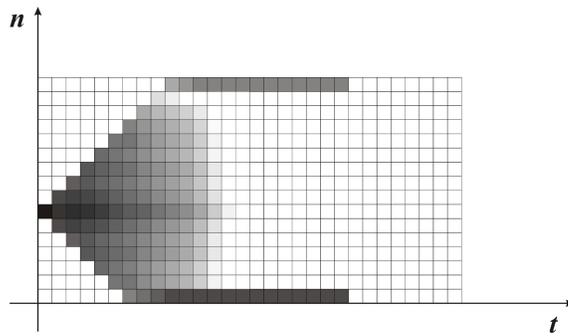


Figura 3.3: Gráfico bidimensional que utiliza cores para representar a terceira dimensão.

Em nossas análises, optamos pela segunda opção, a correspondente à figura 3.3, pois esta nos permitiu maior liberdade para representar os valores que apareceram. Foi necessário realizar uma correspondência entre cores e valores de  $P_t(n)$  não trivial, pois os valores de probabilidade estavam distribuídos de uma forma bastante específica. Alguns poucos valores de probabilidade são sempre muito altos - principalmente, é claro, o valor da probabilidade de encontrar a rede em  $n_0$  no tempo 0, que é 1 - mas a maioria dos valores é da ordem de  $1/N$ , o que torna o problema de escolher uma cor-

<sup>3</sup>Esta figura é apenas um exemplo feito manualmente e não corresponde a nenhum resultado real.

respondência entre cores e valores de  $P_t(n)$  crucial para que os gráficos bidimensionais sejam de fato representativos.

Para discernir entre probabilidades muito baixas, optamos por diagramas de curvas de nível, ou seja, optamos por visualizar uma série de faixas com a mesma probabilidade. Escolhemos dividir o intervalo de probabilidades  $P_t(n)$  entre 0 e 1 em  $n_{divs}$  intervalos, e posicionar faixas a cada intervalo de probabilidade de  $1/n_{divs}$ . Para tanto, utilizamos uma função de mapeamento de cores para probabilidades com o aspecto que pode ser visto na seguinte figura:

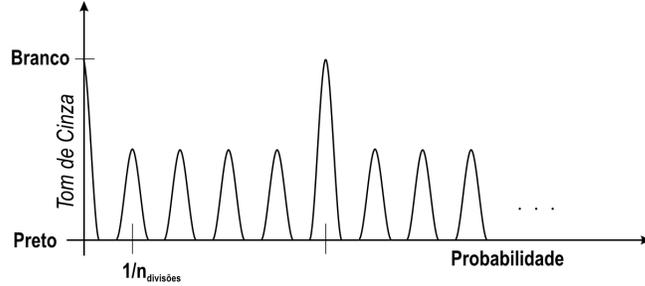


Figura 3.4: Aspecto de função de correlação cor-probabilidade para gerar diagramas de curvas de nível.

A idéia é que será possível visualizar faixas de cores fortes para representar faixas distintas de probabilidades bem espaçadas, assim como faixas de cores fracas para representar faixas de probabilidades menos espaçadas. É importante que cada curva de nível seja de fato uma “faixa”, possuindo uma certa largura, como pode ser visto em 3.4. Isso porque a probabilidade é uma variável que, para fins práticos, é contínua, e não seria possível ver nada se não houvesse uma largura apreciável na associação probabilidade-cores. Assim, cada uma das faixas representará valores de probabilidade muito semelhantes.

Uma função que reproduza este aspecto pode ser arbitrária, desde que as faixas sejam equiprováveis e bem representativas do problema. A função escolhida através de experimentação foi:

$$g(P_t(n)) = \begin{cases} \frac{3}{5} \cos^6(2\pi n_{divs} P_t(n)) & , \text{ se } |P_t(n) - k| > \frac{1}{2n_{divs}}, \forall k \in \mathbb{Z} \\ \cos^6(2\pi n_{divs} P_t(n)) & , \text{ se } |P_t(n) - k| < \frac{1}{2n_{divs}}, \forall k \in \mathbb{Z} \end{cases} \quad (3.16)$$

Esta deve ser interpretada da seguinte forma:  $g(P_t(n))$  é a função que atribui para cada  $P_t(n)$  um valor contínuo de 0 a 1 que representa a fração de branco correspondente, sendo 0 preto e 1 branco.

Esta expressão gera automaticamente uma função com o aspecto de 3.4. A variável  $n_{divs}$ , como já sugere a figura 3.4, representa o espaçamento entre divisões. Os fatores

de combinação linear foram escolhidos através de experimentação e é desejável que o cosseno das subdivisões tenha coeficiente de combinação maior do que o cosseno das divisões espaçadas, para garantir que a imagem gerada tenha detalhes bem visíveis mesmo para as subdivisões menores. Além disso, a potência aplicada nos cossenos garante que a largura das faixas de probabilidade semelhante tenha bom aspecto para a visualização do problema; sem a potência, a largura seria grande demais e o diagrama não mostraria detalhes.

Como exemplo, a figura 3.5 retrata um exemplo de como este código de cores funciona e de como deve ser interpretado. As faixas de probabilidade semelhantes estão marcadas e são representativas da dinâmica; note que há ainda uma grande liberdade adicional na escolha do número  $n_{divs}$ . A menos que seja estipulado o contrário, sempre utilizamos  $n_{divs} = 1000$ , o que permite imediatamente uma correlação com milésimos de probabilidade e múltiplos de 0,5% de probabilidade, como mostra a figura:

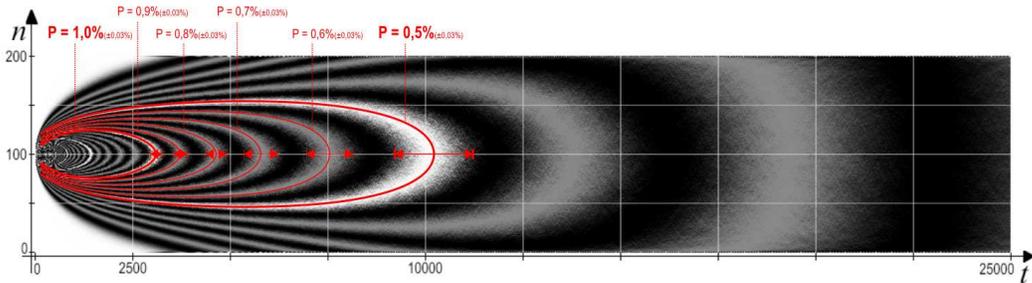


Figura 3.5: Exemplo de código de cores usado no diagrama de curvas de nível e interpretação. Desenho sem escalas e detalhes; apenas explicativo.

Com esse código de cores, é possível representar todos os resultados das nossas simulações de forma satisfatória. Os diagramas  $P(n) \times t$  são particularmente úteis para indicar a velocidade com a qual a rede atinge seu estado assintótico; infelizmente, estes diagramas não são claros no que concerne os estados assintóticos finais. Se houver necessidade eventualmente de realizar uma análise destes estados assintóticos com mais detalhes, o que ocorrerá em casos nos quais estes estados não são triviais, podemos sempre recorrer a cortes dimensionais, graficando  $P_t(n)$  para um dado tempo específico bastante grande em um gráfico bidimensional do tipo  $f(n)$ . Gráficos assintóticos que são cortes do estado final de diagramas como 3.5 serão apresentados ao longo da tese conforme necessário.

## Resultados

**Caso sem elementos fixos** Em nossos estudos, cobrimos inicialmente redes para as quais  $N_0 = N_1 = 0$  considerando redes de tamanhos diferentes e também estados

iniciais distintos. Escolhemos mostrar aqui os resultados de uma rede com  $N = 200$  e com três situações iniciais,  $n_0 = 100$ ,  $n_0 = 50$  e  $n_0 = 25$ . Destes três, vamos tirar conclusões que se aplicam a todos os casos, mesmo aqueles que não foram relatados aqui.

Os três casos escolhidos estão retratados nas figuras 3.6, 3.7 e 3.8. Estas figuras foram geradas com os resultados de simulações realizadas conforme já discutido e utilizam os diagramas de curvas de nível. Em todos os três, escolhemos  $\Delta t = 1000$ ,  $N = 200$ ,  $p = 0$  e  $N_{sims} = 10^8$ .

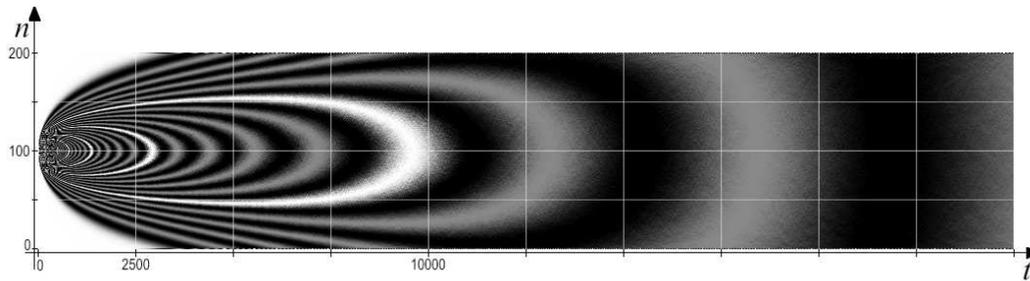


Figura 3.6: Resultados para  $n_0 = 100$  e  $N = 200$ .

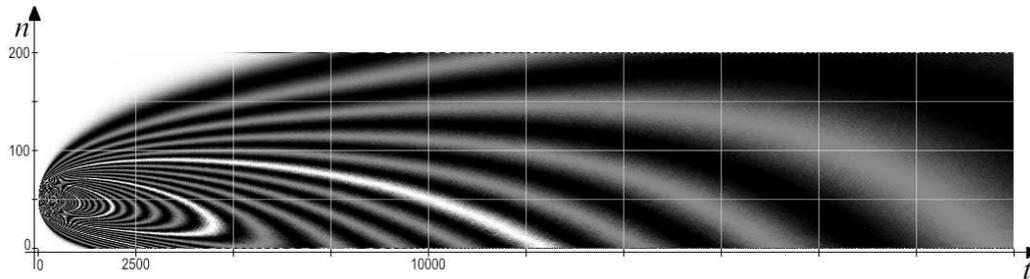


Figura 3.7: Resultados para  $n_0 = 50$  e  $N = 200$ .

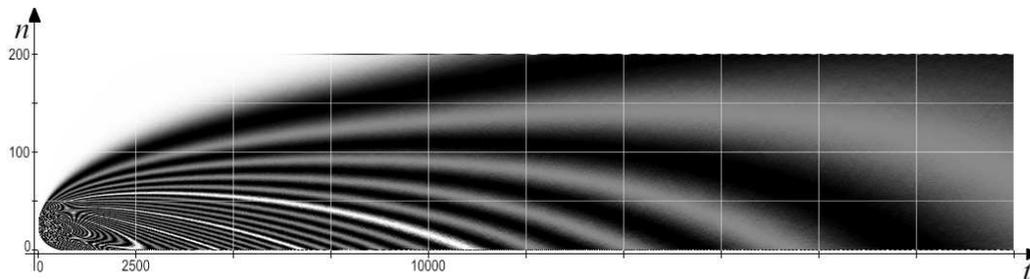


Figura 3.8: Resultados para  $n_0 = 25$  e  $N = 200$ .

Estes três diagramas de curvas de nível são bem representativos de variações na grandeza  $n_0$ , variações essas que causam os efeitos mais interessantes de modificação

da dinâmica. Cobrimos também variações do valor de  $p$ , que, para  $p$  próximo de 1, atuam apenas como fator complementar a uma escala inversa do tempo. Por exemplo,  $p = 0,9$ , que tem probabilidade  $(1 - p) = 0,1$  de ocorrer mudança por cópia, apresenta dinâmica com a metade da velocidade de  $p = 0,8$ , que tem probabilidade  $(1 - p) = 0,2$  de ocorrer mudança por cópia. Isto acontece simplesmente porque há o dobro de probabilidade de ocorrer alguma interação significativa na rede no caso  $p = 0,8$  do que no caso  $p = 0,9$ . Desta forma, para  $p$  grande, o tempo deve então ser modificado linearmente com a expressão  $(1 - p)$ ; infelizmente, esta mesma regra parece não se aplicar para qualquer  $p$ .

Além disso, cobrimos também variações de  $N$ , que atuam basicamente como fator de escala linear do espaço de  $n$ 's e fator de escala aproximadamente quadrático do tempo para estabilização. Estes resultados adicionais foram omitidos devido à sua modificação mais simples na dinâmica se comparado com modificações devido a  $n_0$ .

Nota-se nos resultados que todas as probabilidades de ocorrerem estados entre  $n = 1$  e  $n = N - 1$  tendem a zero para tempos bastante grandes. Há um acúmulo de probabilidade nas extremidades, em  $n = 0$  e  $n = N$ , que segue exatamente a proporção trocada de elementos da rede com estado interno 1 no início das simulações. No caso da figura 3.7, por exemplo, a proporção inicial é de 25% elementos com estado interno 1 e 75% com estado 0; na tendência assintótica, observamos que 25% das simulações encerravam sua dinâmica em  $n = N$  e 75% das simulações em  $n = 0$ ; o mesmo vale para a figura 3.8, com sua proporção inicial de  $n_0/N$  de 12,5%.

Do ponto de vista da dinâmica, é imediato ver que, quando uma rede se encontra em estado  $n = 0$  ou  $n = N$ , os passos da dinâmica não vão modificar mais o estado da rede, pois qualquer cópia que seja porventura realizada não terá efeito algum se todos os elementos tiverem estado interno igual. Desta forma, é natural que as simulações todas apresentem convergência inevitável para estes estados extremos do espaço de  $n$ .

Ainda um outro efeito, mais sutil, pode ser observado nas imagens. Depois de passadas várias iterações da dinâmica, não há mais curvas de nível horizontais, sempre verticais. Isso sugere que, no limite de tempo suficientemente grande, a rede tem uma probabilidade pequena e aproximadamente igual de se encontrar em qualquer estado entre 1 e  $N - 1$ . Veremos mais para frente, em nossas análises analíticas, que isto é exatamente o que acontece.

Finalmente, observamos que os resultados obtidos nas simulações foram todos dentro do esperado e condizem com o modelo. De fato, é razoável intuir que, dado o modelo do eleitor visto na primeira seção, todos os elementos da rede estarão apenas em um estado após um tempo suficientemente grande e sem interferência de agentes externos. Resta agora verificar o que ocorre na presença de elementos fixos da rede,

que podem representar também estes mesmos agentes externos.

**Caso com Elementos Fixos** Dividimos os problemas possíveis em três categorias para facilitar a tarefa de investigação. São elas:

1. *Caso de Elementos Fixos Unilateralmente*, nos quais ocorre que  $N_0 = 0$  e  $N_1 \neq 0$  ou ocorre que  $N_0 \neq 0$  e  $N_1 = 0$ . Por simetria, exibiremos apenas um deles.
2. *Caso de Elementos Fixos Simetricamente*, nos quais  $N_0 = N_1 \neq 0$ .
3. *Caso de Elementos Fixos Assimetricamente*, nos quais  $N_0 \neq 0$ ,  $N_1 \neq 0$  e  $N_0 \neq N_1$ .

**Caso de Elementos Fixos Unilateralmente** Neste caso, a dinâmica se comporta de uma forma bastante previsível: depois de passado suficiente tempo, toda rede que possui elementos fixos com um determinado estado interno tenderá a imitar este estado interno. Portanto, todos os elementos da rede terão aquele estado interno, independentemente do estado inicial desta rede.

Estes casos são bastante simples e citaremos aqui dois exemplos. Para ambos, escolhemos  $p = 0$ ,  $N = 200$ ,  $n_0 = 25$  e  $N_{sim_s} = 10^7$ ; em um deles, escolhemos  $N_1 = 1$ , e no outro, optamos por  $N_1 = 5$ .

Para o primeiro caso,  $N_1 = 1$ , optamos por  $\Delta t = 250$  e  $n_f = 1000$ . Estas escolhas permitem uma boa visualização do problema:

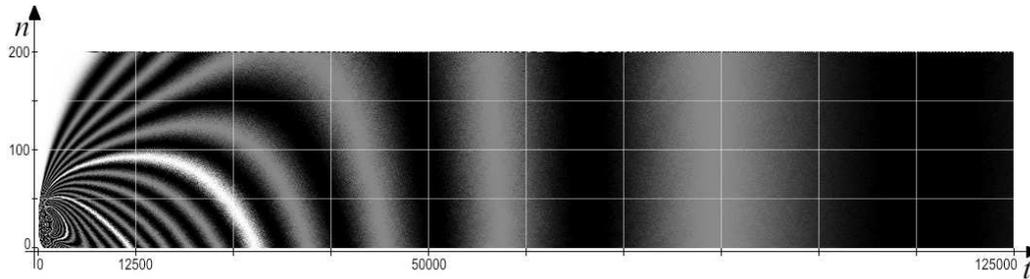


Figura 3.9: Resultados do caso com elementos fixos unilateralmente para  $N_1 = 1$ .

Nesta primeira figura, note que a convergência para o estado  $n = 200$  é realmente lenta. As dimensões de tempo retratadas aqui são 10 vezes superiores às dos casos 3.6, 3.7 e 3.8, e o aspecto das probabilidades é bastante disperso.

O segundo caso escolhido para retratar esta categoria de problemas é um com valor de  $N_1 = 5$ , de convergência muito mais rápida e evidente, como na figura 3.10. Optamos por  $\Delta t = 80$  e  $n_f = 1000$  neste caso em particular, o que mostra a rápida tendência de estabilização do sistema em comparação com o anterior.

Neste caso, notamos que há uma convergência ordenada para  $n = 200$ , que é marcante se comparada com a relativa dispersão antes da acumulação no caso da

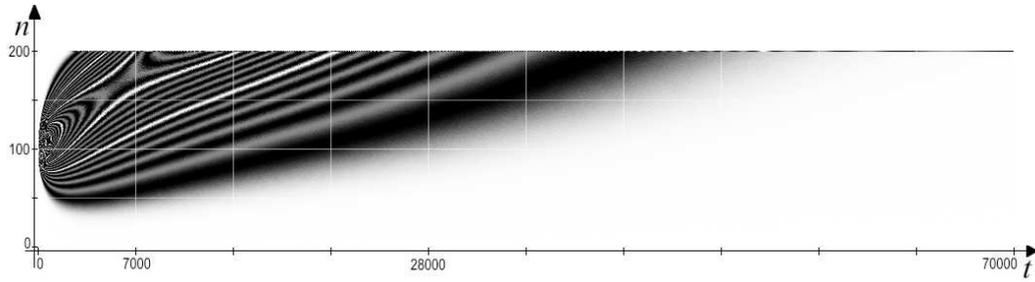


Figura 3.10: Resultados do caso com elementos fixos unilateralmente para  $N_1 = 5$ .

figura 3.9. Estes dois casos representam bem tudo o que pode acontecer se um dos  $N_0$  ou  $N_1$  for nulo; aquele que não é nulo dita a situação final do sistema e o seu valor reflete diretamente na velocidade de convergência do sistema. Outros casos unilaterais seguem também os padrões vistos aqui, sem nenhuma exceção encontrada.

**Caso de Elementos Fixos Simetricamente** Neste caso, a dinâmica se comporta de uma forma ainda previsível, mas não tão simples quanto no caso anterior. A presença de elementos com estado interno fixo dos dois tipos possíveis e em igual quantidade faz com que a rede não estabilize nos extremos, mas sim assuma uma distribuição de probabilidade simétrica ao redor de  $N/2$  e máxima justamente para  $n = N/2$ . Aqui, novamente, o estado inicial da rede é completamente irrelevante.

Escolhemos como representantes dos resultados quatro casos para os quais  $N = 200$ ,  $p = 0$ ,  $n_0 = 25$  e  $N_{sim_s} = 2 \cdot 10^7$ ; nestes, temos  $N_0 = N_1 = 1$  no primeiro caso, que é um caso anômalo, como veremos em breve;  $N_0 = N_1 = 2$  no segundo;  $N_0 = N_1 = 3$  no terceiro e finalmente  $N_0 = N_1 = 5$  no quarto caso.

O primeiro caso,  $N_0 = N_1 = 1$ , tem como parâmetros de amostragem  $\Delta t = 120$  e  $n_f = 1000$  e pode ser visto na figura 3.11.

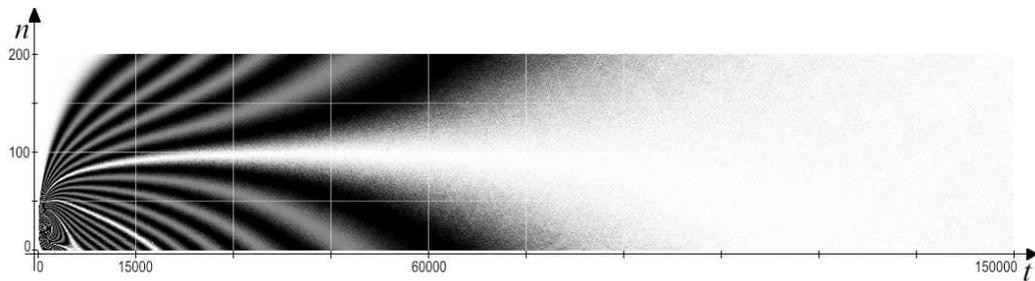


Figura 3.11: Resultados para caso simétrico com  $N_0 = N_1 = 1$ .

Na realidade, o que se vê nesta figura é um tanto inesperado. Esperávamos encontrar uma distribuição de probabilidades que fosse maior ao redor de seu centro, em  $n = N/2$ , e não uma que aparentemente é uniforme, como se observa aqui, já que o es-

tado assintótico final é composto apenas de uma faixa de probabilidades. Na realidade, por causa da escolha de curvas de nível, esta curva é uma das mais fortes e corresponde a uma probabilidade de aproximadamente 0,5%, o que realmente corresponde a uma distribuição uniforme ao longo dos 201 estados possíveis para a rede.

Verificamos que este resultado é realmente válido em qualquer situação inicial, contanto que ocorra que  $N_0 = N_1 = 1$ . Não se trata de problema dos nossos cálculos; este resultado foi independentemente verificado de forma analítica, como veremos em breve.

Para analisar este resultado em mais detalhe, foi feito o gráfico bidimensional de  $P_{120000}(n)$  na figura 3.12, e vemos que de fato trata-se de uma distribuição uniforme, se desconsideradas as flutuações aleatórias.

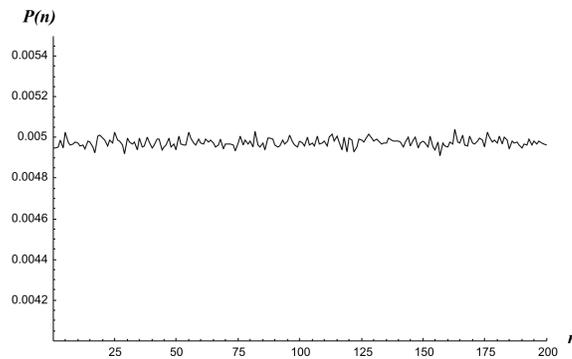


Figura 3.12: Curva  $P_t(n)$  com  $t = 1,2 \cdot 10^5$ .

O próximo caso que estudamos foi o de  $N_0 = N_1 = 2$ , que realmente apresenta uma distribuição assintótica de probabilidades mais condizente com o esperado e centrada no valor  $n = N/2$ . Os parâmetros de visualização escolhidos foram  $\Delta t = 40$  e  $n_f = 1000$ ; note que a convergência para a situação de equilíbrio é muito mais rápida neste caso.

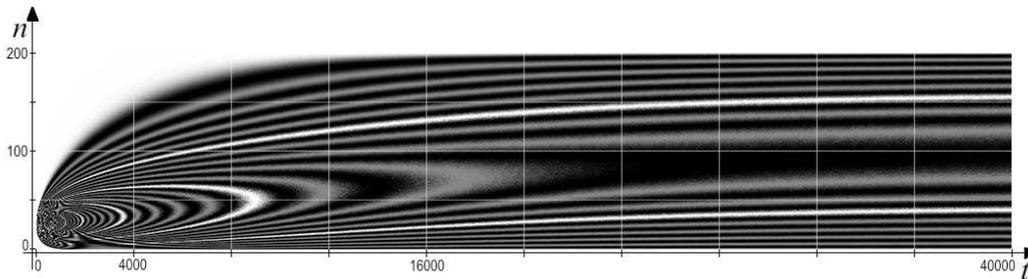


Figura 3.13: Resultados para caso simétrico com  $N_0 = N_1 = 2$ .

De fato, como seria de se esperar, neste caso nota-se uma curva de distribuição de probabilidade após um grande número de iterações  $t$  que é simétrica e máxima

para  $n = N/2$ . A estabilização da rede ocorre aproximadamente três vezes mais rapidamente do que no caso da figura 3.11, como indica a escala de tempo, uma vez que em um caso  $t_f = 40000$  e no outro  $t_f = 120000$ . Ainda assim, há uma probabilidade apreciável de encontrar a rede em um estado qualquer de  $n$ .

Para o próximo caso,  $N_0 = N_1 = 3$ , vemos que a curva de probabilidade torna-se mais estreita e continua simétrica. A rede tem uma probabilidade crescente de interagir com os elementos fixos neste caso, e a proporção de elementos fixos afeta o sistema mais drasticamente. Para o desenho, tomamos  $\Delta t = 25$  e  $n_f = 1000$ .

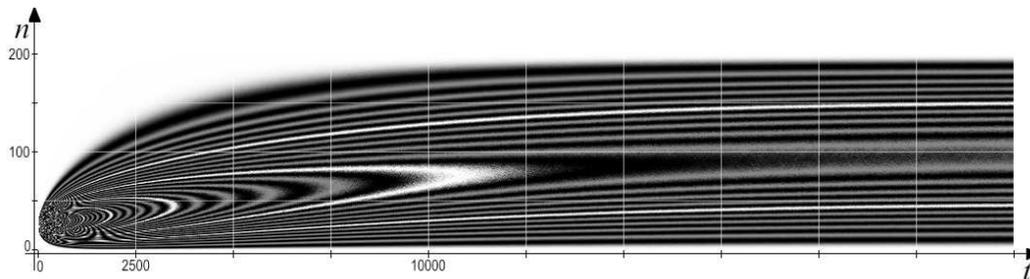


Figura 3.14: Resultados para o caso simétrico em que  $N_0 = N_1 = 3$ .

A convergência para o estado assintótico, como pode ser notado na escala de tempo, é também muito mais rápida neste caso em relação aos casos anteriores.

O quarto e último caso escolhido é o de  $N_0 = N_1 = 5$ , no qual a convergência é extremamente rápida e a rede estabiliza em um estado bastante estreito ao redor de  $n = N/2$ . É interessante notar que a distribuição de probabilidade se estreitou bastante com uma perturbação na forma de elementos fixos que tem probabilidade de cerca de 5% de atuar em um dado passo da dinâmica. Para a figura, optamos por  $\Delta t = 10$  e  $n_f = 1000$ ; note que a escala de tempo é tal que foram efetuados 12 vezes menos passos da dinâmica do que no caso da figura 3.11. Note que alteramos pela primeira vez ao longo deste trabalho os valores de curva de nível:  $n_{divs} = 250$  neste caso em particular. Desta forma, as curvas de nível fracas distam 0,4% umas das outras, e as fortes distam 2%.

Para uma comparação rápida e imediata da situação de equilíbrio dos casos visitados, podemos graficar as probabilidades  $P_t(n)$  para  $t$  máximo de nossas simulações:

Nota-se imediatamente um estreitamento da distribuição de probabilidades quando o número de elementos fixos da rede é aumentado.

**Caso de Elementos Fixos Assimetricamente** No caso de haver elementos fixos dos dois tipos, mas em quantidades diferentes, as curvas vistas quanto  $N_0 = N_1$  apresentam distorções correspondentes a esta desigualdade. Investigaremos aqui alguns casos com  $N_0 = 5$  fixo ao longo destes casos e com  $N_1$  variável, podendo ser 1, 3, 10

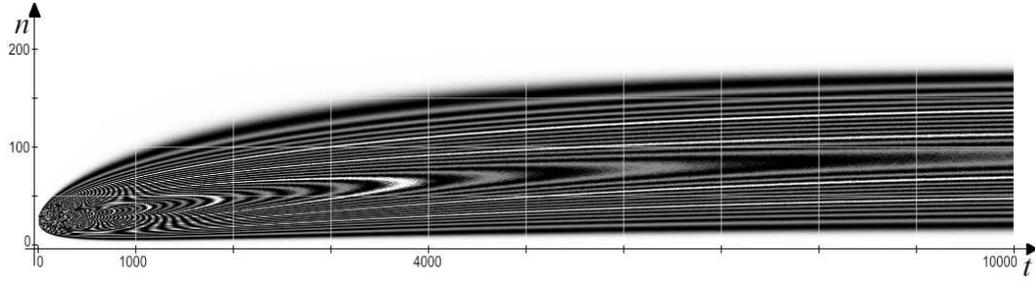


Figura 3.15: Resultados para o caso simétrico em que  $N_0 = N_1 = 5$ . Note que  $n_{divs} = 250$ .

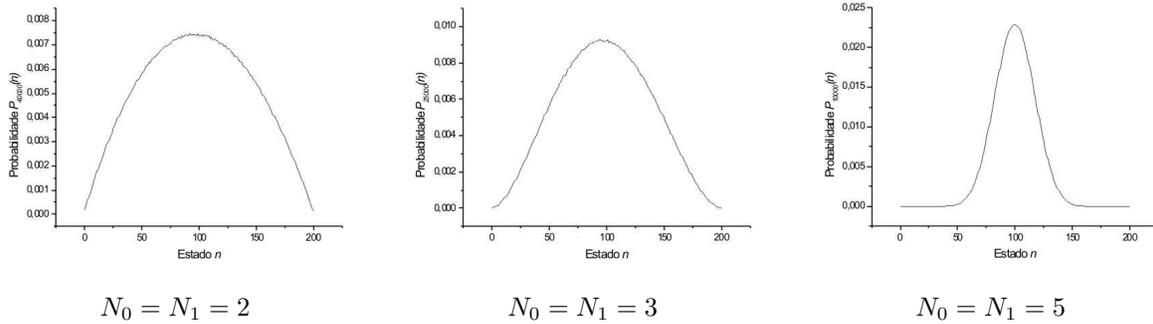


Figura 3.16: Comparação de curvas de probabilidade assintóticas ( $t \rightarrow \infty$ ).

ou 20. Todos os casos têm  $N = 200$ ,  $p = 0$ ,  $N_{sims} = 10^8$  e  $n_0 = 25$ , notando que, novamente,  $n_0$  é grandeza irrelevante para o estado assintótico da rede. Valores diferentes de  $n_0$  causam distorções previsíveis na dinâmica, que se ajusta correspondentemente; optamos por omiti-las aqui por não se tratar de nada de grande interesse.

No primeiro caso,  $N_0 = 5$  e  $N_1 = 1$ , temos um acúmulo de simulações tendendo para  $n = 0$ , como seria de se esperar. Há uma curva de distribuição de probabilidades crescente à medida em que  $n$ 's decrescem. Escolhemos aqui  $\Delta t = 12$  e  $n_f = 1000$ , e modificamos as curvas de nível para  $n_{divs} = 250$  (divisões a cada 2% de probabilidade e subdivisões a cada 0,4% de probabilidade).

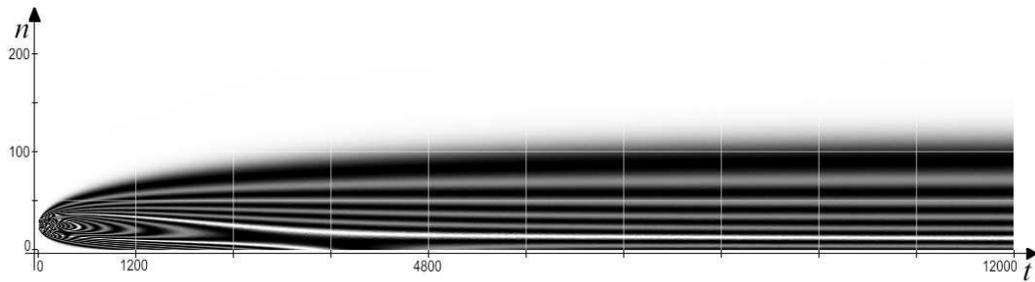


Figura 3.17: Resultados para caso assimétrico  $N_0 = 5$  e  $N_1 = 1$ . Note que  $n_{divs} = 250$  aqui.

O acúmulo de probabilidades na figura 3.17 é tal que o máximo de probabilidade, que está em aproximadamente 2,5%, está localizado realmente em  $n = 0$ . As simulações mostraram portanto que a rede tende a copiar o estado mais presente; notamos também que a proporção de elementos fixos em cada estado, que é de 1 para 5, não influenciou o valor máximo da curva de probabilidades de uma maneira previsível. Originalmente, tinha sido cogitada a idéia de que tal máximo apresentasse regra de proporcionalidade, assim como a proporção de simulações que convergia assintoticamente para  $n = 0$  ou  $n = 200$  no caso de  $N_0 = N_1 = 0$  dependia da proporção de elementos com estado 1 no início das simulações, mas não há nenhuma regra de proporções que se apresenta nestes resultados.

O próximo caso,  $N_0 = 5$  e  $N_1 = 3$ , já mostra que o máximo da curva de distribuição de probabilidades não está mais localizado em  $n = 0$ . Para esta figura, escolhemos  $\Delta t = 15$  e  $n_f = 1000$ , e modificamos as curvas de nível para  $n_{divs} = 750$  (divisões a cada 0,67% de probabilidade e subdivisões a cada 0,13% de probabilidade).

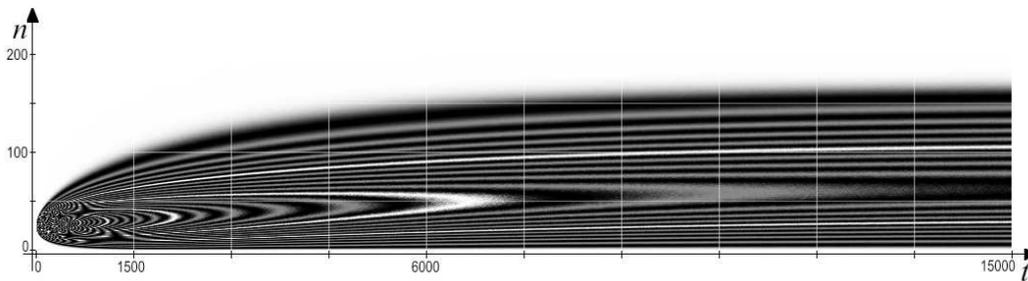


Figura 3.18: Resultados para caso assimétrico com  $N_0 = 5$  e  $N_1 = 3$ . Note que  $n_{divs} = 750$  aqui.

Nota-se que a rede admite, para tempo grande, um aspecto bastante próximo do da figura 3.14, como seria de se esperar. Há uma tendência de as simulações flutuarem em estados com  $n$  inferior a  $N/2$ , o que é natural e esperado, pois  $N_0 > N_1$ . Os outros dois casos finais estão retratados nas figuras 3.19 e 3.20, com  $\Delta t = 20$  e  $n_f = 1000$  em ambos os casos.

Notavelmente, da mesma forma que a curva de distribuição de probabilidade assintótica para tempos grandes torna-se mais estreita no caso simétrico, há um estreitamento nas figuras 3.19 e 3.20 que é bastante evidente. Na figura 3.20 em particular, temos probabilidades excedendo 2% - as que correspondem às faixas em branco - o que não aparece quando há pequeno número de elementos com estado interno fixo.

Para comprovar todas as nossas observações e finalizar esta seção, apresentamos as distribuições de probabilidade para  $t \rightarrow \infty$  para cada um dos casos das figuras anteriores na figura 3.21 na próxima página.

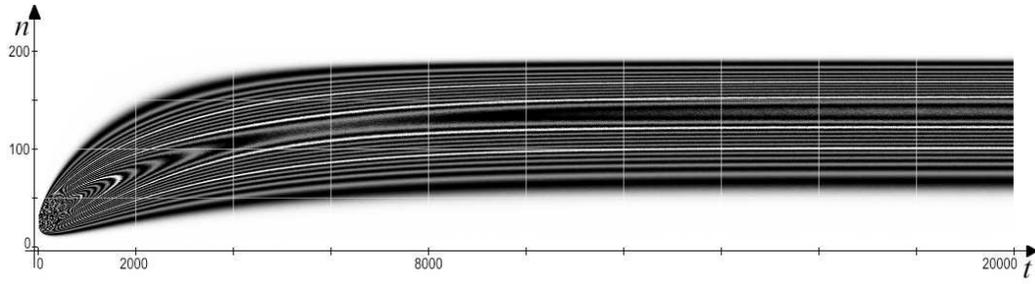


Figura 3.19: Resultados para caso assimétrico com  $N_0 = 5$  e  $N_1 = 10$ . Note que  $n_{divs} = 750$  aqui.

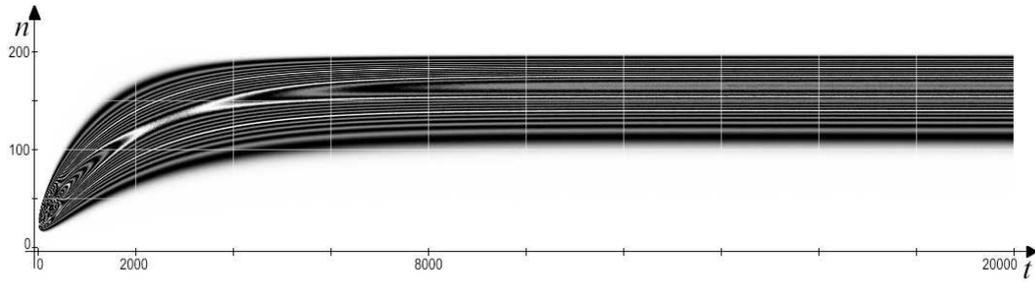


Figura 3.20: Resultados para caso assimétrico com  $N_0 = 5$  e  $N_1 = 20$ . Note que  $n_{divs} = 500$  aqui.

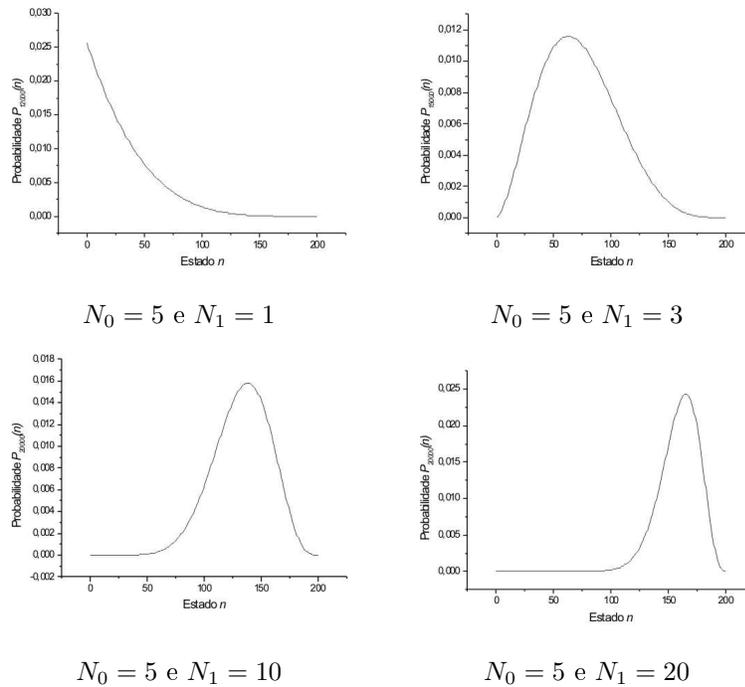


Figura 3.21: Comparação de curvas de probabilidade assintóticas ( $t \rightarrow \infty$ ).

Concluindo, obtivemos algumas conclusões bastante cruciais que distinguem o caso de redes com elementos fixos do caso estudado anteriormente. Inicialmente, notamos que o estado inicial da rede não é de nenhuma relevância para o estado final que esta assume para tempos muito grandes. Vimos que os estados assintóticos para tempos grande são inteiramente governados pela quantidade de elementos com estado interno fixo da rede de uma forma bastante previsível. Em qualquer circunstância, a rede livre acaba imitando grosseiramente os elementos fixos de alguma forma, sendo que a imitação será bastante vaga - i.e., de grande largura probabilística - para uma quantidade pequena de elementos fixos e bastante precisa - i.e., de pequena largura probabilística - para uma quantidade grande de elementos fixos da rede. Em nossas simulações, constatamos que “grande” aqui é da ordem de alguns pontos percentuais do tamanho total da rede para obter uma estreita distribuição de probabilidade final.

Encerrada a análise numérica do problema, vamos resolver analiticamente a dinâmica destes sistemas e realizar uma comparação entre as duas abordagens.

### 3.2.3 Resolução Analítica

Uma vez adquirida familiaridade com o problema e já realizados os cálculos numéricos, vamos agora abordar a dinâmica de uma rede totalmente conectada de uma forma analítica, estendendo o que já foi visto na introdução.

Iniciaremos a nossa análise voltando às expressões 3.10 e 3.11 na página 20, que mostram a matriz de evolução temporal  $U$  do vetor de probabilidade. Da expressão 3.10 é evidente que um vetor de probabilidade  $\vec{P}_t$  em um tempo qualquer  $t$  pode sempre ser escrito em função do vetor de probabilidade inicial  $\vec{P}_0$  da seguinte forma:

$$\vec{P}_t = U^t \vec{P}_0. \quad (3.17)$$

Ressaltamos que, nesta expressão,  $U^t$  designa uma potência de  $U$  e não a matriz transposta. Desta expressão, torna-se evidente que os autovalores e autovetores de  $U$  são de grande importância; porém, devemos salientar desde já que a matriz  $U$  não é simétrica e, portanto, os seus autovetores não seguem as regras tradicionais da álgebra mais básica. Embora exista apenas um conjunto de autovalores para  $U$ , sendo este  $(N + 1)$ -dimensional, há dois conjuntos distintos de autovetores desta matriz: os pela direita e os pela esquerda.

Deste ponto em diante, vamos numerar os autovalores de  $U$ ,  $\lambda$ , com um índice inteiro  $r$  entre 0 e  $N$ , denotando-os de  $\lambda_r$ . Além disso, denotaremos os autovetores pela direita de  $U$  por  $\vec{a}_r$ , com o índice  $r$  correspondendo ao autovalor de cada autovetor específico; note que os  $\vec{a}_r$  são vetores coluna e se assemelham com a expressão de  $\vec{P}_t$  dada em 3.9. Denotaremos os autovetores pela esquerda por  $\vec{b}_r$ , lembrando que estes

são vetores linha. Temos então:

$$U \vec{a}_r = \lambda_r \vec{a}_r \quad (3.18)$$

e

$$\vec{b}_r U = \lambda_r \vec{b}_r. \quad (3.19)$$

Para lidar com a álgebra deste espaço  $(N + 1)$ -dimensional eficientemente, vamos agora escrever a sua regra de identidade e de produto interno, ambas um pouco distintas do que o usual para uma matriz simétrica.

$$\sum_{r=0}^N \frac{1}{\Gamma_r} \vec{a}_r \cdot \vec{b}_r = I, \quad (3.20)$$

$$\vec{b}_r \cdot \vec{a}_{r'} = \Gamma_r \delta_{rr'}, \quad (3.21)$$

$$\Gamma_r = \sum_m a_{rm} b_{rm}. \quad (3.22)$$

Na expressão 3.20,  $I$  é a matriz identidade  $(N + 1) \times (N + 1)$ -dimensional,  $a_{rm}$  designa o  $m$ -ésimo componente de  $\vec{a}_r$  e  $b_{rm}$  designa o  $m$ -ésimo componente de  $\vec{b}_r$ . Levando em conta esta álgebra, podemos projetar um vetor de probabilidades no espaço de autovetores. Em particular, utilizando 3.20, podemos escrever  $\vec{P}_0$  da seguinte forma:

$$\vec{P}_0 = \sum_{r=0}^N \left( \frac{1}{\Gamma_r} \vec{b}_r \cdot \vec{P}_0 \right) \vec{a}_r. \quad (3.23)$$

Agora, podemos simplesmente propagar  $\vec{P}_0$  multiplicando 3.23 por  $U^t$  e utilizando 3.18:

$$\vec{P}_t = U^t \vec{P}_0 = \sum_{r=0}^N \lambda_r^t \left( \frac{1}{\Gamma_r} \vec{b}_r \cdot \vec{P}_0 \right) \vec{a}_r. \quad (3.24)$$

O problema então se resume a encontrar os dois conjuntos de autovetores  $\vec{a}_r$  e  $\vec{b}_r$  e os seus autovalores  $\lambda_r$  correspondentes. Uma vez encontrados estes, pode-se sempre utilizar 3.24 para encontrar qualquer probabilidade futura. Quando é do interesse saber uma probabilidade de transição específica dado um estado inicial  $n_0$ , precisamos realizar a seguinte operação de reconstrução de um componente  $n$ -ésimo específico do vetor de probabilidades:

$$P_{n_0, n}(t) = \sum_{r=0}^N \frac{1}{\Gamma_r} b_{rn_0} a_{rn} \lambda^t. \quad (3.25)$$

**Manipulando a Matriz de Evolução Temporal** A matriz de evolução temporal  $U$ , conforme definida em 3.11 na página 20, pode ser escrita de uma forma mais prática se consideradas as simetrias das expressões de 3.7. Veja, em particular, que podemos reescrever  $\xi_0(n)$  da seguinte forma:

$$\xi_0(n) = 1 + (1-p) \left\{ \frac{[n(n-1+N_1) + (N-n)(N-n-1+N_0)]}{N(N+N_0+N_1-1)} - 1 \right\}. \quad (3.26)$$

Nesta equação, já é possível verificar que será prático redefinir o nosso problema mapeando  $U$  em uma outra matriz  $W$  de acordo com:

$$U = I + \frac{1-p}{N(N+N_0+N_1-1)} W, \quad (3.27)$$

onde  $I$  é a matriz identidade e  $W$  é dada por:

$$W = \begin{pmatrix} \kappa_0(0) & \kappa_-(0) & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \kappa_+(1) & \kappa_0(1) & \kappa_-(1) & \ddots & & \vdots \\ 0 & \kappa_+(2) & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \kappa_-(N-2) & 0 \\ \vdots & & \ddots & \kappa_+(N-1) & \kappa_0(N-1) & \kappa_-(N-1) \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & \kappa_+(N) & \kappa_0(N) \end{pmatrix}, \quad (3.28)$$

com os  $\kappa$  encontrados após manipulação algébrica:

$$\begin{cases} \kappa_0 = -2n(N-n) - N_1(N-n) - nN_0 \\ \kappa_+ = (N-n+1)(n-1+N_1) \\ \kappa_- = (N-n-1+N_0)(n+1) \end{cases}. \quad (3.29)$$

Estas expressões são notavelmente mais simples do que as expressões para os  $\xi$ , pois com o uso de  $W$ , evitamos completamente a dependência em  $p$ . De acordo com o mapeamento 3.27, os autovetores de  $W$ , tanto pela esquerda quanto pela direita, são os mesmos de  $U$ ; porém, os autovalores devem ser corrigidos de acordo com:

$$\lambda_r = 1 + \frac{1-p}{N(N+N_0+N_1-1)} \mu_r \quad (3.30)$$

Aqui,  $\mu_r$  são os autovalores da matriz  $W$  associados ao autovalor  $\lambda_r$  de mesmo autovetor de  $U$ . Estas manipulações iniciais facilitarão significativamente a tarefa de encontrar os autovalores e autovetores de  $U$ .

**Autovalores da Evolução Temporal** Para encontrar os autovalores de  $W$ , utilizamos o software Mathematica para alguns cálculos em vários casos de  $N$  para obter vários conjuntos de autovalores de  $W$ . Retratamos alguns destes conjuntos, ordenados em forma decrescente de  $\mu_r$ , na tabela 3.3, na qual  $\Upsilon = N_0 + N_1$ .

$N$	Conjunto de Autovalores
2	$\{0, -\Upsilon, -2(\Upsilon + 1)\}$
4	$\{0, -\Upsilon, -2(\Upsilon + 1), -3(\Upsilon + 2), -4(\Upsilon + 3)\}$
6	$\{0, -\Upsilon, -2(\Upsilon + 1), -3(\Upsilon + 2), -4(\Upsilon + 3), -5(\Upsilon + 4), -6(\Upsilon + 5)\}$
7	$\{0, -\Upsilon, -2(\Upsilon + 1), -3(\Upsilon + 2), -4(\Upsilon + 3), -5(\Upsilon + 4), -6(\Upsilon + 5), -7(\Upsilon + 6)\}$

Tabela 3.3: Alguns conjuntos de autovalores  $\mu_r$  para diversos valores de  $N$ . Note que  $\Upsilon = N_0 + N_1$ .

Nota-se imediatamente que os autovalores são gerados a partir de uma mesma fórmula que independe de  $N$ , sendo que  $N$  só especifica quantos elementos gerados pela mesma fórmula são relevantes. Além disso, observando a tabela 3.3, a fórmula para os autovalores torna-se evidente:

$$\mu_r = -r(r + N_0 + N_1 - 1). \quad (3.31)$$

Nesta expressão,  $r$  é um número entre 0 e  $N$ . Desta forma, podemos utilizar 3.31 em 3.30 e obter os autovalores  $\lambda_r$  da matriz evolução temporal  $U$ :

$$\lambda_r = 1 - (1 - p) \frac{r(r + N_0 + N_1 - 1)}{N(N + N_0 + N_1 - 1)}. \quad (3.32)$$

Comprovamos esta fórmula em muitos outros casos e optamos por não relatar estes aqui. Explicamos aqui a maneira pela qual os autovalores foram obtidos apenas. Uma demonstração mais rigorosa usando 3.28 provavelmente é possível, mas ainda não chegamos em tal demonstração até este ponto do trabalho. É também possível confirmar a consistência deste resultado utilizando a invariância do traço da matriz  $U$  (ou mesmo  $W$ ), o que garante que o seu traço deve ser igual à somatória dos autovalores. A expressão correspondente leva, depois de algumas manipulações, a um resultado compatível com os  $\mu_r$  e  $\lambda_r$  propostos; esta, é claro, não seria uma demonstração rigorosa.

Neste ponto, já é possível demonstrar que o valor de  $p$  deve introduzir uma correção linear na escala do tempo para  $p$  próximo de 1. Para tanto, lembramos que nenhum dos valores possíveis de  $\mu_r$  pode depender de  $p$ , pois  $W$  independe de  $p$ . Agora veja

que a dependência temporal das probabilidades é dada, de acordo com 3.24, por  $\lambda_r^t$ . Assim, temos uma dependência temporal do tipo:

$$\lambda_r^t = \left[ 1 - (1-p) \frac{r(r+N_0+N_1-1)}{N(N+N_0+N_1-1)} \right]^t. \quad (3.33)$$

Agora veja que, se  $p$  está próximo de 1, então esta expressão pode ser aproximada para 3.34, contanto que  $r(r+N_0+N_1-1)$  seja da ordem de  $N(N+N_0+N_1-1)$  ou menos, o que sabemos que é verdade, pois  $0 \leq r \leq N$ . Portanto:

$$\lambda_r^t \approx e^{-\frac{1-p}{N(N+N_0+N_1-1)}|\mu_r|t} \quad (3.34)$$

Desta forma, comprovamos o que vimos nos resultados numéricos sobre a atuação do fator  $p$ : o seu complementar a um é um fator de escala linear no tempo, de fato. Infelizmente, por causa da natureza da potência envolvida em 3.33, não podemos dizer o mesmo para o intervalo todo de  $p$  e qualquer  $N$ . Isto é razoável e segue a nossa intuição, pois afinal, para valores arbitrários de  $p$ , a probabilidade de não acontecer nada em várias etapas da dinâmica seguirá uma distribuição de Poisson, e a probabilidade de ocorrer algo será sempre a complementar desta; assim, não obteremos uma expressão tão simples quanto 3.34. No caso geral, a atuação de  $p$  ainda depende do valor de  $r$ , pois não há como separá-los em 3.33.

Há ainda uma outra forma interessante de observar 3.33. Cada fator  $\lambda_r^t$  está associado a um autovetor  $\vec{a}_r$  e carrega significado a respeito do comportamento no tempo de cada um dos  $\vec{a}_r$ . Em particular, todos os  $\lambda_r$  seguem  $p \leq \lambda_r \leq 1$ . Os autovalores  $\lambda_r = 1$  representam autovalores que são autoestados da dinâmica e, desta forma, permanecerão sempre presentes para tempos muito grandes. Portanto, a estes autovalores estão associados os autovetores assintóticos no tempo do nosso problema. Todos os outros autovalores são transitórios, com  $\lambda_r^t < \lambda_r < 1$ , e são referentes à dinâmica que se observa no início de todas as simulações.

Podemos ainda realizar uma análise grosseira de tempo de estabilização da dinâmica baseando-se em algo parecido com o que fizemos para a expressão 3.34. O autovalor correspondente ao autovetor cuja presença cai mais lentamente - aquele que perdurará por mais tempo - é o de  $r$  pequeno; assim, se voltarmos a 3.33 e considerarmos  $N \gg 1$ , temos agora a relação:

$$\frac{r(r+N_0+N_1-1)}{N(N+N_0+N_1-1)} \ll 1. \quad (3.35)$$

Desta forma, vale a equação: (note: por uma razão diferente de 3.34).

$$\lambda_2^t \approx e^{-(1-p) \frac{r(r+N_0+N_1-1)}{N(N+N_0+N_1-1)} t}. \quad (3.36)$$

Nesta equação, vemos agora que, independentemente do valor de  $p$ , a dinâmica estabiliza-se com um tempo característico seguindo:

$$\lambda_2^t \approx e^{-\frac{t}{\tau}}, \quad (3.37)$$

com

$$\tau = \frac{N(N+N_0+N_1-1)}{r(r+N_0+N_1-1)} (1-p). \quad (3.38)$$

Esta relação nos diz que a rede estabilizará em um tempo da ordem de aproximadamente  $N^2$  no caso livre em que  $N_0 = N_1 = 0$ , e que a influência de  $1-p$  volta a ser linear no tempo para  $N$  grande, se considerarmos apenas a grandeza típica de estabilização da rede. Vale lembrar aqui que as observações de antes ainda valem:  $1-p$  exerce fator de escala linear apenas para este cálculo e considerando  $r \ll N$ ; para os outros autovalores, a expressão 3.33 não é tão informativa.

Uma outra observação interessante de 3.38 é que, se um dos  $N_0$  ou  $N_1$  forem não nulos, então o autovalor  $\lambda_1$  deixa de corresponder a um autovalor assintótico e passa a ser autovetor com maior tempo de vida da dinâmica. Se os valores de  $N_0$  ou  $N_1$  forem muito inferiores a  $N$  e próximos de 1, teremos um  $\tau$  maior até do que o máximo  $\tau$  no caso em que  $N_0 = N_1 = 0$ ; porém, se  $N_0$  ou  $N_1$  não forem próximos de 1, a expressão 3.38 indica que a estabilização da dinâmica será mais rápida do que no caso  $N_0 = N_1 = 0$ .

**Autovetores da Evolução Temporal** Para encontrar os autovetores do nosso problema, retornaremos à matriz auxiliar  $W$  definida por 3.28 e 3.29. Em particular, veja que podemos escrever uma equação mestra semelhante a 3.7 na página 19 com os  $\kappa$  de 3.29 e então, utilizando os  $\mu_r$ , chegar em uma relação de recursão que deve ser satisfeita pelos componentes  $a_{rm}$  de cada um dos autovetores  $\vec{a}_r$ . Note que a expressão depende, naturalmente, de  $r$  também:

$$\begin{aligned} (n+1)(N+N_0-n-1)a_{r,n+1} &= [2n(N-n) + N_1(N-n) + N_0n - \mu_r] a_{r,n} \\ &\quad - (N-n+1)(N_1+n-1)a_{r,n-1} \end{aligned} \quad (3.39)$$

Uma expressão inteiramente análoga pode ser encontrada utilizando  $W$  transposta para os autovetores pela esquerda, que satisfazem:

$$(N - n)(N_1 + n)b_{r,n+1} = [(N - n)(N_1 + n) + n(N + N_0 - n) - \mu_r]b_{r,n} - n(N + N_0 - n)b_{r,n-1} \quad (3.40)$$

A resolução destas relações de recursão pode ser feita utilizando um raciocínio inverso ao de Frobenius. Vamos converter 3.39 em uma equação diferencial propondo uma função geratriz:

$$P_r(x) = \sum_{n=0}^N a_{rn}x^n \quad (3.41)$$

Agora, multiplicaremos 3.39 por  $x^m$  e somaremos sobre  $m$ . Todas as expressões resultantes podem, após alguma manipulação algébrica, ser escritas em termos de  $P_r(x)$  de 3.41; obtemos assim a seguinte equação diferencial:

$$x(1-x)\frac{d^2P_r(x)}{dx^2} + [(1-N-N_0) - (1+N_1-N)x]\frac{dP_r(x)}{dx} + \left[NN_1 - \frac{\mu_r}{1-x}\right]P_r(x) = 0 \quad (3.42)$$

É interessante notar aqui que a equação 3.39 foi convertida em 3.42 considerando que foram aplicadas duas condições de contorno:  $a_{rN+1} = 0$  e  $a_{r,-1} = 0$ . Isto é necessário para que a relação de recursão 3.39 valha até mesmo nas extremidades do nosso problema; note que teoricamente, estes componentes  $a_{rn}$  com  $n < 0$  ou  $n > N$  nem sequer existem, mas foram criados para fins de cálculo. As duas condições de contorno nos dizem, a partir dos  $\kappa$  de 3.29, que qualquer  $a_{rn}$  com  $n < -1$  ou  $n > N+1$  também é nulo.

Se  $\mu_r = 0$ , então a equação 3.42 torna-se uma equação hipergeométrica de solução conhecida. Nesta situação, temos de considerar ainda dois casos distintos. Primeiramente, se  $N_1 \neq 0$  ou  $N_0 \neq 0$ , então  $\mu_r = 0$  implica  $r = 0$ , e as duas soluções linearmente independentes são construídas com base na série hipergeométrica, que escreveremos com símbolos de Pochhammer:

$$\begin{cases} P_0(x) = F(-N, N_1, 1 - N - N_0, x) \\ P_0(x) = x^{(N+N_0)} F(N_0, N + N_0 + N_1, N + N_0 + 1, x) \end{cases}, \quad (3.43)$$

com

$$F(a, b, c, z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)^{\{n\}} (b)^{\{n\}} z^n}{(c)^{\{n\}} n!}, \quad (3.44)$$

$$(a)^{\{n\}} = a(a+1)(a+2)\dots(a+n-2)(a+n-1) = \frac{\Gamma(a+n)}{\Gamma(a)} = \frac{(a+n-1)!}{(a-1)!}. \quad (3.45)$$

Das duas soluções 3.43, aquela que é do interesse é apenas a primeira, uma vez que a segunda tem expansão cujas potências começam necessariamente em  $N + N_0$  e não podem portanto ser interpretadas como componentes dos nossos autovetores.

Por outro lado, se  $N_0 = N_1 = 0$ , então  $\mu_r = 0$  implica  $r = 0$  ou  $r = 1$ , e a equação diferencial 3.42 torna-se:

$$x \frac{d^2 P_r(x)}{dx^2} + (1 - N) \frac{dP_r(x)}{dx} = 0. \quad (3.46)$$

Esta equação admite as duas soluções  $P_0(x) = 1$  e  $P_1(x) = x^N$ , que representam as duas situações da rede possíveis para redes livres: uma em que  $n = 0$ , ou seja, a rede toda encontra-se no estado 0, e outra situação em que  $n = N$ , ou seja, todos os elementos da rede encontram-se no estado 1. Neste caso, as duas soluções são relevantes.

Enquanto que as soluções com  $\mu_r = 0$  carregam informações a respeito do comportamento assintótico do problema, pois  $\lambda_r = \lambda_r^t = 1$  neste caso, devemos considerar 3.42 para  $\mu_r \neq 0$  para obter todos os autovetores  $\vec{a}_r$ . Passa a ser necessária uma mudança de variáveis:

$$P_r(x) = \frac{1}{(1-x)^{(r+N_0+N_1-1)}} f_r(x). \quad (3.47)$$

Colocando 3.47 em 3.42, obtemos a seguinte equação:

$$x(1-x) \frac{d^2 f_r(x)}{dx^2} + [\psi - (\varphi + \phi + 1)x] \frac{df_r(x)}{dx} - \varphi \phi f_r(x) = 0, \quad (3.48)$$

$$\begin{cases} \varphi = 1 - r - N_0 \\ \phi = 1 - r - N - N_0 - N_1 \\ \psi = 1 - N - N_0 \end{cases} \quad (3.49)$$

A equação 3.48 é uma outra equação hipergeométrica e tem como solução duas expressões do tipo 3.43, mas com parâmetros modificados. Consideramos novamente que uma delas não faz sentido para o nosso caso, uma vez que há uma potência do tipo  $x^{N+N_0}$  multiplicando a função hipergeométrica, o que faz com que os coeficientes da expansão excedam as nossas potências procuradas. A expressão adicional do tipo  $(1-x)^{-a}$  que aparece na frente não muda isto, pois a expansão desta função ao redor

de 0 mostra que só há potências  $x^i$  com  $i \geq 0$ . Desta forma, a função geratriz para  $\mu_r \neq 0$  é:

$$P_r(x) \frac{1}{(1-x)^{(r+N_0+N_1-1)}} F(1-r-N_0, 1-r-N-N_0-N_1, 1-N-N_0, x). \quad (3.50)$$

Cada uma destas funções pode ser expandida em série de potências de  $x$ , o que resulta nos componentes dos autovetores  $\vec{a}_r$ . Utilizaremos, sempre que possível, a notação de Pochhammer de 3.45:

$$a_{rn} = \sum_{p=0}^{\bar{p}} \frac{(N_0 + N_1 + r - 1)^{\{n-p\}}}{(n-p)!} D_p, \quad (3.51)$$

com

$$D_p = \frac{(-1)^p (N_0 + r - p)^{\{p\}} (N + N_0 + N_1 + r - p)^{\{p\}}}{p! (N + N_0 - p)^{\{p\}}}, \quad (3.52)$$

e

$$\bar{p} = \min [n, N_0 + r - 1]. \quad (3.53)$$

Note que estas expressões são sempre válidas e resolvem o problema de encontrar os  $\vec{a}_r$ ; para que estes autovetores tenham utilidade, porém, ainda é necessário encontrar os  $\vec{b}_r$ . Para tanto, voltaremos à equação 3.40 e definimos uma outra função geratriz  $q_r(x)$ , inteiramente análoga à de 3.41:

$$Q_r(x) = \sum_{n=-N_1+1}^{N+N_0-1} b_{rn} x^n. \quad (3.54)$$

É importante notar que os limites da somatória neste caso não são triviais. Isto ocorre porque, para manter a equação diferencial consistente com o nosso problema e fazer com que a relação de recursão 3.40 valha em todo lugar, escolhemos como condições de contorno que  $b_{r,-N_1} = b_{r,N+N_0} = 0$ . Isto, de acordo com os  $\kappa$  de 3.29, garante que todo  $b_{rn}$  com  $n < -N_1$  e  $n > N + N_0$  seja nulo.

Realizando agora a multiplicação de 3.40 por  $x^n$  e somando em  $n$ , chegamos, após manipulação algébrica cuidadosa, na seguinte equação diferencial:

$$x(1-x)^2 \frac{d^2 Q_r(x)}{dx^2} + (1-x) [(N - N_1 + 1) - x(N + N_0 - 3)] \frac{dQ_r(x)}{dx} + \left[ \frac{(N+1)(N_1-1)}{x} - NN_1 + \mu_r + x(N + N_0 - 1) \right] Q_r(x) = 0. \quad (3.55)$$

Esta equação diferencial não-homogênea é de difícil manipulação, e faz-se necessário utilizar a mudança de variáveis:

$$Q_r(x) = \frac{x^{(1-N_1)}}{(1-x)^{(r+1)}} g_r(x). \quad (3.56)$$

Esta mudança de variáveis faz com que 3.55 se transforme numa equação diferencial hipergeométrica do tipo 3.48, com parâmetros  $\varphi$ ,  $\phi$  e  $\psi$  dados por:

$$\begin{cases} \varphi = 1 - r - N_1 \\ \phi = 1 - r - N - N_0 - N_1 \\ \psi = 1 - N - N_1 \end{cases} . \quad (3.57)$$

Desta forma, se desprezarmos novamente a segunda solução linearmente independente devido à presença de potências muito maiores do que as nossas, restritas entre  $x^i$  com  $0 \leq i \leq N$ , a função geratriz 3.54 é:

$$Q_r(x) = \frac{x^{(1-N_1)}}{(1-x)^{(r+1)}} F(1-r-N_1, 1-r-N-N_0-N_1, 1-N-N_1, x). \quad (3.58)$$

Esta solução pode, assim como 3.50, ser expandida em série de potências de  $x$  para a obtenção dos componentes  $b_{rn}$  dos  $\vec{b}_r$ . Há uma situação que deve ser tratada em particular, que é a de  $N_0 = N_1 = 0$ ; nesta, as duas soluções, que devem ser tratadas separadamente, são:

$$\vec{b}_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \vec{b}_1 = \begin{pmatrix} -N \\ -N+2 \\ -N+4 \\ \vdots \\ N-4 \\ N-2 \\ N \end{pmatrix} \quad (3.59)$$

No caso em que  $N_1 \neq 0$  ou  $N_0 \neq 0$ , a expansão em série de potências de 3.58 fornece:

$$b_{rn} = \sum_{p=0}^{\bar{p}} \frac{(n-p+N_1)^{\{r\}}}{r!} \bar{D}_p, \quad (3.60)$$

com

$$\bar{D}_p = \frac{(-1)^p (N_1 + r - p)^{\{p\}} (N + N_0 + N_1 + r - p)^{\{p\}}}{p! (N + N_1 - p)^{\{p\}}}, \quad (3.61)$$

e

$$\bar{p} = \min [n + N_1 - 1, N_1 + r - 1]. \quad (3.62)$$

Todos os valores, incluindo  $b_0$  e  $b_N$ , estão sempre de acordo com a solução numérica e até com diagonalizações algébricas diretas realizadas no *Mathematica* para matrizes  $W$  pequenas.

Ainda é possível normalizar o autovetor assintótico (com  $\lambda = 1$ ) para o caso em que  $N_0$  e  $N_1$  são diferentes de zero. Neste caso, obtemos:

$$\sum_{n=0}^N a_{0n} = \frac{(N_0 - 1)! (N + N_0 + N_1 - 1)!}{(N + N_0 - 1)! (N_0 + N_1 - 1)!}. \quad (3.63)$$

Desta forma, assintoticamente, podemos definir uma densidade de probabilidade  $\rho$  dada por:

$$\rho(n) = C(N, N_0, N_1) \frac{(N_1 + n - 1)! (N + N_0 - n - 1)!}{(N - n)! n!}. \quad (3.64)$$

com constante de normalização  $C(N, N_0, N_1)$  dada por:

$$C(N, N_0, N_1) = C(N, N_1, N_0) = \frac{N! (N_0 + N_1 - 1)}{(N + N_0 + N_1 - 1)! (N_1 - 1)! (N_0 - 1)!}. \quad (3.65)$$

A fórmula 3.64 corresponde rigorosamente aos resultados numéricos obtidos através de estatística de simulações.

### 3.2.4 Generalização para $N_0$ e $N_1$ não-inteiros

Do ponto de vista da genética de populações, seria interessante considerar a possibilidade de as taxas de mutação associadas com os nós de estado interno fixo assumirem valores quaisquer e não só os números racionais  $\mu_0 = N_0 / (N + N_0 + N_1 - 1)$  e  $\mu_1 = N_1 / (N + N_0 + N_1 - 1)$ . No nosso modelo, obtivemos uma solução para estes casos automaticamente, uma vez que as nossas equações diferenciais para  $p_r(x)$  e  $q_r(x)$  são perfeitamente válidas para valores reais quaisquer de  $N_0$  e  $N_1$ . Além disso, para as expressões de  $a_{rm}$  e  $b_{rm}$ , podemos substituir diretamente  $N_0$  e  $N_1$  por grandezas reais  $q_0$  e  $q_1$ , escrevendo as probabilidades em termos de funções gama. Para as distribuições de probabilidade de equilíbrio (autovetores com  $\lambda = 1$ ), obtemos, desta

forma, a expressão:

$$P(n) = \frac{N!}{(N-n)! n!} \frac{\Gamma(q_1 + n) \Gamma(N + q_0 - n)}{\Gamma(q_1) \Gamma(N + q_0)}. \quad (3.66)$$

Nesta expressão,  $q_0$  e  $q_1$  podem ser quaisquer dois números reais que definam as taxas de mutação. O caso em que  $q_0 = q_1$  representa mutações sem preferencialidade, nas quais um estado pode ser alterado para 0 ou 1 com igual probabilidade. Se  $q_0 \neq q_1$ , as mutações tendem a um dos alelos (equivalente ao nosso estado interno) de um gene, em um problema genético típico. Podemos interpretar este caso como um favorecimento por seleção natural de um dos alelos. Uma das vantagens de mapear o problema de genética de populações, no qual deriva genética e mutações competem, é que podemos subsequente considerar estruturas diferentes de redes. A figura 3.22 indica alguns exemplos da expressão 3.66 para vários valores não-inteiros de  $N_0$  e  $N_1$ .

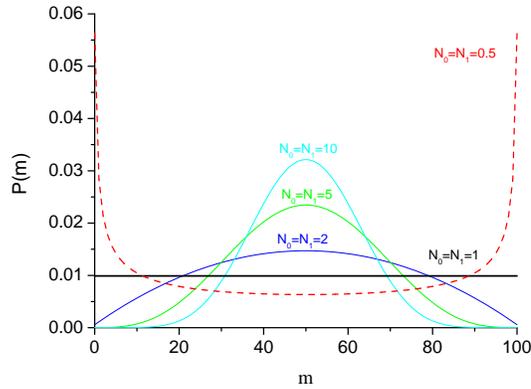


Figura 3.22: Alguns exemplos de  $P(n)$  de 3.66 para vários valores de  $N_0$  e  $N_1$ .

Podemos ainda aproximar a expressão 3.66 para o caso em que  $N_0 \ll 1$  e  $N_1 \ll 1$  em dois limites: o primeiro, para  $n \ll N$ , e o segundo, para  $n \gg 1$ . Faremos uso das seguintes aproximações:

1.  $\Gamma(k + \epsilon) \approx \Gamma(k)(1 + \epsilon \ln k)$  para  $\epsilon \ll 1/\ln(k)$  e  $k$  inteiro.
2.  $\epsilon \Gamma(\epsilon) \approx 1$  para  $\epsilon \rightarrow 0$ .
3.  $\Gamma(1 - x) = \pi / [\sin(\pi x) \Gamma(x)]$

Utilizando as expressões (1) e (2) em 3.66, temos, para  $n \ll N$ ,

$$P(n) \approx \frac{N!}{(N-n)! n!} (n-1)! N_1 (1 + N_1 \ln n) \frac{(N-n-1)!}{(N-1)!}$$

$$= \frac{NN_1}{n(N-n)}(1 + N_1 \ln n) \approx \frac{N_1}{n}(1 + N_1 \ln n) \approx \frac{N_1}{n^{1-N_1}} \quad (3.67)$$

De forma análoga, para  $n \gg 1$  podemos obter:

$$P(n) \approx \frac{N_1}{(N-n)^{1-N_0}}[1 + (N_1 - N_0) \ln N]. \quad (3.68)$$

Estas duas expressões não estão simétricas devido ao fato de que a solução ainda não foi adequadamente normalizada em nenhum dos dois casos. Podemos utilizar a expressão 3.65 com funções gamma no lugar de fatoriais e fazer uso da expressão (3) para chegar em uma normalização:

$$\begin{aligned} C(N, N_0, N_1) &\approx \frac{\pi\Gamma(1)(N_0 + N_1) \cos(\pi N) \Gamma(N)[1 + (N_0 + N_1) \ln N]}{\pi N_0 \cos(\pi N)\Gamma(1)\Gamma(N)[1 + N_0 \ln N]} \\ &= \frac{N_0 + N_1}{N_0} \frac{[1 + (N_0 + N_1) \ln N]}{[1 + N_0 \ln N]} \\ &\approx \frac{N_0 + N_1}{N_0} (1 + N_1 \ln N). \end{aligned} \quad (3.69)$$

Note que esta constante é a mesma, independentemente do limite tomado ( $n \ll N$  ou  $n \gg 1$ ). Dividindo as expressões 3.67 e 3.68 por 3.69 obtemos:

$$\rho(n) \approx \frac{N_1 N_0}{N_0 + N_1} (1 - N_1 \ln N) \frac{1}{n^{1-N_1}} \quad \text{para } n \ll N \quad (3.70)$$

e

$$\rho(n) \approx \frac{N_1 N_0}{N_0 + N_1} (1 - N_0 \ln N) \frac{1}{(N-n)^{1-N_0}} \quad \text{para } N-n \ll N. \quad (3.71)$$

Uma vez obtidas estas duas soluções, podemos somá-las e obter trivialmente uma excelente aproximação para qualquer  $n$  entre 0 e  $N$  dada por:

$$\rho(n) \approx \frac{N_1 N_0}{N_0 + N_1} \left( \frac{1}{n^{1-N_1}} (1 - N_1 \ln N) + \frac{1}{(N-n)^{1-N_0}} (1 - N_0 \ln N) \right) \quad (3.72)$$

A figura 3.23 mostra uma comparação da solução exata com esta aproximação para um caso em que  $N_0 = N_1 = 0,01$  e  $N = 100$ ; a correspondência é excelente.

### 3.2.5 Análise de redes complexas através de valores efetivos de $N_0$ e $N_1$

Se a dinâmica de dois estados internos utilizada até este ponto for estendida para redes mais complexas, teremos problemas sérios para repetir a análise feita até este ponto, uma vez que a matriz de conectividade irregular destas redes torna uma formulação analítica intratável. Mas, sempre que  $N_0 \neq 0$  e  $N_1 \neq 0$ , há uma distribuição de probabilidade assintótica (para  $t \rightarrow \infty$ ) não trivial, como no caso da rede totalmente conectada, e é uma proposta interessante descrever esta curva assintótica no

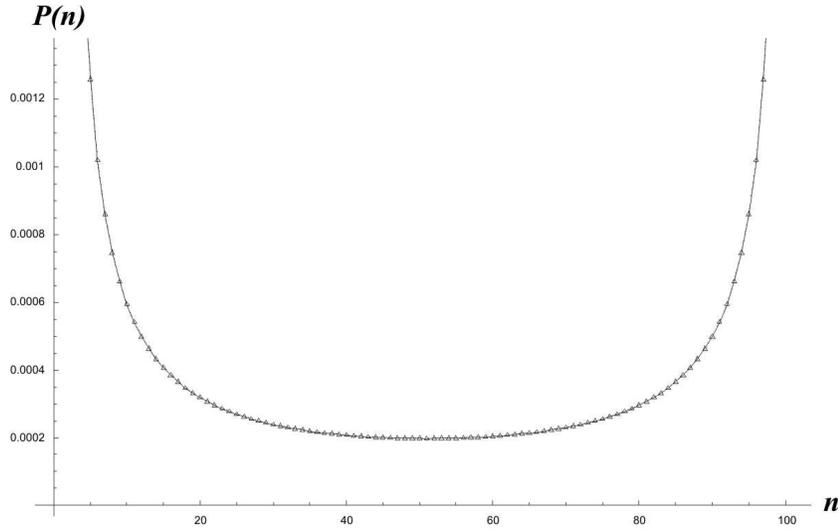


Figura 3.23: Comparação de distribuições assintóticas de probabilidade da dinâmica para rede totalmente conectada: em preto, curva obtida exatamente através da fórmula 3.65 e em cinza, curva aproximada com 3.72 para  $N_0 = N_1 = 0,01$  e  $N = 100$ .

formalismo de uma rede totalmente conectada.

Isto pode ser conseguido de uma forma bastante imediata. Quando, em redes mais complicadas, temos nós cujo estado interno está fixo, estes nós exercem uma influência na rede que não é igual à exercida por um elemento de uma rede totalmente conectada. Podemos então ajustar dois parâmetros  $(N_0)_{ef}$  e  $(N_1)_{ef}$ , que chamaremos de *valores efetivos* de  $N_0$  e  $N_1$ , estes sendo números não-inteiros tais que a distribuição assintótica de 3.65 imite de uma forma bastante satisfatória uma curva assintótica de probabilidade obtida para uma rede não-totalmente conectada com  $N_0$  e  $N_1$  inteiros dispostos de uma forma complexa na rede. Ao longo de nossas próximas seções, que estudam a dinâmica de outras redes mais elaboradas do que a totalmente conectada, faremos esta análise várias vezes e veremos que, para redes sem caráter extenso, é possível ajustar  $(N_0)_{ef}$  e  $(N_1)_{ef}$  tais que a distribuição assintótica de probabilidade é muito bem explicada pelo nosso modelo. Discutiremos as implicações destas comparações na conclusão deste trabalho, após uma análise de todos os dados referentes às outras topologias.

### 3.3 Dinâmica em Rede Aleatória

#### 3.3.1 Criando a Rede

Redes aleatórias, já explicadas no capítulo 2, são boas aproximações para um grande número de sistemas reais. Assim sendo, é de interesse investigarmos como se comporta a dinâmica de um sistema destes. Infelizmente, nenhuma tentativa de solucionar o

problema analiticamente baseado na equação 3.4 na página 18 terá sucesso, uma vez que a matriz de conectividade  $\zeta$  é aleatória.

Uma abordagem numérica é imediata e pode ser realizada com uma modificação bastante simples do algoritmo utilizado para o problema totalmente conectado. De fato, podemos utilizar exatamente as mesmas variáveis, adicionando uma série de números inteiros  $v_{\#}(i)$ , com  $1 \leq i \leq N$ , que designa o número de vizinhos do  $i$ -ésimo nó da rede. O algoritmo deve então ser modificado de forma tal que a seleção de  $i_{cop}$ , o elemento a ser copiado, deve ser feita considerando  $1 \leq i_{cop} \leq v_{\#}(i_{at})$ , onde  $i_{at}$  é, como já definido anteriormente, o nó que terá seu estado interno atualizado. Em uma rede totalmente conectada,  $v_{\#}(i) = N + N_0 + N_1 - 1$ ; em geral, como em uma rede real, este não é o caso.

Uma vez modificado o algoritmo para incluir  $v_{\#}(i)$ , basta então gerar uma rede aleatória com uma probabilidade de conexão  $p_c \gg 1/N$  e preencher a matriz de vizinhos  $v(i, j)$  de uma forma representativa. Resumidamente, utilizaremos a seguinte seqüência para realizar esta tarefa:

1. Criaremos uma lista de pares de números inteiros que contenha os índices dos nós ligados por todas as conexões possíveis. A lista segue o formato

$$\{(1, 2), (1, 3), \dots, (2, 3), (2, 4), \dots, (N - 2, N - 1), (N - 1, N)\}$$

onde para todo par  $(i, j)$  vale  $i < j$ , e há  $n_{conexões} = N(N - 1)/2$  pares de índices.

2. Inicializamos uma rede completamente sem conexões, para a qual  $v_{\#}(i) = 0$  para todo  $i$ .
3. Varremos a lista de  $n_{conexões}$  uma por uma e sorteamos, para cada par  $(i, j)$ , um número real  $z$ . Se  $z < p_c$ , então adicionamos uma conexão entre aquele par particular de índices, adicionando 1 em  $v_{\#}(i)$  e em  $v_{\#}(j)$  e fazendo  $v(i, v_{\#}(i)) = j$  e  $v(j, v_{\#}(j)) = i$ . Se  $z > p_c$ , então não ocorre nada.

Esta seqüência gera os dados necessários para simular a dinâmica de redes aleatórias de acordo com os mesmos algoritmos já explicados na seção de dinâmica de redes totalmente conectadas.

### 3.3.2 Abordagem Numérica

Podemos implementar o algoritmo utilizado para redes totalmente conectadas de uma forma imediata. Voltando à página 23, temos de considerar a possibilidade de que o estado inicializado seria um pouco viciado, uma vez que os nós numerados de 1 a  $N$  são inicializados de forma tal que os nós de 1 a  $n_0$  têm estado interno 1, e os numerados

$n_0 + 1$  a  $N$  têm estado interno 0. Na realidade, para uma simulação adequada, seria necessário sortear quais dos  $N$  elementos livres têm de fato estado interno 1; isso não foi necessário antes devido à indistinguibilidade dos elementos da rede na topologia totalmente conectada.

A partir de agora, faz-se necessário<sup>4</sup> inicializar os estados  $\sigma_i$  da rede com o seguinte algoritmo de sorteio aleatório:

1. Zerar todos os  $\sigma_i$  com  $0 \leq i \leq N$ .
2. Realizar os seguintes passos  $n_0$  vezes:
  - (a) Sortear um número  $l$  entre 1 e  $N$ .
  - (b) Enquanto  $\sigma_l = 1$ , sortear um outro número  $l$  entre 1 e  $N$ .
  - (c) Estipule  $\sigma_l = 1$ .
3. Inicialize  $\sigma_i$  com  $\sigma_i = 1$  para  $N + 1 \leq i \leq N + N_1$  e, finalmente,  $\sigma_i = 0$  para  $N + N_1 + 1 \leq i \leq N + N_0 + N_1$ , de acordo ainda com o método de inicialização proposto anteriormente.

Estes comandos bastante simples farão com que o estado inicial seja embaralhado entre os nós com estados internos livres. Note que os elementos com estados internos fixos ainda continuam indexados da mesma forma.

Podemos então efetuar a dinâmica de acordo com o algoritmo estipulado anteriormente. Note que escrevemos o algoritmo já pensando na possibilidade de simular topologias diferentes, nas quais  $k_i \neq N + N_0 + N_1 - 1$  como na rede totalmente conectada.

Os resultados para redes aleatórias se mostraram bastante interessantes: eles são idênticos às simulações realizadas para a rede totalmente conectada. Tipicamente, se considerarmos uma rede de  $N = 200$  e probabilidade de conexão de  $p \gg 0,005$ , de acordo com a regra para formação de supergrupo vista no capítulo 2, todas as figuras de simulações de redes totalmente conectadas são reproduzidas para redes aleatórias, independentemente se escolhermos, digamos,  $p = 0,75$  ou  $p = 0,1$ .

Isto faz sentido: a rede aleatória simplesmente condensa parte da aleatoriedade ao selecionar um elemento para copiar em sua topologia, não afetando significativamente o processo de cópia que acontece em uma rede totalmente conectada, *contanto* que haja número apreciável de conexões ainda presentes entre os elementos. Isto mostra que as redes aleatórias são muito bem representadas por redes totalmente conectadas,

---

<sup>4</sup>Na realidade, na rede aleatória ainda poderíamos ter usado o método anterior para inicializar a rede, uma vez que a topologia é aleatória e a aleatoriedade não traz consigo nenhuma tendência para influenciar a dinâmica.

o que dá grande abrangência a todos os resultados discutidos até este ponto, seja considerando  $N_0 = N_1 = 0$  ou não. Optamos por não reproduzir nenhum resultado aqui justamente porque não há absolutamente nenhuma diferença entre o que já vimos até este ponto e os resultados para redes aleatórias.

## 3.4 Dinâmica em Rede Reticulada

### 3.4.1 Criando a Rede

Redes reticuladas são bastante simples em sua essência e podem ser geradas de forma bastante imediata. Na nossa análise, consideraremos redes de uma, duas ou até três dimensões, e sempre com a simetria mais simples possível, a cúbica. Caracterizaremos a rede por dois parâmetros: o número  $a$  de elementos que perfaz uma aresta da rede e a distância mínima  $d$  para que haja uma conexão entre dois elementos. Estipularemos que a distância entre os elementos da rede mais adjacentes é sempre unitária. Alguns exemplos de redes bidimensionais pequenas estão retratados na Figura 3.24

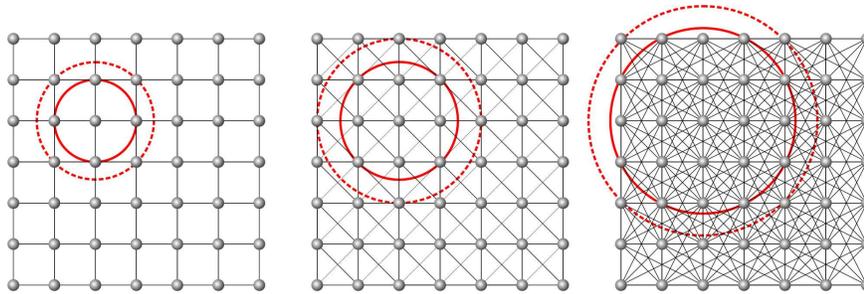


Figura 3.24: Exemplos de redes reticuladas bidimensionais com  $a = 7$  (49 elementos na rede). Da esquerda para a direita, temos:  $1 \leq d < \sqrt{2}$ ,  $\sqrt{2} \leq d < 2$  e  $\sqrt{5} \leq d < 2\sqrt{2}$ .

O algoritmo para gerar estas redes é simples:

1. Inicializamos uma rede completamente sem conexões, para a qual  $v_{\#}(i) = 0$  para todo  $i$ .
2. Dispomos os elementos da rede espacialmente utilizando um, dois ou três *loops* de programa, dependendo da dimensão da rede reticulada.
3. Para cada  $i$ -ésimo elemento da rede, realizamos as seguintes operações:
  - (a) Consideramos todos os  $j$ -ésimos elementos da rede, com  $i \neq j$ , medindo a distância  $d_{ij}$  entre estes dois elementos.
  - (b) Se  $d_{ij} < d$ , então fazemos  $v_{\#}(i) = v_{\#}(i) + 1$  e  $v(i, v_{\#}(i)) = j$ . Se  $d_{ij} > d$ , então não adicionaremos nenhuma conexão.

Primeiramente, vamos analisar redes com  $N_0 = N_1 = 0$ , nas quais só há elementos livres; depois, há interesse no estudo de redes com elementos com estado interno fixo. Na rede totalmente conectada os elementos são indistinguíveis, e não há a dúvida sobre onde posicionar os nós de estado fixo; na rede aleatória, também há uma indistinguibilidade como consequência do efeito médio da aleatoriedade das conexões, mas na rede reticulada, o posicionamento dos elementos de estado interno fixo é altamente relevante.

Optamos por investigar o que ocorre em interfaces compostas de elementos com estado interno livre que ligam um hiperplano com estado interno fixo a um outro hiperplano com estados fixos no estado oposto. A figura (3.25) ilustra esta idéia e mostra estas interfaces entre duas regiões com estado interno fixo. Nestas interfaces, optamos por redes com  $d = 1$ .

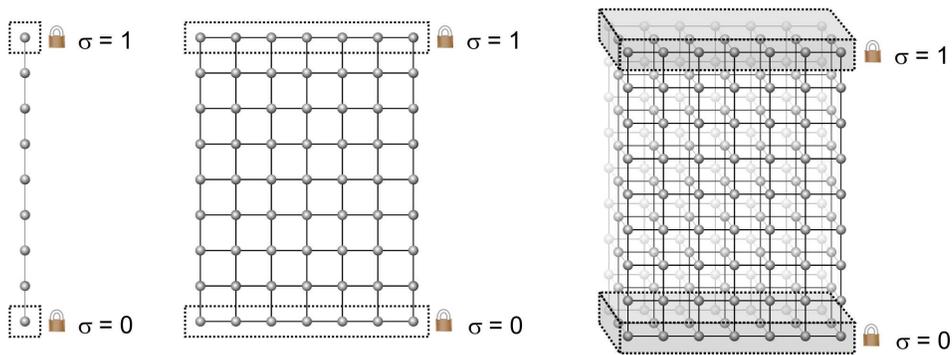


Figura 3.25: Exemplos ilustrativos de redes reticuladas livres com extremidades ligadas a regiões de estado interno fixo. Para conveniência, optamos por  $d = 1$ ; claro que estas interfaces podem existir para  $d > 1$  também.

No caso em que  $N_0 = N_1 = 0$ , não consideramos condições periódicas de contorno nas quais os elementos de uma extremidade da rede estão conectados aos elementos da outra extremidade da rede: era desejado observar justamente a influência da extensão da rede na dinâmica. No caso das interfaces também há a possibilidade de condições periódicas de contorno, mas esta não foi explorada. Na realidade, o caso de interfaces sempre recai, por simetria, sobre uma média de um problema unidimensional, e decidimos, por esta razão, realizar uma análise cuidadosa da interface unidimensional. As outras interfaces foram exploradas numericamente, mas sem muitos detalhes.

### 3.4.2 Resolução analítica de redes reticuladas unidimensionais

Existe um caso específico de redes reticuladas que ainda pode ser resolvido analiticamente de forma aproximada. Trata-se do caso em que  $d = 1$ , ou seja, apenas os vizinhos mais próximos estão conectados entre si, e há apenas uma dimensão. Desta

forma, todos os  $N$  elementos livres estão dispostos em sequência e há apenas duas possibilidades interessantes no que concerne os nós de estado interno fixo. Primeiro, pode não haver elementos cujo estado interno é fixo. Este caso não é tão simples e não será abordado analiticamente aqui. Na segunda possibilidade não-trivial, há um nó com estado interno fixo em 0 em uma das extremidades da rede linear e um nó com estado interno fixo em 1 na outra extremidade. Estas possibilidades estão retratadas na figura 3.26.

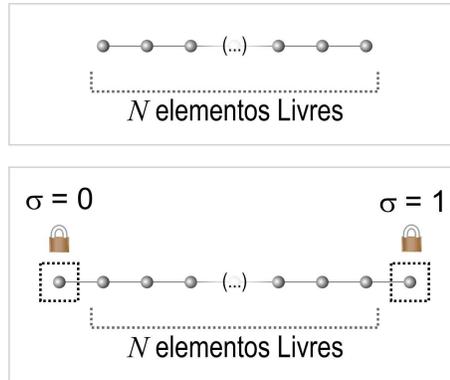


Figura 3.26: Possibilidades de redes reticuladas unidimensionais com  $d = 1$ : extremidades fixas ou não.

Para especificar um estado de uma rede com este aspecto, basta informar até que ponto da rede há estados 1, o que na realidade é idêntico ao cálculo proposto em 3.5. Note que, ao utilizar esta especificação de um estado, estamos considerando apenas estados nos quais não há "buracos", ou seja, os únicos estados acessíveis para esta rede são aqueles em que os nós até um certo ponto na cadeia linear estão em um estado, e deste ponto em diante em outro. Claro que, uma vez que  $d = 1$ , a rede sempre tenderá a um estado deste tipo. A figura retrata alguns estados possíveis, assim como um que não está sendo considerado, que possui lacunas.

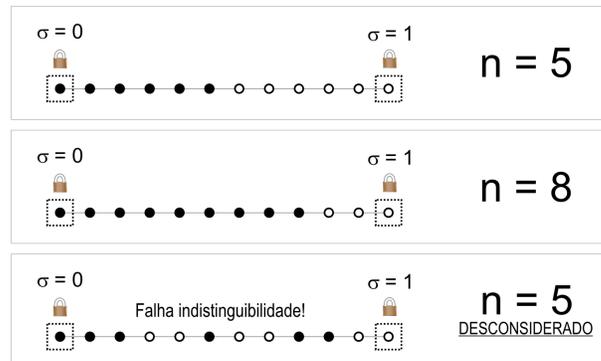


Figura 3.27: Possíveis estados para redes reticuladas unidimensionais com  $d = 1$  e  $N = 10$  com elementos fixos nas extremidades.

Agora, podemos escrever, para sistemas deste tipo, equações para as probabilidades de encontrar um dado estado  $n$  após  $t$  passos da dinâmica, de forma inteiramente análoga ao que foi feito em 3.7.

A figura 3.28 mostra como é possível obter, em princípio, qualquer estado após um passo da dinâmica, dadas as probabilidades dos estados antes desta atualização.

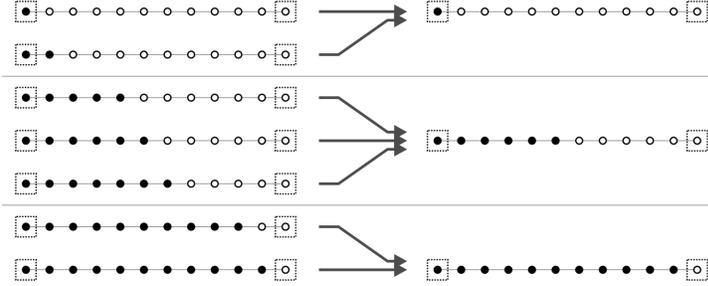


Figura 3.28: Maneiras de obter um estado após um passo da dinâmica.

Podemos então escrever:

$$P_{t+1}(n) = \frac{1}{2N}P_t(n+1) + \left(1 - \frac{1}{N}\right)P_t(n) + \frac{1}{2N}P_t(n-1), \quad 0 < n < N \quad (3.73)$$

$$P_{t+1}(0) = \frac{1}{2N}P_t(1) + \left(1 - \frac{1}{2N}\right)P_t(0)$$

$$P_{t+1}(N) = \left(1 - \frac{1}{2N}\right)P_t(N) + \frac{1}{2N}P_t(N-1)$$

Estas equações são consideravelmente mais simples do que as de 3.7, o que é de se esperar dada a simplicidade do problema. A matriz de evolução temporal pode ser escrita como

$$U = \frac{1}{N} \begin{pmatrix} N - \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \cdots & \cdots & 0 & & \\ \frac{1}{2} & N - 1 & \frac{1}{2} & \ddots & & & \vdots \\ 0 & \frac{1}{2} & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \frac{1}{2} & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \frac{1}{2} & N - 1 & & \frac{1}{2} \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & \frac{1}{2} & N - \frac{1}{2} & \end{pmatrix}. \quad (3.74)$$

Neste caso, ao contrário do caso da rede totalmente conectada, autovetores e autovalores podem resolver o problema de uma forma mais fácil: em uma matriz simétrica, os autovetores pela esquerda e os pela direita são iguais. Vamos considerar novamente

que temos um espectro  $\lambda_r$  de  $N + 1$  autovalores, indexados com  $0 \leq r \leq N$  em ordem decrescente.

O espectro  $\lambda_r$  em questão pode ser obtido através de investigação com o software *Mathematica*, da mesma forma que fizemos anteriormente com os autovalores da evolução temporal da rede totalmente conectada. Temos então:

$$\lambda_r = \left(1 - \frac{1}{N}\right) + \frac{1}{N} \cos\left(\frac{\pi r}{(N+1)}\right). \quad (3.75)$$

A expressão 3.75 mostra que o espectro de autovalores está contido entre 1 e  $1 - 2/N$ .

Uma vez conhecidos os autovalores, podemos agora retornar à equação 3.73 e escrever a relação:

$$\frac{1}{2N} a_{r,k-1} + \left(1 - \frac{1}{N}\right) a_{r,k} + \frac{1}{2N} a_{r,k+1} = \lambda_r a_{r,k}. \quad (3.76)$$

Esta equação é válida, de acordo com 3.73, apenas para  $k$  entre 1 e  $N - 1$ ; porém, podemos, sem perda de generalidade, tomar  $a_{r,-1} = a_{r0}$  e  $a_{rN} = a_{r,N+1}$  e a equação 3.76 reproduzirá adequadamente as duas equações adicionais de 3.73. Podemos então inserir em 3.76 os autovalores de 3.75 e multiplicar tudo por  $2N$ :

$$a_{r,k+1} - 2 \cos\left(\frac{r\pi}{N+1}\right) a_{r,k} + a_{r,k-1} = 0. \quad (3.77)$$

Multiplicamos agora esta expressão por  $x^k$ , somamos em  $k$  de 0 a 1 e definimos a função geratriz:

$$f_r(x) = \sum_{k=0}^N a_{rk} x^k \quad (3.78)$$

Após um pouco de álgebra, e considerando que há uma simetria do tipo  $a_{rN} = (-1)^r a_{r0}$ , chegamos em uma função geratriz que é razão de dois polinômios:

$$f_r(x) = a_{r0} (1-x) \frac{1 - (-1)^r x^{N+1}}{1 - 2x \cos\left(\frac{r\pi}{N+1}\right) + x^2} \quad (3.79)$$

Esta função geratriz pode ser reescrita como<sup>5</sup>:

$$f_r(x) = \bar{A} \left(\frac{1-x}{x}\right) \sum_{k=1}^N x^k \sin\left(\frac{rk\pi}{N+1}\right) \quad (3.80)$$

A constante de normalização  $\bar{A}$  também pode ser encontrada e é:

---

<sup>5</sup>Veja Gradshtein, pg. XXX [16].

$$a_{rk} = \frac{1}{\sqrt{N+1}} \cos\left(\frac{r(2k+1)\pi}{2(N+1)}\right) \quad (3.81)$$

Assim, está encerrado o cálculo do caso em que há elementos fixos, uma vez que temos a solução analítica completa para qualquer  $N$ . A dinâmica tem um caráter difusivo que se assemelha a uma função de onda de poço de potencial quadrado atenuada de forma dependente da energia.

Em particular, as equações prevêm a existência de um autovetor assintótico constante e uniforme que foi, de fato, verificado. Ele é condizente também com a teoria de rede totalmente conectada, na qual, se  $N_0 = N_1 = 1$ , temos uma distribuição de probabilidade uniforme como estado assintótico.

Além disso, notamos que os nossos cálculos são indicativos de que, mesmo em redes reticuladas, processos discretos podem ser aproximados por equações bastante simples de difusão. Não nos demos ao trabalho de estender esta abordagem para redes bidimensionais ou mesmo tridimensionais, uma vez que seria necessária uma metodologia inteiramente diferente da que estamos utilizando aqui, mas é concebível que o aspecto difusivo da dinâmica permanecesse inalterado, na média.

### 3.4.3 Abordagem Numérica

As redes reticuladas podem ser simuladas com o mesmo algoritmo e com o mesmo código paralelo utilizado para as redes totalmente conectadas. Vamos utilizar novamente a mesma maneira de exibir resultados.

Iniciaremos a nossa análise com um estudo em redes livres ( $N_0 = N_1 = 0$ ) sobre a velocidade da dinâmica diante de variações do número de dimensões, efetuando simulações em redes unidimensionais, bidimensionais e tridimensionais. Em seguida, partiremos para o caso em que há elementos fixos, e analisaremos o único caso que nós nos propusemos a verificar, o caso da interface entre duas regiões com estado interno fixo, e veremos alguns resultados numéricos para a dinâmica, verificando que há uma perfeita correspondência entre o nosso modelo analítico e os resultados numéricos<sup>6</sup>.

**Redes Unidimensionais Livres** A figura 3.29 indica uma primeira simulação utilizando um parâmetro  $d = 6$ . Claro que, se  $d > N/2$ , teremos uma rede totalmente conectada; se  $d$  for inferior a  $N/2$ , esperamos que a dinâmica seja mais lenta, pois há um caráter extenso da rede que proíbe uma dinâmica excessivamente rápida. É exatamente isto que a figura 3.29 indica: note que a figura representa tempos de até 100000 passos da dinâmica, enquanto que uma rede totalmente conectada teria um aspecto

---

<sup>6</sup>Este cálculo é particularmente simples neste caso, uma vez que as expressões para a solução exata *não envolvem fatoriais*, e os autovetores pela esquerda e direita são os mesmos. A avaliação do nosso resultado analítico torna-se muito mais fácil aqui do que na solução de rede totalmente conectada.

não muito diferente de dispersão de estados se tivéssemos desenhado até apenas 25000 passos da dinâmica.

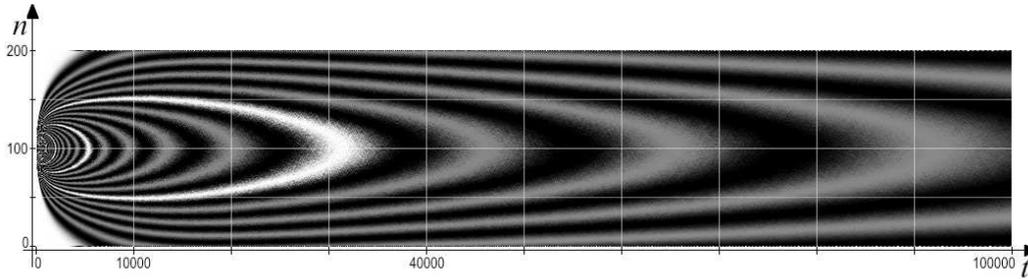


Figura 3.29: Dinâmica de rede reticulada na qual  $d = 6$ ,  $N = 200$ ,  $N_0 = N_1 = 0$ ; gerada com  $n_{divs} = 1000$  e  $n_{sims} = 10^7$ .

É evidente que, para  $d$ s maiores, temos uma dinâmica mais rápida, uma vez que a rede terá aspecto mais totalmente conectado e o caminho mínimo médio da rede será muito menor. A rede efetivamente perde o seu caráter espacial, o que faz com que mudanças de estado transitem mais livremente pela topologia. A figura 3.30 indica este comportamento: nela, tomamos como tempo final 50000 passos da dinâmica, metade da figura 3.29, e observamos uma dinâmica muito mais rápida. É natural esperar que a velocidade da dinâmica varie de forma monótona crescente com o crescimento de  $d$ , até a tendência assintótica quando  $d > N/2$  de obtermos exatamente a dinâmica de uma rede totalmente conectada. Nenhum dos outros resultados encontrados numericamente foge a esta regra bastante simples.

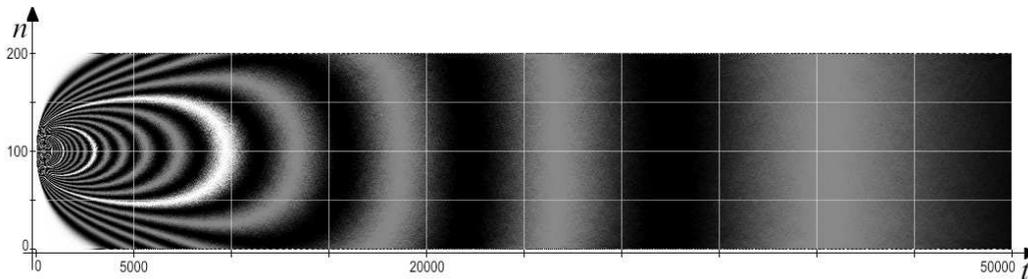


Figura 3.30: Dinâmica de rede reticulada na qual  $d = 50$ ,  $N = 200$ ,  $N_0 = N_1 = 0$ ; gerada com  $n_{divs} = 1000$  e  $n_{sims} = 10^7$ .

**Redes Bidimensionais e Tridimensionais Livres** As redes bi- e tridimensionais analisadas possuem valores de aresta  $a = 14$  no caso bidimensional ( $N = 196$ ) e  $a = 6$  no caso tridimensional ( $N = 216$ ). Estes são os valores inteiros que resultam em um número total de elementos da rede o mais próximo possível de  $N = 200$ , o que facilita a comparação com a dinâmica observada anteriormente para redes unidimensionais.

Em ambos os casos, observou-se a mesma dependência da velocidade da dinâmica do parâmetro  $d$ . Quando  $d$  se torna suficientemente grande ( $d > a\sqrt{D}/2$ , onde  $D$  é o número de dimensões da rede considerada), temos uma rede totalmente conectada; à medida em que  $d$  decresce, a rede tem conectividade mais extensa e, portanto, possui dinâmica associada mais lenta. A figura 3.31 mostra o caso bidimensional representativo de nossas análises, e a figura 3.32 representa os resultados numéricos para uma rede tridimensional. Note que escolhemos os parâmetros  $d$  da melhor forma tal que chegássemos próximos ao valor de  $k_i = 12$  para a rede da figura 3.29; no caso de  $d = 2$  bidimensional, temos  $\langle k \rangle = 10,5$ , e no caso tridimensional, temos, com  $d = 1,5$ ;  $k_i = 18$ , com muitos elementos periféricos com  $k_i < 18$  tal que  $\langle k \rangle = 13,3$ , um valor razoavelmente próximo de 12 que ainda permite comparações razoáveis.

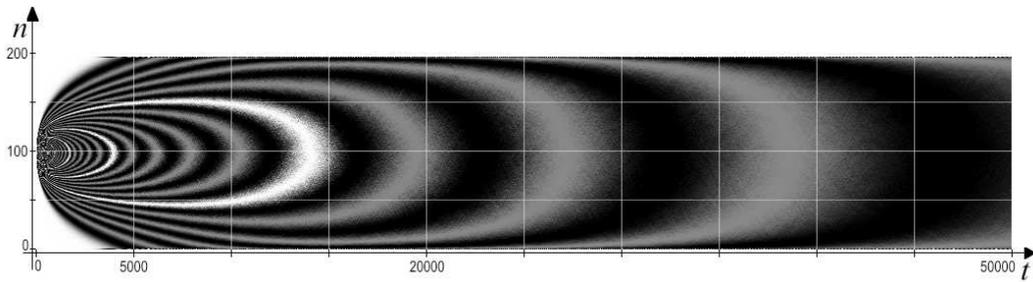


Figura 3.31: Dinâmica de rede reticulada bidimensional na qual  $d = 2$ ,  $a = 14$ ,  $N = 196$ ,  $N_0 = N_1 = 0$ ; gerada com  $n_{divs} = 1000$  e  $n_{sims} = 10^7$ .

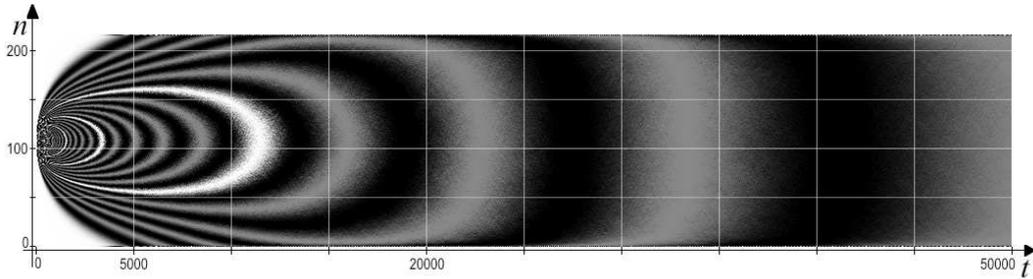


Figura 3.32: Dinâmica de rede reticulada tridimensional na qual  $d = 1,5$ ,  $a = 6$ ,  $N = 216$ ,  $N_0 = N_1 = 0$ ; gerada com  $n_{divs} = 1000$  e  $n_{sims} = 10^7$ .

Observamos que a dinâmica é consideravelmente mais rápida para redes em dimensões superiores. Note também que a diferença entre rede bidimensional e tridimensional em termos de velocidade da dinâmica é inferior à diferença de qualquer uma destas duas com a rede unidimensional, que, de longe, é a mais lenta de todas. Isto provavelmente deve-se ao fato de que estas redes têm caminhos mínimos médios drasticamente reduzidos em relação às redes unidimensionais, o que é óbvio a partir de sua estrutura. É claro que o caso de dinâmica em redes extensas, reticuladas em padrão

cúbico ou ainda mais complexo, já foi estudado com muitas ferramentas estatísticas diferentes, mas realizar uma análise muito aprofundada aqui está fora do escopo deste trabalho. Nossas análises, bastante superficiais, apenas posicionam redes reticuladas e redes extensas dentro do contexto de redes complexas.

**Interfaces entre Regiões de Estado Interno Fixo** O caso de interfaces unidimensionais foi estudado exclusivamente na situação em que  $d = 1$ , com estado inicial  $n = N/2$ , de tal forma que não há "buracos" constituídos por nós com estado interno diferente de seus dois vizinhos, como indica a figura 3.27. Foi feito um módulo simulador capaz de considerar interfaces unidimensionais, bidimensionais e até tridimensionais. Em todas as instâncias, havia um estado assintótico uniforme; em particular, as interfaces unidimensionais apresentam de fato a dinâmica analítica que foi demonstrada anteriormente. Note que este caso é uma exceção na qual *não será utilizada a inicialização da rede por sorteio*: os  $n_0$  nós com estado interno 1 serão considerados sequencialmente, e não escolhidos aleatoriamente, como explicado no processo de criação de redes aleatórias. Todas as outras inicializações de rede que não a da interface podem utilizar a inicialização por sorteio livremente.

Inicialmente, vamos apresentar dois conjuntos de resultados para redes unidimensionais com  $N = 60$ , sempre com  $N_0 = N_1 = 1$  dispostos nas extremidades e iniciando a rede com  $n = 30$  contados a partir da extremidade com  $N_1 = 1$ . Os primeiros dados, apresentados na figura 3.33, foram obtidos numericamente; esta figura deve ser comparada com a da imagem 3.34, correspondentes à mesma dinâmica avaliada com a solução exata de 3.81.

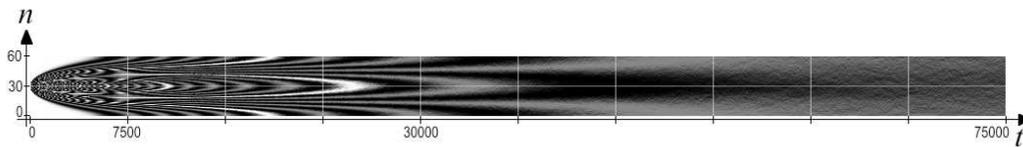


Figura 3.33: Dinâmica de interface reticulada unidimensional na qual  $d = 1$ ,  $N = 60$ ,  $N_0 = N_1 = 1$ ; gerada com  $n_{divs} = 500$  e  $n_{sims} = 10^7$ .

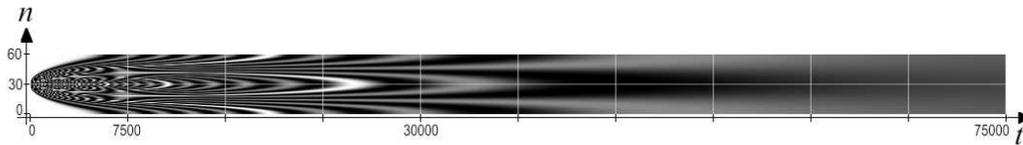


Figura 3.34: Dinâmica de interface reticulada unidimensional na qual  $d = 1$ ,  $N = 60$ ,  $N_0 = N_1 = 1$ ; gerada com  $n_{divs} = 500$  e solução analítica exata.

## 3.5 Dinâmica em Rede Mundo Pequeno

### 3.5.1 Criando a Rede

Para criar uma rede mundo pequeno de acordo com o algoritmo de Watts-Strogatz já discutido anteriormente, bastam alguns poucos passos a mais do que uma rede reticulada. Como temos uma probabilidade  $p_c$  de realocação de cada uma das conexões existentes, precisaremos criar uma lista de todas as conexões da rede, para então varrer esta lista e realocar aleatoriamente. Note que a rede de Watts-Strogatz é gerada a partir de uma rede unidimensional com condições periódicas de contorno.

O algoritmo para gerar uma rede de mundo pequeno utilizado foi este:

1. Inicializamos uma rede linear, para a qual reconhecidamente  $v_{\#}(i) = 2d$  para todo  $i$ ; precisamos preencher apenas a matriz de vizinhos  $v(i, j)$ .
2. Para cada  $i$ -ésimo elemento da rede, realizamos a seguinte operação:
  - (a) Considerar todos os  $j$  inteiros que satisfazem  $1 \leq j \leq d$ . Se  $i + j \leq N$ , então  $v(i, j) = i + j$  e  $v(j, i + d) = i$ ; caso contrário,  $v(i, j) = i + j - N$  e  $v(j, i + d) = N - i$ .
3. Criamos uma lista de pares de números inteiros que contenha os índices dos nós ligados por todas as conexões possíveis. A lista segue o formato

$$\{(1, 2), (1, 3), \dots, (2, 3), (2, 4), \dots, (N - 2, N - 1), (N - 1, N)\}$$

onde para todo par  $(i, j)$  vale  $i > j$ , e há  $n_{con} = Nd$  pares de índices.

4. Varremos a lista de  $n$  uma por uma e sorteamos, para cada par  $(i, j)$ , um número real  $z$ . Se  $z < p_c$ , então realocaremos a conexão entre aquele par particular de índices, tomando o cuidado de criar uma conexão que ainda não exista. Para isso, escolhemos realocar o índice  $j$ , sem perda de generalidade, para um outro índice  $j_{realoc}$ . Enquanto o par  $(i, j_{realoc})$  estiver contido na lista de conexões existentes, sortearemos outro  $j_{realoc}$  entre 0 e  $N$ .

Quando concluídos estes passos, teremos gerado uma rede mundo pequeno com, na média,  $Ndp_c$  conexões realocadas. Não consideraremos nenhum caso em que  $N_0 \neq 0$  ou  $N_1 \neq 0$ , por simplicidade; haveria bastante ambigüidade acerca de onde posicionar os elementos com estados fixos, se optássemos por fazê-lo.

### 3.5.2 Abordagem Numérica

Utilizaremos este algoritmo para realizar uma transição suave entre redes reticuladas e redes aleatórias, sendo que estas últimas apresentam a dinâmica típica de uma rede to-

talmente conectada. Esta transição suave é controlada pela probabilidade de reconexão  $p_c$ : quanto  $p_c = 0$ , temos uma rede reticulada unidimensional; quando  $p_c = 1$ , temos uma rede aleatória. Vamos verificar como a dinâmica se modifica para os seguintes valores de  $p_c$ : 0; 0,01; 0,05; 0,1; 0,2; 0,5; 0,75 e 1,0. Para possibilitar melhor comparação, trabalharemos com uma rede unidimensional com  $N = 200$ ,  $N_0 = N_1 = 0$ ,  $n_0 = 100$  e  $d = 6$  (com  $\langle k \rangle = 12$ ), sendo que os  $n_0$  estados 1 iniciais são dispostos aleatoriamente na rede.

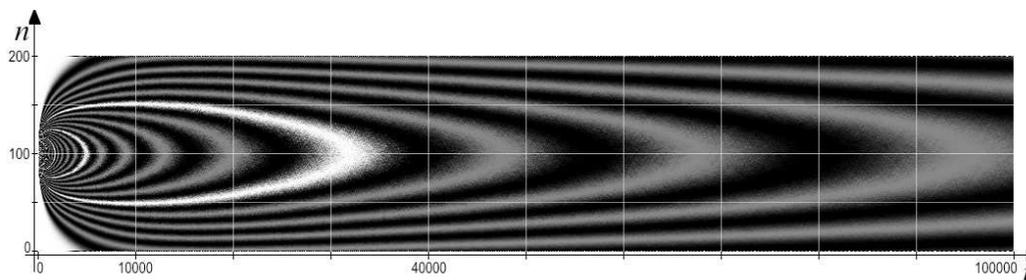


Figura 3.35: Dinâmica de rede mundo pequeno na qual  $p_c = 0$ ,  $d = 6$ ,  $N = 200$ ,  $N_0 = N_1 = 0$ ; gerada com  $n_{divs} = 1000$  e  $n_{sims} = 5.10^6$ .

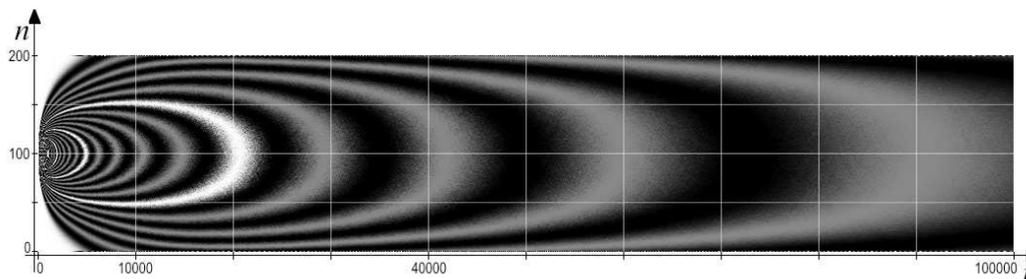


Figura 3.36: Dinâmica de rede mundo pequeno na qual  $p_c = 0,01$ ,  $d = 6$ ,  $N = 200$ ,  $N_0 = N_1 = 0$ ; gerada com  $n_{divs} = 1000$  e  $n_{sims} = 5.10^6$ .

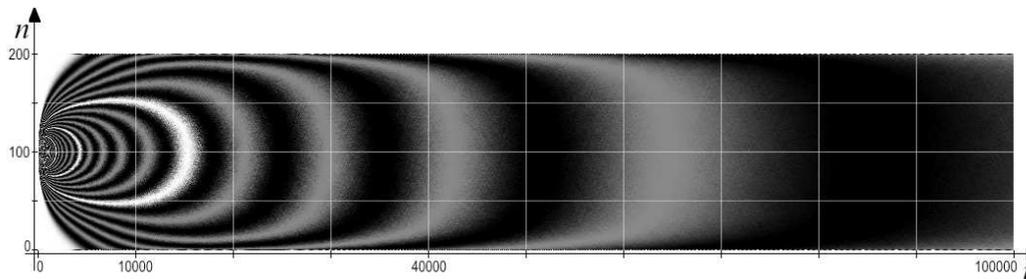


Figura 3.37: Dinâmica de rede mundo pequeno na qual  $p_c = 0,05$ ,  $d = 6$ ,  $N = 200$ ,  $N_0 = N_1 = 0$ ; gerada com  $n_{divs} = 1000$  e  $n_{sims} = 5.10^6$ .

Vemos imediatamente a partir destas figuras que a dinâmica se torna mais rápida mesmo para valores bastante pequenos de  $p_c$ . Considerando  $p_c$ s ainda maiores, temos as figuras:

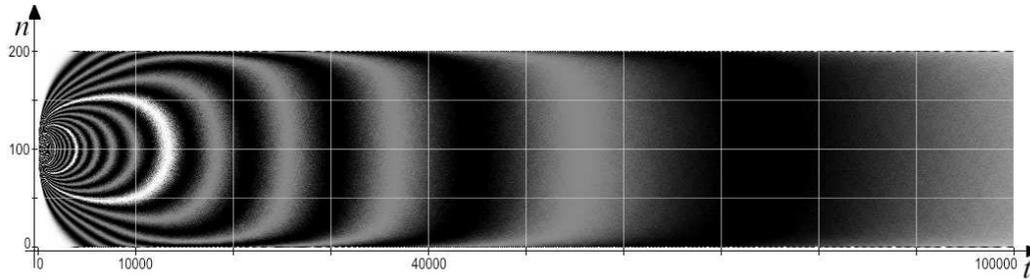


Figura 3.38: Dinâmica de rede mundo pequeno na qual  $p_c = 0,1$ ,  $d = 6$ ,  $N = 200$ ,  $N_0 = N_1 = 0$ ; gerada com  $n_{divs} = 1000$  e  $n_{sims} = 5 \cdot 10^6$ .

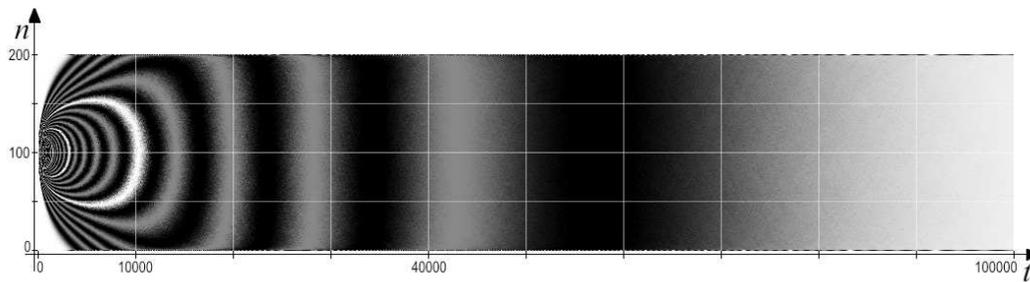


Figura 3.39: Dinâmica de rede mundo pequeno na qual  $p_c = 0,5$ ,  $d = 6$ ,  $N = 200$ ,  $N_0 = N_1 = 0$ ; gerada com  $n_{divs} = 1000$  e  $n_{sims} = 5 \cdot 10^6$ .

Nota-se que, com metade das conexões realocadas, temos uma dinâmica consideravelmente mais rápida do que a da figura 3.35. Além disso, a dinâmica torna-se mais e mais próxima da dinâmica de uma rede totalmente conectada, para a qual valem nossos resultados analíticos. Quando  $p_c = 1$ , recuperamos exatamente a figura 3.6, como podemos ver na Figura 3.40, o que é perfeitamente consistente.

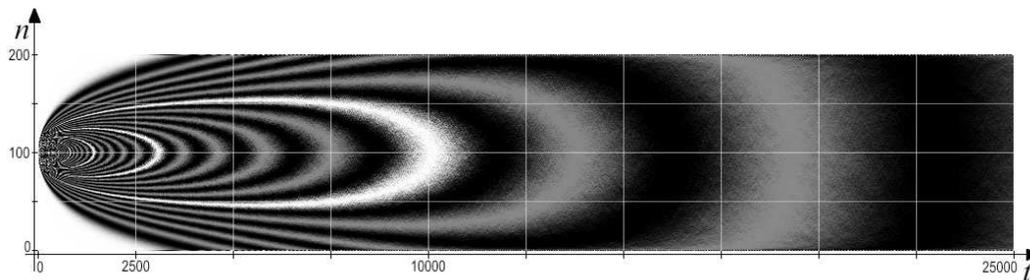


Figura 3.40: Dinâmica de rede mundo pequeno na qual  $p_c = 1$ ,  $d = 6$ ,  $N = 200$ ,  $N_0 = N_1 = 0$ ; gerada com  $n_{divs} = 1000$  e  $n_{sims} = 5 \cdot 10^6$ .

Desta análise, concluímos que a rede mundo pequeno de Watts-Strogatz tem dinâmica que é consideravelmente mais rápida do que uma rede reticulada tradicional, apesar de ter características topológicas mais típicas de redes reticuladas, como alto fator de agrupamento. Isto ressalta novamente a importância do caminho mínimo médio entre dois nós: para uma rede mundo pequeno, temos um caminho consideravelmente encurtado devido aos atalhos criados pelas conexões realocadas.

## 3.6 Dinâmica em Rede Estrela

### 3.6.1 Criando a Rede

Uma rede estrela, conforme já definido anteriormente, é composta de  $m_0$  elementos centrais totalmente conectados e  $N + N_0 + N_1 - m_0$  elementos periféricos, se considerarmos que os elementos com estado interno fixo ocupam posições periféricas. Estas redes podem ser geradas de forma muito simples através do uso do mesmo código que gerou a rede totalmente conectada de antes. Uma vez gerado o núcleo de  $m_0$  elementos, temos apenas de adicionar  $N + N_0 + N_1 - m_0$  nós com  $m_0$  conexões com o núcleo.

É aparente que, numa rede com esta topologia, a probabilidade de ocorrer uma cópia de um elemento fixo é consideravelmente menor do que em uma rede totalmente conectada com os mesmos  $N$ ,  $N_0$  e  $N_1$ . Veremos que isto tem um efeito bastante interessante na dinâmica.

### 3.6.2 Abordagem Numérica

Os resultados obtidos para a rede estrela mostraram que há uma dinâmica rápida bastante particular. Investigamos redes livres com  $N = 200$  e  $N_0 = N_1 = 0$  com diversos valores de  $m_0$  e constatamos que esta rede é, de fato, a que possui dinâmica mais rápida. Um exemplo típico para  $m_0 = 10$ , um vigésimo da rede, pode ser visto na figura 3.41. Note, a partir das curvas de igual probabilidade, que mais de 95% das simulações já estão praticamente estabilizadas nas extremidades após apenas 5000 passos da dinâmica. Uma outra observação bastante interessante é a proximidade da dinâmica com o caso totalmente conectado, como visto na figura 3.6.

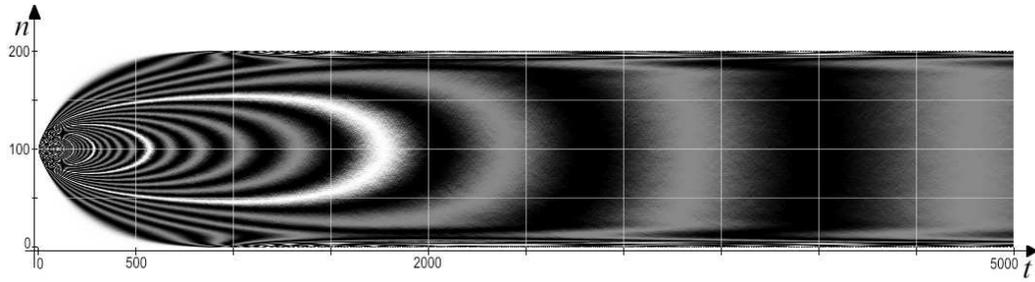


Figura 3.41: Dinâmica de rede estrela na qual  $m_0 = 10$ ,  $N = 200$ ,  $N_0 = N_1 = 0$ ; gerada com  $n_{divs} = 1000$  e  $n_{sims} = 10^7$ .

Para valores maiores de  $m_0$ , a dinâmica torna-se consideravelmente mais lenta. Isto não surpreende; afinal, nestes casos temos núcleos totalmente conectados maiores que trazem consigo uma dinâmica muito mais lenta. O limite mais interessante de fato é o em que  $m_0$  é um inteiro muito menor do que um décimo de  $N$ . Neste caso, a dinâmica admite um número bem visível de caminhos mais prováveis correspondente ao número de estados possíveis para o núcleo, e poucos passos da dinâmica são necessários para haver estabilização. Vemos este comportamento nitidamente na figura 3.42, com  $m_0 = 1$ : há dois estados internos possíveis para o elemento central da estrela, e vemos que o sorteio inicial do estado interno deste elemento é determinante para qual caminho a rede tomará. Se o elemento central tiver estado interno 0, a rede inteira seguirá um caminho exponencial para o estado  $n = 0$ ; se o elemento central tiver estado interno 1, a rede inteira tenderá ao estado  $n = N$ . Claro que existe a pequena probabilidade de que o nó central da rede troque o seu estado, o que causaria um pulso para o outro caminho e justifica a pequena probabilidade observada entre os picos da figura 3.42.

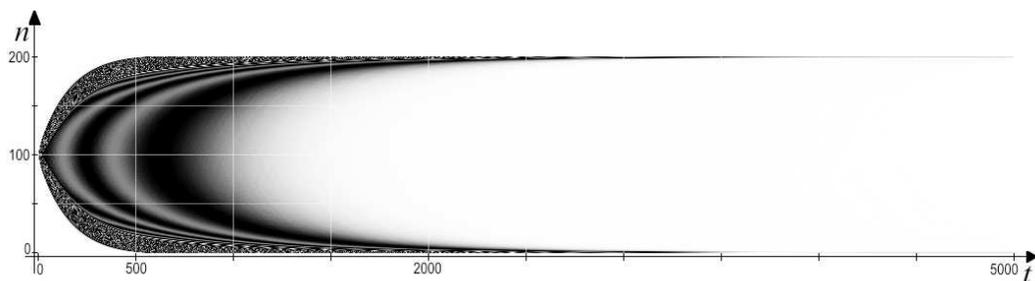


Figura 3.42: Dinâmica de rede estrela na qual  $m_0 = 1$ ,  $N = 200$ ,  $N_0 = N_1 = 0$ ; gerada com  $n_{divs} = 1000$  e  $n_{sims} = 10^7$ .

Alguns outros exemplos, como  $m_0 = 2$ , com três caminhos mais prováveis para a rede e  $m_0 = 3$ , com quatro caminhos mais prováveis, podem ser vistos nas figuras 3.43 e 3.44. Nestas figuras, torna-se evidente o argumento de que o número de estados possíveis do núcleo da estrela é naturalmente  $m_0 + 1$ .

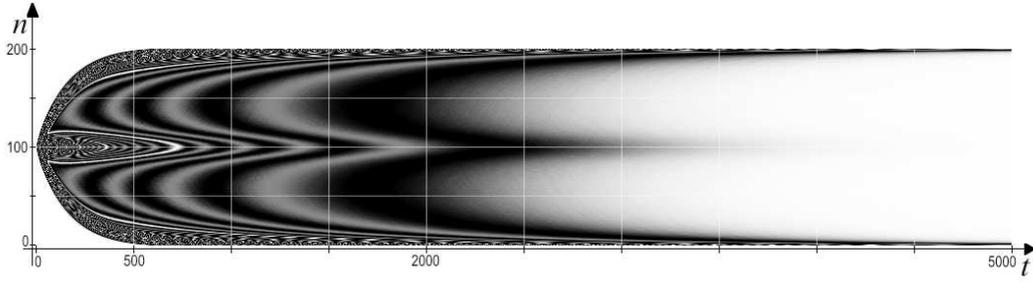


Figura 3.43: Dinâmica de rede estrela na qual  $m_0 = 2$ ,  $N = 200$ ,  $N_0 = N_1 = 0$ ; gerada com  $n_{divs} = 1000$  e  $n_{sims} = 10^7$ .

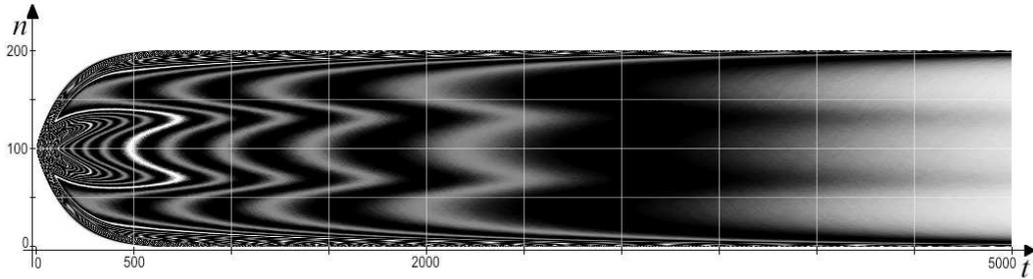


Figura 3.44: Dinâmica de rede estrela na qual  $m_0 = 3$ ,  $N = 200$ ,  $N_0 = N_1 = 0$ ; gerada com  $n_{divs} = 1000$  e  $n_{sims} = 10^7$ .

Estes caminhos só são visíveis se  $N \gg m_0$ , pois caso contrário há uma superposição tal que obtemos uma imagem suave, como o que ocorre na figura 3.41. Além destes caminhos equivalentes a um estado do núcleo da estrela, há também transições que aparecem entre estes caminhos. Durante a passagem de um para outro, temos, na média, uma curva exponencial bem definida, consequência de que, se não há alteração no estado do núcleo da estrela, a dinâmica da rede é semelhante a um processo poissoniano com distribuição de probabilidade exponencial.

**Caso de Elementos Fixos Unilateralmente** A dinâmica é alterada significativamente quando são adicionados elementos fixos. No caso de elementos fixos em apenas um dos estados internos, a dinâmica é trivial: todos os nós da rede eventualmente assumem aquele estado interno. A figura 3.41 modifica-se de forma muito semelhante à dinâmica de uma rede totalmente conectada, como podemos ver na Figura 3.45, se tomarmos, digamos,  $N_1 = 10$ .

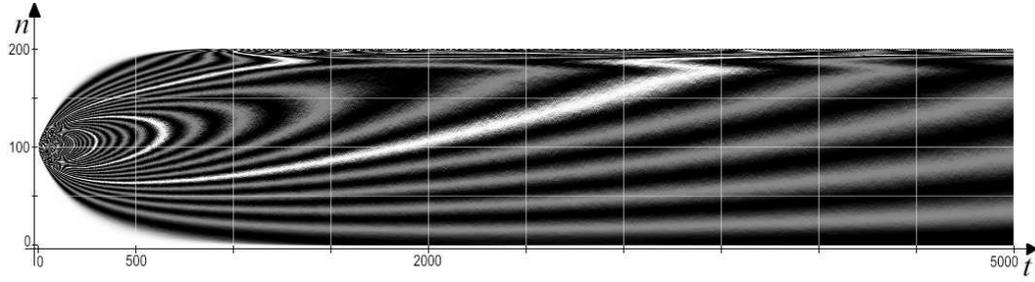


Figura 3.45: Dinâmica de uma rede estrela com  $m_0 = 10$ , para  $N_1 = 20$ ,  $N_0 = 0$ , com  $n_{divs} = 1000$  e  $n_{sims} = 10^7$ .

Analogamente, uma rede com  $m_0 = 2$  também tende ao estado em que  $n = 200$ , mas os caminhos correspondentes aos três estados do núcleo possíveis (0, 1 ou 2 nós no estado 1 no núcleo) continuam tendo o mesmo aspecto de antes. Isto pode ser visto na figura 3.46. Note, porém, que a estabilização total da rede consome muito mais tempo do que no caso em que não há elementos fixos, uma vez que a probabilidade de atuação dos elementos fixos é bastante baixa.

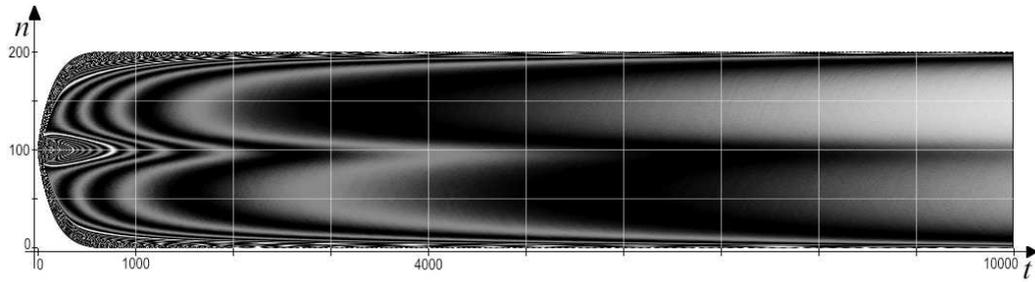


Figura 3.46: Dinâmica de uma rede estrela com  $m_0 = 2$ , com  $N_0 = 0$  e  $N_1 = 20$ , figura com  $n_{divs} = 1000$  e  $n_{sims} = 10^7$ .

**Caso de Elementos Fixos Simetricamente** Agora vejamos alguns casos simétricos nos quais  $N_0 = N_1 = 5$  e  $N_0 = N_1 = 10$ , retratados nas figuras 3.47 e 3.48, respectivamente, considerando, por enquanto, um número razoável de  $m_0 = 10$  para evitar o aparecimento de dinâmicas altamente específicas, como as das figuras 3.43 e 3.44.

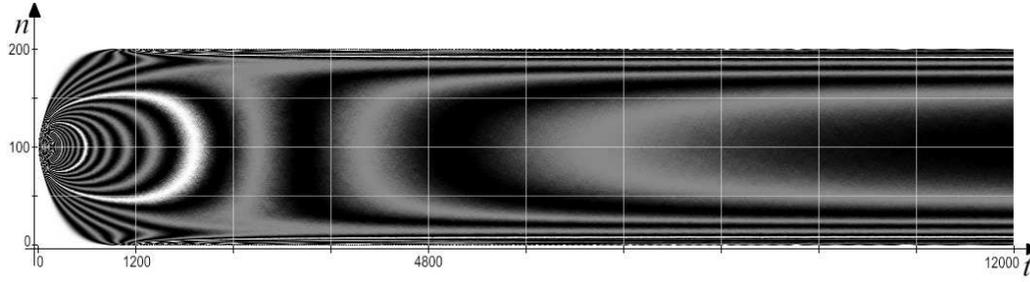


Figura 3.47: Dinâmica de rede estrela na qual  $m_0 = 10$ ,  $N = 200$ ,  $N_0 = N_1 = 2$ ; gerada com  $n_{divs} = 1000$  e  $n_{sims} = 10^7$ .

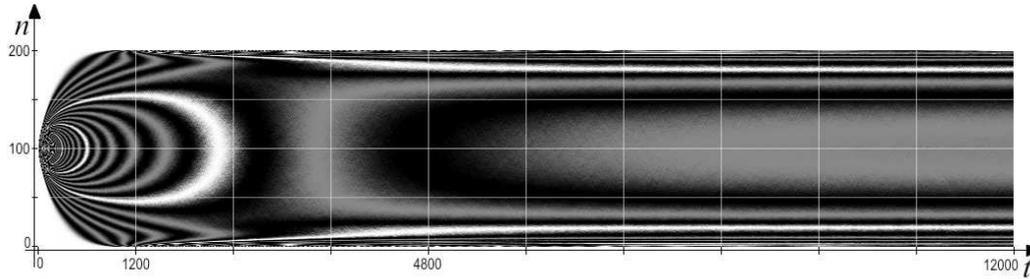


Figura 3.48: Dinâmica de rede estrela na qual  $m_0 = 10$ ,  $N = 200$ ,  $N_0 = N_1 = 5$ ; gerada com  $n_{divs} = 1000$  e  $n_{sims} = 10^7$ .

Para interpretar adequadamente estas figuras, é necessário voltar ao raciocínio de que a probabilidade de ocorrer uma cópia de um elemento fixo nestas redes estrela é muito menor do que no caso de uma rede totalmente conectada. Em particular, numa rede totalmente conectada, a probabilidade de ocorrer uma cópia de elemento com estado interno fixo é simplesmente dada por  $(N_0 + N_1) / (N + N_0 + N_1 - 1)$ , mas na rede estrela, esta probabilidade vai para:

$$P_{cop. de fixo} = \left(\frac{m_0}{N}\right) \left(\frac{N_0 + N_1}{N + N_0 + N_1 - 1}\right) \quad (3.82)$$

Nos casos retratados nas figuras 3.47 e 3.48, portanto, temos uma probabilidade de atuação dos nós com estado interno fixo que é de  $1/20$  vezes o equivalente de uma rede totalmente conectada. Isso mostra que uma aproximação para a dinâmica assintótica de uma rede estrela com  $m_0 = N/20$  deste tipo é considerar que  $N_0 \rightarrow N_0/20 = 0,1$  e  $N_1 \rightarrow N_1/20 = 0,1$  no caso  $N_0 = N_1 = 2$  e  $N_0 \rightarrow 0,25$  e  $N_1 \rightarrow N_1/20 = 0,25$  no caso  $N_0 = N_1 = 5$ . De fato, a nossa solução analítica pode ser considerada válida para  $N_0$  e  $N_1$  não inteiros, se substituirmos as fatoriais por funções gama. Uma comparação entre a curva obtida na figura 3.47 e a solução analítica com  $N_0 = N_1 = 0,1$  mostra que esta idéia é razoável, uma vez que o aspecto da curva é exatamente o mesmo,

como podemos ver na figura 3.49.

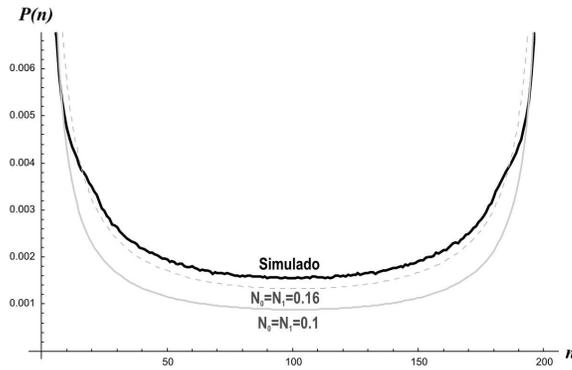


Figura 3.49: Comparação de estados assintóticos da dinâmica para rede estrela com  $N_0 = N_1 = 2$  (linha sólida grossa), para rede totalmente conectada com  $N_0 = N_1 = 0,1$  (linha cinza sólida) e com  $N_0 = N_1 = 0,16$  (linha cinza hachurada)

Enquanto que a aparência da curva é razoável, a investigação das duas curvas indica que haveria maior proximidade se tomássemos  $N_0 = N_1 = 0,16$ , e não  $0,10$ .

De qualquer forma, a mesma comparação pode, em termos gerais, ser realizada para o caso em que  $N_0 = N_1 = 5$  na rede estrela e  $N_0 = N_1 = 0,25$  na rede totalmente conectada.

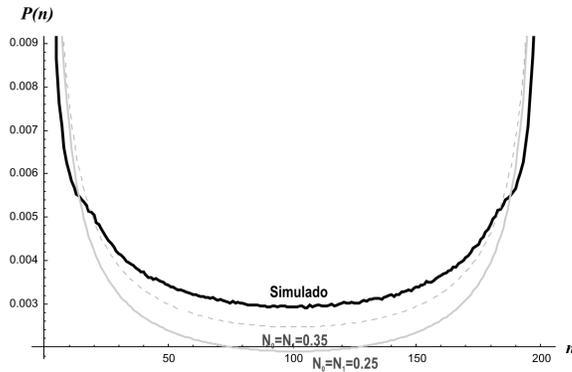


Figura 3.50: Comparação de estados assintóticos da dinâmica para rede estrela com  $N_0 = N_1 = 5$  (linha sólida) e para rede totalmente conectada com  $N_0 = N_1 = 0,25$  (linha pontilhada).

Estas figuras mostram que o resultado analítico tem utilidade mesmo em redes mais complexas do que as totalmente conectadas e aleatórias, pelo menos ao prever grosseiramente o comportamento da rede. A equação 3.82 sugere também que a chance de atuação dos elementos fixos é bastante relevante para a rede como um todo, e o número de conexões que os nós com estado interno fixo possuem com o resto da rede é crucial para a determinação do aspecto do estado assintótico.

Se, por outro lado, considerássemos  $m_0 \ll N$ , ou seja, houvesse o aparecimento de dinâmicas específicas como as de 3.42, 3.43 e 3.44, haveria a possibilidade de a nossa previsão falhar consideravelmente. Isto porque a rede tenderá a um estado assintótico bastante particular e haverá pequenos picos de probabilidade correspondentes a cada um dos estados possíveis do núcleo da estrela. Isto pode ser visto na figura 3.51, onde optamos por  $m_0 = 2$  e  $N_0 = N_1 = 50$ , um número comparativamente grande de elementos fixos, tendo como objetivo mostrar picos mais pronunciados de probabilidade. A figura 3.52 mostra o estado assintótico da rede de uma forma mais enfática em um gráfico.

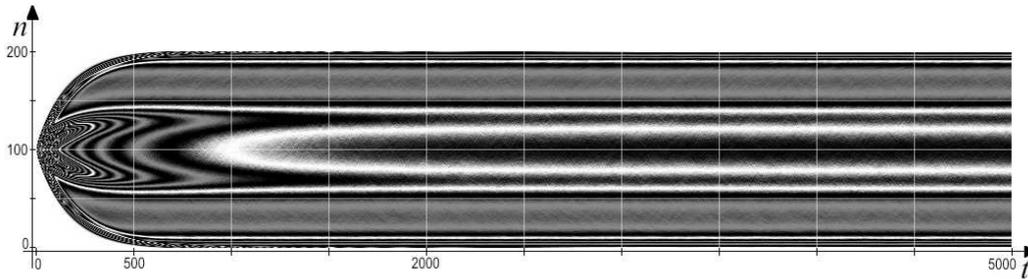


Figura 3.51: Dinâmica de rede estrela com  $m_0 = 3$ ,  $N_0 = N_1 = 50$ ,  $n_{divs} = 1000$  e  $n_{sims} = 10^7$ .

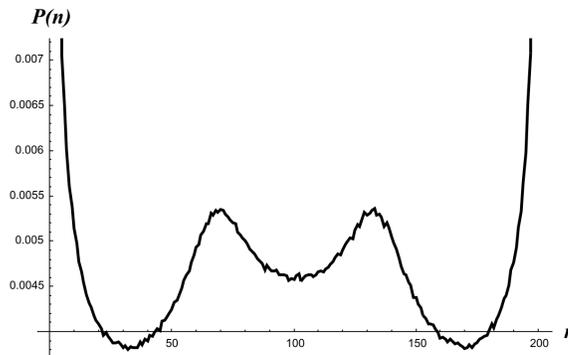


Figura 3.52: Distribuição de probabilidade assintótica para rede estrela com  $m_0 = 3$ ,  $N_0 = N_1 = 50$ , equivalente ao estado final da figura 3.51.

**Caso de Elementos Fixos Assimetricamente** Há também a última possibilidade, a de considerar  $N_0 \neq N_1$ , ambos não nulos. Este caso é também simples: não ocorre deslocamento dos picos, que permanecem nas mesmas posições, mas a intensidade destes picos tende a crescer quando  $n$  se aproxima de 0 (caso  $N_0 > N_1$ ), ou quando  $n$  se aproxima de 200 (caso  $N_1 > N_0$ ). Escolhemos para representar estes casos uma situação em que  $N_0 = 50$  e  $N_1 = 75$ , com  $m_0 = 2$ , uma modificação imediata da figura 3.51.

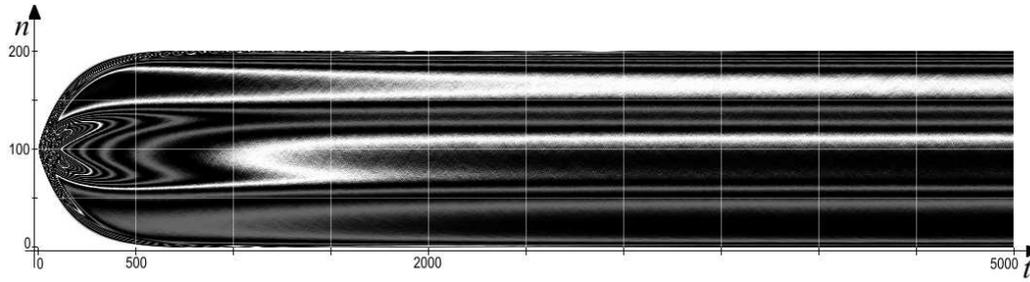


Figura 3.53: Dinâmica de rede estrela para  $m_0 = 3$ , com  $N_0 = 50$ ,  $N_1 = 75$ , gerada com  $n_{divs} = 1000$  e  $n_{sims} = 10^7$ .

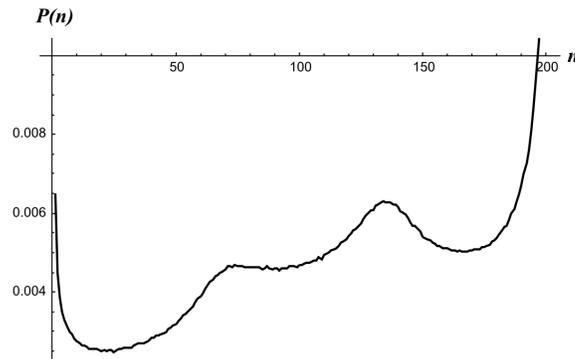


Figura 3.54: Estado assintótico de rede estrela correspondente ao final da figura 3.53

Isto encerra a nossa análise da dinâmica de redes estrela. Vimos que estas redes apresentam dinâmicas bastante rápidas, e que há o aparecimento de uma dinâmica não compatível com a de uma rede totalmente conectada no limite em que  $m_0 \ll N$ . Ressaltamos que esta é a única topologia para a qual a dinâmica geral da rede totalmente conectada não se aplica nem como aproximação grosseira neste limite, mesmo considerando um fator de correção linear no tempo correspondente à dinâmica mais rápida. Neste caso, aparecem picos de probabilidade em mais do que uma posição durante a dinâmica, o que não ocorre em nenhuma das outras conectividades estudadas. Isto indica que topologias de rede específicas podem desviar consideravelmente da que estudamos detalhadamente, a totalmente conectada; porém, estatisticamente, para redes suficientemente desordenadas para as quais os diversos efeitos específicos de topologia se cancelam entre si, a nossa dinâmica resolvida analiticamente ainda pode voltar a ser mais útil. Na próxima seção, veremos que as redes livres de escala, que apresentam uma estrutura de muitas estrelas de diversos tamanhos (i.e. número de elementos) interconectadas, não seguem dinâmica radicalmente diferente da totalmente conectada.

## 3.7 Dinâmica em Redes Livres de Escala

### 3.7.1 Criando a Rede

As redes livres de escala são as mais complexas redes que serão estudadas aqui. O algoritmo para gerar a conectividade livre de escala utilizado foi o de Albert-Barabasi, que envolve o crescimento da rede a partir de uma rede inicial de  $m_0$  elementos totalmente conectados através da adição de  $N + N_0 + N_1 - m_0$  elementos, cada um tomando  $m$  conexões com a rede já existente.

Explicaremos aqui de forma não exaustivamente detalhada o algoritmo utilizado para gerar as redes livres de escala. Escolhemos que os elementos com estado interno fixo estão nas regiões mais periféricas da rede, ou seja, foram adicionados por último na rede livre de escala. Isto é inteiramente equivalente a considerar, como já foi feito antes, que os nós de índice  $1 \leq i \leq N$  são livres, os de  $N + 1 \leq i \leq N + N_0$  têm estado interno 0 fixo, e os de  $N + N_0 + 1 \leq i \leq N + N_0 + N_1$  têm estado interno 1 fixo. Escolhemos estas indexações justamente porque simplificam o processo de posicionamento destes elementos neste caso.

De qualquer forma, o algoritmo utilizado é o seguinte:

1. Iniciaremos nosso processo de criação de rede com uma rede de  $N + N_0 + N_1$  elementos totalmente desconectados com  $v_{\#}(i) = 0$  para todo  $i$ .
2. Os primeiros  $m_0$  nós, começando a contar dos  $N$  livres e com  $m_0 < N$ , são totalmente conectados entre si. Logo, estipulamos  $v_{\#}(i) = m_0 - 1$  para  $1 \leq i \leq m_0$  e os  $v(i, j)$  com  $1 \leq j \leq m_0 - 1$  contêm uma lista de índices de 1 a  $m_0$  que exclui  $i$ .
3. Em seguida, são adicionados  $N + N_0 + N_1 - m_0$  nós à rede, sendo que os  $N_0 + N_1$  com estado fixo são adicionados por último, o que dá a eles caráter periférico. Para cada um destes, devem ser realizadas as operações:
  - (a) Cria-se uma lista de índices  $g(p)$  com índice  $1 \leq p \leq \sum k_i$  que contém os índices dos  $i$ -ésimos elementos repetidos, cada um,  $k_i$  vezes.
  - (b) Adiciona-se um  $l$ -ésimo elemento à rede. Para escolher as suas conexões, repetimos os seguintes passos  $m$  vezes:
    - i. É sorteado um número  $p_1$  entre 1 e  $\sum k_i$ . Se o  $l$ -ésimo elemento não possuir conexão com o elemento de índice  $g(p_1)$ ; então soma-se 1 a  $v_{\#}(l)$  e  $v(l, v_{\#}(l)) = g(p_1)$ . Se o  $l$ -ésimo elemento já possuir esta conexão, este passo deve ser repetido novamente (daí que  $m < m_0$  é obrigatório).

Esta seqüência de passos gera um conjunto de dados de  $v_{\#}$  e  $v$  que são suficientes para que o mesmo algoritmo descrito anteriormente para a rede totalmente conectada possa ser utilizado.

### 3.7.2 Abordagem Numérica

As redes livres de escala têm caráter mais extenso do que as estrelas, o que fica evidente se pensarmos no caminho mínimo médio destas duas redes. Desta forma, seria de se esperar que a dinâmica fosse mais lenta do que no caso da rede estrela, o que de fato foi verificado.

A nossa análise dessas redes consistiu de uma varredura de vários parâmetros possíveis. Inicialmente, consideramos apenas redes livres de escala com  $N_0 = N_1 = 0$ , sem elementos fixos, com  $N = 200$ ,  $\Delta t = 25$  e  $n_f = 1000$ . Os parâmetros de rede escolhidos para o processo de crescimento da rede livre de escala foram  $m_0 = 10$  e  $m = 5$ ; para este caso, temos  $\langle k \rangle = 9,9$ . Optamos por simular as mesmas três possibilidades de estado inicial tomadas no caso da rede totalmente conectada:  $n_0 = 100$ ,  $n_0 = 50$  e  $n_0 = 25$ . Estas três possibilidades estão retratadas nas figuras 3.55, 3.56 e 3.57.

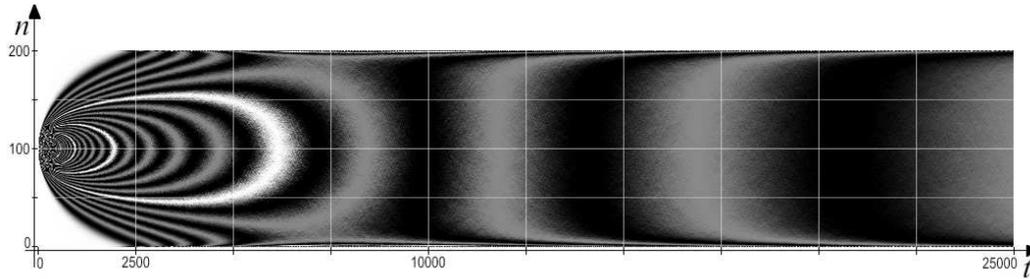


Figura 3.55: Dinâmica de rede livre de escala com  $m_0 = 10$ ,  $m = 5$ ,  $N_0 = N_1 = 0$ ,  $n_0 = 100$ ,  $n_{divs} = 1000$  e  $n_{sim_s} = 10^7$ .

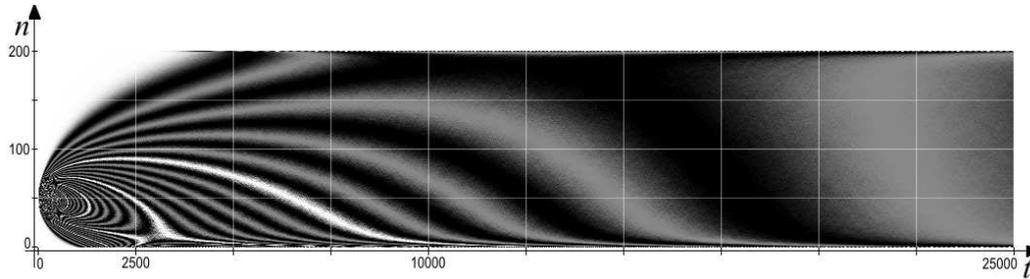


Figura 3.56: Dinâmica de rede livre de escala com  $m_0 = 10$ ,  $m = 5$ ,  $N_0 = N_1 = 0$ ,  $n_0 = 50$ ,  $n_{divs} = 1000$  e  $n_{sim_s} = 10^7$ .

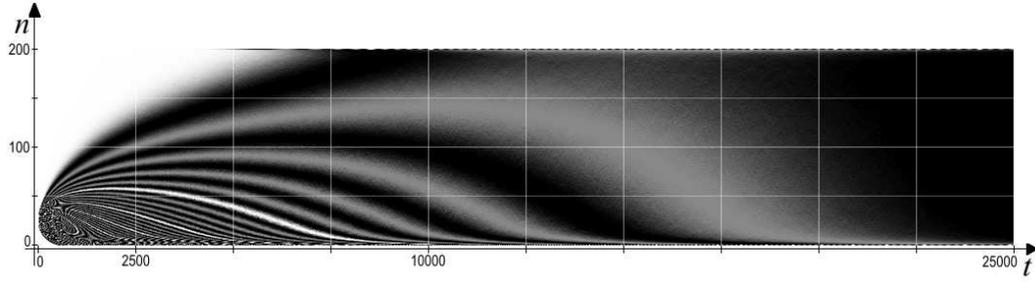


Figura 3.57: Dinâmica de rede livre de escala com  $m_0 = 10$ ,  $m = 5$ ,  $N_0 = N_1 = 0$ ,  $n_0 = 25$ ,  $n_{divs} = 1000$  e  $n_{sim_s} = 10^7$ .

Estas três figuras mostram que a dinâmica de fato é consideravelmente mais lenta do que a de uma rede estrela, mas uma comparação com a figura 3.6 na página 29 mostra que a dinâmica é mais rápida do que no caso totalmente conectado. Nas três figuras, notamos que o aspecto geral da dinâmica não é muito distinto do de uma rede totalmente conectada, se considerarmos um fator linear de escala no tempo. As proporções assintóticas de simulação também são consistentes com os nossos resultados analíticos para redes totalmente conectadas, o que seria de se esperar; qualquer especificidade da topologia é perdida quando se escolhe os  $n_0$  nós com estado interno 1 aleatoriamente dentre os  $N$  nós da rede.

**Caso de Elementos Fixos Unilateralmente** Em seguida, analisamos alguns casos de redes com elementos de estado interno fixo de apenas um tipo, ou seja, redes para as quais  $N_0 = 0$  e  $N_1 \neq 0$ . Não há necessidade de abordar o problema em que  $N_1 = 0$ , pois trata-se de situação simétrica. Naturalmente, a rede inteira estabiliza no estado  $n = N$ , como no caso da rede totalmente conectada; o que nos interessa, de fato, é que a dinâmica continua sendo mais rápida.

Vamos representar aqui dois casos em redes com  $N = 200$ ,  $m_0 = 10$  e  $m = 5$ : um caso em que  $N_1 = 1$ , na figura 3.58, e outro caso no qual  $N_1 = 5$ , apresentado na figura 3.59.

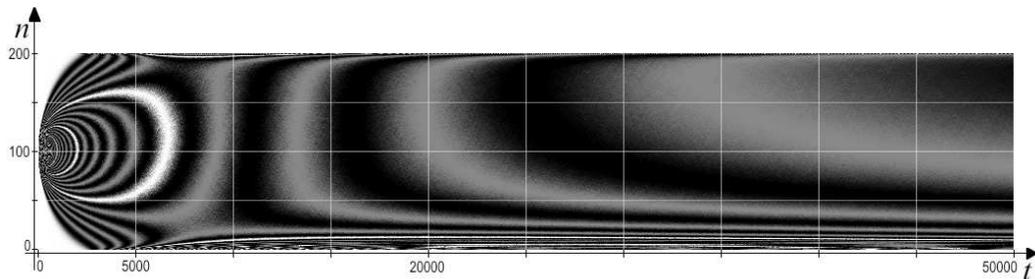


Figura 3.58: Dinâmica de rede livre de escala com  $m_0 = 10$ ,  $m = 5$ ,  $N_0 = 0$ ,  $N_1 = 1$ ,  $n_0 = 100$ ,  $n_{divs} = 1000$  e  $n_{sim_s} = 10^7$ .

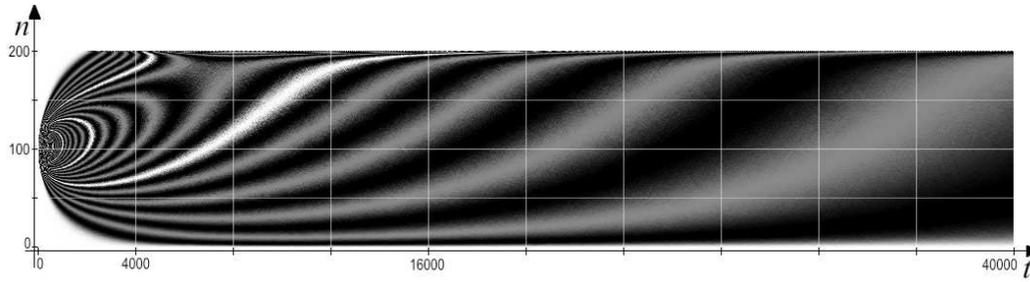


Figura 3.59: Dinâmica de rede livre de escala com  $m_0 = 10$ ,  $m = 5$ ,  $N_0 = 0$ ,  $N_1 = 5$ ,  $n_0 = 100$ ,  $n_{divs} = 1000$  e  $n_{sims} = 10^7$ .

Na figura 3.58, é interessante notar que a curva quase assintótica cresce para  $n$  pequenos, o que é indicativo de que ou a rede está, de fato, estabilizada no pico  $n = N$ , ou a rede tem maior probabilidade de se encontrar em estados com  $n$  pequenos, para os quais a maior parte das cópias possíveis é irrelevante. Esta é uma primeira indicação de que o elemento fixo no estado 1 tem uma influência bastante baixa na rede, pois tem uma chance de ser copiado que é bastante reduzida nesta topologia.

**Caso de Elementos Fixos Simetricamente** O caso estudado a seguir foi o de  $N_0 = N_1 \neq 0$ , sempre mantendo os mesmos parâmetros de rede:  $N = 200$ ,  $m_0 = 10$  e  $m = 5$ . Começamos a nossa análise pelo caso  $N_0 = N_1 = 1$ , representado na figura 3.60.

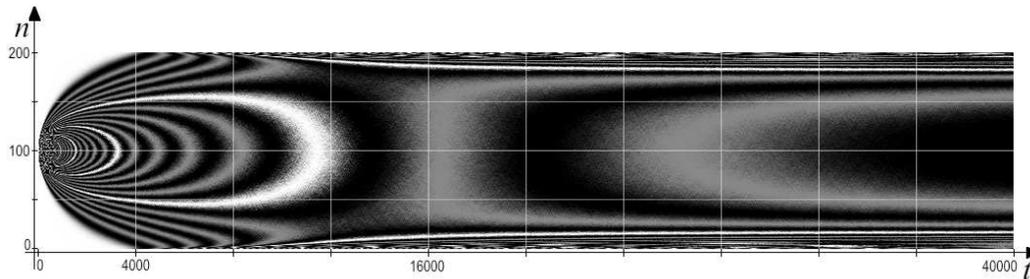


Figura 3.60: Dinâmica de rede livre de escala com  $m_0 = 10$ ,  $m = 5$ ,  $N_0 = 1$ ,  $N_1 = 1$ ,  $n_0 = 100$ ,  $n_{divs} = 1000$  e  $n_{sims} = 10^7$ .

Note que há uma curva assintótica de probabilidade não trivial neste caso, e esta distribuição assintótica não é uniforme, como no caso da rede totalmente conectada (figura 3.11). A figura 3.61 mostra a distribuição de probabilidade final estável da dinâmica.

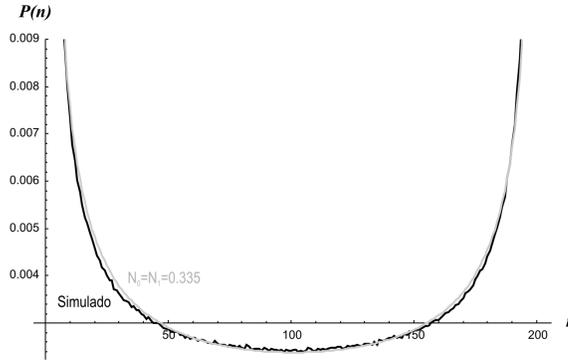


Figura 3.61: Estado assintótico de rede livre de escala com  $N_0 = N_1 = 1$  correspondente ao final da figura 3.60 e comparação com caso totalmente conectado com  $(N_0)_{ef} = (N_1)_{ef} = 0,335$ .

É possível encontrar valores não-inteiros de  $N_0$  e  $N_1$  que façam com que a teoria analítica para o estado assintótico de uma rede totalmente conectada imite o comportamento assintótico desta rede livre de escala. Após um pouco de experimentação, chegamos a um valor *efetivo* de  $(N_0)_{ef} = (N_1)_{ef} = 0,335$  que faz com que a distribuição obtida analiticamente imite de forma extraordinariamente satisfatória a curva assintótica obtida através de simulações, como pode ser visto na figura 3.61, na qual a curva cinza representa um vetor assintótico de probabilidades utilizando o valor efetivo 0,335.

Infelizmente, não é trivial estabelecer uma regra simples que, exclusivamente através dos parâmetros da rede, seja capaz de prever os valores efetivos  $(N_0)_{ef}$  e  $(N_1)_{ef}$  que fazem com que as duas distribuições, analítica e numérica, sejam idênticas. Mesmo assim, é interessante observar que é perfeitamente possível modelar o estado assintótico de uma rede tão complexa quanto uma rede livre de escala utilizando apenas o ajuste destes dois valores efetivos.

Mais alguns casos simétricos foram analisados utilizando este mesmo método. Tipicamente, temos o caso em que  $N_0 = N_1 = 2$ , com todos os outros parâmetros inalterados em  $N = 200$ ,  $m_0 = 10$  e  $m = 5$ , na figura 3.62. A análise de valores efetivos  $(N_0)_{ef}$  e  $(N_1)_{ef}$  que reproduzem corretamente a distribuição de probabilidade assintótica é simples e resulta em um valor  $(N_0)_{ef} = (N_1)_{ef} = 0,585$ . Ambas as curvas assintóticas, tanto a numérica em rede livre de escala com  $N_0 = N_1 = 2$  e analítica em rede totalmente conectada com  $(N_0)_{ef} = (N_1)_{ef} = 0,585$ , estão retratadas na figura 3.63. Neste caso notamos que, novamente, há excelente correspondência entre as duas curvas.

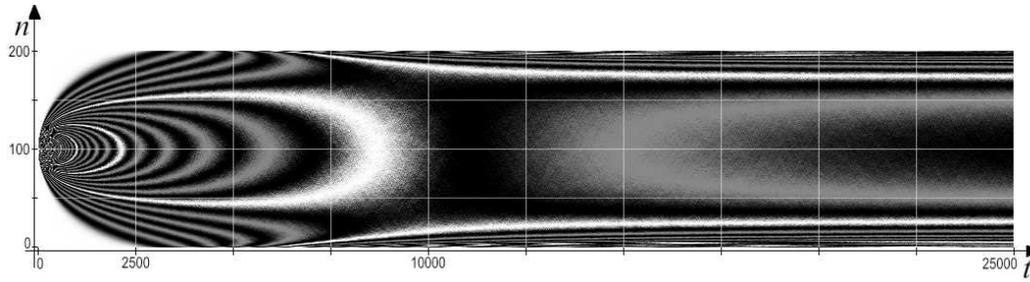


Figura 3.62: Dinâmica de rede livre de escala com  $m_0 = 10$ ,  $m = 5$ ,  $N_0 = 2$ ,  $N_1 = 2$ ,  $n_0 = 100$ ,  $n_{divs} = 1000$  e  $n_{sims} = 10^7$ .

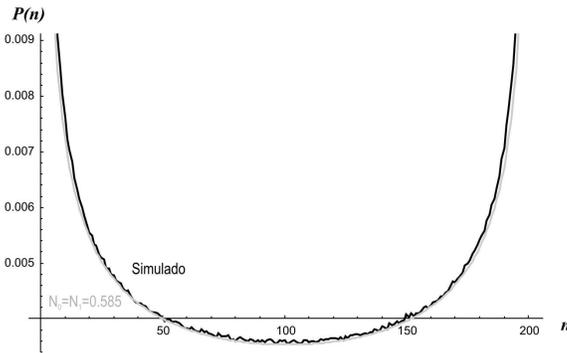


Figura 3.63: Estado assintótico de rede livre de escala com  $N_0 = N_1 = 2$  correspondente ao final da figura 3.62 e comparação com caso totalmente conectado com  $(N_0)_{ef} = (N_1)_{ef} = 0,585$ .

Um último caso simétrico analisado foi o de  $N_0 = N_1 = 5$ , ainda com  $N = 200$ ,  $m_0 = 10$  e  $m = 5$ . A figura 3.64 mostra a dinâmica neste caso e a figura 3.65 mostra a distribuição assintótica de probabilidade para a rede totalmente conectada e uma comparação com o modelo totalmente conectado com  $(N_0)_{ef} = (N_1)_{ef} = 1,45$ .

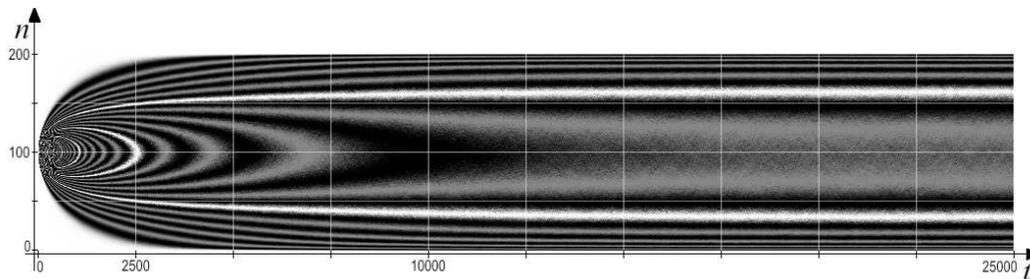


Figura 3.64: Dinâmica de rede livre de escala com  $m_0 = 10$ ,  $m = 5$ ,  $N_0 = 5$ ,  $N_1 = 5$ ,  $n_0 = 100$ ,  $n_{divs} = 1000$  e  $n_{sims} = 10^7$ .

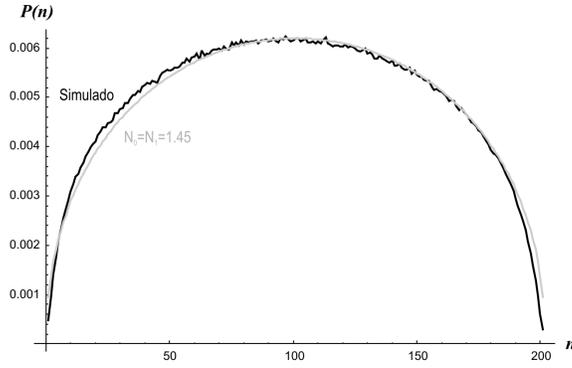


Figura 3.65: Estado assintótico de rede livre de escala com  $N_0 = N_1 = 5$  correspondente ao final da figura 3.64 e comparação com caso totalmente conectado com  $(N_0)_{ef} = (N_1)_{ef} = 1,45$ .

Ressaltamos que a comparação com rede totalmente conectada, tomando  $(N_0)_{ef}$  e  $(N_1)_{ef}$  apropriados, funciona muito bem em todos os casos até agora. Resta saber se o sucesso é novamente observado para redes assimétricas.

**Caso de Elementos Fixos Assimetricamente** Um último caso a analisar na topologia livre de escala é o caso em que  $N_0 \neq N_1$ ,  $N_0 \neq 0$  e  $N_1 \neq 0$ . Mantivemos os parâmetros de rede inalterados em  $N = 200$ ,  $m_0 = 10$  e  $m = 5$  e abordamos três casos analiticamente.

A primeira rede analisada tomou  $N_0 = 5$  e  $N_1 = 1$ . Como seria de se esperar, esta rede convergiu para um estado assintótico diferente do da rede totalmente conectada, equivalente a  $N_0$  e  $N_1$  efetivos inferiores aos valores reais, como no caso simétrico analisado anteriormente. A figura 3.66 representa a dinâmica de uma rede com estas características e a figura 3.67 mostra uma comparação da distribuição de probabilidade assintótica desta rede livre de escala com uma distribuição de uma rede totalmente conectada com  $(N_0)_{ef} = 1,45$  e  $(N_1)_{ef} = 0,335$ .

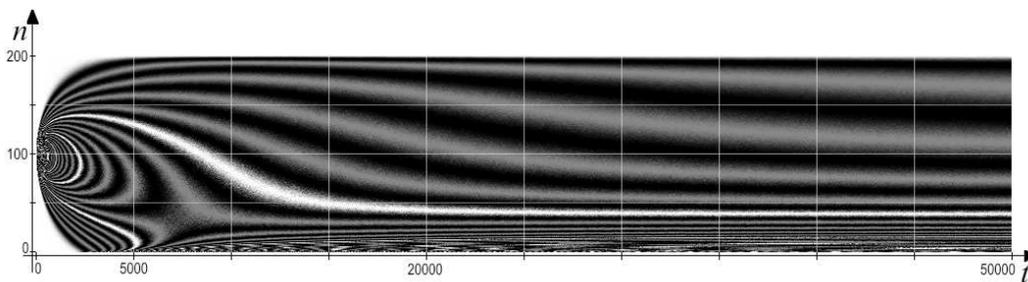


Figura 3.66: Dinâmica de rede livre de escala com  $m_0 = 10$ ,  $m = 5$ ,  $N_0 = 5$ ,  $N_1 = 1$ ,  $n_0 = 100$ ,  $n_{divs} = 1000$  e  $n_{sim_s} = 10^7$ .

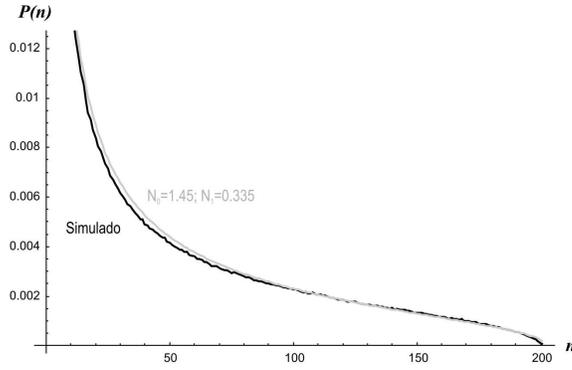


Figura 3.67: Estado assintótico de rede livre de escala com  $N_0 = 5$  e  $N_1 = 1$  correspondente ao final da figura 3.66 e comparação com caso totalmente conectado com  $(N_0)_{ef} = 1,45$  e  $(N_1)_{ef} = 0,335$ .

O segundo caso abordado foi um em que  $N_0 = 5$  e  $N_1 = 3$ . Esta rede também convergiu rapidamente e os seus resultados estão na figura 3.68. Foi realizada uma boa comparação do estado assintótico desta rede com o de uma rede totalmente conectada com  $(N_0)_{ef} = 1,45$  e  $(N_1)_{ef} = 0,83$ , indicada na figura 3.69. Há apenas uma pequena discrepância para  $n$  próximo de 1 em relação à curva construída com valores efetivos.

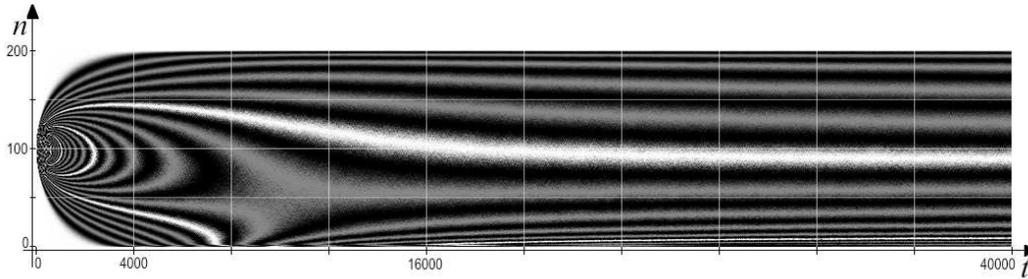


Figura 3.68: Dinâmica de rede livre de escala com  $m_0 = 10$ ,  $m = 5$ ,  $N_0 = 5$ ,  $N_1 = 3$ ,  $n_0 = 100$ ,  $n_{divs} = 1000$  e  $n_{sim.s} = 10^7$ .

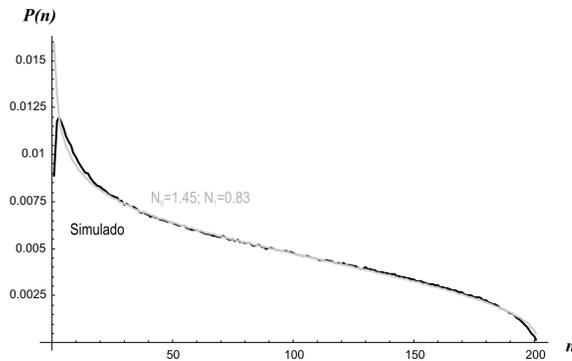


Figura 3.69: Estado assintótico de rede livre de escala com  $N_0 = 5$  e  $N_1 = 3$  correspondente ao final da figura 3.68 e comparação com caso totalmente conectado com  $(N_0)_{ef} = 1,45$  e  $(N_1)_{ef} = 0,83$ .

Para encerrar, analisamos um último caso em que  $N_0 = 5$  e  $N_1 = 10$ , reproduzido na figura 3.70. Este caso é marcante porque, quando analisada a curva de probabilidade assintótica do sistema, ela se compara bem com a de uma rede totalmente conectada com valores  $(N_0)_{ef} = 1,45$  e  $(N_1)_{ef} = 2,95$  ambos superiores a 1, assim como no caso da figura 3.65.

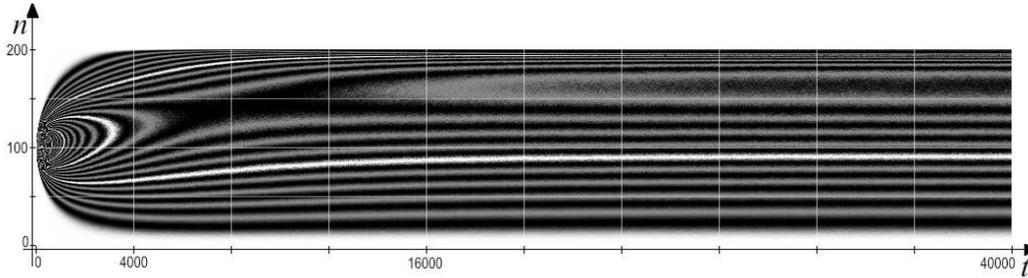


Figura 3.70: Dinâmica de rede livre de escala com  $m_0 = 10$ ,  $m = 5$ ,  $N_0 = 10$ ,  $N_1 = 3$ ,  $n_0 = 100$ ,  $n_{divs} = 1000$  e  $n_{sim.s} = 10^7$ .

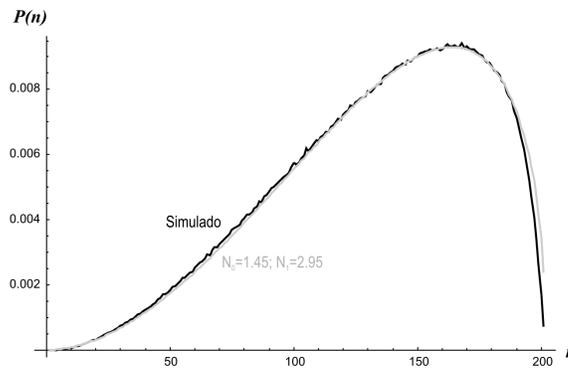


Figura 3.71: Estado assintótico de rede livre de escala com  $N_0 = 5$  e  $N_1 = 10$  correspondente ao final da figura 3.70 e comparação com caso totalmente conectada com  $(N_0)_{ef} = 1,45$  e  $(N_1)_{ef} = 2,95$ .

**Transição de Rede Totalmente Conectada para Rede Livre de Escala** Uma outra possibilidade muito interessante que o nosso algoritmo apresenta é a de realizar uma transição contínua entre uma rede totalmente conectada, para a qual  $m_0 = N$ , e uma rede livre de escala com  $m_0 < N$ . A visualização desta transição é a melhor maneira de verificar o quão mais rápida a dinâmica de uma rede livre de escala realmente é. Para as simulações de transição, estipulamos um valor fixo de  $m = 5$ ; consideramos sempre  $N = 200$ ,  $n_0 = 100$ ,  $N_0 = N_1 = 0$  e testamos a dinâmica para  $m_0 = 200, 100, 50$  e, finalmente,  $m_0 = 10$ .

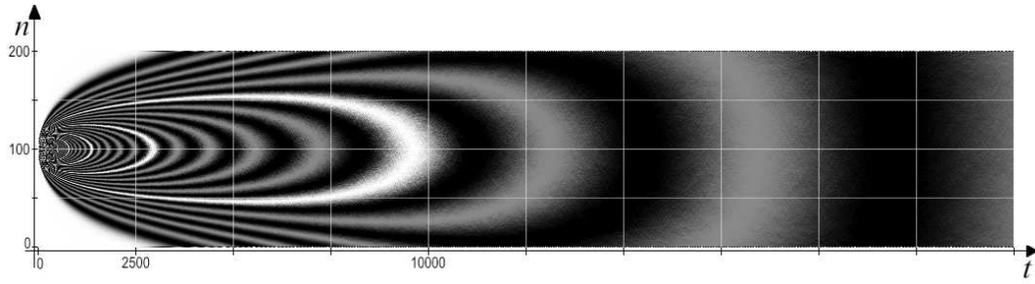


Figura 3.72: Dinâmica de rede totalmente conectada, equivalente à rede livre de escala com  $m_0 = 200$ ,  $m = 5$ ,  $N_0 = N_1 = 0$ ,  $n_{divs} = 1000$  e  $n_{sims} = 10^7$ .

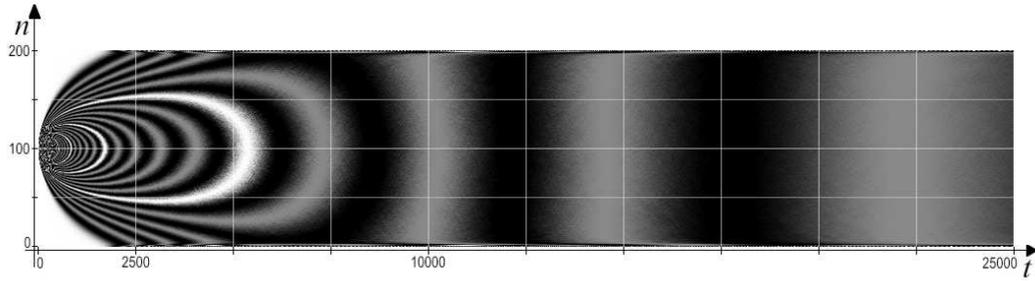


Figura 3.73: Dinâmica de rede livre de escala com  $m_0 = 100$ ,  $m = 5$ ,  $N_0 = N_1 = 0$ ,  $n_{divs} = 1000$  e  $n_{sims} = 10^7$ .

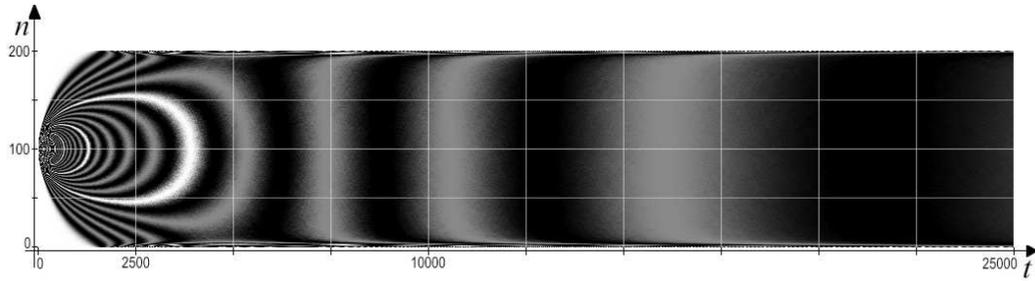


Figura 3.74: Dinâmica de rede livre de escala com  $m_0 = 50$ ,  $m = 5$ ,  $N_0 = N_1 = 0$ ,  $n_{divs} = 1000$  e  $n_{sims} = 10^7$ .

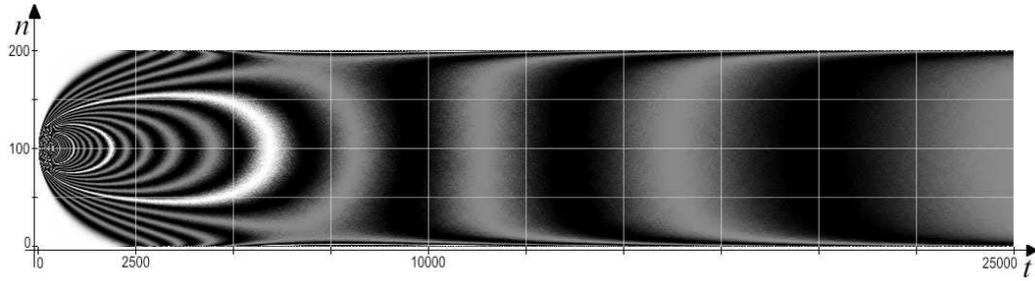


Figura 3.75: Dinâmica de rede livre de escala com  $m_0 = 10$ ,  $m = 5$ ,  $N_0 = N_1 = 0$ ,  $n_{divs} = 1000$  e  $n_{sims} = 10^7$ .

Vemos destes resultados que redes com  $N = 200$  são mais rápidas no caso em que  $m_0 = 50$  do que no caso em que  $m_0 = 10$ . Isto indica que a dinâmica tem seu máximo de velocidade em um conjunto específico de valores e não é automático que, reduzindo-se  $m_0$ , obtemos uma dinâmica mais rápida.

Com estes resultados, encerramos a nossa análise comparativa da dinâmica de redes livres de escala com redes totalmente conectadas, para as quais temos um modelo que se provou ser bastante aplicável em dinâmicas em geral.

## Capítulo 4

# Conclusão

Neste trabalho, tínhamos como objetivo um estudo detalhado de dinâmicas de dois estados em redes de diferentes topologias, com um modelo que previa a inclusão de elementos da rede cujo estado interno é fixo. Originalmente, foram consideradas abordagens tanto analíticas quanto numéricas. Já tínhamos uma solução analítica completa para o caso sem estados internos fixos em redes totalmente conectadas, mas este era um resultado de tamanha complexidade de dedução que não havia tanta esperança de bons resultados analíticos gerais para o caso com estados internos fixos.

Durante os nossos estudos, fomos capazes de encontrar uma solução analítica completa para redes totalmente conectadas para as quais há nós com estados internos fixos. A nossa nova dedução é mais simples e mais geral do que a solução original ([8]) para redes livres, e é neste ponto que se encontra a sua utilidade; na realidade, a solução original tornou-se obsoleta e não foi nem sequer incluída neste texto.

Esta solução foi encontrada tomando uma abordagem bastante comum em problemas em física: transformou-se o problema em um problema de autovalores e autovetores. Uma vez feito isso, encontrar os autovetores e autovalores é apenas um problema algébrico. Cabe a nós também utilizar os resultados de uma forma significativa, tomando aproximações e observando grandezas mais específicas contidas dentro desta nossa solução geral. É aqui também que seria apropriado um desenvolvimento futuro; um certo esforço exploratório que fizesse uso de nossos resultados poderia possivelmente levar a novas idéias.

Depois de desenvolvida essa resposta analítica do problema geral em redes totalmente conectadas, partimos para os cálculos numéricos em outras redes. Foram estudadas, sob o mesmo enfoque de dinâmica de dois estados, outros cinco tipos de redes, incluindo redes reticuladas, mundo pequeno, aleatórias, estrela e livres de escala, cada uma com a possibilidade de incluir ou não elementos com estado interno fixo. Para as redes livres (i.e., sem nós com estado interno fixo), a nossa solução

analítica explica com excelente precisão a dinâmica de redes aleatórias. Com menos sucesso, a dinâmica de redes livres de escala também se assemelha à do caso totalmente conectado, se considerado um fator de escala no tempo. Para redes estrela, verificamos uma correspondência também razoável, desde que  $m_0 \gg 1$ . As redes reticuladas mostraram-se bastante diferentes em termos da dinâmica; confrontados com esta diferença, desenvolvemos um pequeno modelo analítico de uma interface entre espaços com estados internos fixos e verificamos boa correspondência. Desta forma, chegamos à conclusão de que o nosso modelo analítico tem mérito para redes livres de escala e aleatórias, mas falha quando confrontado com redes de caráter extenso, como redes reticuladas.

Os casos estudados numericamente estão relatados na tabela 4.1. Note que concentramos os nossos esforços nas redes livres de escala, para as quais há uma quantidade enorme de exemplos; redes reticuladas e redes mundo pequeno têm sua importância reduzida em comparação com as livres de escala.

Rede	Reticulada	Mundo Pequeno	TC/Aleatória	Livre de Escala	Estrela
$N_0 = N_1 = 0$	✓	✓	✓	✓	✓
$N_0 \neq 0, N_1 = 0$	×	×	✓	✓	✓
$N_0 = N_1 \neq 0$	✓ ( $N_0 = N_1 = 1$ )	×	✓	✓	✓
$N_0 \neq 0, N_1 \neq 0, N_0 \neq N_1$	×	×	✓	✓	×

Tabela 4.1: Resumo dos casos analisados numericamente. Note que ✓ designa casos abordados e × designa casos que não foram considerados.

Em termos de velocidade da dinâmica, pudemos ordenar os tipos de rede em uma ordem de velocidade crescente. Esta ordem, indo da rede com dinâmica mais lenta para a mais rápida, é bastante simples e razoável. Primeiramente, as redes reticuladas, com o seu aspecto extenso, são as redes mais lentas. As redes de mundo pequeno, geradas pelo algoritmo de realocação aleatória de Watts-Strogatz, são redes cuja dinâmica é muito acelerada em relação às reticuladas convencionais, uma vez que há a presença de "atalhos" na topologia da rede. As redes aleatórias, caso extremo das redes de Watts-Strogatz, são o nosso padrão de comparação de velocidade (idêntico à velocidade de uma rede totalmente conectada); em seguida, as redes mais rápidas, em ordem crescente, são as redes livres de escala e as redes estrela. A figura 4.1 mostra esta tendência em um diagrama comparativo.

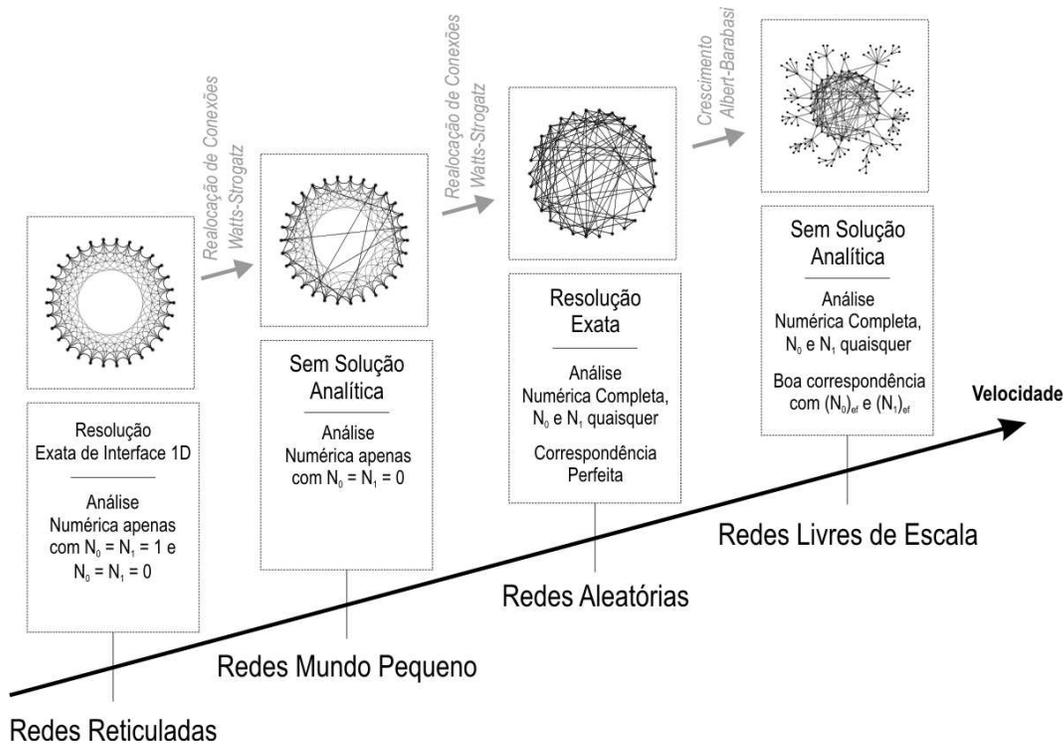


Figura 4.1: Diagrama comparativo de velocidade da dinâmica das cinco redes. Note que excluímos redes estrelas deste diagrama.

Quando se consideram redes com elementos fixos, para as quais  $N_0 \neq 0$  e  $N_1 \neq 0$ , temos mais uma série de resultados e o modelo analítico mostra-se útil para a análise do estado assintótico da rede (para  $t \rightarrow \infty$ ) se ajustarmos os parâmetros  $N_0$  e  $N_1$  da nossa solução analítica exata para os seus *valores efetivos*, como vimos anteriormente. O modelo analítico ganha abrangência ao ser capaz de comparar redes quaisquer com nós de estado interno fixo com redes totalmente conectadas, e descreve com boa precisão o que acontece em redes mais complexas assintoticamente.

Este trabalho poderia ainda ser estendido encontrando-se  $(N_0)_{ef}$  e  $(N_1)_{ef}$  como funções do tipo de rede e dos parâmetros desta rede. Até o presente momento, não tivemos sucesso em encontrar uma forma suficientemente simples de mapear os valores efetivos que encontramos empiricamente com alguma fórmula que seja capaz de prever estes valores.

Uma outra extensão possível para este trabalho seria considerar sistemas com mais de dois estados internos. Alguns testes iniciais com nós com três estados internos foram realizados, mas sem muitos resultados de interesse até este ponto. É claro que, com três estados internos, o trabalho analítico provavelmente torna-se mais difícil, mas provavelmente ainda é possível encontrar pelo menos os estados assintóticos de equilíbrio para a rede. De qualquer forma, isto poderia ser investigado mais a fundo.

Concluindo, este trabalho teve excelente sucesso em estudar processos dinâmicos gerais, descritos a partir de um modelo extremamente simples, em muitas redes de complexidade não-trivial. Não só foram feitos estudos numéricos extensivos, mas também foram encontrados resultados analíticos bastante interessantes e inéditos.

# Referências Bibliográficas

- [1] R. Durrett and S.A. Levin, Philos. Trans. R. Soc. London, Ser. B 343, 329 (1994).
- [2] A. Hastings, T. Powell, Ecology 72, 896 (1991).
- [3] J.N. Eisenberg, D.R. Maszle, J. Theor. Biol. 176, 501-510 (1995).
- [4] H. Sayama, L. Kaufman and Y. Bar-Yam, Phys. Rev. E 62, 7065 (2000).
- [5] H. Sayama, M.A.M. de Aguiar, E. Rauch, Y. Bar-Yam and M. Baranger, Phys. Rev. E65 (2002) 051919.
- [6] M.A.M. de Aguiar, H. Sayama, E. Rauch, Y. Bar-Yam and M. Baranger, Phys. Rev. E65 (2002) 31909.
- [7] E. M. Rauch and Y. Bar-Yam, Nature 431, 449 (2004).
- [8] M.A.M. de Aguiar, I.R. Epstein and Y. Bar-Yam, Phys. Rev. E72 (2005) 067102.
- [9] Erdős, P. and A. Rényi, 1959, Publ. Math. Debrecen 6, 290.
- [10] Erdős, P. and A. Rényi, 1960, Publ. Math. Inst. Hung. Acad. Sci 5, 17.
- [11] Erdős, P. and A. Rényi, 1961, Bull. Inst. Int. Stat. 38, 343.
- [12] Bollobás, B., 1985, *Random Graphs* (Academic Press, London.)
- [13] Watts, D.J. and S.H. Strogatz, 1998, Nature 393, 440.
- [14] Broder, A., R. Kumar, F. Maghoul, P. Raghavan, S. Rajalopagan, R. Stata, A. Tomkins and J. Wiener, 2000, Comput. Netw. 33 309.
- [15] Barabási, A.-L., R. Albert and H. Jeong, 1999, Science 286, 509
- [16] Gradshteyn I.S., Ryzhik I.M. 1996, Tables of Integrals, Series and Products. Academic Press, INC
- [17] R. Albert and A.-L. Barabási, Rev. Mod. Phys. **74** (2002) 47.
- [18] Y. Bar-Yam and I. Epstein, **PNAS** 101, 4341 (2004).
- [19] L. H. Hartwell, J. J. Hopfield, S. Leibler, A. W. Murray, Nature **402** (1999) C47 .
- [20] Y. Moreno, M. Nekovee and A.F. Pacheco, Phys. Rev. E **69** (2004) 066130.

- [21] S. Boccaletti, V. Latora, Y. Moreno, M. Chavez and D.-U. Hwang, Phys. Rep. **424** 2006 175.
- [22] E. Ravasz, A. L. Somera, D. A. Mongru, Z. N. Oltvai, A.-L. Barabási, Science **297** (2002) 1551
- [23] A.L. Barabasi, Z.N. Oltvai, Nat. Rev. Genet. 5 (2004) 101; A. Fronczak, P. Fronczak, J.A. Holyst, Phys. Rev. E **68** (2003) 046126; J.D. Noh Phys. Rev. E **67** (2003) 045103.
- [24] P. A. P. Moran, Proc. Cambridge Philos. Soc. 54, 60 1958; G. A. Watterson, Ann. Math. Stat. 32, 716 1961; C. Cannings, Adv. Appl. Probab. 6, 260 1974; K. Gladstien, SIAM J. Appl. Math. 34, 630 1978.
- [25] D. Vilone and C. Castellano, Phys. Rev. E 69, 016109 2004; V. Sood and S. Redner, Phys. Rev. Lett. 94, 178701 2005.
- [26] M. E. J. Newman, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 98, 404 2001; Phys. Rev. E 64, 016131 2001; 64, 016132 2001; D. Braha and Y. Bar-Yam, ibid. 69, 016113 2004. D.J. Watts, S.H. Strogatz, Nature 393 (1998) 440.
- [27] C. Koch and G. Laurent, Science 284, 96 1999; H. Jeong, B. Tombor, R. Albert, Z. N. Oltvai, and A.-L. Barabási, Nature London 407, 651 2000. H. Jeong, S.P. Mason, A.-L. Barabási, Z.N. Oltvai, Nature 411 (2001) 41.
- [28] M. Faloutsos, P. Faloutsos, and C. Faloutsos, Comput. Commun. Rev. 29, 251 1999; R. Albert, H. Jeong, and A.-L. Barabási, Nature London 401, 130 1999. R. Pastor-Satorras, A. Vázquez, A. Vespignani, Phys. Rev. Lett. 87 (2001) 258701.