

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

INSTITUTO DE FÍSICA *Gleb Wataghin*

F 590A - INICIAÇÃO CIENTÍFICA I

# Introdução a Sistemas Não-Lineares e Sistemas Complexos

Aluno: Deborah Renée Louise Polderman

deh.polderman x(arroba)x gmail.com



Coordenador: Prof. Dr. José Joaquín Lunazzi

Orientador: Prof. Dr. José Antônio Brum

<http://portal.ifi.unicamp.br/pessoas/corpo-docente/269-628>

Departamento de Física da Matéria Condensada

Instituto de Física Gleb Wataghin

Universidade Estadual de Campinas

Campinas - SP

Junho 2015

# Introdução

---

Em 1736, Euler propôs um problema que consistia em encontrar um caminho entre sete pontes através do rio Pregel, na cidade de Königsberg (Prússia Oriental), percorrendo cada uma dessas pontes exatamente uma vez e retornando ao ponto de partida. O senso comum concluiu que era impossível, porém o cientista encontrou uma solução, que além, deu origem a teoria dos grafos [2].

Pesquisas interdisciplinares [3] apontam que diversos sistemas complexos podem ser representados por redes mundo-real ou, em linguagem matemática, grafos. Suas aplicações encontram-se em vários ramos da ciência, em sistemas como a “World Wide Web”, redes sociais, bioquímica, economia, entre outros. Entende-se como complexo, o sistema dinâmico adaptativo, não-linear, aberto, com um grande número de componentes interagindo entre si sem um controle central, porém exibindo um comportamento coletivo auto-organizado [9].

S. Milgram, psicólogo de Harvard na década de 50, projetou um experimento para determinar quantas passagens seriam necessárias para que uma carta chegasse ao destinatário começando por um indivíduo qualquer nos Estados Unidos: seis graus de separação seriam suficientes[10, 3]. Redes, que dentre outras características, apresentam um número pequeno de conexões, quando comparado com o de elementos, mais especificamente os *nós da rede* (no

exemplo, a população norte americana), são conhecidas como *redes pequeno-mundo*. D. Watts e S.H. Strogatz foram os primeiros a definir este conceito. Através do mapeamento de neurônios e conexões neurais do verme *Caenorhabditis elegans*, pesquisadores evidenciaram que, também, o cérebro possui estas propriedades [3].

Atualmente, o mapeamento de conexões cerebrais com técnicas de neuroimagem não invasivas buscam descrever a estrutura da rede do cérebro humano em forma de grafos, o chamado “connectome”, em um projeto cuja extensão tem características semelhantes ao do genoma humano. Estudos futuros serão fundamentais para o entendimento, prevenção e tratamento de doenças cerebrais [6].

# Caracterização e Propriedades das Redes

---

Neste capítulo pretendemos descrever as propriedades básicas e os modelos de redes complexas, uma referência importante é [1], na qual esta seção foi baseada.

Redes são caracterizadas por vértices (ou nós) interligados por arestas (“links” ou “edges”) direta ou indiretamente de acordo com o comportamento a ser descrito. Como podemos observar na figura 2.1, pode haver mais de uma aresta entre o mesmo par de vértices, as chamadas *arestas múltiplas* (“multiedges”) determinando assim um *multigrafo*, também pode ocorrer de um vértice se conectar a ele próprio, são os chamados *laços* (“self-edges”).

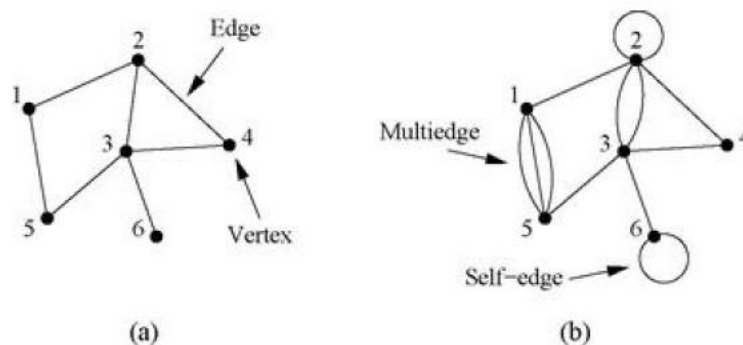


Figura 2.1: A esquerda uma pequena rede simples e a direita uma rede com arestas múltiplas e laços. Extraído de [1].

Em geral, uma representação característica de uma rede é dada pela matriz de adjacência  $A_{ij}$ , que define a topologia do grafo. As denominadas *redes indiretas* são aquelas nas quais existindo um link entre os vértices  $i$  e  $j$  para  $i \neq j$ , escrevemos  $A_{ij} = A_{ji} = 1$ ; caso contrário,  $A_{ij} = 0$ . Para arestas múltiplas,  $A_{ij}$  é igual ao número de ligações entre os vértices  $i$  e  $j$  e no caso de laços ( $i = j$ ),  $A_{ii} = 2$ .

Levando em conta a direção da conexão entre os vértices  $i$  e  $j$ , define-se as redes diretas, ou *dígrafos*. Neste caso, cada aresta tem a direção do vértice  $j$  para  $i$  e a matriz de adjacência possui elementos  $A_{ij} = 1$  e  $A_{ji} = 0$ , ou seja, a matriz  $A$  não é simétrica.

O número de arestas conectadas a um vértice  $i$  é denominado grau e denotado por  $k_i = \sum_{j=1}^n A_{ij}$ , onde  $n$  é o número total de vértices. Em uma rede com  $m$  links no total significa que existem  $2m$  terminações de links, já que todos os links possuem dois términos de conexão, cada link existindo entre dois vértices. O número total de terminações em um grafo indireto é igual a soma dos graus de todos os vértices, ou seja

$$2m = \sum_{i=1}^n k_i, \quad (2.1)$$

e utilizando a definição de grau em termos da matriz de adjacência obtemos

$$m = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n k_i = \frac{1}{2} \sum_{ij} A_{ij}, \quad (2.2)$$

enquanto o grau médio cde um vértice é

$$c = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n k_i, \quad (2.3)$$

o que nos leva a concluir, ao combinar as equações (2.2) e (2.3), que

$$c = \frac{2m}{n}. \quad (2.4)$$

A probabilidade  $p_k$  de um vértice aleatório ter grau  $k$  pode ser entendida como a fração de vértices na rede que possuem grau  $k$ . O grau médio ou valor esperado de  $k$  é uma média dos

possíveis valores que  $k$  pode assumir, com cada valor sendo ponderado pela probabilidade de que  $k$  seja igual a esse valor. O primeiro momento da distribuição é, portanto,

$$\langle k \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} k p_k. \quad (2.5)$$

Muitas redes importantes seguem leis de potência, quando o logaritmo do grau de distribuição  $p_k$  é linear com a função de grau  $k$ , ou seja,

$$\ln p_k = -\alpha \ln k + c, \quad (2.6)$$

onde  $\alpha$  e  $c$  são constantes. Ao aplicar o logaritmo em ambos lados da equação acima temos

$$p_k = C k^{-\alpha}, \quad (2.7)$$

novamente,  $C$  é uma constante e é igual a  $e^c$ .

O coeficiente de aglomeração ou transitividade  $C$  mede a probabilidade média de que dois vértices vizinhos a um outro sejam vizinhos também, ou seja, a probabilidade de que três vértices estejam conectados entre si, o que constitui, por fim, uma contagem do número de triângulos presentes em uma rede. Definimos, portanto, o coeficiente de aglomeração de um vértice  $i$  como

$$C_i = \frac{(\text{número de pares de vizinhos de } i \text{ conectados})}{(\text{número de pares de vizinhos de } i)}, \quad (2.8)$$

ou, em termos do grau médio

$$C = \frac{1}{n} \frac{[\langle k^2 \rangle - \langle k \rangle]^2}{\langle k \rangle^3}, \quad (2.9)$$

quando  $n \gg 1$ , ou seja, em grandes redes, o coeficiente de aglomeração torna-se extremamente pequeno.

Um caminho é uma sequência consecutiva de arestas entre vértices ao longo da rede. Seu comprimento é o número de arestas percorridas e é tipicamente da ordem de  $\log n$ . O caminho geodésico é o mais curto entre dois vértices.

## 2.1 Modelos de Redes

Nessa seção discutiremos os três principais tipos de redes complexas bem como suas características estruturais importantes no estudo de redes reais.

### Redes Aleatórias

Considere um grafo fragmentado em componentes, ou seja, em subgrupos isolados onde não existe um caminho que interligue dois vértices de subgrupos diferentes. Atribui-se, então, uma probabilidade  $p$  uniforme para a união entre dois vértices quaisquer do grafo, ou seja, todos os nós possuem a mesma chance de obter um link. Tais redes, conhecidas como grafos de Erdős-Rényi, são as mais simples que podemos descrever [10].

Em geral, um grafo aleatório é um modelo de rede no qual alguns parâmetros tem valores fixos, como por exemplo o número de vértices  $n$  e o número de links  $m$ . No entanto, a rede é randômica em outros aspectos. Nesse caso especificamente, fixamos  $n$  e aleatoriamente colocamos  $m$  links entre eles. Outra definição equivalente do modelo é dizer que a rede é criada escolhendo uniformemente ao acaso dentre o conjunto de todos os grafos simples com exatamente  $n$  vértices e  $m$  links. Cada possível link  $\binom{n}{2}$  existe com probabilidade  $p$  de estabelecer conexão [1].

Algumas propriedades de um grafo aleatório  $G(n, m)$ , como o grau médio  $\langle k \rangle = 2m/n$  (2.4) e número médio de links  $m$  podem ser calculadas diretamente. Em  $G(n, m)$  fixamos a probabilidade de links entre os vértices. Novamente, temos  $n$  vértices, mas agora colocamos um link entre cada par distinto com probabilidade independente  $p$ . Nessa rede, o número de links não é fixado. A definição técnica do grafo aleatório não é em termos de uma única rede, mas em termos de um *ensemble*, a probabilidade de distribuição sobre todas as possíveis redes [1]. Para ser específico,  $G(n, m)$  é o ensemble de redes com  $n$  vértices no qual cada grafo simples possui probabilidade

$$P(G) = p^m (1 - p)^{\binom{n}{2} - m}, \quad (2.10)$$

onde  $\binom{n}{2}$  é o número de combinações possíveis de  $n$  vértices conectados dois a dois. No caso de

grafos não simples, isto é, aqueles onde há multiedges ou self-edges, essa probabilidade é zero.

O número de grafos com exatamente  $n$  vértices e  $m$  links é igual ao número de maneiras de obter links dentre  $\binom{n}{2}$  possibilidades para os distintos links entre pares de vértices. Cada um desses grafos aparece com a mesma probabilidade  $P(G)$ , dada pela equação (2.10), Logo, a probabilidade total de desenhar um grafo com  $m$  links do nosso ensemble é

$$P(m) = \binom{\binom{n}{2}}{m} p^m (1-p)^{\binom{n}{2}-m}, \quad (2.11)$$

a qual é exatamente a probabilidade de uma variável aleatória binomial com parâmetros  $(\binom{n}{2}, p)$ .

O valor médio de  $m$  é

$$\langle m \rangle = \sum_{m=0}^{\binom{n}{2}} m P(m) = \binom{n}{2} p, \quad (2.12)$$

O número esperado de links entre qualquer individual par de vértices é justamente igual a probabilidade  $p$  de um link entre os mesmos vértices, e a equação (2.12) deste modo diz somente que o número total de links esperado na rede é igual ao número esperado  $p$  entre qualquer par de vértices, multiplicado pelo número de pares.

Podemos usar esse resultado para calcular o grau médio de um vértice no grafo aleatório. Como dito anteriormente, o grau médio num grafo com exatamente  $m$  links é  $\langle k \rangle = 2m/n$ , e então o grau médio em  $G(n, p)$  é

$$\langle k \rangle = \sum_{m=0}^{\binom{n}{2}} \frac{2m}{n} P(m) = \frac{2}{n} \binom{n}{2} p = (n-1)p, \quad (2.13)$$

onde usamos a equação (2.12) e o fato de que  $n$  é constante. O grau médio de um grafo aleatório é portanto

$$c = (n-1)p, \quad (2.14)$$

que é o mesmo que dizer que o número esperado de links conectado a vértice é igual ao número esperado  $p$  entre um vértice e outro, multiplicado pelo número  $(n-1)$  de outros vértices.

Inicialmente dois vértices são aleatoriamente conectado, começando por nós isolados. Um dado vértice no grafo é conectado com probabilidade independente  $p$  a cada um dos  $n-1$



outros vértices. Deste modo, a probabilidade de começar conectado a uns particulares  $k$  outros vértices e não a qualquer outros vértices é  $p^k(1-p)^{n-1-k}$ . Existem  $\binom{n-1}{k}$  modos de escolher esses  $k$  outros vértices, e, então, a probabilidade total de começar conectado a exatamente  $k$  outros vértices é

$$p_k = \binom{n-1}{k} p^k (1-p)^{n-1-k}, \quad (2.15)$$

novamente temos a distribuição binomial. Em outras palavras,  $G(n, p)$  tem uma distribuição de grau binomial. Em muitos casos estamos interessados em propriedades de grandes redes, então,  $n$  pode ser assumido como grande. A equação (2.14) nos diz que  $p = c/(n-1)$  torna-se extremamente pequeno quando  $n \rightarrow \infty$ , o que nos permite escrever

$$\ln[(1-p)^{n-1-k}] = (n-1-k) \ln \left( 1 - \frac{c}{n-1} \right) \approx -(n-1-k) \frac{c}{n-1} \approx -c, \quad (2.16)$$

onde expandimos o logaritmo em série de Taylor e a igualdade torna-se exata com  $n \rightarrow \infty$ . Tirando exponenciais em ambos lados, encontramos  $(1-p)^{n-1-k} = e^{-c}$  no limite de  $n$  grande, onde também temos

$$\binom{n-1}{k} = \frac{(n-1)!}{(n-1-k)!k!} \approx \frac{(n-1)^k}{k!}, \quad (2.17)$$

e, então, (2.15) torna-se

$$p_k = \frac{(n-1)^k}{k!} p^k e^{-c} = \frac{(n-1)^k}{k!} \left( \frac{c}{n-1} \right)^k e^{-c} = \frac{c^k}{k!} e^{-c}, \quad (2.18)$$

que é a distribuição de Poisson no limite de  $n$  grande. É por isso que grafos de Erdős-Rényi podem ser chamados também de “Grafo aleatório de Poisson” ou “Grafo aleatório de Bernoulli”, com referência à distribuição de graus e links deste modelo [1].

Grafos de Erdős-Rényi são modelos idealizados uma vez que a maior parte de redes do mundo real, como por exemplo a rede cerebral, não são bem descritas por grafos aleatórios ou regulares [2]. Este modelo prediz, por exemplo, que a maioria dos neurônios conecta-se aproximadamente ao mesmo número de outros neurônios [10].

Uma peculiaridade deste grafo, descrita em [7], é que ao aumentar o número de conexões ( $m$ ), o número de componentes também cresce e quando  $m = n/2$  uma transição de fase ocorre.

## Redes pequeno-mundo

As “redes pequeno-mundo” constituem outro modelo e são mais eficientes para analisar a maioria das redes do mundo real. Estas são matematicamente definidas por duas propriedades: caminho mínimo ou geodésico pequeno, e elevado grau de aglomeração. A figura abaixo mostra um exemplo de rede pequeno-mundo.

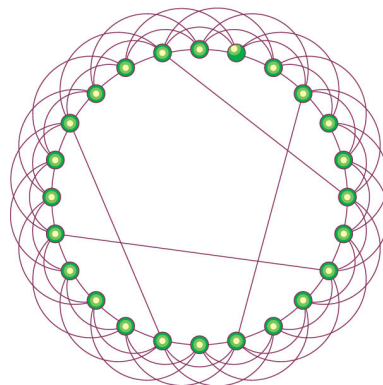


Figura 2.2: Rede “pequeno-mundo”. Extraído de [7]

A grande dificuldade na construção de redes tipo mundo pequeno está em combinar as duas características em uma mesma rede. A forma encontrada por Watts-Strogatz [7] foi partir inicialmente de uma rede tipo anel e conectá-la aleatoriamente com uma certa probabilidade (figura anterior). O resultado é altamente satisfatório e a figura 2.3 exemplifica esse caso, onde observamos a existência de um alto grau de aglomeração mesmo na presença de um caminho mínimo médio pequeno.

## Redes de Barabási e Albert

Barabási e Albert [10] demonstraram que redes livre de escalas são geradas através de uma lei de potência na distribuição de graus. Tais redes seguem uma “conexão preferencial”, o que implica dizer que a adição de um nó o leva a se conectar com nós de alto grau de conexão, os denominados “hubs”. Ao contrário do que diziam Erdős-Rényi, em termos matemáticos, devemos reconhecer os diversos *hubs* extensivamente encontrados na maioria das redes complexas

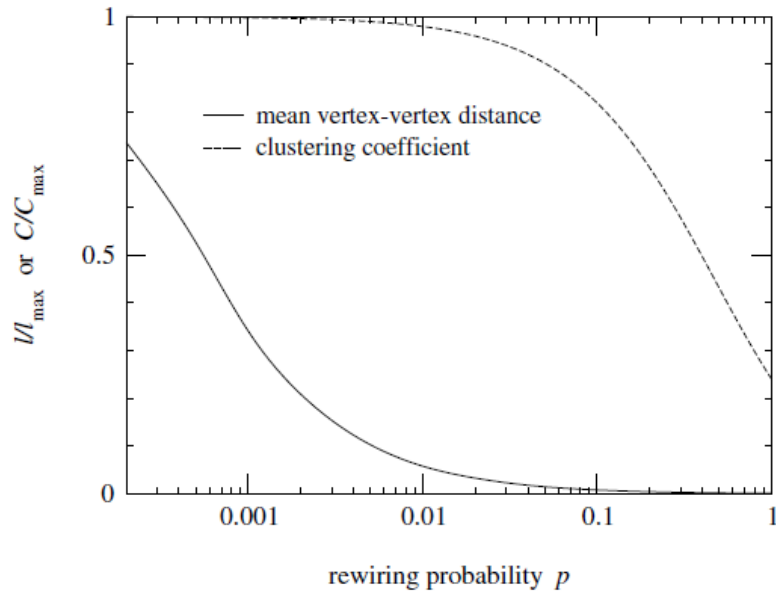


Figura 2.3: Coeficiente de aglomeração e caminho médio para uma rede pequeno-mundo. Extraído de [1]

da natureza. Eles determinam a estabilidade da estrutura e do comportamento dinâmico das mesmas.

Começamos com uma pequena rede e a expandimos adicionando um vértice por vez. Para se conectar, o vértice novo escolhe o vértice com maior quantidade de links com probabilidade

$$p_i = \frac{k_i}{\sum_j k_j} \quad (2.19)$$

ou seja, a probabilidade de que um novo vértice escolha um dado nó é proporcional ao número de links que o nó escolhido possui.

Simulações em computadores revelaram que o número de nós com exatamente  $k$  links segue uma lei de potência para qualquer  $k$  da forma:  $p_k \sim k^{-3}$ . Redes reais como a *Web*, Hollywood, a rede metabólica no interior da célula, as redes citacionais, econômicas e a rede linguística fazem parte do conjunto de redes sem escala [10].

## Redes Booleanas

---

Uma *rede booleana aleatória* foi empregada por Kauffman em um modelo computacional simplificado para estudar redes regulatórias genéticas [3]. Como dito pelo próprio Kauffman em [13], “As redes aleatórias booleanas são sistemas termodinâmicos abertos, afastados do equilíbrio por uma fonte exógena de energia. Elas são sistemas de variáveis binárias liga/desliga, cada qual sendo governada por uma lógica de acionamento denominada função booleana.”

Neste tipo de rede, cada elemento estará ativo ou inativo, o que será aqui representando, respectivamente, por 1 e 0. A cada etapa de uma evolução temporal discreta, aplica-se uma função lógica booleana, escolhida aleatoriamente, do tipo “e” ou “ou”, que determinará a saída 0 ou 1 do estado de um nó na próxima etapa dependendo do estado dos outros componentes ao qual está conectado. Após um certo número de passos, o sistema tende a voltar ao estado inicial, uma vez que o número total de possíveis configurações da rede, aqui denotado por  $\Omega$ , é finito. Uma vez atingido o mesmo estado anterior, o sistema irá seguir os mesmos passos, um atrator no sistema dinâmico.

Temos  $N$  variáveis binárias do tipo  $\sigma_i \in \{0, 1\}$  como função do tempo (discreto), ou seja,  $\sigma_i = \sigma_i(t)$ , para  $t = 1, 2, 3, \dots$  e  $K$  entradas por variável. Na etapa  $(t + 1)$ , a evolução é determinada por uma função booleana  $f_j$  das  $K$  variáveis de controle  $\sigma_{jK_i}(i)$ , ou vizinhos de  $\sigma_i$

com os quais há ligações, no tempo anterior  $t$ , ou seja,

$$\sigma_i(t+1) = f_i(\sigma_{j_1(i)}(t), \sigma_{j_2(i)}(t), \sigma_{j_3(i)}(t), \sigma_{j_{K_i(i)}}(t)) \quad (3.1)$$

Vamos considerar o caso limite no qual  $K = N$ . A função  $\sigma_i$  tem  $\Omega = 2^N$  estados possíveis, já que cada variável atribuí aleatoriamente a sua entrada 0 ou 1 de acordo com a função booleana empregada, enquanto sua função booleana acoplada  $f_i$  tem  $2^K$  argumentos, logo, existem  $N_f = 2^{2^K}$  configurações possíveis.

No modelo N-K, introduzido por Kauffman, a distribuição é uniforme, ou seja, todos os estados tem a mesma probabilidade  $1/N_f$  de ocorrer. Nele, todas as três fases podem ser encontradas no limite termodinâmico, é dizer, fase caótica, complexa próxima à transição da ordem para o caos e crítica [12]. O enfoque será dado na aproximação "annealing", na qual a cada etapa uma função booleana é aleatoriamente escolhida, ou seja, as ligações podem mudar a cada atualização, dependendo da escolha do algoritmo.

Com o objetivo de interpretar a transição de um estado para o outro, ou a percolação de informação através da rede, vamos definir a "distância de Hamming" entre dois estados do sistema. Um estado do sistema é caracterizado pelo conjunto das variáveis binárias  $\sigma_i$ , como definido abaixo

$$\Sigma_t = \{\sigma_1(t), \sigma_2(t), \dots, \sigma_N(t)\}. \quad (3.2)$$

A distância de Hamming entre um estado  $\Sigma_t$  e um outro  $\tilde{\Sigma}_t$  será dada por

$$D(t) = \sum_{i=1}^N (\sigma_i(t) - \tilde{\sigma}_i(t))^2, \quad (3.3)$$

uma medida que avalia quão próximos estão um estado do outro, ou a variação entre os *bits* da rede. Por exemplo, temos três estados caracterizados por  $\Sigma_1 = \{1, 0, 0, 0\}$ ,  $\Sigma_2 = \{1, 1, 0, 0\}$ ,  $\Sigma_3 = \{0, 1, 0, 1\}$ . A distância de Hamming entre  $\Sigma_1 - \Sigma_2$  é 1, a de  $\Sigma_2 - \Sigma_3$  é 2, já entre  $\Sigma_1 - \Sigma_3$  é 3.

Para estados iniciais, ou seja, quando  $t = 0$ , esta distância pode ser usada para caracterizar a sensibilidade às condições iniciais. Assumindo que a informação é processada

entre curtos períodos de tempo, a distância de Hamming em um tempo  $t$  está exponencialmente ligada à distância inicial por

$$D(t) = D(0)e^{\lambda t}, \quad (3.4)$$

na qual  $\lambda$  é o expoente de Lyapunov característico da dinâmica do sistema. Se  $\lambda > 0$  diz-se que o sistema está na fase caótica, já que a distância de Hamming cresce exponencialmente e dois estados iniciais próximos tornam-se rapidamente muito diferentes. Para  $\lambda < 0$ , dois estados próximos convergem, então o sistema está na fase congelada. Em  $\lambda = 0$ , na fase crítica, não há dependência exponencial com o tempo e  $D(t) \propto t^\gamma$ .

Se normalizarmos da distância de Hamming, dividindo-a pelo número total de variáveis, obtemos

$$a(t) = 1 - \frac{D(t)}{N} = 1 - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\sigma_i^2(t) - 2\sigma_i(t)\tilde{\sigma}_i(t) + \tilde{\sigma}_i^2(t)) \approx \frac{2}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i(t)\tilde{\sigma}_i(t). \quad (3.5)$$

Quando  $a(t) \rightarrow 1$  para um tempo muito grande significa que toda informação foi perdida, já que os dois estados são iguais e a distância de Hamming é nula.

Redes booleanas aleatórias com limiar (RTN) é um modelo bastante empregado atualmente inclusive em redes neurais. São caracterizadas por uma função booleana que ativa ou inibe (liga/desliga) um nó da rede dependendo de um certo limiar  $h \geq 0$ . O estado do nó no tempo  $t + 1$  é dado por

$$\sigma_i(t + 1) = \begin{cases} 1, & \text{se } \sum_{j=1}^n w_{ij}\sigma_j(t) > h \\ 0, & \text{se } \sum_{j=1}^n w_{ij}\sigma_j(t) \leq h \end{cases} \quad (3.6)$$

onde  $w_{ij}$  pode ser  $\pm 1$  caso o nó ativo ou iniba seu vizinhos. A informação é propagada somente por nós ativos ( $\sigma_i = 1$ ) [4].

## Aproximação de Campo Médio

Considerando que todos os nós da rede podem estar somente ativos (1) ou inativos (0), com probabilidades  $(1 - p)$  e  $p$ , respectivamente, para o tempo posterior  $t + 1$  um dado nó pode estar em ambos estados dependendo da função booleana empregada com probabilidade

$2p(1-p)$ . Na teoria de Campo Médio as flutuações são descartadas e assumimos um valor alto para  $K$ .

Dois estados iniciais distintos

$$\Sigma_0 = \sigma_1(0), \sigma_2(0), \dots, \sigma_N(0) \quad (3.7)$$

e

$$\tilde{\Sigma}_0 = \tilde{\sigma}_1(0), \tilde{\sigma}_2(0), \dots, \tilde{\sigma}_N(0), \quad (3.8)$$

são separados pela distância de Hamming

$$D(0) = \sum_{i=1}^N (\sigma_i(0) - \tilde{\sigma}_i(0))^2. \quad (3.9)$$

Os estados dos nós variam no tempo afetando em média  $KD(t)$  funções de acoplamento, onde  $K$  é, por simplificação, o grau médio dos  $N$  nós da rede. Em uma mudança de estado, a distância de Hamming é metade do número de variáveis binárias, logo

$$D(t+1) = \frac{K}{2} D(t) \quad (3.10)$$

ou em relação à distância inicial

$$D(t) = \left(\frac{K}{2}\right)^t D(0) = D(0)e^{t \ln(K/2)}. \quad (3.11)$$

Para  $K > 2$  a distância de Hamming aumenta exponencialmente com o tempo, significando que as duas distâncias inicialmente próximas divergem com o tempo, dizemos então que sistema está no estado caótico. Em  $K < 2$  toda a informação inicial foi perdida e os dois estados se aproximam exponencialmente, este é no estado “congelado”. Para  $K = 2$  a rede está no estado crítico.

O córtex cerebral humano contém  $10^{10}$  neurônios com  $10^{14}$  conexões [11] sendo considerado uma rede complexa densamente conectada.

## Aproximação Annealed

A aproximação “annealed” descrita a seguir leva em consideração a independência entre todos os nós da rede, ignorando a correlação temporal entre eles. Ela também será caracterizada para redes densamente conectadas, ou seja, quando o número médio de ligações  $K$  é alto. Essa seção está baseada em [4].

Algumas definições serão importantes no estudo da atividade da rede, a saber,  $\mathbf{A}(t)$  é a fração de nós ativos no tempo  $t$ ;  $\mathbf{A}_\infty$ , a atividade estável da rede;  $\mathbf{F}_+$ , a fração de links positivos da rede; por fim,  $\mathbf{p}_k$  é a distribuição de probabilidade de  $k$ .

Em princípio, observamos a atividade de um nó em particular e estamos interessados na quantidade  $\mathbf{m}$  de nós que estão ligados a ele, mais especificamente, de quantos nós ele está recebendo sinal, ou seja, quando  $\sigma_{ji} = 1$ . O número mínimo desse nós é  $h + 1$ , onde  $h$  é o limiar imposto na equação (3.6) e, portanto, admitimos  $m > h$ . Designamos por  $l$  o número de links ( $w_{ij}$ ) ativadores (isto é,  $\omega_{ij} = +1$ ). Existem pelo menos  $\lfloor \frac{m+h}{2} \rfloor$  nós com links ativadores. A probabilidade de ativação de um dado nó com  $m$  vizinhos ativos é

$$P_{\text{ativo}}(m) = \sum_{l=\lfloor \frac{m+h}{2} \rfloor+1}^m \binom{m}{l} F_+^l (1 - F_+)^{m-l}, \quad (3.12)$$

onde  $\lfloor x \rfloor$  representa a função piso, o maior inteiro menor ou igual a  $x$ , e

$$F_+ = \frac{\text{número de } w_{ij} \text{ positivos}}{\text{número total de } w_{ij}}. \quad (3.13)$$

Portanto, a fração total de nós ativos em  $t + 1$ , dentre todas as  $\binom{k}{m}$  distribuições possíveis é

$$A(t + 1) = \sum_{k=1}^{n-1} p_k \sum_{m=h+1}^k \binom{k}{m} A(t)^m [1 - A(t)]^{k-m} P_{\text{ativo}}(m), \quad (3.14)$$

que é a aproximação annealed. Após um certo tempo, pode-se verificar por simulações numéricas (ref. [4]), que a atividade da rede torna-se estável, aqui denotado por  $A(\infty) = A(t \rightarrow \infty)$ .

Com o objetivo de interpretar melhor o resultado obtido, faremos algumas simplificações que nos serão úteis. Somar sobre a probabilidade  $p_k$  é o mesmo que considerar o número de



ligações médias da rede  $K$ , logo

$$A_\infty = \sum_{m=h+1}^K \binom{K}{m} A_\infty^m [1 - A(t)]^{K-m} P_{ativo}(m), \quad (3.15)$$

A função beta incompleta normalizada é definida como

$$I_z(a, b) = \frac{\int_0^z t^{a-1} (1-t)^{b-1} dt}{\int_0^1 t^{a-1} (1-t)^{b-1} dt}, \quad (3.16)$$

Sabemos que (ref. [14]) (pode-se mostrar por integração por partes)

$$I_x(m, n - m + 1) = \sum_m^n \binom{n}{m} x^m (1-x)^{n-m}. \quad (3.17)$$

Assim, a equação (3.12) pode ser escrita da seguinte forma

$$P_{ativo}(m) = I_{F+} \left( \lfloor \frac{m+h}{2} \rfloor + 1, m - \lfloor \frac{m+h}{2} \rfloor \right), \quad (3.18)$$

aproximamos, então, a função menor inteiro por  $\lfloor x/2 \rfloor \approx x/2 - 1/4$ , e

$$P_{ativo}(m) = I_{F+} \left( \frac{m+h+3/2}{2}, \frac{m-h+1/2}{2} \right), \quad (3.19)$$

que substituímos em (3.15)

$$A_\infty = \sum_{m=h+1}^K \binom{K}{m} A_\infty^m [1 - A_\infty]^{K-m} I_{F+} \left( \frac{m+h+3/2}{2}, \frac{m-h+1/2}{2} \right). \quad (3.20)$$

Para o caso em que  $K \gg h$  podemos aproximar

$$\sum_{m=0}^K \binom{K}{m} A_\infty^m (1 - A_\infty)^{K-m} = 1. \quad (3.21)$$

Ainda considerando  $K \gg h$  podemos aproximar  $m$  por seu valor médio  $\tilde{m} = KA_\infty$  e obtemos

$$A_\infty = I_{F+} \left( \frac{KA_\infty + h + 3/2}{2}, \frac{KA_\infty - h + 1/2}{2} \right), \quad (3.22)$$

$$F_+ = I_{A_\infty}^{-1} \left( \frac{KA_\infty + h + 3/2}{2}, \frac{KA_\infty - h + 1/2}{2} \right). \quad (3.23)$$

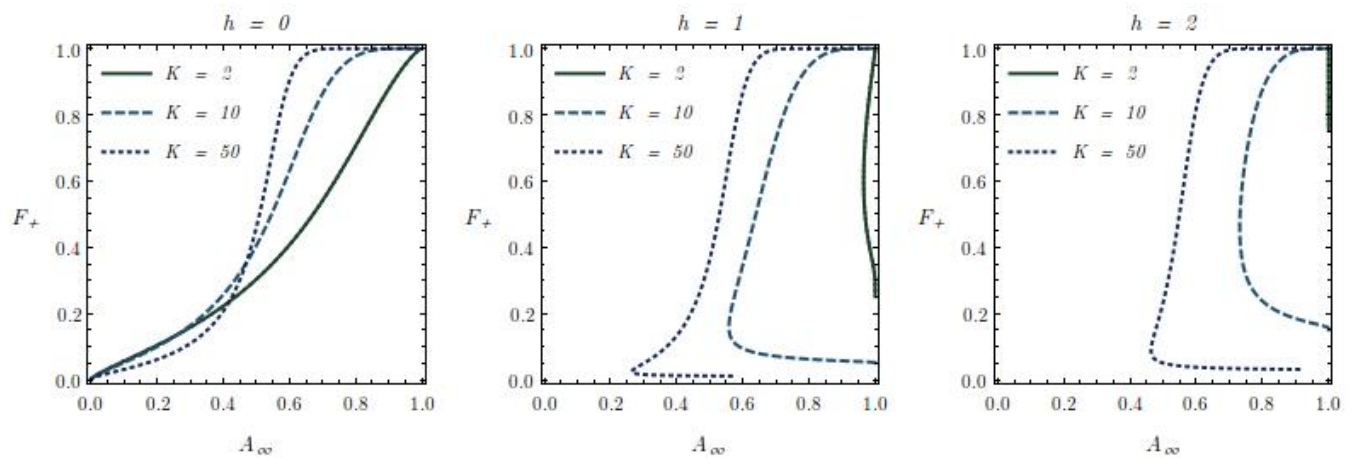


Figura 3.1: Gráficos  $A_\infty \times F_+$

Utilizando o programa Mathematica e as equações (3.22) e (3.23), plotamos três gráficos com valores distintos do limiar  $h$  e de  $K$ , como observado na figura 3.1.

É possível notar que para  $K = 2$ , a aproximação falha para alguns valores de  $A_\infty$ , quando  $h > 0$ , que é justamente no ponto crítico obtido na aproximação de campo médio. Já em  $h = 0$  a aproximação condiz com a simulação, pois observamos que por volta de  $F_+ = 0,5$  a atividade da rede fica estável, principalmente para valores altos de  $K$ . Quando  $F = 0,5$  significa que os nós coexistem com a mesma probabilidade de links ativadores e inibitórios. Vale resaltar que o resultado obtido independe diretamente do tamanho da rede, no entanto, quanto maior o número médio de ligações, melhor a aproximação.

# Conclusão

---

O objetivo desse relatório foi apresentar uma introdução no campo das redes complexas. Caracterizamos algumas propriedades úteis e descrevemos os principais modelos de redes comumente utilizados. Por fim, foi feito um breve estudo da dinâmica da rede, em particular de redes booleanas, e com a aproximação annealed obtivemos uma ferramenta matemática capaz de simular satisfatoriamente a atividade de uma rede densamente conectada. Essa parte final foi baseada no trabalho de dissertação de Mestrado de João Pinheiro Neto (ref. [4]).

## Opinião do orientador

A estudante desempenhou bem as atividades previstas na primeira parte do projeto. Durante essa etapa ela estudou e adquiriu os conceitos gerais sobre redes, compreendendo os principais parâmetros que caracterizam e classificam as redes. Ela também estudou alguns exemplos mais importantes de redes, principalmente nos aspectos estruturais das mesmas. Em paralelo, a segunda etapa do projeto foi definida, onde será priorizado os aspectos da dinâmica das redes, em particular, as redes booleanas. O relatório reflete o trabalho da estudante. Na segunda etapa dos trabalhos a estudante investigou o problema de dinâmica de redes. Considerando o caso das redes booleanas e as aproximações de campo médio e “annealed”, ela reproduziu os resultados obtidos no nosso grupo, obtendo uma expressão analítica para a

atividade da rede. Essa etapa conclui o estudo mais técnico do projeto e considero muito bom os resultados obtidos. Os próximos passos envolvem ampliar a discussão dos resultados obtidos.

# Referências Bibliográficas

---

- [1] M. Newman, *Networks: An Introduction* (Oxford University Press, 2010).
- [2] O. Sporns, *Networks of the Brain* (The MIT Press, 2011).
- [3] M. Mitchell, *Complexity: A Guided Tour* (Oxford University Press, 2009).
- [4] João Pinheiro Neto, *A study on the structure and dynamics of complex networks*, Dissertação de Mestrado, (IFGW, UNICAMP, 2014).
- [5] Ed Bullmore, & O. Sporns, *Complex brain networks: graph theoretical analysis of structural and functional systems*. *Nature*, **10**, 186-198 (2009).
- [6] O. Sporns, *The human connectome: a complex network*. *Ann. N. Y. Sci.*, **1224**, 109-125 (2011).
- [7] S.H. Strogatz, *Exploring complex networks*. *Nature*, **410**, 268-276 (2001).
- [8] J. Metz, R. Calvo, E. Rossi, M. Seno, R.A.F. Romero & Z. Liang, *Redes Complexas: Conceitos e Aplicações* (Universidade de São Paulo, 2007).
- [9] *Complexidade e Caos*, Org. H.M. Nussenzveig, (Editora UFRJ/COPEA, 2003).

- [10] A.-L. Barabasi & J. Frangos, *Linked: The New Science of Networks* (Perseus Books, Cambridge, 1<sup>a</sup> edição, 2002)
- [11] A. Barrat, M. Barthélemy & A. Vespignani, *Dynamical Processes on Complex Networks*, (Cambridge University Press, 2008).
- [12] C. Gros, *Complex and Adaptive Dynamical Systems: A Primer*, (Springer; 2<sup>a</sup> edição, 2011).
- [13] *O que é a vida? 50 anos depois*, Org. M. P. Murphy & L. A. J. O'Neill, (Editora Unesp, 1997).
- [14] *Digital Library of Mathematical Functions*, National Institute of Standards and Technology (ver página <http://dlmf.nist.gov/8.17>).