

Samyr Silva Bezerra Jácome

Aspectos Dinâmicos e Estruturais em Modelos
de Redes para Sistemas Complexos

Fortaleza – CE

Março / 2009

Samyr Silva Bezerra Jácome

Aspectos Dinâmicos e Estruturais em Modelos de Redes para Sistemas Complexos

Tese de Doutorado apresentada ao Departamento de Física da Universidade Federal do Ceará, como parte dos requisitos para a obtenção do Título de Doutor em Física.

Orientador:

Prof. Dr. André Auto Moreira

Co-orientador:

Prof. Dr. José Soares de Andrade Junior

DOUTORADO EM FÍSICA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
CENTRO DE CIÊNCIAS
UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ.

Fortaleza – CE

Março / 2009

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Biblioteca Universitária
Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

- J16a Jácome, Samyr Silva Bezerra.
Aspectos dinâmicos e estruturais em modelos de redes para sistemas complexos / Samyr Silva Bezerra
Jácome. – 2009.
95 f. : il. color.
- Tese (doutorado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Física, Fortaleza, 2009.
Orientação: Prof. Dr. André Auto Moreira.
Coorientação: Prof. Dr. José Soares de Andrade Junior.
1. Mecânica estatística. 2. Redes complexas. 3. Percolação. 4. Transporte de fluidos. 5. Statistical mechanics. I. Título.

CDD 530

*Aos Meus Avós
Paternos
aos
Meus Pais
e a
Meu Amor, Celina..*

Agradecimentos

- Ao Professor André Auto pela orientação, amizade e as valorosas discussões que contribuíram para não apenas para a realização deste trabalho como também para o enriquecimento da minha formação científica;
- Ao Professor José Soares de Andrade Júnior pela co-orientação, discussões e suporte lógico que contribuíram para a realização deste trabalho;
- Ao Professor Ascânio de Araújo pela amizade e excelentes discussões que influenciaram diretamente nesse trabalho;
- Aos demais Professores do departamento de Física que de alguma forma contribuíram para a realização deste trabalho;
- Aos Professores Luciano da Silva, Uriel Costa e Eric Parteli por participarem da banca de defesa da minha tese;
- Às funcionárias Irene, Rejane, Ana Cleide, Creuza, Vera e Michele pela cordialidade e profissionalismo;
- Aos amigos Lucas, Felipe, Talita, Mariana, Baquil e Eduardo pela amizade ao longo do período de minha formação;
- Aos amigos Erneson, Apiano, Roberto, Pablo e George pela amizade;
- Ao amigo Saulo pela amizade e discussões dos algoritmos "tampas";
- Ao Marcos pela amizade e paciência nas correções da tese;
- Aos meus grandes amigos Oscar, Sanderson, Alexandre e Thiago Ribeiro, os quais a distância não me deixa esquecer;
- À minha querida avó, a qual chamo carinhosamente de Mãe Liquinha, pelo amor e carinho;
- Aos meus pais pelo amor, carinho, dedicação e por acreditarem no meu potencial e terem me proporcionado uma ótima educação;
- Aos meus irmãos pelo carinho, companherismo e principalmente pela amizade;
- Aos quase filhos Willamis, Wesley, Yolanda, David e Fernando pela estreita amizade e por terem convivido harmoniosa e pacientemente comigo ao longo desses dois últimos anos;
- Ao meu grande amor, Celina, por ter me dado a chance de conhecê-la e me permitir cativar o seu amor. Vivi ao seu lado os momentos mais intensos e felizes da minha vida. Obrigado pelo seu companherismo, sua dedicação e principalmente pela sua compreensão e paciência, pois sei que cometi muitos erros ao longo do tempo.

Resumo

Nesta tese estudaremos sistemas onde alguma forma de desordem ou não-homogeneidade tem um importante papel na complexidade da formação estrutural ou da regulação dinâmica do sistema. Primeiramente estudaremos a dinâmica das redes Booleanas, onde as regras de atualização escolhidas aleatoriamente controlam o comportamento global do sistema. Na condição crítica e próximo dela, propomos que a transição para o regime crítico pode ser caracterizado pela divergência do tempo de relaxação t_R . Baseados em simples argumentos de escalonamento, mostramos, além de outros resultados, que a probabilidade acumulativa da distribuição de t_R decai como uma lei de potência $P(t_R < t) \sim t^{-\beta}$, com o expoente $\beta = 1$, para o modelo *annealed* na região crítica. Em seguida estudamos um novo método de decomposição de redes aplicado às redes livres de escalas, onde a ampla distribuição de conectividade é um aspecto fundamental. O método consiste basicamente na retirada simultânea e iterativa de grupos de vértices com um determinado grau K de conectividade até que não haja mais sítios com este mesmo grau de conectividade na rede. Deste modo, definimos algumas variáveis que caracterizam o processo de decomposição e obtemos uma série de expoentes e parâmetros bem definidos. A partir do comportamento destas variáveis pudemos constatar por meio de algumas manipulações matemáticas que nosso método é auto-consistente, servindo como ótima ferramenta para estudo dos aspectos estruturais de uma rede. Por fim, estudamos os *backbones*, onde utilizamos um modelo de rede em que a desordem está no arranjo aleatório de camadas fáceis e difíceis à percolação. Os resultados numéricos indicam a quebra na classe de universalidade da geometria fractal e da distribuição de tamanhos de massa do *backbones* e também um comportamento assintótico da dimensão fractal no limite de grandes valores de massa e/ou anisotropia.

Abstract

In this thesis we study systems where some form of disorder or non-homogeneity has a significant role at the complexity of the structural building or of the dynamics regulation of the system. First, we study the dynamics of Boolean networks, where the rules to update the state of the nodes are randomly chosen and control the global behavior of the system. At the critical threshold, and near to it, we propose that the transition to the critical regime can be characterized by the divergence of the relaxation time t_R . Based on simple scaling arguments, we show that the cumulative probability distribution of t_R decays as a power-law $P(t_R < t) \sim t^{-\beta}$, with exponent $\beta = 1$, for the *annealed* model at the critical region. Then, we study a novel method for network decomposition, which we apply to scale-free networks, that have the broad degree distribution as a fundamental feature. This method consists in a simultaneous and iterative remotion of groups of nodes with degree K until there are no more nodes with this degree in the network. Thus, we define new variables that characterize the process of decomposition and we obtain a set of well define exponents and parameters. From the behavior of these variables we can see, through some mathematical manipulations, that our method is self-consistent, serving as a useful tool for the study of the structural features of the network. At last, we study the backbones of the percolation cluster, where we use a network model with layers arranged in a disorderly way to represent some kind of anisotropy resistance to the percolation. Our numerical results indicate a break at the universality class on the fractal dimension and on the mass distribution of the backbones.

Sumário

Lista de Figuras

Lista de Tabelas

Introdução	p. 20
1 REDES BOOLEANAS	p. 23
1.1 Introdução	p. 23
1.2 Modelo	p. 25
1.3 Fluxo de informação	p. 30
1.3.1 Teoria do Campo Médio	p. 32
1.3.2 Solução Geral	p. 33
1.3.3 Diagrama de fases	p. 35
1.4 Comportamento Dinâmico no Ponto Crítico	p. 37
1.4.1 Teoria	p. 37
1.4.2 Resultado Numérico	p. 39
1.5 Conclusões	p. 43
2 DECOMPOSIÇÃO DE REDES LIVRES DE ESCALAS	p. 45
2.1 Redes Livres de Escalas	p. 45
2.1.1 Rede de Albert-Barabási	p. 50
2.1.1.1 Cálculo Analítico	p. 52
2.2 Método de decomposição	p. 54

2.2.1	Modelo	p. 54
2.2.2	Resultados	p. 57
2.3	Conclusão	p. 62
3	PERCOLAÇÃO EM MULTI-CAMADAS	p. 63
3.1	Percolação	p. 63
3.1.1	Modelo de Percolação	p. 66
3.1.2	<i>Backbone</i>	p. 70
3.1.3	Método <i>Self-Avoiding Random Walk</i>	p. 75
3.2	Multi-camadas	p. 79
3.2.1	<i>Backbone</i> em Multi-camadas	p. 81
3.3	Resultados	p. 84
3.4	Conclusões	p. 88
4	CONCLUSÕES	p. 90
5	APÊNDICE	p. 92
	Referências	p. 93

Lista de Figuras

- 1 Diferentes tipos de conexões. (a) Podemos observar que em uma rede regular as conexões são escolhidas de acordo com a geometria do espaço. No exemplo em questão, podemos observar o elemento σ_i está conectado aos primeiros e segundos vizinhos, ou seja, aos $4d$ primeiros vizinhos, no espaço unidimensional $d = 1$. (b) Ao contrário do item anterior, o elemento σ_i pode ter suas conexões aleatoriamente escolhidas, ou seja, qualquer elemento σ_j do sistema tem igual chance de pertencer ao conjunto de elementos controladores do elemento σ_i p. 26
- 2 Ilustração exemplificando um esquema dinâmico de uma rede booleana.
a) Um diagrama de conexões contendo três elementos binários conectados entre si. A tabela mostra a regra de cada elemento, onde o elemento 1 é governado pela função “E” e os elementos 2 e 3 são governados pela função “OU”. b) A tabela mostra os $2^3 = 8$ possíveis estados do sistema em um dado tempo t no lado esquerdo e seus respectivos estados evoluídos para o tempo $t + 1$ no lado direito. c) Representação da dinâmica do sistema por gráfos de estado. Cada conjunto de algarismos representa um estado em um dado instante e as setas indicam o sentido da evolução temporal dos estados. p. 29
- 3 Um atrator é formado quando o estado de um sistema evolui para outro estado já visitado, passando a repetir indefinidamente sempre a mesma trajetória (sequências) de estados. A bacia atratora é formada por todos os estados que evoluem naturalmente para algum estado de um atrator. Na ilustração, temos uma base atratora de uma Rede Booleana com $N=13$ elementos e $K=3$ conexões. Cada estado do sistema é representado por um círculo e o sentido da evolução temporal ocorre de fora para dentro da figura, onde as linhas conectam um estado ao sucessor. O atrator é de tamanho 7 (sete estados) e o sentido de sua evolução temporal é indicado pela seta. A tabela de *bit* ilustra um dos estados que compõe a base atratora. (Fig. adaptada de [18]) p. 30

- 4 A distância de Hamming fornece a quantidade de estados diferentes dos pares conjugados entre duas redes semelhantes. Na ilustração, temos a representação esquemática de duas redes semelhantes com 16 elementos. Os pares de elementos conjugados com mesma cor possuem o mesmo estado e os que são cores diferentes (marcados por bolas pretas) possuem estados diferentes. Neste exemplo, a distância de Hamming é $H(t) = 4$. p. 31
- 5 Diagrama de fases das redes booleanas aleatórias. A área rachurada corresponde a fase ordenada e a área logo acima corresponde a fase caótica. A curva que separa ambas as regiões é a equação $K_c = [2p(1 - p)]^{-1}$. Gráfico adaptado de [19]. p. 36
- 6 Distribuição cumulativa do tempo de relaxação no ponto crítico. O tempo de relaxação é definido como a quantidade de passos necessários para que o dano em um par de redes semelhantes chegue a zero. A linha pontilhada é o comportamento esperado. Podemos ver que, para sistemas muito grandes, a distribuição segue o decaimento previsto em forma de lei de potência, $P(t_R > t) \sim t^{-1}$. Podemos observar, entretanto, um pequeno desvio para pequenas escalas de tempo e um truncamento exponencial para tempos muito grandes, que está localizado por um tempo de escala dado por $t_x \sim N^{1/2}$ (ver *inset*). O resultado para $N = 2^{31}$ foi obtido numericamente iterando a equação 1.26. Este resultado mostra que até na condição crítica, o sistema tende a alcançar o estado ordenado. Entretanto, no limite termodinâmico o tempo de relaxação médio diverge. O mais importante deste resultado é que na maioria dos casos o sistema se recupera da perturbação depois de poucos passos, enquanto que em pouquíssimos casos a resposta ao estímulo faz o sistema sofrer uma transição global. p. 39
- 7 Distribuição cumulativa do tempo de relaxação t_R para a fase ordenada próxima do ponto crítico. Estas curvas foram obtidas para uma rede de tamanho $N = 102400$ e conectividade $K = 3$. Os resultados mostram que a fase ordenada o tempo de escala τ_0 do truncamento exponencial da distribuição é determinado por $\tau_0 \sim (I_c - I)^{-\nu}$ para $\nu = 1$. O gráfico principal mostra a distribuição escalonada pelo tempo de correlação ν_0 , enquanto os dados originais podem ser visto no *inset*. p. 40

- 8 Distribuição cumulativa do tempo de relaxação para a fase caótica próxima do ponto crítico. Os resultados foram obtidos para uma rede de tamanho $N = 102400$ e conectividade $K = 3$. Quando $I_c > I$, o sistema está no regime caótico e, então, esperamos que o dano nunca convirja a zero. Esta concepção é consistente com os resultados, onde vemos que o *crossover* da lei de potência decai para um comportamento plano. Isto significa dizer que a média do tempo de relaxação diverge até para uma rede de tamanho finito. O tempo de correlação $\tau_0 \sim (I - I_c)^{-\nu}$ nos dá o tempo de escala para diferentes probabilidades. Podemos perceber um truncamento exponencial para valores de I se aproximando da condição crítica. Este truncamento ocorre devido ao tamanho finito da rede. Podemos perceber também que o início do truncamento varia cada vez mais rapidamente com o aumento de $(I - I_c)$. O gráfico principal mostra a distribuição escalonada com o tempo de correlação τ_0 , enquanto que os dados originais podem ser vistos no *inset*. p. 41
- 9 Distribuição cumulativa do tempo de relaxação para o caso *quenched*. Na fase ordenada próxima do ponto crítico, a distribuição torna-se restrita a pequenos tempos de escala. Como no modelo *annealed*, o *inset* mostramos a superposição das curvas por um tempo de correlação dado por $\tau_0 \sim (I - I_c)^{-\nu}$, com $\nu = 1$ p. 42
- 10 Distribuição de Poisson feita a partir dos dados de uma simulação computacional de uma rede aleatória. Os dados foram gerados de uma rede de $N = 10000$ vértices e probabilidade de conexão $\rho = 0.0015$. No eixo vertical temos a probabilidade haver o número X_k vértices com conectividade k (eixo horizontal) e $E(X_K)/N$ representa a expectativa da distribuição de Poisson para os parâmetros $N = 10000$ e $\rho = 0.0015$ (Fig. retirada de [16]). p. 46

- 11 Gráfico experimental da magnetização próxima do ponto crítico para cinco tipos de materiais magnéticos diferentes, onde os eixos da magnetização e temperatura são multiplicados respectivamente por um fator $H^{-1/\delta}$ e $H^{-1/\beta\delta}$, com $\beta \sim 0.36$ e $\delta \sim 4.5$. Os cinco materiais são CrBr_3 , EuO , Ni , YIG e Pd_3Fe e todos são ferromagnetos com estruturas diferentes: o CrBr_3 é considerado uma rede anisotrópica; o EuO possui forte interação entre os segundos vizinhos; o Ni é um ferromagneto elétron itinerante; o YIG é um ferrimagneto; o Pd_3Fe é uma liga magnética. Apesar da diferença estrutural, todos os materiais possuem o mesmo expoente crítico. Assim podemos colapsar o gráfico da magnetização em uma única curva pela multiplicação de um fator de escala, fazendo com que os cinco materiais pertençam a mesma classe de universalidade (Gráfico retirado de [40]). p. 48
- 12 Ilustração que mostra o processo de crescimento da rede Barabási-Albert. A rede é iniciada com o número inicial de vértices $m_0 = 3$ e o coeficiente de agregação $m = 2$. As bolas pretas são os vértices antigos e os cinzas o novo vértice adicionado. p. 50
- 13 Gráfico que mostra a distribuição de probabilidade do grau de conectividade $P(K)$ em função de K , onde podemos perceber o decaimento em lei de potência na forma $P(K) \sim K^{-\gamma}$, com $\gamma = 3.0$. A rede foi criada com $N = 10^6$ vértices e diferentes coeficientes de agregação m p. 51
- 14 Ilustração que representa um processo de RI k -shells de uma rede Barabási-Albert. A rede possui tamanho $N = 10$ e foi construída com um coeficiente de agregação $m = 2$. O processo de remoção foi realizado retirando todos os vértices com $K = 3$ conexões. As bolas de cor cinza indicam os vértices que serão retirados no passo seguinte. A figura a) representa a rede inicial, $t = 0$, b) o processo intermediário, $t = 1$, com $s_3(1) = 3/10$ e c) a configuração final, $t = 2$, com $s_3(2) = 2/10$, onde não há mais vértices com $K = 3$ conexões. Em todo o processo ocorreu um total de 2 iterações resultando em uma β -shell com $S_3 = 5/10$ p. 55

- 15 Decomposição de uma rede de Barabási-Albert. A simulação foi realizada em 200 amostras de redes com $N = 2^{23}$ vértices e diferentes valores de coeficiente de agregação m . Dentro do *inset* é mostrado um gráfico normalizado que representa o comportamento da fração média do total de vértices retirados $\langle S_K \rangle$ em função de K . Podemos perceber um decaimento em lei de potência com uma inclinação de aproximadamente 3.0 independente do coeficiente de agregação m . No gráfico principal é mostrado o colapso da distribuição o da fração média $\langle S_K \rangle$ por um fator de $m^{-\eta}$, onde $\eta \approx 1.8$ p. 56
- 16 A fração média de massa retirada $\langle s_K(t) \rangle$ é definida como sendo a quantidade média de vértices retirada em cada instante da iteração ao longo de um processo de decomposição em um conjunto de 200 amostras com redes de tamanho $N = 2^{25}$. O gráfico mostra a distribuição de $\langle s_K(t) \rangle$ em função da iteração t para $m = 3$ e diferentes valores de K , onde podemos perceber um decrescimento exponencial com inclinações λ_K . Os símbolos representam os dados computacionais e a linha contínua o ajuste exponencial. p. 57
- 17 A figura mostra o gráfico log-linear do tempo característico λ_K em função de K em redes de tamanho $N = 23$. Cada valor de λ_K é obtido a partir da inclinação da distribuição da média da fração de vértices retirados $\langle s_K(t) \rangle$ em função do tempo de iteração t para cada valor de conexão K (ver Fig. 16). Podemos perceber o comportamento logaritmo de λ_K em função de K na forma $\lambda_K \sim \delta \ln(K)$, com $\delta = 0.89$, e diferentes $m = 1, 3$, e 7 . O *inset* mostra a sobreposição de λ_K por um fator escala $m^{-\nu}$ com $\nu = 1.25$ p. 58
- 18 O gráfico acima mostra em log-log a variação C_K em função K para $m = 3$ e diferentes tamanhos de redes. A linha contínua representa o ajuste dado pela equação 2.15. O *inset* é mostrado a constante C_K multiplicado pelo seu respectivo tamanho de rede N p. 59
- 19 O gráfico mostra o tempo total médio $\langle T(K) \rangle$ necessário para o término do processo de decomposição para cada valor de K . Utilizamos diferentes tamanhos N de redes para um mesmo valor de número de conexões iniciais $m = 3$. A curva de linha contínua representa o ajuste da equação 2.20 com os parâmetros $\alpha = 3$, $\delta = 0.89$ e $a_3 = 0.72$ p. 61

- 20 Conjunto de quatro figuras ilustrativas do modelo de percolação. a) Esquema de percolação por sítios de uma rede quadrada 10×10 de primeiros vizinhos, onde os sítios azuis representam os *clusters* finitos, o vermelho e o *cluster* percolante os brancos os sítios vazios; b), c) e d) são figuras de simulações de uma rede quadrada 50×50 com diferentes probabilidades de ocupação p , onde em c) e d) as cores seguem a mesma representação de a) enquanto que em b) a cor vermelha representa o maior cluster finito da rede e o azul os demais. p. 67
- 21 Ilustração de uma rede quadrada $L \times L$ de percolação. A rede foi gerada no ponto crítico $p = p_c = 0.59275$ e com $L = 500$. O *cluster* percolante é identificado pela cor azul claro, os maiores *clusters* finitos são representados na ordem decrescente pelas cores verde escuro, vermelho, rosa, verde claro, amarelo, laranja, os demais por azul escuro e os desocupado por preto. Através das cores, podemos perceber que no ponto crítico existem *clusters* de todos os tamanhos. p. 68
- 22 Gráfico que representa a probabilidade de haver um cluster percolante $P_\infty(p)$ em função da probabilidade de sítios ocupados p . As curvas foram obtidas a partir de uma rede quadrada $L \times L$ com $L = 10^2$ (linha vermelha), $L = 10^3$ (linha azul), $L = 10^4$ (linha preta). A linha vertical serve de referência no ponto $p = p_c = 0.59275$ p. 69

- 23 Gráfico que mostra o comportamento da distribuição de massa dos *clusters* para vários níveis de tamanhos com três probabilidades p diferentes. Em a) temos o método *finitary size scale* que determina em função do tamanho da rede L o comportamento da massa do maior *cluster* com probabilidade de ocupação $p = 0.5$ (triângulos) e do *cluster* percolante com probabilidades $p = p_c = 0.59275$ (círculos) e $p = 0.7$ (quadrados). A linha pontilhada com traços (triângulos) representa o ajuste logarítmico e a linha contínua (círculos) e a tracejada (quadrados) os ajustes em lei de potência com expoentes $D_f \approx 1.89$ e $D \approx 2.0$, respectivamente. Cada ponto foi obtido a partir de uma média de 1000 amostras. Em b) temos o método do raio de giração que determina a massa do *cluster* finito em função do tamanho do seu raio médio. Cada ponto foi obtido a partir da média da massa de todos os *clusters* (apenas os que não tocam nas bordas) contidos em um intervalo logarítmico de raio médio e a linha contínua representa um ajuste em lei de potência com o expoente $D_f \approx 1.89$. A simulação foi realizada utilizando uma rede quadrada $10^4 \times 10^4$ com probabilidade de ocupação $p = p_c = 0.59275$ p. 71
- 24 Ilustração de *backbone* sob *cluster* percolante gerado em uma rede quadrada. Em a) temos um exemplo esquemático onde *backbone* são os sítios vermelhos e o *cluster* percolante os azuis. A entrada e saída de fluido são representados pelos sítios de cor preta e os sítios verdes representam a conexão entre regiões estagnadas ao restante do *cluster*. Em b) mostramos uma simulação em uma rede 500×500 de um *backbone* de cor preta sob um *cluster* percolante de cor cinza. p. 72

- 25 Gráficos que mostram os comportamentos críticos da massa do *backbone* em uma rede quadrada ($L \times L$). Em a) temos a distribuição da massa média M_B (para $r = 2$ e $L = 2^{11}$) em função do seu raio de giração R_g (círculos) e em função das componentes R_{gx} (triângulos) e R_{gy} (quadrados) do raio de giração. Para uma melhor visualização, multiplicamos por 5 e 20 as distribuições de massa das componentes R_{gx} e R_{gy} , respectivamente. Podemos perceber os comportamentos nas formas $M_B \sim R_g^{D_B}$, $M_B \sim R_{gx}^{D_{Bx}}$ e $M_B \sim R_{gy}^{D_{By}}$, onde as linhas contínuas representam os ajustes com inclinações $D_B = 1.638 \pm 0.006$, $D_{Bx} = 1.646 \pm 0.007$ e $D_{By} = 1.65 \pm 0.008$. Os pontos representados por diamantes mostram a componente R_{gy} em função de R_{gx} , onde podemos perceber uma relação em lei de potência com expoente D_{Bxy} aproximadamente igual a 1.0. Em b) temos a probabilidade de distribuição de massa do *backbone* para $r = 2$, que decai como uma lei de potência na forma $P(M_B) \sim M_B^{-\tau_B}$ seguida por um pequeno platô e depois por um *cutoff* com decaimento abrupto. A linha contínua representa o ajuste com inclinação $\tau_B = 1.237 \pm 0.02$ e os símbolos representam os diferentes tamanhos de redes ($L \times L$). Em c) mostramos a probabilidade de distribuição de massa $P(M_B)$ para diferentes tamanhos de $r = 2, 4, 8, 16$ e 32 e em d) o escalonamento pelos fatores r^{D_B} no eixo $P(M_B)$ e r^{-D_B} no eixo M_B . Nos itens c) e d) usamos redes de tamanho $L = 2^{11}$ e em todos os itens foram utilizados 10^5 amostras. p. 73
- 26 Ilustração que representa a geração de um perímetro através do algoritmo SARW. Os círculos representam os sítios desocupados, as bolas cinzas os sítios ocupados e o **X** o próximo sítio com estado nulo que será visitado. Os números fora do parênteses significam o tempo de cada passo do caminhante e os que estão entre parenteses indicam a escolha do próximo estado, sendo 1 para ocupação e 0 para desocupado. O resultado final do processo nos dá um perímetro externo com $N_o = 9$ sítios ocupados e $N_v = 12$ sítios desocupados. p. 77
- 27 Exemplo ilustrativo de dois perímetros gerados a partir de um programa computacional baseado no algoritmo SARW. Os sítios ocupados estão em vermelho e desocupados em azul. O perímetro da esquerda é um exemplo de perímetro interno e o da direita um perímetro externo. p. 78

- 28 Gráfico que mostra o comportamento da fração de número de perímetro interno $n_i(p)$ (bolas azuis) e externo $n_e(p)$ (bolas vermelhas) em função da probabilidade p . Podemos perceber que abaixo da probabilidade crítica ($p < p_c = 0.59275$) o número de perímetros externos é máximo enquanto os internos é praticamente nulo e quando a probabilidade está acima ($p > p_c = 0.59275$) temos o comportamento inverso. Para a probabilidade p próxima do ponto crítico $p_c = 0.59275$ há um comportamento abrupto e o número de perímetros internos e externos tendem a permanecer iguais. As linhas contínua e tracejadas servem de referências, indicando respectivamente o ponto crítico $p_c = 0.5927$ e a igualdade do número de perímetros internos e externos ($n_i(p) = n_e(p)$). p. 79
- 29 Gráficos de diagrama de fases para o modelo PM. Em a) temos o diagrama de fases de \tilde{p}_c em função do parâmetro Δ com o cálculo computacional baseado no algoritmo SARW para os casos alternado (bolas) e aleatório (quadrados). Em b) temos a comparação entre os algoritmos da baseados no método da bisseção utilizando (símbolos vazios) uma rede quadrada e no método SARW (símbolos preenchidos) para o cálculo do diagrama de fases de \tilde{p}_c . Note que à medida que o parâmetro Δ aumenta, a diferença entre os métodos se tornam cada vez maior, principalmente para o caso aleatório. No limite de $\Delta = 0.5$ deveremos ter $\tilde{p}_c = 0.5$, o que não ocorre para o método da bisseção em redes quadradas. p. 80
- 30 Ilustrações de *backbones* sob *clusters* percolantes em diferentes graus de anisotropia segundo o modelo PM aleatório. Em a) temos uma rede quadrada (250×250), $\tilde{p}_c = 0.59725$ e $\Delta = 0.0$, em b) uma rede retangular (550×250), $\tilde{p}_c = 0.588$ e $\Delta = 0.1$ e em c) uma rede retangular (700×60), $\tilde{p}_c = 0.57423$ e $\Delta = 0.2$. Em ambos os casos utilizamos $r = 2$ p. 82
- 31 Gráficos da distribuição de massa M_B em função da componente R_{gy} do raio de giração gerados em redes de multi-camadas aleatórias. Nos itens a) e b) mostramos o efeito de tamanho finito causados pelos limites das redes quadradas (símbolos vermelhos) e retangulares (símbolos azuis). Podemos perceber que à medida que o parâmetro Δ aumenta, os efeitos de tamanho finito ficam cada vez mais acentuados na rede quadrada. Em ambos os itens utilizamos redes quadradas (512×512) e redes retangulares (1800×512) e (4000×400) com $\Delta = 0.1$ e 0.2 e $r = 2$ p. 83

- 32 Conjunto de gráficos que mostram o comportamento da distribuição de massa do *backbone* M_B em função do raio de giração R_g (círculo) e das componentes R_{gx} (triângulo) e R_{gy} (quadrado) do raio de giração e mostramos também R_{gy} em função de R_{gx} (diamante). Em todos os casos temos o comportamento em lei de potência na forma $M_B \sim R_g^{D_B}$, $M_B \sim R_{gx}^{D_{Bx}}$, $M_B \sim R_{gy}^{D_{By}}$ e $R_{gy} \sim R_{gx}^{D_{Bxy}}$. Para facilitar a visualização da figura, multiplicamos por 5 a distribuição de massa das componentes R_{gx} e R_{gy} p. 85
- 33 Conjunto de gráficos que mostram o comportamento da densidade de probabilidade da distribuição de massa do *backbone* $P(M_B)$ para diferentes valores de Δ . Em a) e b) mostramos distribuições com massa dos *backbones* que tocam nos limites da rede (vermelho) e daqueles que não tocam (azuis) para $\Delta = 0.15$ e 0.30 . Em c) e d) temos a distribuição para diferentes valores de distância r entre os sítios. p. 87

Lista de Tabelas

- 1 Ilustração do conjunto das possíveis funções booleanas com dois argumentos. Nas duas primeiras colunas da esquerda para direita, o agrupamento de cada par de zeros e uns de cada linha forma o conjunto de arranjos da função booleana. No restante das dezesseis colunas, cada coluna forma um ensemble e o agrupamento dos dezesseis ensembles formam o conjunto de todos os ensembles possíveis para a função booleana com $K = 2$ argumentos. p. 27
- 2 Ilustração de duas funções booleanas com três argumentos. A primeira função (quarta coluna da esquerda para a direita) é formada por uma distribuição probabilística. A função será uniforme quando $p = 0.5$. Na quinta coluna temos uma função canalizadora. Neste exemplo, sempre que o estado do primeiro argumento σ_{i_1} for igual a 0, o valor de saída da função será sempre 1 independentemente dos estados dos outros argumentos σ_{i_2} e σ_{i_3} . Quando σ_{i_1} for igual a 1, a distribuição seguirá uma distribuição probabilística. p. 28
- 3 A tabela mostra a probabilidade das possíveis ocorrências de configurações formadas a partir de dois elementos conjugados de redes semelhantes. A variável p representa a probabilidade da função booleana ter *outputs* 1 e a quantidade $(1 - p)$ a probabilidade de *outputs* 0. Podemos perceber, portanto, que a probabilidade de termos configurações iguais é dada por $p^2 + (1 - p)^2 = 1 + 2p(p - 1)$ e diferentes por $p(1 - p) + (1 - p)p = 2p(1 - p)$ p. 35
- 4 Tabela contendo valores de probabilidades críticas para diferente tipos de redes [55]. p. 66

5 Tabela contendo os valores de probabilidades críticas para diferentes valores de Δ . Na coluna do meio temos a probabilidade crítica para o modelo aleatório p_{cram} e na coluna da direita a probabilidade crítica para o modelo alternado p_{calt} . Os valores foram obtidos a partir de simulações baseadas no método *Self-Avoid Random Walk*. p. 92

Introdução

Ao longo destes quatro anos de doutorado tive a oportunidade de conhecer e trabalhar com vários problemas ligados aos sistemas complexos. Dentre eles três em especial passaram a fazer parte de um esforço sistemático e objetivo, que culminaram nos assuntos abordados nesta tese. Um fator em especial os unem em uma classe verdadeiramente importante da física de sistemas complexos, ou seja, o fato de todos apresentarem alguma forma de desordem.

A identificação da desordem varia para cada tipo de sistema, porém, uma característica comum a todos é o fato dos sistemas desordenados apresentarem algum tipo de organização aleatória quando alguma propriedade dos seus constituintes for observada globalmente. Esta característica corrobora, portanto, o nosso conceito intuitivo de desordem, ou seja, a idéia de algo que não existe certo padrão de organização. Atualmente, tem-se observado que a desordem é um aspecto bastante importante para a formação da complexidade dinâmico-estrutural de uma infinidade de sistemas, como exemplo, podemos citar: as redes Booleanas tipo *annealed* e *quenched*, onde a desordem está na aleatoriedade das conexões e nas regras de atualizações dos estados dos sítios; as redes livre de escala, onde a desordem está no arranjo das conexões; as redes de percolação, onde a desordem é encontrada na disposição de poros do meio poroso etc.

Muitos sistemas físicos apresentam os regimes ordenado e caótico, entretanto, especula-se que apenas no limite crítico entre os dois regimes há a presença de um processo de auto-regulação eficaz, capaz de tornar um sistema dinâmico robusto e adaptável. Esta característica está presente em diversos sistemas reais, tornando o estudo dos processos dinâmicos em regimes críticos e quase críticos um fonte rica para a pesquisa científica. Nesse sentido, estudamos, no capítulo 1, as redes booleanas na condição crítica e próximo dela, onde propomos que a transição para o regime crítico pode ser caracterizado pela divergência do tempo de relaxação t_R , ou seja, do tempo no qual a memória do dano aplicado na rede é completamente perdido. Com simples argumentos de escalonamento mostramos que para o modelo *annealed* na região crítica, a probabilidade acumulativa da distribuição de t_R decai como uma lei de potência $P(t_R < t) \sim t^{-\beta}$, com o expoente $\beta = 1$. Nossos resultados numéricos comprovam este decaimento e mostram redes de tamanho

finito com um truncamento exponencial em uma escala de tempo proporcional a $N^{-1/2}$. Estudamos também a distribuição t_R partindo da condição crítica para os regimes ordenado e caótico. Observamos que acima da escala de tempo característico a distribuição na fase ordenada apresenta um *crossover* para um decaimento exponencial. Para a fase caótica a distribuição apresenta um *crossover* para um platô, que é consistente com a divergência do tempo de relaxação médio esperado na condição caótica.

Em seguida (Cap. 2) estudamos um novo método de decomposição para redes complexas. Nossa motivação se deve principalmente ao estudo do processo iterativo à medida que a rede perde seus sítios. Este tipo de estudo pode ser bastante útil quando for associado ou à análise de alguma propriedade que dependa das conexões da rede, como por exemplo, o fluxo de informação e a robustez a ataques e a erros eventuais, ou ao desenvolvimento de *softwares* de visualização de grandes redes. Assim, aplicamos o método de decomposição a rede livre de escalas de Barabási-Albert. O método consiste basicamente na retirada iterativa de grupos de vértices com o mesmo grau de conectividade, ou seja, a cada iteração identificamos todos aqueles vértices com K conexões e, então, os retiramos simultaneamente da rede. Esse processo é repetido até que não haja mais vértices na rede com K conexões. Definidos as variáveis S_K como a fração da quantidade total de vértices retirados da rede e $s_K(t)$ como a fração de vértices retirados em cada iteração. Analisando o comportamento de S_K e $s_K(t)$ juntamente com outras funções que surgiram ao longo do processo investigativo, observamos que a utilização do método de decomposição resultou em uma série de expoentes e parâmetros relacionados entre si e invariantes para diferentes estruturas de rede.

O terceiro tema estudado neste trabalho está ligado à percolação anisotrópica. Este tipo de percolação está presente de diferentes maneiras em muitos sistemas reais. Um exemplo típico são as rochas sedimentares, que podem exibir anisotropia espacial devido à tendência das camadas morfológicas se disporem com maior probabilidade na direção horizontal. A partir de exemplos como este, podemos concluir que entender de uma forma mais realista o processo de escoamento em meios porosos anisotrópicos é fundamental para o desenvolvimento de novas tecnologias. Desta forma, estudamos, no capítulo 3, a estatística de *backbones* gerados em redes quadradas de percolação em multicamadas, onde os sítios de entrada e saída de fluidos são separados por uma distância r . As camadas possuem de diferentes densidades e são dispostas aleatoriamente ao longo de uma dada direção. Os resultados numéricos indicam a quebra de classe de universalidade com o valor da dimensão fractal diminuindo à medida que a anisotropia aumenta. Observamos ainda a igualdade assintótica entra a dimensão fractal e o expoente da associado a fractalidade

da direção oposta a anisotropia. Investigamos também o expoente τ_B que caracteriza a região de escala da densidade de probabilidade da distribuição de massa do *backbone* $P(M_B)$ e verificamos que ele varia rapidamente com a anisotropia até um valor limite, ou seja, $\tau_B = 1.33 \pm 0.01$. As mudanças ocorridas na classe de universalidade dos expoentes críticos investigados podem ser explicadas como um resultado das correlações de longo alcance induzidas pela formação de camadas adjacentes com a mesma concentração de probabilidade.

Na tese, todos os capítulos seguem a mesma estrutura, ou seja, seguem a ordem de uma breve introdução, onde o foco principal é expor ao leitor idéias e propriedades básicas necessárias ao objeto de estudo do capítulo, como conjecturas e teorias universalmente aceitas. Na sequência é apresentado a problematização do tema seguido dos resultados, discussões e conclusões.

1 REDES BOOLEANAS

Abordamos neste capítulo o estudo do comportamento dinâmico das redes booleanas no ponto crítico e próximo dele através da divergência do tempo de relaxação, ou seja, através da quantidade de tempo necessário para um pequeno dano desaparecer por completo. Observamos além de outros resultados que com simples argumentos de escalonamento a probabilidade acumulativa da distribuição de t_R decai como uma lei de potência $P(t_R < t) \sim t^{-\beta}$, com o expoente $\beta = 1$, indicando que o modelo *annealed* pertence a mesma classe de percolação direcionada. O capítulo é iniciado com uma breve introdução geral (1.1) e depois abordamos o aspecto teórico do fluxo de informação (1.3). Por último apresentamos nossos resultados teóricos e numéricos (1.4) e na sequência a conclusão (1.5).

1.1 Introdução

Nas ultimas décadas, o estudo de sistemas complexos tem sido motivo de muitos elos interdisciplinares, tornando sua definição algo bastante abrangente. Podemos, no entanto, particularizar o leque de possibilidades destes sistemas para as chamadas redes complexas, as quais são definidas como sendo um sistema constituído por um grande número de unidades relacionadas entre si em uma rede não trivial de interações [1]. Um fato marcante que pode ser observado nas redes complexas é que elas não podem ser analisadas de maneira reducionista, ou seja, não é possível caracterizar propriedades globais da rede analisando apenas as suas partes constituintes. Desta forma, a análise das redes complexas se constitui em uma quebra de paradigma, pois mesmo que as unidades individuais se relacionem de maneira simples e conhecida, a contribuição coletiva para as propriedades macroscópicas do sistema se manifesta de forma complexa, exigindo ferramentas de análise global.

Uma das características mais relevantes dos sistemas complexos é sua capacidade de evoluir espontaneamente para estados organizados [3], ou seja, um agente individual tem

a habilidade de auto-regular seu comportamento até alcançar uma condição desejada para o sistema. Todavia, esta condição não é alcançada por uma estrutura predefinida entre os agentes, mas sim como uma condição de emergência da dinâmica do sistema. Em outras palavras, podemos dizer que não há um controle central ou distribuição de tarefas, cada agente responde apenas a interações locais sem conhecer o estado do sistema como um todo. Assim, dependendo de cada tipo de estrutura dinâmica, um sistema poderá corrigir falhas locais e responder eficazmente às mudanças do ambiente.

Os estudos ligados aos sistemas complexos mostram que ajustando apenas poucos parâmetros que governam as interações entre os agentes individuais é possível fazer com que um sistema sofra transições entre os estados ordenado e caótico [2]. Entretanto, especula-se que nem a fase ordenada nem a fase caótica sejam capazes de apresentar ao mesmo tempo a robustez e a adaptabilidade observadas em sistemas reais. Estas características foram apenas observadas na condição crítica, a qual é definida como a região que compreende o limite de transição entre as fases ordenada e caótica [2].

A elaboração de modelos discretos e baseados em agentes constitui um dos métodos mais usados para a análise de redes complexas. Em particular, as redes booleanas conquistaram grande aceitação nos estudos científicos em virtude da sua flexibilidade em definir tanto a estrutura de interação entre os agentes quanto as regras de evolução do sistema. Esse modelo de rede foi inicialmente desenvolvido por Kauffman para modelar a regulação genética [4] e atualmente tem sido aplicado em diversos tipos de problemas, que vão desde a regulação e controle genético [5], evolução [6, 7], redes neurais [8, 9, 10] até estudos do comportamento da estrutura da matéria [11]. Uma das suas principais características é apresentar uma linha crítica de transição de fases no limite termodinâmico que divide os regimes caótico do ordenado.

As redes booleanas são freqüentemente modeladas com as conexões entre seus agentes escolhidas aleatoriamente a partir de alguma classe de ensemble. São também freqüentemente chamadas de modelo $N - K$ porque cada um dos N elementos que compõe o sistema interage com outros K elementos. O modelo booleano consiste em um conjunto de N elementos cujos os estados são descritos por variáveis booleanas, ou seja, cada elemento σ_i pode assumir apenas os estados 0 ou 1. A evolução temporal ocorre em passos de tempo discreto, onde todos os estados são atualizados simultaneamente de acordo com a função booleana $f(\hat{\sigma}_i)$ associada a cada elemento. Os parâmetros de controle dinâmico utilizados são a média de conectividade $\langle K \rangle$ e a probabilidade p , a qual fornece a probabilidade com que o resultado da função booleana associada ao conjunto de entradas

aleatórias $\widehat{\sigma}_i = \{\sigma_{i1}, \sigma_{i2}, \dots, \sigma_{iK}\}$ seja igual a 1. Alguns estudos tem mostrado que apenas estes dois parâmetros são necessários para estabelecer a rede nos regimes caótico e regular [12, 13, 14]. Uma definição mais rigorosa do modelo será exposta na próximo seção.

1.2 Modelo

O modelo de rede booleana é constituído por um conjunto de N elementos $\{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \dots, \sigma_N\}$ conectados entre si, onde cada variável σ_i é binária, ou seja, $\sigma_i \in \{0, 1\}$ para $i = 1, 2, 3, \dots, N$. A dinâmica da rede ocorre com o estado de cada elemento booleano sendo regido de acordo com os estados dos outros elementos aos quais está conectado. Mais precisamente, o estado do elemento σ_i no passo $t + 1$ é determinado pelos estados dos seus K_i elementos controladores (elementos aos quais está conectado) $\sigma_{j1}, \sigma_{j2}, \sigma_{j3}, \dots, \sigma_{jK}$ no tempo t , ou seja,

$$\sigma_i(t + 1) = f_i(\sigma_1(t), \sigma_2(t), \sigma_3(t), \dots, \sigma_{K_i}(t)) , \quad (1.1)$$

onde f_i é definida como a função booleana associada ao i -ésimo elemento com K_i argumentos. A estrutura do modelo estará completamente definida quando for especificado:

- A conectividade K_i de cada elemento da rede, ou seja, definir quantas variáveis irão determinar o estado de cada elemento σ_i ;
- As ligações de cada elemento, isto é, qual o conjunto de elementos $\{\sigma_{j1}^{(i)}, \sigma_{j2}^{(i)}, \sigma_{j3}^{(i)}, \dots, \sigma_{jK_i}^{(i)}\}$ que estará associado a cada elemento σ_i ;
- As regras de evolução de cada elemento, ou seja, determinar a função booleana f_i de cada elemento σ_i .

A conectividade média é definida por

$$\langle K \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N K_i . \quad (1.2)$$

Assim, em um modelo mais geral, a conectividade K_i poderá variar de um elemento para outro, o que poderia resultar, segundo a equação (1.2), em uma conectividade média com valores não inteiros. Nestes casos, alguns modelos ganharam muita importância, tais como as redes de pequeno mundo [15] e as redes com a distribuição em lei de potência da conectividade K [16]. Todavia, neste trabalho será considerado apenas o caso em que a conectividade é a mesma para todos os elementos, ou seja, $K_i = K$.

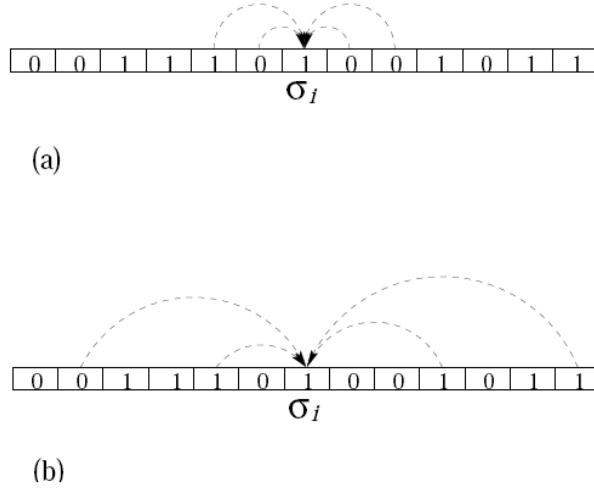


Figura 1: Diferentes tipos de conexões. (a) Podemos observar que em uma rede regular as conexões são escolhidas de acordo com a geometria do espaço. No exemplo em questão, podemos observar o elemento σ_i está conectada aos primeiros e segundos vizinhos, ou seja, aos $4d$ primeiros vizinhos, no espaço unidimensional $d = 1$. (b) Ao contrário do item anterior, o elemento σ_i pode ter suas conexões aleatoriamente escolhidas, ou seja, qualquer elemento σ_j do sistema tem igual chance de pertencer ao conjunto de elementos controladores do elemento σ_i .

A geometria da rede booleana desempenha um importante papel na dinâmica do sistema, pois o modo como as conexões estão distribuídas determina tanto o estado coletivo do sistema quanto dos seus elementos constituintes. Como exemplos, podemos citar as redes regulares, onde os K elementos de controle $\sigma_{j_1}, \sigma_{j_2}, \sigma_{j_3}, \dots, \sigma_{j_K}$ podem ser escolhidos de um conjunto dos $4d$ vizinhos mais próximos em uma rede hiper-cúbica d dimensional (Ver Fig. 1a). Um outro exemplo são as redes aleatórias uniformes, na qual qualquer elemento do sistema tem igual chance de pertencer a um ou mais conjuntos de elementos controladores (Ver Fig. 1b).

Fazendo uma análise minuciosa de um sistema booleano, temos que em uma rede com N elementos há um espaço de estado com $\Omega = 2^N$ possíveis configurações e que a função booleana $f_i(\sigma_{j_1}, \sigma_{j_2}, \sigma_{j_3}, \dots, \sigma_{j_K})$ possui exatamente 2^K arranjos.

Sabendo que a função booleana possui apenas dois valores de saída por arranjo, ou seja, 0 ou 1, resulta que o número total de diferentes funções é dado por

$$N_f = 2^{2^K}. \quad (1.3)$$

Para exemplificar, tomemos uma função booleana com $K = 2$. Neste caso, haverá $2^2 = 4$ configurações possíveis com argumentos $\sigma_{j_1}, \sigma_{j_2}$ e para cada uma destas configurações

σ_{i_1}	σ_{i_2}	$f_i(\sigma_{i_1}, \sigma_{i_2})$															
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1
0	1	0	1	0	1	0	1	0	1	1	0	1	0	1	0	1	0
1	0	0	0	1	1	0	0	1	1	1	1	0	0	1	1	0	0
1	1	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1	0	0	0	0

Tabela 1: Ilustração do conjunto das possíveis funções booleanas com dois argumentos. Nas duas primeiras colunas da esquerda para direita, o agrupamento de cada par de zeros e uns de cada linha forma o conjunto de arranjos da função booleana. No restante das dezesseis colunas, cada coluna forma um ensemble e o agrupamento dos dezesseis ensembles formam o conjunto de todos os ensembles possíveis para a função booleana com $K = 2$ argumentos.

poderá haver dois valores de saída (0 ou 1), resultando em um total de $2^{2^2} = 16$ possíveis funções booleanas (Tabela 1).

Dado um conjunto de arranjos de uma função booleana, podemos definir um ensemble como sendo o conjunto formado por 0 e 1 associados a saída do grupo de arranjos da função Booleana (Ver Tabela 1). A formação de um ensemble pode ser dado através da atribuição de zeros e uns segundo uma distribuição de probabilidade. Há várias maneiras de escolha para a distribuição, como por exemplo:

- Distribuição Uniforme: inicialmente introduzida por Kauffman, temos que todos os ensembles tem a mesma possibilidade de ocorrer com probabilidade igual a $1/N_f$;
- Distribuição Probabilística: neste modelo, a probabilidade para que ocorra a saída 0 associado a um dado arranjo da função booleana é p e para a saída 1 é $(1 - p)$ (Ver Tabela 2);
- Funções Canalizadoras: neste tipo de função, o valor de saída da função booleana é fixo para um dado valor de argumento (Ver Tabela 2);
- Funções Adaptativas: são funções capazes de se adaptar a um determinado fim. Um exemplo de sua utilização é na simulação das sinapses de uma rede de neurônios.

Dos casos citados acima, o ensemble mais simples de ser trabalhado são os formados pela distribuição uniforme. Entretanto, na formulação original das redes booleanas, as conexões eram escolhidas aleatoriamente e as saídas da função f_i eram determinadas segundo uma tendência p . Esse modelo ficou conhecido como redes de Kauffman ou redes booleanas aleatórias, servindo inicialmente para o estudo de regulação genética.

σ_{i_1}	σ_{i_2}	σ_{i_3}	Aleatório $f(\sigma_{i_1}, \sigma_{i_2}, \sigma_{i_3})$	Canalizadora $f(\sigma_{i_1}, \sigma_{i_2}, \sigma_{i_3})$
0	0	0	0	1
0	0	1	1	1
0	1	0	0	1
0	1	1	0	1
1	0	0	1	0
1	0	1	0	1
1	1	0	1	1
1	1	1	1	0

Tabela 2: Ilustração de duas funções booleanas com três argumentos. A primeira função (quarta coluna da esquerda para a direita) é formada por uma distribuição probabilística. A função será uniforme quando $p = 0.5$. Na quinta coluna temos uma função canalizadora. Neste exemplo, sempre que o estado do primeiro argumento σ_{i_1} for igual a 0, o valor de saída da função será sempre 1 independentemente dos estados dos outros argumentos σ_{i_2} e σ_{i_3} . Quando σ_{i_1} for igual a 1, a distribuição seguirá uma distribuição probabilística.

Desde que as conexões e as funções booleanas sejam dadas, podemos, então, definir um modelo de atualização utilizando a equação (1.1) para atualizar os estados de todos os elementos do sistema. A forma de atualização pode ser

- Atualização sincronizada : todas as variáveis são atualizadas simultaneamente;
- Atualização serial : apenas uma variável é atualizada em cada passo de tempo. Estas variáveis podem ser escolhidas aleatoriamente ou por um esquema previamente definido.

O modelo estará completamente finalizado ao determinarmos o aspecto dinâmico da estrutura, que pode ser:

- Modelo *Quenched*: em português quer dizer temperado, consiste em manter ao longo de todo o tempo sempre as mesmas regras de atualização;
- Modelo *Annealed*: em português quer dizer recosido, consiste em escolher em cada passo de tempo novas regras de atualização tais como novas conexões e funções booleanas;

A fim de exemplificar o que foi dito nesta seção, suponhamos um pequeno sistema formado por três elementos ($N = 3$) cada qual com duas conexões ($K = 2$). Suponhamos

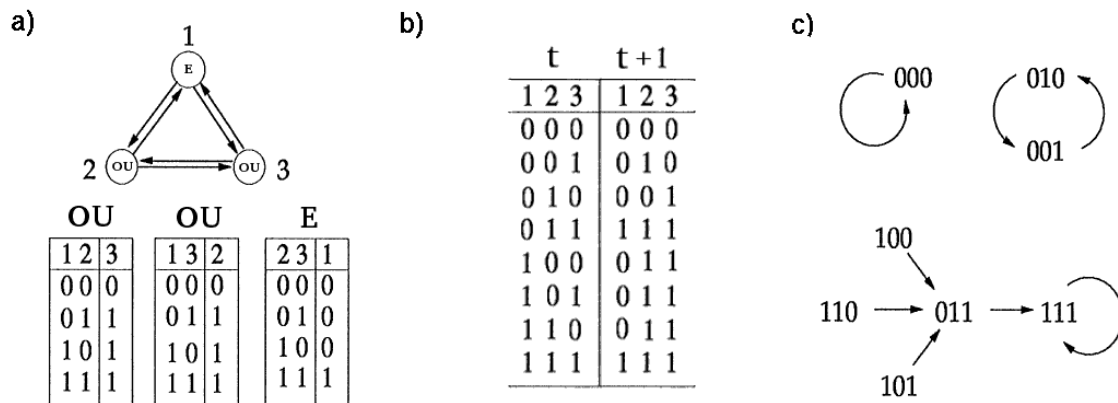


Figura 2: Ilustração exemplificando um esquema dinâmico de uma rede booleana. a) Um diagrama de conexões contendo três elementos binários conectados entre si. A tabela mostra a regra de cada elemento, onde o elemento 1 é governado pela função "E" e os elementos 2 e 3 são governados pela função "OU". b) A tabela mostra os $2^3 = 8$ possíveis estados do sistema em um dado tempo t no lado esquerdo e seus respectivos estados evoluídos para o tempo $t + 1$ no lado direito. c) Representação da dinâmica do sistema por gráficos de estado. Cada conjunto de algarismos representa um estado em um dado instante e as setas indicam o sentido da evolução temporal dos estados.

também que a dinâmica do sistema seja *quenched*. Assim, fixaremos as seguintes regras: o elemento 1 será governado pela função "E", ou seja, seu estado será sempre igual a 1 se os estados dos seus vizinhos forem 1 ao mesmo tempo e 0 caso contrário; os elementos 2 e 3 serão governados pela função "OU", onde basta apenas um dos seus vizinhos ter estado igual a 1 para que seu estado torne-se 1 (Fig. 2a). A atualização de todos os possíveis estados do sistema no tempo t ao $t + 1$ é mostrado na Fig. 2b. Em cada passo de tempo, um estado evolui exclusivamente para outro e a sucessão da evolução destes estados definem uma trajetória, a qual é indicada pelas setas na Fig. 2c.

Em um sistema *quenched* de tamanho finito há necessariamente um número finito de estados. Com isso, temos que em algum momento do processo dinâmico o estado do sistema deva eventualmente evoluir para outro estado já visitado. Sendo, então, o modelo *quenched* um modelo determinístico (regras fixas), o sistema passará a percorrer indefinidamente sempre a mesma trajetória, formando, assim, um ciclo de estados [17]. Na maioria casos, entretanto, o estado inicial de um sistema não faz parte de um ciclo de estados. Assim, temos que na evolução temporal o estado inicial sempre irá alcançar algum ponto do ciclo de estado. Definimos, então, um ciclo de estados como sendo um atrator, pois o estado inicial de um sistema *quenched* de tamanho finito sempre evoluirá para um ciclo de estado, e definimos também uma bacia atratora como o conjunto de trajetórias que alcançam um atrator Fig. 3.

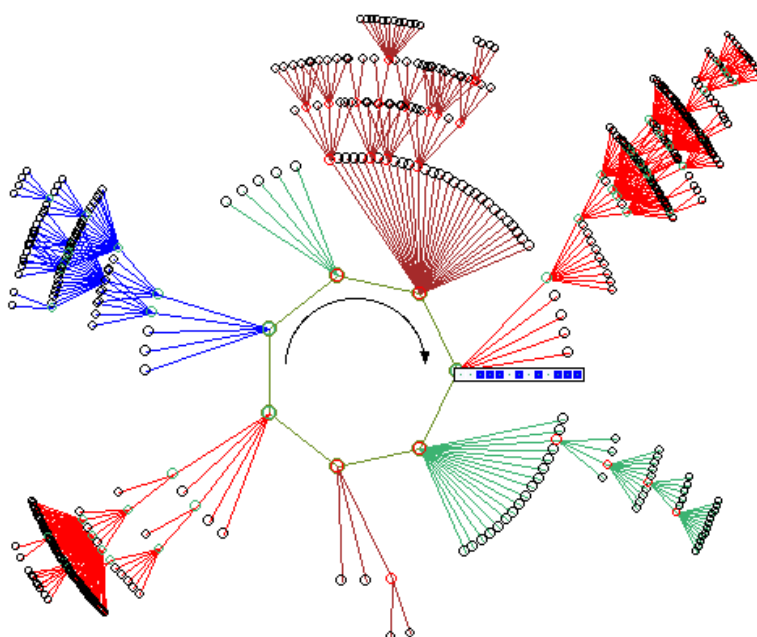


Figura 3: Um atrator é formado quando o estado de um sistema evolui para outro estado já visitado, passando a repetir indefinidamente sempre a mesma trajetória (sequências) de estados. A bacia atratora é formada por todos os estados que evoluem naturalmente para algum estado de um atrator. Na ilustração, temos uma base atratora de uma Rede Booleana com $N=13$ elementos e $K=3$ conexões. Cada estado do sistema é representado por um círculo e o sentido da evolução temporal ocorre de fora para dentro da figura, onde as linhas conectam um estado ao sucessor. O atrator é de tamanho 7 (sete estados) e o sentido de sua evolução temporal é indicado pela seta. A tabela de *bit* ilustra um dos estados que compõe a base atratora. (Fig. adaptada de [18])

Ao contrário do modelo *quenched*, um sistema *annealed* não possui atratores. Isto ocorre independentemente do estado do sistema ter evoluído para um estado já visitado, pois a mudança de regras e conexões impossibilitam que o estado sucessor seja mesmo estado sucessor da vez anterior.

1.3 Fluxo de informação

O estudo das redes complexas tem como um dos principais assuntos investigados o processo de propagação de informação. Essa propriedade é de fundamental importância, pois podemos ampliar o conceito de informação e identificá-la a qualquer tipo de entidade capaz de fluir em uma rede independentemente da sua formação estrutural. Assim, podemos, por exemplo, definir a informação como sendo um vírus ou uma fofoca que se propaga em uma rede de pessoas ou uma pequena perturbação causada em uma rede cristalina.

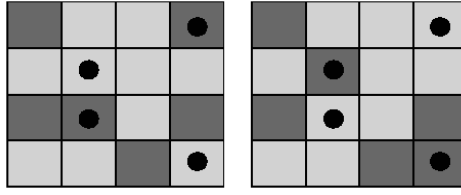


Figura 4: A distância de Hamming fornece a quantidade de estados diferentes dos pares conjugados entre duas redes semelhantes. Na ilustração, temos a representação esquemática de duas redes semelhantes com 16 elementos. Os pares de elementos conjugados com mesma cor possuem o mesmo estado e os que são cores diferentes (marcados por bolas pretas) possuem estados diferentes. Neste exemplo, a distância de Hamming é $H(t) = 4$.

Investigar a resposta às mudanças constitui um dos principais focos no estudo das redes booleanas. Esta propriedade indica o grau de robustez de uma rede, permitindo-nos elucidar questões como: dado um dano no sistema, até quantos estados subseqüentes do sistema ele pode perdurar? O sistema se recompõe ou diverge com um dano? Há uma probabilidade do dano se propagar indefinidamente?

No que se refere ao estudo de fluxo de informação em redes booleanas, podemos associar a propagação de informação à propagação de dano. Neste contexto, a simulação computacional viabiliza o estudo da propagação considerando a evolução temporal de sistemas idênticos, onde eles se diferenciam somente por uma pequena mudança ou na função booleana ou nos estados iniciais dos elementos da rede.

O estudo abordado neste trabalho consiste em considerar dois sistemas semelhantes, ou seja, dois sistemas

$$\Sigma_0 = \{\sigma_1(0), \sigma_2(0), \sigma_3(0), \dots, \sigma_i(0)\} \quad (1.4)$$

e

$$\hat{\Sigma}_0 = \{\hat{\sigma}_1(0), \hat{\sigma}_2(0), \hat{\sigma}_3(0), \dots, \hat{\sigma}_i(0)\} , \quad (1.5)$$

que se diferem apenas por uma pequena fração de sítios com estados iniciais diferentes. Desta forma, podemos analisar as configurações dos estados a partir da evolução temporal sob a mesma dinâmica através da grandeza

$$H(t) = \sum_{i=1}^N (\sigma_i(t) - \hat{\sigma}_i(t))^2 , \quad (1.6)$$

que informa a quantidade de estados diferentes dos pares de elementos conjugados entre as duas redes e é definida como sendo a distância de Hamming (Fig. 4).

Podemos concluir que se a transferência de informação no sistema for localizada, a distância de Hamming não crescerá muito. Entretanto, se o sistema for suficientemente

caótico, a informação poderá abranger todo o sistema, fazendo com que a distância de Hamming nunca chegue a zero [19].

Outra medida bastante utilizada é a sobreposição normalizada entre configurações de estado $a(t)$, que é definida como

$$a(t) = 1 - h(t) , \quad (1.7)$$

onde definimos $h(t) = H(t)/N$ como sendo a distância de Hamming normalizada.

Analisando as equações (1.6) e (1.7) no limite do tempo tendendo ao infinito, temos que se $\lim_{t \rightarrow \infty} h(t) = 0$ ou $\lim_{t \rightarrow \infty} a(t) = 1$ o sistema não reterá informação (dano) seja qual for seu estado inicial. Entretanto, se $\lim_{t \rightarrow \infty} h(t) > 0$ ou $\lim_{t \rightarrow \infty} a(t) < 1$ a informação permanecerá no sistema indefinidamente.

O modelo de rede booleana possui três tipos de fases (regimes), as quais podem ser identificadas a partir da distância de Hamming. Desta forma, temos que na fase ordenada a informação (quantidade de estados diferentes entre as redes) se propaga com o tempo apenas por um número finito de elementos. Contrariamente, na fase caótica a informação se propaga exponencialmente com o tempo, atingindo toda a rede. Por último, uma fase intermediária, a crítica, na qual informação se propaga apenas algebricamente com o tempo.

1.3.1 Teoria do Campo Médio

Utilizando a teoria do campo médio, na qual as interações dependem das médias globais da rede desprezando qualquer flutuação local, podemos realizar a primeira abordagem analítica através da distância de Hamming para estudar a dinâmica da rede booleana e determinar o limite que separa as fases ordenada e caótica [19]. Para isso, imaginemos uma rede *annealed* Σ_0 formada por um número muito grande de elementos, onde todas as conexões e estados iniciais sejam aleatoriamente escolhidos e a função booleana siga uma distribuição uniforme. Seja a rede $\widehat{\Sigma}_0$ uma rede semelhante a Σ_0 , diferenciando-se apenas em poucos elementos com estados iniciais diferentes. A diferença inicial entre as duas redes é quantificada pela distância de Hamming $h(0)$, a qual fornece o número de elementos diferentes no tempo zero. Na dinâmica do sistema, teremos que em média um único elemento participará dos argumentos de K funções booleanas. Logo, poderemos concluir que haverá $Kh(0)$ funções afetadas. Como a função booleana é uniformemente distribuída, cada uma das funções alteradas terá uma probabilidade 1/2 de fornecer um

valor de *output* diferente para cada elemento conjugado das redes. Portanto, a distância de Hamming depois do primeiro passo será

$$h(1) = \frac{1}{2}Kh(0) . \quad (1.8)$$

Se na evolução de cada passo de tempo o sistema mantiver a escolha das conexões e das funções booleanas suficientemente aleatórias, o mesmo procedimento utilizado para a equação (1.8) poderá ser mantido para passos de tempo consecutivos, logo,

$$h(t+1) = \frac{1}{2}Kh(t) , \quad (1.9)$$

substituindo $h(t)$ por $h(0)$ em cada iteração desde o tempo zero, temos que

$$h(t+1) = \left(\frac{K}{2}\right)^t h(0)$$

$$h(t+1) = h(0) \exp[\ln(0.5K)t] . \quad (1.10)$$

Analisando a equação (1.10), observamos que para $K > 2$ o número de elementos diferentes crescerá exponencialmente e para $k < 2$ decairá exponencialmente. Já para $K = 2$ não terá nem crescimento nem decaimento exponencial, haverá apenas um comportamento influenciado por flutuações. Podemos, portanto, concluir que variando o valor da conectividade, o sistema poderá apresentar uma das seguintes fases:

- *Caótico* ($K > 2$), a distância de Hamming cresce exponencialmente com o tempo;
- *Ordenado* ($K < 2$), a distância de Hamming decresce exponencialmente com o tempo;
- *Crítico* ($K = 2$), a evolução temporal da distância de Hamming é determinada essencialmente por flutuações.

1.3.2 Solução Geral

Pudemos obter a equação (1.10) assumindo que a função booleana do sistema adquire os valores 1 e 0 com a mesma probabilidade $p = 1/2$. Entretanto, veremos que as fases ordenada, caótica e crítica também estão presentes em casos mais gerais em que saídas 0 e 1 da função booleana são atribuídos de acordo com probabilidades p e $1-p$ respectivamente. Assim, temos que para um dado valor de probabilidade p há um valor crítico $K_c(p)$ para a conectividade K , onde abaixo dele o sistema apresenta a fase ordenada e acima a fase

caótica. De maneira contrária, dado um valor para K , haverá um valor de probabilidade crítica $p_c(K)$ que separa a fase ordenada da caótica em um sistema booleano. A solução analítica foi obtida primeiramente por [12], fornecendo uma relação de recorrência para distância de Hamming em função da conectividade K e da probabilidade p .

Analisando a equação (1.7), podemos perceber que a sobreposição $a(t)$ entre os estados dos sistemas Σ_t e $\widehat{\Sigma}_t$ em um tempo t é a probabilidade de um par de elementos conjugados $(\sigma_i, \widehat{\sigma}_i)$ possuírem os mesmos estados em ambas as redes. Portanto, a probabilidade de encontrarmos os argumentos da função booleana com os mesmos estados nas duas redes será

$$\rho_K = [a(t)]^K . \quad (1.11)$$

No próximo passo de tempo a sobreposição $a(t + 1)$ será determinada pela soma da probabilidade dos argumentos da função booleana serem os mesmos no passo anterior (probabilidade ρ_K) mais a probabilidade de haver pares de elementos conjugados com pelo menos um argumento diferente da função booleana (probabilidade $1 - \rho_K$) virem a possuir os mesmos estados (probabilidade $1 + 2p(p - 1)$ (Tabela 3)), ou seja,

$$\begin{aligned} a(t + 1) &= \rho_K + (1 - \rho_K)[1 + 2p(p - 1)] \\ a(t + 1) &= a(t)^K + (1 - a(t)^K)[1 + 2p(p - 1)] \\ a(t + 1) &= 1 - (1 - a(t)^K)2p(p - 1) \\ a(t + 1) &= 1 - [(1 - a(t)^K)] / K_c , \end{aligned} \quad (1.12)$$

onde K_c é definido por

$$K_c = \frac{1}{2p(p - 1)} . \quad (1.13)$$

Substituindo a equação 1.12 na equação 1.7 podemos determinar a evolução temporal da distância de Hamming, que é dada por [19]

$$h(t + 1) = \{1 - [1 - h(t)]^K\} / K_c . \quad (1.14)$$

Um as formas alternativas de representar a evolução temporal da Hamming foi dada em [1]. Neste trabalho foi proposto que a dinâmica da distância de Hamming deveria ser obtida a partir do mapa iterativo

$$\begin{aligned} h(t + 1) &= I_1 K h(t) [1 - h(t)]^{K-1} + \frac{1}{2!} I_2 K (K - 1) h(t)^2 [1 - h(t)]^{K-2} \\ &+ \frac{1}{3!} I_3 K (K - 1) (K - 2) h(t)^3 [1 - h(t)]^{K-3} + \dots , \end{aligned} \quad (1.15)$$

onde a influência I_i representa a probabilidade de um elemento que tem i vizinhos danifi-

σ_i	$\widehat{\sigma}_i$	Probabilidade
1	1	p^2
1	0	$p(1-p)$
0	1	$(1-p)p$
0	0	$(1-p)^2$

Tabela 3: A tabela mostra a probabilidade das possíveis ocorrências de configurações formadas a partir de dois elementos conjugados de redes semelhantes. A variável p representa a probabilidade da função booleana ter *outputs* 1 e a quantidade $(1-p)$ a probabilidade de *outputs* 0. Podemos perceber, portanto, que a probabilidade de termos configurações iguais é dada por $p^2 + (1-p)^2 = 1 + 2p(p-1)$ e diferentes por $p(1-p) + (1-p)p = 2p(1-p)$.

cados tornar-se danificado no passo de tempo seguinte. Em particular, foi mostrado que para redes booleanas aleatórias que a influência média não depende do número de *inputs* danificados, o que resulta na igualdade $I_1 = I_2 = I_j = I = 2p(1-p)$ e conseqüentemente na equação 1.14.

1.3.3 Diagrama de fases

Podemos fazer uma análise do comportamento da distância de Hamming a partir da equação 1.14. Para isso imaginemos em um dado instante a propagação de uma pequena perturbação no sistema e, então, expandimos em série de Taylor a equação 1.14, onde teremos

$$\begin{aligned}
 h(t+1) &= \frac{1}{K_c} \left[Kh(t) - \frac{K(K-1)}{2} [h(t)]^2 + \dots \right] \\
 h(t+1) - h(t) &= \left(\frac{K}{K_c} - 1 \right) h(t) - \frac{K(K-1)}{2K_c} [h(t)]^2 + \dots \\
 \Delta h(t) &= \left(\frac{K}{K_c} - 1 \right) h(t) \Delta t - \frac{K(K-1)}{2K_c} [h(t)]^2 \Delta t + \dots, \quad (1.16)
 \end{aligned}$$

onde $\Delta h(t) = h(t+1) - h(t)$ e $\Delta t = 1$. A integração do termo de primeira ordem da equação 1.16 resulta em

$$h(t) \sim \exp \left[\left(\frac{K}{K_c} - 1 \right) t \right]. \quad (1.17)$$

Fazendo um estudo de caso, temos que para $K > K_c$ o sistema se comportará caoticamente, pois por menor que seja a perturbação, a distância crescerá exponencialmente com o passar do tempo até que a informação (dano) alcance toda a rede. Notemos, portanto, que no caso particular em que $p = 1/2$ e $K = 2$, o comportamento da distância de Hamming está em completo acordo com o estudo feito para a aproximação de campo

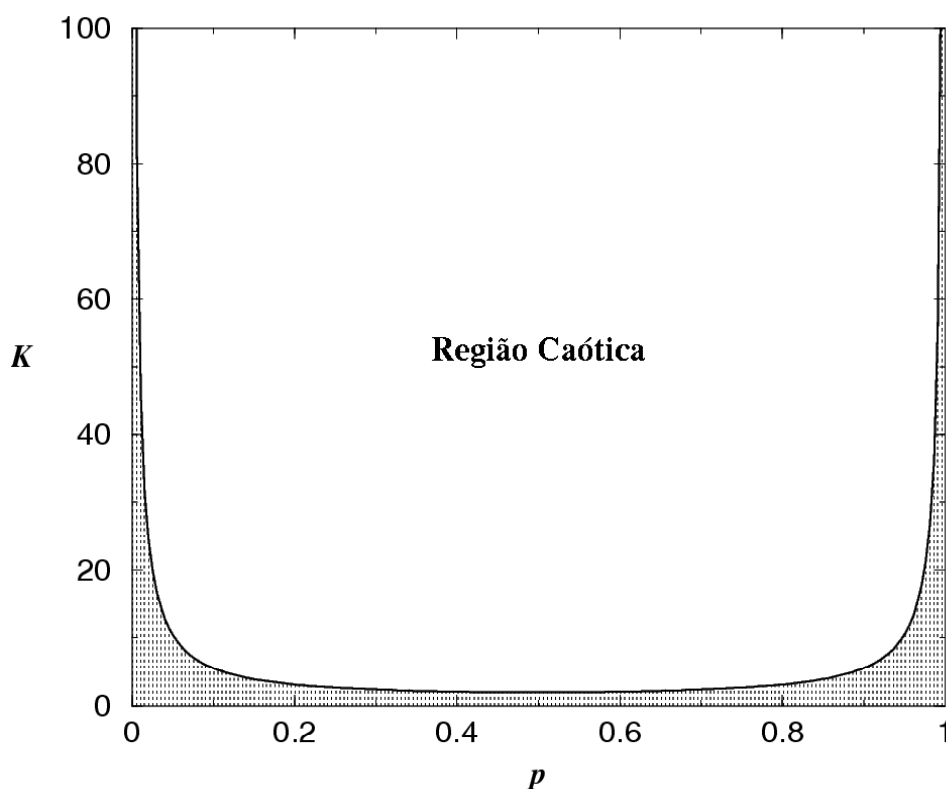


Figura 5: Diagrama de fases das redes booleanas aleatórias. A área rachurada corresponde a fase ordenada e a área logo acima corresponde a fase caótica. A curva que separa ambas as regiões é a equação $K_c = [2p(1-p)]^{-1}$. Gráfico adaptado de [19].

médio. Para $K \leq K_c$, a distância de Hamming tenderá a zero para longos períodos de tempo, o que significa dizer que o dano se propagará localmente e, então, desaparecerá.

Finalizamos este capítulo abordando um dos aspectos mais importantes da equação 1.17, o qual a partir dela podemos determinar os valores críticos que separam os regimes ordenado e caótico. Essa situação ocorrerá quando a relação k/k_c for igual a 1, uma vez que de acordo com a equação 1.17 o regime não será nem ordenado nem caótico. Portanto,

$$\begin{aligned} \frac{K}{K_c} &= 1 \\ K[2p(p-1)] &= 1 \\ 2p(p-1) &= K^{-1} \\ p^2 - p + \frac{1}{2K} &= 0, \end{aligned}$$

resolvendo a equação do segundo grau acima, temos

$$p_c^{1,2} = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} - \frac{1}{2K}}. \quad (1.18)$$

A partir da equação 1.18 temos que para um dado valor de K , o sistema poderá ser posto

em uma das três diferentes fases ajustando apenas o valor da probabilidade p . A linha crítica que separa os regimes ordenado e caótico será obtido variando ou o valor de K ou o valor de p (Fig. 5).

1.4 Comportamento Dinâmico no Ponto Crítico

1.4.1 Teoria

Na seção anterior deduzimos a solução geral para a distância de Hamming (Eq.1.14) e pudemos a partir dela determinar analiticamente os estados de fase ajustando apenas os valores da conectividade K e da probabilidade p (Eq. 1.17). Entretanto, a aproximação de primeira ordem da equação (1.14) falha (fornecendo um valor nulo) quando pretendemos determinar o comportamento crítico ($K = K_c$) do sistema. Para resolver este problema, realizamos uma aproximação de segunda ordem (ver equação 1.16), ou seja,

$$\begin{aligned} \Delta h(t) &= -\frac{(K-1)}{2} [h(t)]^2 \Delta t \\ \frac{1}{[h(t)]^2} \Delta h(t) &= -\frac{(K-1)}{2} \Delta t . \end{aligned} \quad (1.19)$$

A integração da equação acima resulta em um decaimento em lei de potência da forma

$$h(t) \sim t^{-\beta} , \quad (1.20)$$

onde $\beta = 1$ é um expoente crítico. Segundo a equação (1.20), a rede booleana no ponto crítico comporta-se como na fase ordenada, exceto pelo decaimento lento do dano em forma de lei de potência. O expoente β está de acordo com o valor esperado para o modelo de campo médio para percolação direcionada [20, 21], pois evidências numéricas conjecturam que a transição do dano em sistemas *annealed* está na mesma classe de universalidade da percolação direcionada [22]. Porém, uma exceção é verificada para o modelo de percolação direcionada em duas dimensões com a dinâmica de Glauber, onde a temperatura de transição de dano coincide com a temperatura crítica do sistema [23]. Para dimensões maiores, essa coincidência não ocorre mais [24], fazendo com que a conjectura de equivalência seja válida (Uma discursão mais precisa sobre esse tema pode ser visto em [25]).

Devido às flutuações, que são intrínsecas à dinâmica de redes booleanas, e a existência de pontos fixos, quando a distância de *Hamming* se torna zero, a demonstração direta por simulação numérica do decaimento em lei de potência dado da equação 1.20 torna-se uma

tarefa muito complicada. Para contornar esta situação, propomos um novo método de estudo que consiste em analisar estatisticamente o tempo de relaxação t_R , que é definido como o período de tempo necessário para que a distância de Hamming convirja para zero.

Podemos, ao invés de estudar um sistema no limite termodinâmico (redes com $N \rightarrow \infty$), tomar um ensemble de M redes de tamanho finito e, então, definir a distância de Hamming como a média da distância entre as duas redes semelhantes, ou seja,

$$\bar{h}(t) = \frac{1}{M} \sum_{i=0}^M h_i(t) . \quad (1.21)$$

Em redes de tamanho finito há uma chance de $h_i(t)$ convergir para zero em passos finitos de tempo. Quando isto ocorre, o par de redes evoluirá sempre para os mesmos estados de sítios, fazendo com que o sistema atinja um estado de repouso dinâmico. Nessa condição, a distância de *Hamming* será igual a zero indefinidamente, $h_i(t_R < t) = 0$, e não contribuirá mais para a media definida na equação 1.21. Se definirmos M_d como os pares de redes não alcançaram o estado de repouso, teremos

$$\bar{h}(t) = \frac{M_d}{M} \frac{1}{M_d} \sum_{i=0}^{M_d} h_i(t) . \quad (1.22)$$

Analisando a equação (1.22), podemos observar que a fração M_d/M dá a probabilidade $P(t_R > t)$ de termos o tempo de relaxação t_r de um dado par de redes maior que o tempo t . Quando tomamos somente a fração M_d/M , é razoável esperar que a função de distribuição de probabilidade de $\bar{h}(t)$ tenha um comportamento estacionário. Neste trabalho, assumimos que a distância média dos pares de redes não convergentes flutua em torno de uma média, permitindo que possamos considerar o somatório da equação 1.21 constante, ou seja,

$$\frac{1}{M_d} \sum_{i=0}^{M_d} h_i(t) = const . \quad (1.23)$$

Assim, a equação (1.21) torna-se

$$\bar{h}(t) \sim P(t_R > t) . \quad (1.24)$$

Substituindo, então, a equação (1.20) na (1.21), temos

$$P(t_R > t) \sim t^{-\beta} , \quad (1.25)$$

com expoente $\beta = 1$. Esse resultado nos mostra que podemos, mediante simulação numé-

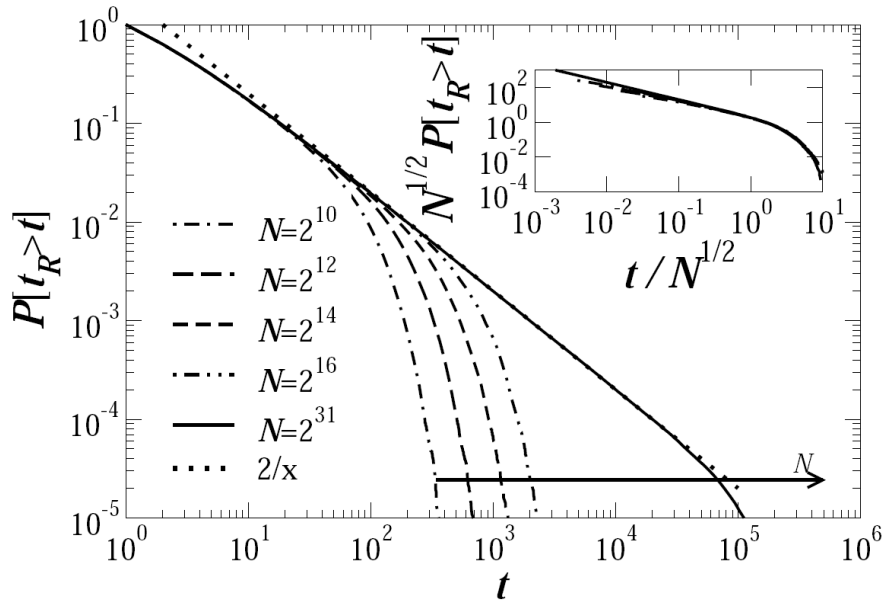


Figura 6: Distribuição cumulativa do tempo de relaxação no ponto crítico. O tempo de relaxação é definido como a quantidade de passos necessários para que o dano em um par de redes semelhantes chegue a zero. A linha pontilhada é o comportamento esperado. Podemos ver que, para sistemas muito grandes, a distribuição segue o decaimento previsto em forma de lei de potência, $P(t_R > t) \sim t^{-1}$. Podemos observar, entretanto, um pequeno desvio para pequenas escalas de tempo e um truncamento exponencial para tempos muito grandes, que está localizado por um tempo de escala dado por $t_\times \sim N^{1/2}$ (ver *inset*). O resultado para $N = 2^{31}$ foi obtido numericamente iterando a equação 1.26. Este resultado mostra que até na condição crítica, o sistema tende a alcançar o estado ordenado. Entretanto, no limite termodinâmico o tempo de relaxação médio diverge. O mais importante deste resultado é que na maioria dos casos o sistema se recupera da perturbação depois de poucos passos, enquanto que em pouquíssimos casos a resposta ao estímulo faz o sistema sofrer uma transição global.

rica, confirmar que a distribuição de probabilidade 1.25 segue a lei de potência esperada, como será exposto na seção a seguir.

1.4.2 Resultado Numérico

A confirmação dos resultados expostos na seção anterior foi obtido a partir de dois procedimentos numéricos diferentes, ambos corroborando a teoria proposta nesse trabalho. O primeiro, mais intuitivo, consiste em definir duas redes semelhantes com N elementos booleanos e, então, calcular a quantidade de pares de elementos conjugados com estados diferentes em cada passo de tempo. O segundo procedimento é baseado no trabalho de Derrida e Pomeau [12], onde foi mostrado que o número de elementos danificados na rede

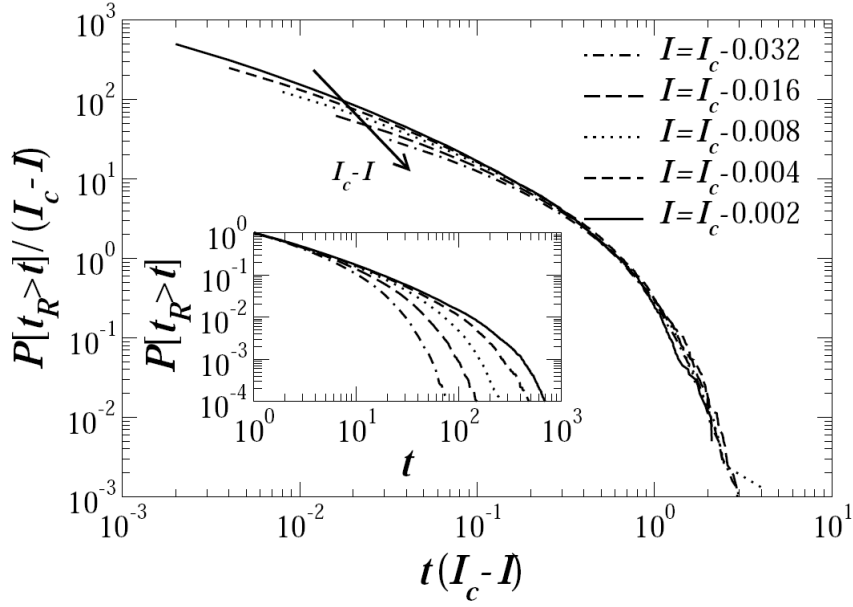


Figura 7: Distribuição cumulativa do tempo de relaxação t_R para a fase ordenada próxima do ponto crítico. Estas curvas foram obtidas para uma rede de tamanho $N = 102400$ e conectividade $K = 3$. Os resultados mostram que a fase ordenada o tempo de escala τ_0 do truncamento exponencial da distribuição é determinado por $\tau_0 \sim (I_c - I)^{-\nu}$ para $\nu = 1$. O gráfico principal mostra a distribuição escalonada pelo tempo de correlação ν_0 , enquanto os dados originais podem ser visto no *inset*.

é obtido a partir da equação de iteração estocástica

$$P(m, n) = \frac{N!}{m!(N - m)!} (Iq)^m (1 - Iq)^{N - m}, \quad (1.26)$$

tal que $I = 2p(1 - p)$, m e n são respectivamente o número de elementos danificados nos passos seguinte e atual e a quantidade $q = 1 - (1 - n/N)^K$ é a probabilidade com a qual um elemento tem de possuir uma conexão com um outro elemento danificado. Os resultados de ambos os procedimentos foram obtidos da média de um ensemble de 50.000 pares de redes, onde mantivemos fixa a conectividade $K = 3$ e variamos tanto o tamanho da rede N como a distribuição da probabilidade p . No entanto, optamos por expor neste trabalho os resultados do segundo procedimento devido à rapidez e capacidade de obtermos redes com o tamanho de até $N = 2^{31}$.

A conjectura discutida na seção anterior é apoiada pelos resultados da figura (6), que mostra a distribuição cumulativa do tempo de relaxação t_R para uma rede de tamanho finito no ponto crítico ($K = K_c$). O tempo de relaxação é definido como o período de tempo necessário para que a distância de Hamming convirja a zero após o sistema ter os estados de um par de elementos conjugado danificado inicialmente.

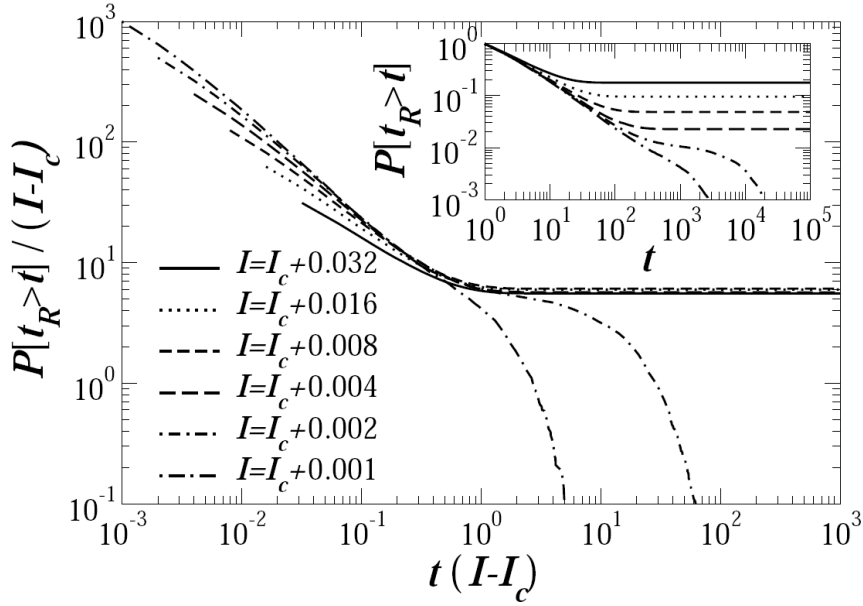


Figura 8: Distribuição cumulativa do tempo de relaxação para a fase caótica próxima do ponto crítico. Os resultados foram obtidos para uma rede de tamanho $N = 102400$ e conectividade $K = 3$. Quando $I_c > I$, o sistema está no regime caótico e, então, esperamos que o dano nunca convirja a zero. Esta concepção é consistente com os resultados, onde vemos que o *crossover* da lei de potência decai para um comportamento plano. Isto significa dizer que a média do tempo de relaxação diverge até para uma rede de tamanho finito. O tempo de correlação $\tau_0 \sim (I - I_c)^{-\nu}$ nos dá o tempo de escala para diferentes probabilidades. Podemos perceber um truncamento exponencial para valores de I se aproximando da condição crítica. Este truncamento ocorre devido ao tamanho finito da rede. Podemos perceber também que o início do truncamento varia cada vez mais rapidamente com o aumento de $(I - I_c)$. O gráfico principal mostra a distribuição escalonada com o tempo de correlação τ_0 , enquanto que os dados originais podem ser vistos no *inset*.

Os resultados mostram que a distribuição cumulativa possui aproximadamente o expoente esperado ($\beta = 1$) acima do ponto de *crossover*, a partir do qual a curva segue decaindo exponencialmente (Fig. 6). O ponto onde se inicia o decaimento exponencial é localizado para diferentes tamanhos de redes com um tempo característico que cresce na forma $t_x \sim N^\gamma$ para $\gamma = 1/2$ (*inset* da figura 6). Este resultado é surpreendente, pois mostra que redes booleanas tem um limite para o tempo de relaxação t_R até mesmo na condição crítica ($K = K_c$). O valor esperado para o expoente $\beta = 1$ na equação 1.25 foi confirmado obrigatoriamente para simulações com redes de tamanhos muito grandes, onde a curva da distribuição cumulativa coincide com a lei de potência por quase quatro ordens de grandeza (Fig. 6).

Investigamos também o comportamento não crítico do sistema partindo do ponto crítico. Na figura (7) mostramos resultados para redes se aproximando do ponto crítico a partir do regime ordenado. Similarmente à condição crítica, a distribuição decai como lei

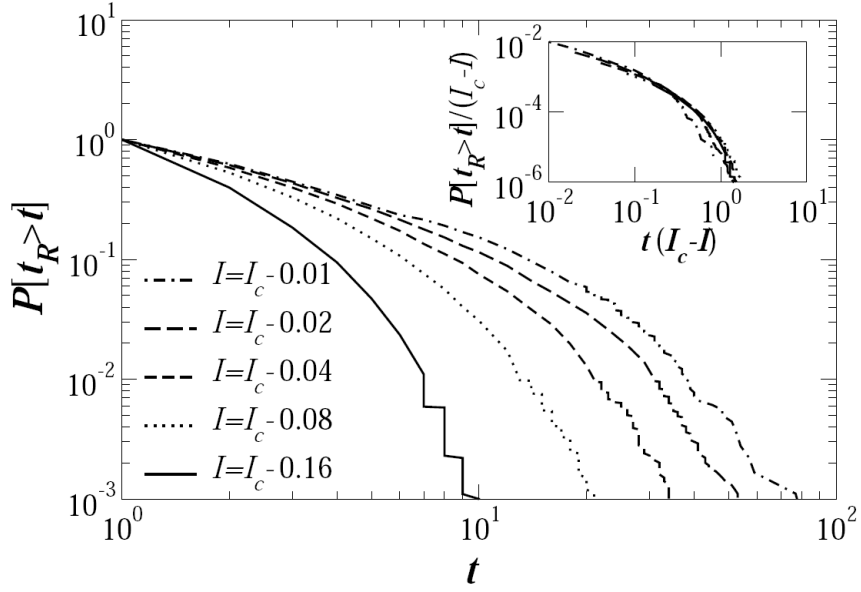


Figura 9: Distribuição cumulativa do tempo de relaxação para o caso *quenched*. Na fase ordenada próxima do ponto crítico, a distribuição torna-se restrita a pequenos tempos de escala. Como no modelo *annealed*, o *inset* mostramos a superposição das curvas por um tempo de correlação dado por $\tau_0 \sim (I - I_c)^{-\nu}$, com $\nu = 1$.

de potência seguida por um regime exponencial. Neste caso, entretanto, a escala de tempo para o qual o sistema vai para o regime exponencial é controlado pelo deslocamento da condição crítica. Assim, definimos o tempo de correlação $\tau_0 \sim (I - I_c)^{-\nu}$ para $\nu = 1$. Este resultado está de acordo com o esperado para o modelo de campo médio para percolação direcionada [20, 21]. No caso ordenado, τ_0 é definido como o tempo de escala além do qual o dano é removido completamente da rede.

Um comportamento complementar é observado quando o sistema vai para o ponto crítico a partir do regime caótico, como mostra a figura (8). Neste caso, há um truncamento do ponto do decaimento exponencial, onde observamos um *crossover* para um comportamento plano. Esta situação é consistente com o fato do tempo de relaxação médio divergir no regime caótico. Como na fase ordenada, o tempo de escala para o *crossover* na fase caótica é determinado pelo tempo de correlação $\tau_0 \sim (I - I_c)^{-\nu}$ para o mesmo expoente $\nu = 1$. Temos, portanto, que no caso caótico τ_0 é o tempo a partir do qual toda a memória do estado inicial é perdida e as duas redes inicialmente semelhantes divergem para estados completamente distintos. Concluímos que assim como o expoente β , o expoente ν está também de acordo com os resultados obtidos para o modelo de campo médio para percolação direcionada [20, 21].

Por último, estendemos nossos resultados para a distribuição do tempo de relaxação

para o modelo de redes booleanas *quenched*, onde a atualização da função booleana e a estrutura desordenada das conexões são fixas. Construímos uma rede *quenched* e a deixamos evoluir até que ela alcance um ciclo atrator. Subseqüentemente, provocamos uma perturbação no atrator alterando o estado de um dos elementos da rede em um dado instante e medimos o tempo necessário para que o sistema retorne para o mesmo ciclo atrator. Os casos onde o sistema evolui para diferentes atratores não são considerados na estatística e, como a forma da distribuição depende do comprimento do atrator, restringimos nosso estudo para os casos onde o ciclo do atrator tenha pelo menos mais de 10 estados.

Observando a figura (9), temos que a distribuição do tempo de relaxação ao caso *quenched* segue um comportamento inteiramente similar para o caso *annealed*, ou seja, um decaimento lento seguido por um truncamento exponencial. O *onset* para escalas de tempo muito grande é controlado pelo deslocamento da condição crítica $\tau_0 \sim (I - I_c)^{-\nu}$, com $\nu = 1$, onde podemos observar que esta relação é igual a relação de escala obtida para o modelo *annealed*. Este resultado reforça a idéia que sob certas condições a rede booleana aleatória pode ser apropriada para estudar a condição crítica de redes regulatórias.

1.5 Conclusões

Neste capítulo apresentamos resultados obtidos para a dinâmica de redes booleanas sujeitas a uma pequena perturbação, onde observamos que dependendo do regime em que o sistema se encontra, a distribuição cumulativa do tempo de relaxação apresenta diferentes comportamentos.

Nesse sentido temos que no ponto crítico a distribuição cumulativa do tempo de relaxação segue um decaimento em lei de potência com expoente $\beta = 1$. Este comportamento está, portanto, de acordo com a conjectura que diz que tanto a dinâmica de propagação de danos em redes *annealed* como o modelo de percolação direcionada pertencem à mesma classe de universalidade [20, 21, 25]. Observamos ainda que na condição crítica há um truncamento exponencial na região de grandes tempos de relaxação, cujo início do truncamento escala com o tamanho do sistema na forma $\tau_x \sim N^{1/2}$.

Na fase ordenada próxima do ponto crítico a distribuição do tempo de relaxação tem um *crossover* para um decaimento exponencial, indicando que uma pequena perturbação é perdida depois de apenas alguns passos de tempo. Já na fase caótica próxima do ponto crítico o *crossover* vai para um regime plano, indicando que o sistema poderá nunca se recuperar de uma perturbação por menor que ela seja.

Nossos resultados podem ser interpretados dentro de uma conjectura de "vida no limite do caos" proposto por Kauffman [2]. De acordo com esta idéia, nem o regime ordenado nem o regime caótico podem modelar ao mesmo tempo de forma eficiente a robustez e a adaptabilidade observadas nos sistemas auto-regulatórios reais. No contexto dos nossos resultados, temos que apesar da distância de *Hamming* no regime ordenado ir a zero com pequenos tempos de relaxação, a quantidade de estados envolvidos no processo dinâmico é muito pequeno, impedindo a adaptabilidade. Já no regime caótico, temos um grande número de estados envolvidos no processo dinâmico, porém o tempo de relaxação tende a infinito, inviabilizando a auto-regulação. No ponto crítico temos o meio termo, ou seja, temos tanto grande quantidade de estados envolvidos no processo dinâmico como um tempo de relaxação tendendo a zero em tempos relativamente pequenos.

A distribuição em lei de potência achada no ponto crítico nos mostra que para maioria dos eventos o sistema é robusto, recuperando-se completamente de pequenas perturbações e erros externos. Desta forma, temos que a alteração de poucos elementos pode provocar um processo que faça com que a maioria dos elementos não afetados do sistema responda à perturbação, assemelhado-se a um sistema real respondendo a alguma mudança ambiental.

2 DECOMPOSIÇÃO DE REDES LIVRES DE ESCALAS

Estudamos neste capítulo um novo método de decomposição de redes aplicado às redes livres de escalas tipo Barabási-Albert. O método consiste basicamente em identificar todos os sítios com exatamente K conexões e retirá-los simultaneamente da rede. Esse processo é repetido iterativamente até que não haja mais sítios na rede com K conexões. Na análise dos resultados, observamos uma série de expoentes e parâmetros bem estabelecidos e relacionados entre si de maneira que é possível tornar o modelo auto-consistente. Na primeira seção (2.1) apresentamos uma breve introdução às redes livres de escalas onde propomos a rede de Barabási-Albert como um bom modelo teórico para ser trabalhado. Na seção seguinte (2.2) definimos o novo método de decomposição e apresentamos nossos resultados analíticos e numéricos. Na última seção (2.3) finalizamos o capítulo com a conclusão.

2.1 Redes Livres de Escalas

O estudo topológico de redes complexas teve início com o modelo de grafos aleatórios proposto por Erdős e Rényi no início da década de 60 [26]. Naquela época, o estudo de redes ficou praticamente restrito ao desenvolvimento de teorias puramente matemáticas devido principalmente ao fato da difícil obtenção de uma grande base de dados e também por não haver tecnologias que possibilitassem de maneira precisa sua análise. Um grande avanço teórico se deu no início da década de 80 quando Béla Bollobás provou matematicamente que a distribuição de conectividade das redes aleatórias era de fato poissoniana [27], ou seja, nesta distribuição a maioria dos vértices possuía em média a mesma quantidade de conexões (largura do pico central da distribuição de Poisson) enquanto uma pequena minoria possuía ou poucas (lado esquerdo da distribuição de Poisson) ou muitas conexões (lado direito da distribuição de Poisson) (Fig. 10).

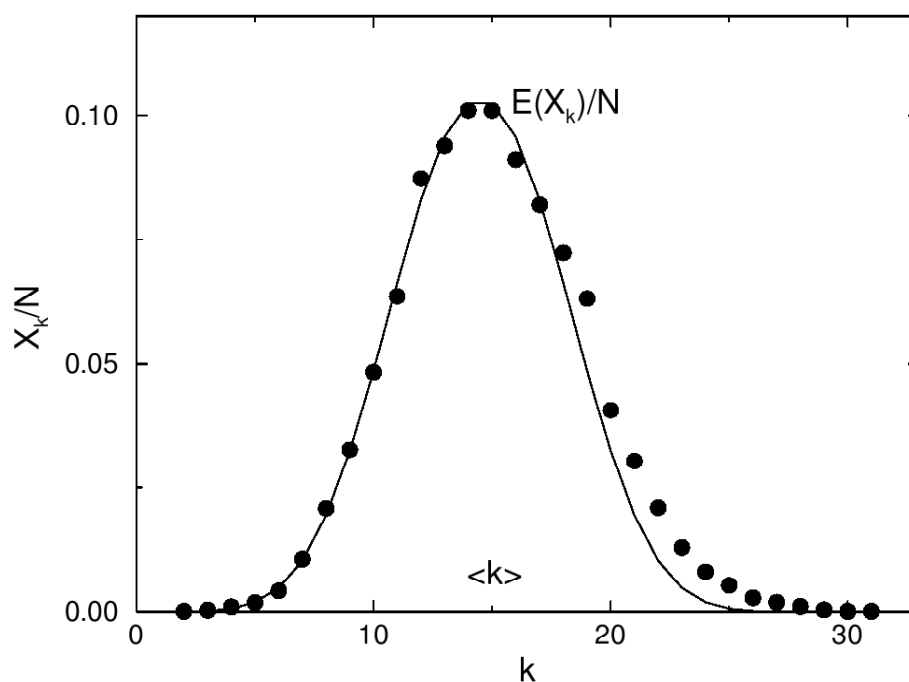


Figura 10: Distribuição de Poisson feita a partir dos dados de uma simulação computacional de uma rede aleatória. Os dados foram gerados de uma rede de $N = 10000$ vértices e probabilidade de conexão $\rho = 0.0015$. No eixo vertical temos a probabilidade haver o número X_k vértices com conectividade k (eixo horizontal) e $E(X_K)/N$ representa a expectativa da distribuição de Poisson para os parâmetros $N = 10000$ e $\rho = 0.0015$ (Fig. retirada de [16]).

Entretanto, ainda na década de 60 e sem conexão com o estudo de redes complexas, dois trabalhos envolvendo redes sociais foram desenvolvidos. Primeiro em 1965, onde Price [28] estudou o número de citações de artigos científicos e verificou que sua distribuição seguia um decaimento em lei de potência. Depois, em 1967, o famoso estudo experimental de Stanley Milgram [29] mostrou que entre duas pessoas desconhecidas quaisquer nos EUA havia em média apenas uma cadeia de seis outras pessoas que as separavam, sendo este fato conhecido posteriormente como efeito de pequeno mundo.

As redes aleatórias foram por muito tempo o único modelo teórico de redes complexas a serem estudadas, até que em 1998 Watts e Strogatz [30] propuseram um novo modelo que continha ao mesmo tempo tanto o efeito de pequeno mundo (característica também presente nas redes aleatórias) quanto um alto grau de coeficiente de agrupamento (quantidade de conexões próximas de um dado vértice). O modelo consistia inicialmente de uma rede regular, onde então cada vértice era visitado e com uma probabilidade p era reconectado aleatoriamente a outros vértices da rede. Apesar da nova característica, o modelo de Watts e Strogatz ainda possuía uma distribuição poissoniana do seu grau de conectividade.

Com o passar dos anos e com o surgimento da tecnologia computacional, o estudo dos grafos foi convergindo cada vez mais para a aplicação em sistemas naturais, onde as redes passaram a ser formadas por várias entidades (físicas ou idealizadas) conectadas entre si. Assim, já no final da década de 90, dois trabalhos mudaram a concepção topológica das redes complexas. O primeiro em 1998, onde Redner mostrou que distribuição da quantidade de vezes com que um artigo era citado (representando a conectividade da rede) decaía como uma lei de potência, com o expoente $\gamma_{cite} \approx 3$ [31]. No ano seguinte, Barabási *et al* [32] utilizaram um robô para mapear sítios da WWW (*World Wide Web*), onde a rede WWW seria formada pelos sítios (vértices) e pelos *hyperlinks* (conexões entre os sítios). A expectativa era que a distribuição de conectividade dos sítios corroborasse a teoria de grafos aleatórios. Entretanto, a análise dos dados também mostrou que distribuição de conectividade decaía em forma de lei de potência, com expoentes $\gamma_{in} \approx 2.1$ (para sítios que recebiam ligações de outros sítios) e $\gamma_{out} \approx 2.5$ (para sítios que enviavam ligações de outros sítios). A constatação deste tipo de decaimento foi um fato muito surpreendente, pois mostrou que em alguns sistemas reais a distribuição de conectividade tanto apresentava desvio padrão muito maior que a média de conexões como possuía uma invariância de escala. Em um aspecto mais detalhado, temos que o grau conectividade possui todos os níveis de tamanhos, sendo que a maioria dos vértices possui poucas conexões enquanto a outra minoria (chamados de *hubs*) possui muitas conexões.

Após os trabalhos de Redner [31] e Barabási *et al* [32], muitos outros vieram reforçar a idéia de que o comportamento em lei de potência de redes complexas é de certa forma bastante comum em sistemas reais. Como exemplos podemos citar a rede da estrutura física da *internet*, a qual é formada por roteadores conectados por fibra óptica ou outro tipo de linha de transmissão [34]; rede de contato sexual entre pessoas na Suécia, que mostrou que a maioria das pessoas em seu tempo de vida possuía apenas alguns poucos parceiros enquanto outros poucos possuíam algumas dezenas e até centenas [35]; a rede de pessoas conectadas por e-mail, o que poderia talvez explicar a rápida propagação de alguns tipos de vírus; a rede de co-autorias de trabalhos científicos, a qual é formada por pesquisadores que publicaram juntos um mesmo artigo científico [36]. Um fato curioso é que um dos cientistas mais "conectados" é Erdős, o qual escreveu mais de 1400 artigos com pelo menos 500 colaboradores; a rede de atores de Hollywood, os quais são considerados conectados se dois atores atuaram juntos em algum filme [37]; a rede de metabolismo celular, onde cada vértice representa uma molécula e cada conexão uma reação bioquímica entre elas [38]; a rede de chamadas telefônicas, onde os vértices eram formados por números de telefones e as conexões por chamadas completadas entre dois números [39].

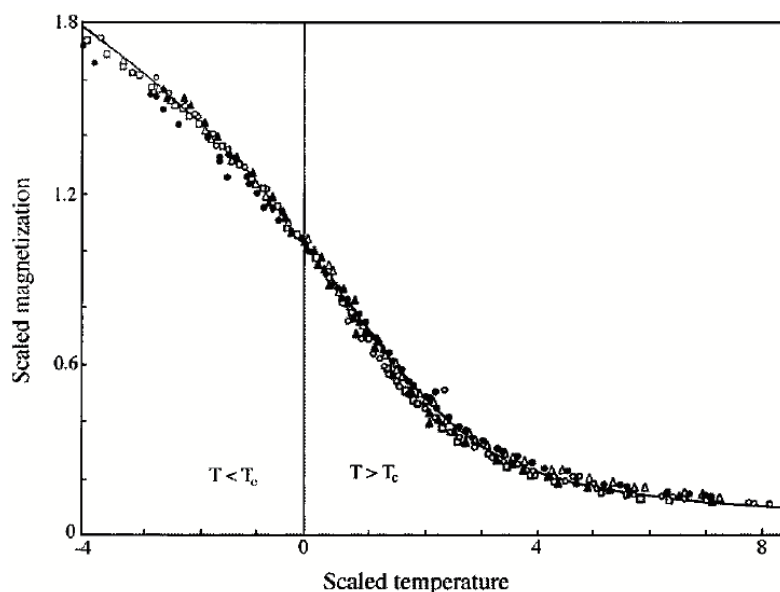


Figura 11: Gráfico experimental da magnetização próxima do ponto crítico para cinco tipos de materiais magnéticos diferentes, onde os eixos da magnetização e temperatura são multiplicados respectivamente por um fator $H^{-1/\delta}$ e $H^{-1/\beta\delta}$, com $\beta \sim 0.36$ e $\delta \sim 4.5$. Os cinco materiais são CrBr_3 , EuO , Ni , YIG e Pd_3Fe e todos são ferromagnetos com estruturas diferentes: o CrBr_3 é considerado uma rede anisotrópica; o EuO possui forte interação entre os segundos vizinhos; o Ni é um ferromagneto elétron itinerante; o YIG é um ferrimagneto; o Pd_3Fe é uma liga magnética. Apesar da diferença estrutural, todos os materiais possuem o mesmo expoente crítico. Assim podemos colapsar o gráfico da magnetização em uma única curva pela multiplicação de um fator de escala, fazendo com que os cinco materiais pertençam a mesma classe de universalidade (Gráfico retirado de [40]).

A observação de que cada vez mais e mais fenômenos naturais apresentam grandezas que se comportam como uma lei de potência tem atraído boa parte da atenção da comunidade científica. A importância deste tipo de comportamento teve seu início no estudo de sistemas termodinâmicos próximos do ponto crítico, onde foram observadas duas propriedades fundamentais. São elas (Ver [40]):

- Escalonamento: propriedade cuja validação foi verificada em diversos trabalhos experimentais, está associada à idéia de invariância de escala e se subdivide basicamente em duas categorias. A primeira delas é composta por um conjunto de expoentes relacionados entre si, chamados leis de escalas. Como exemplo podemos citar os expoentes críticos¹ α , β e γ associados respectivamente ao calor específico C_T , à magnetização M e à susceptibilidade magnética χ_T , onde o vínculo é dado por $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$. A segunda categoria consiste na possibilidade de grandezas

¹Os expoentes são matematicamente definidos por: $C_T \sim \epsilon^{-\alpha}$, $M^2 \sim \epsilon^{2\beta}$ e $\chi_T \sim \epsilon^{-\gamma}$, onde ϵ é a temperatura reduzida $\epsilon = (T - T_c)/T_c$

de n variáveis que representam os estados de um sistema passarem a representar o mesmo estado do sistema por pelo menos $n - 1$ variáveis. Como exemplo, temos a magnetização $M(H, \epsilon)$ como função do campo magnético H e da temperatura ϵ . Desta forma, observaremos que para cada valor do campo magnético H haverá uma curva da magnetização $M(H, \epsilon)$ em função da temperatura ϵ . Próximo do ponto crítico, poderemos ter a magnetização M apenas como função da temperatura ϵ se multiplicarmos M e ϵ por potências de H apropriadas, resultando em um colapso de todas as curvas independentemente do valor do campo H ;

- Universalidade: esta propriedade foi proposta pela primeira vez por Leo Kadanoff nos anos 70 e ela ocorrerá quando no limite termodinâmico dois sistemas quaisquer possuírem os mesmos expoentes, fazendo com que eles apresentem as mesmas leis de invariância de escala independente do tipo de interação que há entre os seus respectivos agentes. Para exemplificar, podemos citar os materiais magnéticos com diferentes estruturas microscópicas (diferentes interações entre os agentes constituintes), que possuem aproximadamente os mesmos valores de expoentes próximo do ponto crítico (Fig 011).

Embora as idéias de invariância de escala e universalidade tenham surgido no contexto de transições de fase, principalmente após a comprovação empírica da teoria de grupo de renormalização [41], sua aplicação conceitual tem alcançado uma grande diversidade de tipos de sistemas complexos, indo desde sistemas biológicos, sociais, artificiais até o sistema econômico. Para uma melhor compreensão sobre os conceitos acima expostos, ver os artigos [40, 42].

Neste capítulo realizamos um estudo sobre a decomposição de redes complexas livres de escalas baseado no modelo de crescimento preferencial proposto por Albert-Barabási [37]. A escolha deste modelo se deveu principalmente por ele apresentar um decaimento do grau de conectividade sob a forma de lei de potência, que como vimos está presente em um grande número de sistemas que podem ser modelados como uma rede complexa. Outro fator que também contribuiu para nossa escolha é o fato do modelo de rede de Albert-Barabási ser bastante flexível na variação dos parâmetros iniciais e por possibilitar a obtenção de uma grande quantidade de amostras, o que é crucial para uma boa descrição estatística do nosso problema.

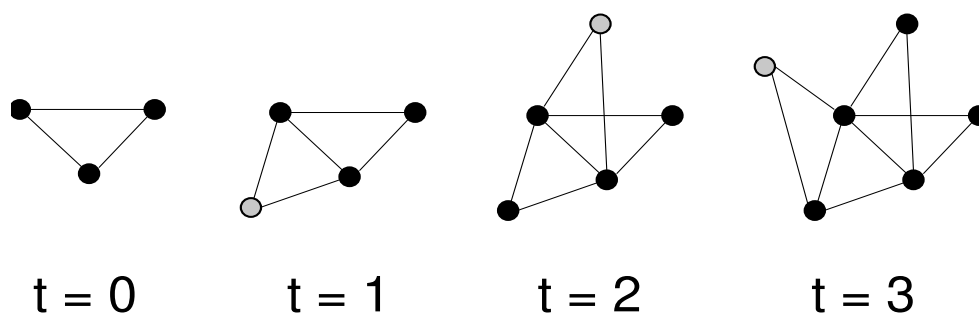


Figura 12: Ilustração que mostra o processo de crescimento da rede Barabási-Albert. A rede é iniciada com o número inicial de vértices $m_0 = 3$ e o coeficiente de agregação $m = 2$. As bolas pretas são os vértices antigos e os cinzas o novo vértice adicionado.

2.1.1 Rede de Albert-Barabási

Apesar dos modelos de redes desenvolvidos por Erdős e Renyi e por Watts e Strogatz exibirem efeito de pequeno mundo e alto coeficiente de aglomeração (apenas Watts e Strogatz), os mesmos falham quando tentamos utilizá-los para modelar alguns sistemas reais, pois não apresentam o decaimento em lei de potência na distribuição de conectividade da rede. Uma solução dada para resolver esse problema foi feita por Barabási e Albert [37] quando propuseram duas características genéricas que estariam presentes nos sistemas reais. A primeira delas é que as redes reais crescem continuamente, ou seja, o número de vértices N cresce com o tempo. A segunda característica foi a observação de que havia uma preferência nas novas conexões que surgiam, isto é, era mais provável que uma nova página da internet se conectasse com uma outra mais conhecida ou que um novo artigo citasse um outro mais conhecido naquela área ou assunto específico. Estes e muitos outros exemplos indicam que o surgimento das conexões não são aleatórias, mas que há um mecanismo que governa o processo de escolha das conexões. De fato, este processo é dado quando um novo vértice se conecta a algum dos vértices existentes com uma probabilidade que é proporcional à quantidade de conexões de cada vértice que já esteja na rede. Desta forma, o modelo livre de escala proposto por Barabási e Albert leva em consideração as duas características e pode ser definido da seguinte forma:

- crescimento: a rede é iniciada com um pequeno número m_0 de vértices, estando todos conectados entre si, e então é adicionado a cada passo de tempo t um novo vértice que se conectará a m vértices daqueles já existentes.
- conexão preferencial: a escolha de uma nova conexão é dada por uma probabilidade $\Pi(K_i)$, que leva em consideração a quantidade de conexões K_i do i -ésimo vértice existente na rede, ou seja,

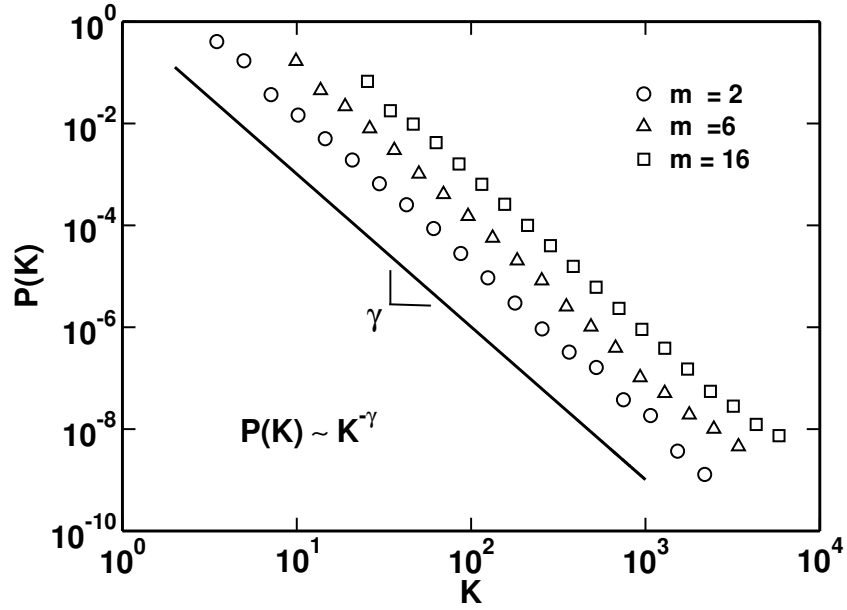


Figura 13: Gráfico que mostra a distribuição de probabilidade do grau de conectividade $P(K)$ em função de K , onde podemos perceber o decaimento em lei de potência na forma $P(K) \sim K^{-\gamma}$, com $\gamma = 3.0$. A rede foi criada com $N = 10^6$ vértices e diferentes coeficientes de agregação m .

$$\Pi(K_i) = \frac{K_i}{\sum_j^N K_j} . \quad (2.1)$$

Após t passos de tempo, o tamanho da rede será $N = m_0 + t$ e a quantidade de vértices $m(t + m_0)$. Um esquema ilustrativo do crescimento da rede poderá ser visto na Fig. 12.

De fato poderemos constatar a partir de simulações computacionais que esse modelo de rede irá evoluir para um estado livre de escala, onde a probabilidade de encontrarmos um vértice com K conexões seguirá uma lei de potência $P(K) = K^{-\gamma}$, com $\gamma \sim 3$, independentemente do valor de conexões iniciais m (único parâmetro de controle da rede) (Fig. 13).

A distribuição em lei de potência mostra que apenas alguns vértices possuem alta concentração de conexões, chamados de concentradores ou *hubs*, enquanto a grande maioria possui poucas conexões. Desta forma, uma das grandes consequências da presença dos *hubs* na rede é que eles possibilitam que o caminho médio $\langle d \rangle$ entre qualquer par de vértices da rede sejam drasticamente diminuídos em relação ao apresentado pelas redes aleatórias de forma que $\langle d \rangle \sim \ln(\ln N)$ [16]. O processo de crescimento preferencial tem também como consequência um baixo índice de coeficiente de agrupamento, $C_A \sim N^{-0.75}$

[16], porém ainda maior que o apresentado pelas redes aleatórias.

O cálculo analítico do expoente da distribuição de conectividade da rede de Barabási-Albert pode ser realizado por pelo menos três maneiras diferentes [43, 44], entretanto, apresentaremos na subseção seguinte apenas o método da teoria contínua [16], também conhecido como método da teoria do campo médio [45].

2.1.1.1 Cálculo Analítico

O método aproximativo escolhido aqui para o cálculo analítico do expoente da distribuição da rede de Barabási-Albert é o método da teoria contínua, que foi desenvolvido primeiramente por Barabási *et al* [37, 45] em 1999. O método consiste basicamente em calcular a dependência temporal do grau de conectividade $K_i(t)$ de um dado vértice i e, então, a partir daí fazer uma mudança de variável na probabilidade cumulativa para acharmos a distribuição de probabilidade.

No processo de crescimento da rede, temos que o grau de conectividade $K_i(t)$ aumentará toda vez que um novo vértice for adicionado e conectado ao vértice i , acarretando uma variação temporal da probabilidade $\Pi(K_i(t))$. Supondo que $K_i(t)$ seja uma variável contínua no tempo, a taxa em que $K_i(t)$ muda no tempo será proporcional a $\Pi(K_i(t))$, satisfazendo, conseqüentemente, à equação dinâmica

$$\frac{\partial K_i}{\partial t} = m\Pi(K_i) = m \frac{K_i}{\sum_j^{N-1} K_j}. \quad (2.2)$$

O somatório no denominador da equação (2.2) é realizado incluindo todos os vértices da rede menos o novo vértice adicionado, pois para ele o tempo $t = 0$. Assim, teremos que $\sum_j^{N-1} k_j = 2mt - m$, porém quando o tempo é muito grande, o somatório resultará em apenas $2mt$ e, portanto,

$$\frac{\partial K_i}{\partial t} = \frac{K_i}{2t}. \quad (2.3)$$

Sabemos que no momento da adição t_i cada vértice i possuía apenas $K_i(t_i) = m$ conexões. Assim a solução da equação (2.3) será dada por

$$K_i(t) = m \left(\frac{t}{t_i} \right)^\beta, \quad (2.4)$$

onde $\beta = 1/2$. Podemos perceber na equação (2.4) que a distribuição de todos os vértices evolui da mesma maneira, como uma lei de potência, de tal maneira que a única diferença está na constante de proporcionalidade.

Usando a equação (2.4), podemos determinar a probabilidade de escolher um vértice com o grau de conectividade $K_i(t)$ menor que K em função do tempo, ou seja,

$$P(K_i < K) = P\left(t_i > \frac{m^{1/\beta}t}{K^{1/\beta}}\right). \quad (2.5)$$

Suponhamos agora que cada vértice é adicionado em intervalos de tempos iguais, temos que a densidade de probabilidade de sortear um vértice que foi adicionado em um tempo t_i será constante no tempo, ou seja,

$$P(t_i) = \frac{1}{m_0 + t}. \quad (2.6)$$

A partir da definição de probabilidade acumulada e substituindo a equação (2.6) na (2.5), teremos

$$\begin{aligned} P\left(t_i > \frac{m^{1/\beta}t}{K^{1/\beta}}\right) &= 1 - P\left(t_i < \frac{m^{1/\beta}t}{K^{1/\beta}}\right) \\ &= 1 - \int_0^{\frac{m^{1/\beta}t}{K^{1/\beta}}} P(t_i) dt_i \\ &= 1 - \int_0^{\frac{m^{1/\beta}t}{K^{1/\beta}}} \frac{1}{m_0 + t} dt_i \\ &= 1 - \frac{1}{K^{1/\beta}} \frac{m^{1/\beta}t}{m_0 + t}. \end{aligned} \quad (2.7)$$

De acordo com a equação (2.5), podemos obter o grau de distribuição de conectividade $P(K)$ derivando a equação (2.7) em relação a K , portanto,

$$P(K) = \frac{\partial P[K_i < K]}{\partial K} = \frac{1}{\beta K^{1/\beta+1}} \frac{m^{1/\beta}t}{m_0 + t}. \quad (2.8)$$

Assintoticamente, quando o tempo é muito grande ($t \rightarrow \infty$), a distribuição $P(K)$ se comporta como uma lei de potência

$$P(K) \sim 2m^2 K^3, \quad (2.9)$$

onde podemos observar a independência do expoente da distribuição $P(K)$ com o parâmetro m e desta forma evidenciar a coerência com os resultados numéricos.

A grande maioria das redes reais apresentam uma distribuição de conectividade em forma de lei de potência que independe do tamanho da rede. Este fato pode realmente ser previsto analiticamente no modelo de Albert-Barabasi pela equação 2.9, indicando que o sistema atinge seu estado estacionário para longos períodos de tempo. Podemos observar ainda na equação 2.9 o termo de proporcionalidade m^2 também constatado nas simulações numéricas (Ver em [16]).

2.2 Método de decomposição

2.2.1 Modelo

Frequentemente é observado que alguns dos sistemas reais que podem ser modelados por redes complexas evoluem espontaneamente para estados auto-organizados após ataques ou estímulos externos. Esta capacidade torna tais sistemas bastante adaptativos e robustos a uma grande variedade de eventos naturais imprevisíveis e isso se deve principalmente ao processo de interações locais que há entre os seus agentes constituintes. Assim, temos, neste contexto, que os estudos ligados às conexões entre agentes tornam-se um dos aspectos mais relevantes para se entender as propriedades dinâmico-estruturais das redes complexas.

Muitos trabalhos foram desenvolvidos com o intuito de fornecer ferramentas matemáticas que nos auxiliem no entendimento de sistemas complexos. Em particular, a observação de que algumas redes reais apresentavam um decaimento na distribuição de conectividade sob a forma de lei de potência atraiu fortemente a atenção dos pesquisadores de sistemas complexos devido principalmente ao fato das redes livres de escala não possuírem uma conectividade média (o que torna o sistema bastante robusto a defeitos e ataques aleatórios [16]) e por apresentarem efeito de pequeno mundo (rápida propagação de informação). De fato, os avanços na concepção teórica da estrutura de redes complexas indicam que estas características estão intimamente ligadas à maneira de como se dão os arranjos das conexões entre os agentes (Ver na sequência [26, 30, 37]).

Nesse sentido, a investigação topológica torna-se um dos principais meios para se compreender as propriedades estruturais das redes complexas. Neste trabalho, utilizamos um método semelhante à decomposição *k-shells* para analisar o processo de retirada iterativa de vértices de uma rede livre de escala em diferentes níveis de graus de conectividade. Comumente, uma *k-shells* é definida como sendo o conjunto de todos os vértices com conectividade menor ou igual a K [46] e está quase sempre associada à formação de

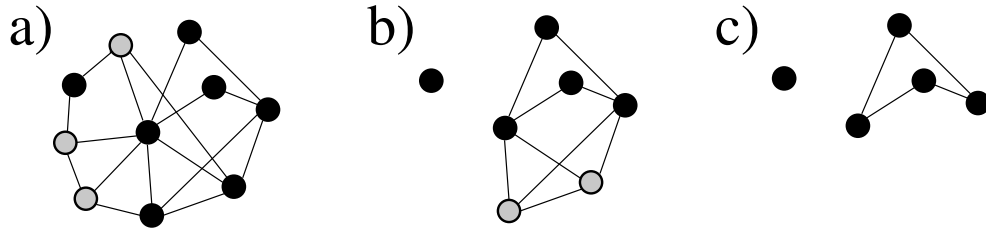


Figura 14: Ilustração que representa um processo de RI k -shells de uma rede Barabási-Albert. A rede possui tamanho $N = 10$ e foi construída com um coeficiente de agregação $m = 2$. O processo de remoção foi realizado retirando todos os vértices com $K = 3$ conexões. As bolas de cor cinza indicam os vértices que serão retirados no passo seguinte. A figura a) representa a rede inicial, $t = 0$, b) o processo intermediário, $t = 1$, com $s_3(1) = 3/10$ e c) a configuração final, $t = 2$, com $s_3(2) = 2/10$, onde não há mais vértices com $K = 3$ conexões. Em todo o processo ocorreu um total de 2 iterações resultando em uma β -shell com $S_3 = 5/10$.

estruturas k -core [47, 48, 49, 50].

Nosso objetivo é analisar os aspectos associados à iteração quando uma rede complexa sofre um dado processo de remoção definido como remoção iterativa (RI) k -shells. Para isso, utilizaremos uma rede livre de escala criada a partir do modelo de agregação preferencial de Barabási-Albert (BA) [37]. A escolha do modelo de rede BA deve-se tanto pela sua flexibilidade nos ajustes dos parâmetros de construção da rede como por sua facilidade de geração. O modelo BA consiste em uma rede criada a partir de um pequeno número de vértices m_0 , cada um com m conexões iniciais. A rede é crescida acrescentando-se um vértice por vez, onde cada um se conectará a m vértices daqueles já existentes. A escolha das conexões é realizada seguindo uma probabilidade que é proporcional ao número de conexões de cada vértice, ou seja, a probabilidade de um vértice já existente na rede receber uma nova ligação é proporcional ao seu próprio número de conexões. Este processo de crescimento será repetido até que o número máximo de vértices N seja alcançado. Para facilitar o controle dos parâmetros de crescimento, usaremos neste trabalho a relação $m_0 = m + 1$.

A RI k -shells é feita a partir da retirada iterativa de grupos de vértices com o mesmo grau de conectividade, ou seja, em cada iteração identificamos todos aqueles vértices que possuem exatamente K conexões e então os retiramos simultaneamente da rede. Como consequência, temos a alteração da conectividade dos outros vértices da rede por causa das conexões perdidas com os vértices retirados. Este fato faz com que alguns dos vértices remanescentes que possuíam o número de conexões maiores que K possam vir a possuir K conexões. Desta forma, repetimos o processo de retiradas dos vértices em sucessivas iterações até que não haja mais vértices com K conexões na rede (Ver Fig. 14). Nesta

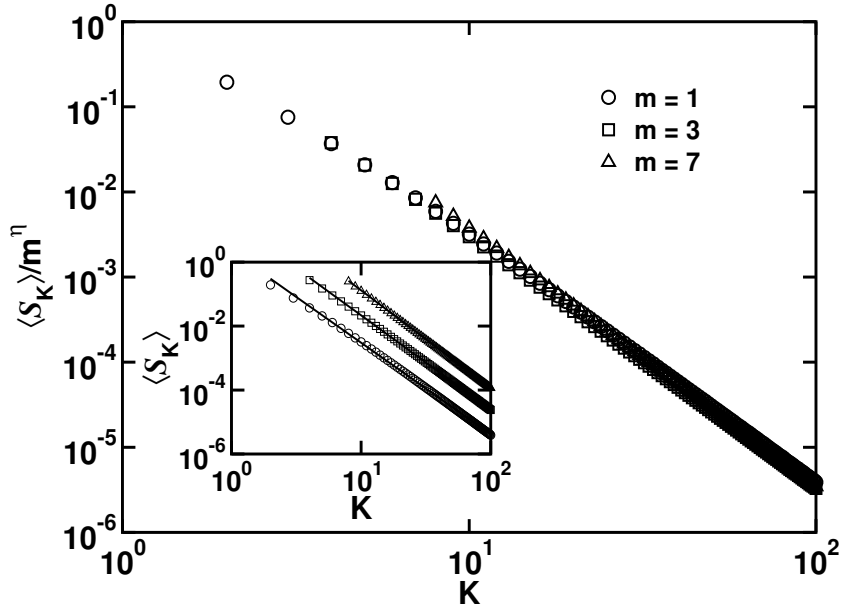


Figura 15: Decomposição de uma rede de Barabási-Albert. A simulação foi realizada em 200 amostras de redes com $N = 2^{23}$ vértices e diferentes valores de coeficiente de agregação m . Dentro do *inset* é mostrado um gráfico normalizado que representa o comportamento da fração média do total de vértices retirados $\langle S_K \rangle$ em função de K . Podemos perceber um decaimento em lei de potência com uma inclinação de aproximadamente 3.0 independente do coeficiente de agregação m . No gráfico principal é mostrado o colapso da distribuição o da fração média $\langle S_K \rangle$ por um fator de $m^{-\eta}$, onde $\eta \approx 1.8$.

situação, dizemos que a rede atingiu seu ponto de saturação e calculamos a fração total de vértices retirados S_K somando todas as frações de vértices retirados ao longo de cada iteração $s_K(t)$, ou seja,

$$S_K = \sum_{t=1}^{T_K} s_K(t) . \quad (2.10)$$

onde t é o passo de cada iteração e T_K é a quantidade total de iterações para o término do processo de remoção.

Diferentemente dos estudos envolvendo a decomposição *k-shells* e *k-core*, o método RI *k-shells* não é aplicado sucessivamente com diferentes valores de K em uma mesma rede e sempre a partir do seu estado inicial, ou seja, nunca é executado em uma rede que já tenha sofrido um processo de remoção.

A seguir apresentaremos os resultados computacionais, iniciando com a análise da distribuição da fração média do total de vértices retirados $\langle S_K \rangle$ em função do grau de conectividade K , onde verificamos que a distribuição varia como uma lei de potência do tipo $\langle S_K \rangle \sim K^{-\alpha}$, com $\alpha = 3$. Em seguida, analisamos como a fração média de vértices retirados $\langle s_K(t) \rangle$ varia ao longo de cada iteração t , verificando um decaimento exponen-

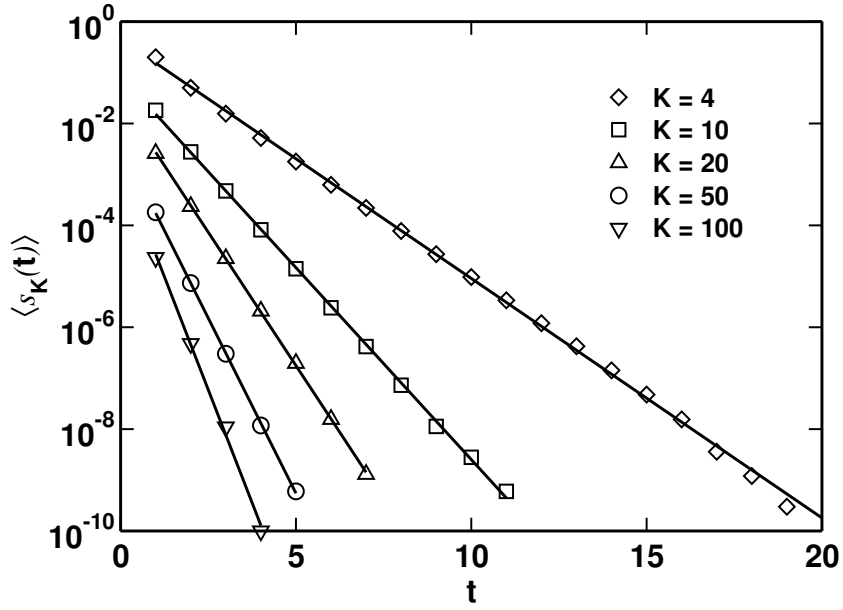


Figura 16: A fração média de massa retirada $\langle s_K(t) \rangle$ é definida como sendo a quantidade média de vértices retirada em cada instante da iteração ao longo de um processo de decomposição em um conjunto de 200 amostras com redes de tamanho $N = 2^{25}$. O gráfico mostra a distribuição de $\langle s_K(t) \rangle$ em função da iteração t para $m = 3$ e diferentes valores de K , onde podemos perceber um decaimento exponencial com inclinações λ_K . Os símbolos representam os dados computacionais e a linha contínua o ajuste exponencial.

cial, e então realizamos uma breve dedução teórica para explicar o processo iterativo. A partir daí, analisamos como a constante de proporcionalidade C_K e o tempo característico (inclinação) λ_K do decaimento exponencial varia com a conectividade K . Continuando com a análise dos resultados, utilizamos as equações encontradas para descrever o comportamento C_K e λ_K juntamente com a aproximação do somatório da equação (2.10) de uma integral da exponencial para recuperar o expoente da fração média do total de vértices retirados $\langle S_K \rangle$. Para finalizar, deduzimos a partir das equações encontradas para $\langle s_K(t) \rangle$, C_K e λ_K uma equação que se ajusta muito bem à variação da quantidade total de iterações T_K com o grau de conectividade K .

2.2.2 Resultados

A análise estatística foi realizada com vários valores de conexões fixas K em um conjunto de 200 amostras de redes de tamanho N . Por conveniência mostramos resultados para diferentes tamanhos de redes com coeficientes de agregação inicial $m = 1, 3$ e 7 , pois o comportamento é basicamente o mesmo para qualquer valor de m .

Semelhante ao que é observado na distribuição *k-shells* no modelo de decomposição

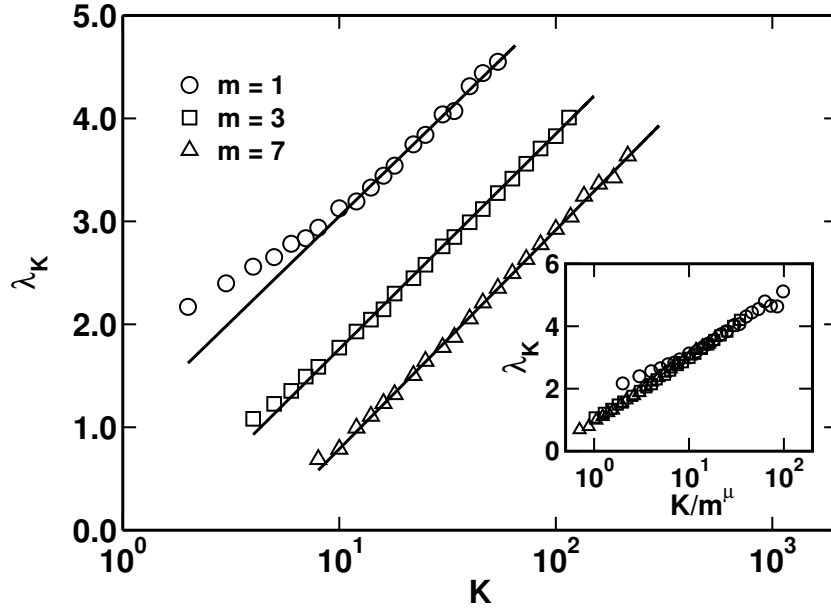


Figura 17: A figura mostra o gráfico log-linear do tempo característico λ_K em função de K em redes de tamanho $N = 23$. Cada valor de λ_K é obtido a partir da inclinação da distribuição da média da fração de vértices retirados $\langle s_K(t) \rangle$ em função do tempo de iteração t para cada valor de conexão K (ver Fig. 16). Podemos perceber o comportamento logarítmico de λ_K em função de K na forma $\lambda_K \sim \delta \ln(K)$, com $\delta = 0.89$, e diferentes $m = 1, 3$, e 7 . O *inset* mostra a sobreposição de λ_K por um fator escala $m^{-\nu}$ com $\nu = 1.25$.

k -core [46, 50, 51, 52], o *inset* da Fig. 15 mostra que a distribuição da média da fração $\langle S_K \rangle$ também varia sob a forma de lei de potência para diferentes valores de conexões K , ou seja,

$$\langle S_K \rangle \sim K^{-\alpha}, \quad (2.11)$$

onde o expoente $\alpha \approx 3$. Esse comportamento com o expoente α constante ocorre para todos os valores de coeficientes de agregação m e independe do tamanho da rede N . No gráfico principal da Fig. 15 temos um reescalonamento da fração $\langle S_K \rangle$ por um fator de $m^{-\eta}$, para $\eta \approx 1.8$, em que podemos colapsar as distribuições com os diferentes valores de m . Notemos que apesar da inclinação α ser a mesma da distribuição de conectividade da rede BA, o expoente do fator de reescalonamento η é ligeiramente diferente² [53].

O gráfico da Fig. 16 nos mostra que para $m = 3$ e para um dado valor de K fixo, a média da fração de massa retirada $\langle s_K(t) \rangle$ decai exponencialmente com cada iteração t sob a forma

$$\langle s_K(t) \rangle = C_K \exp(-\lambda_K t). \quad (2.12)$$

²O fator de escalonamento da distribuição da rede livre de escala de Albert-Barabási é igual a 2.0

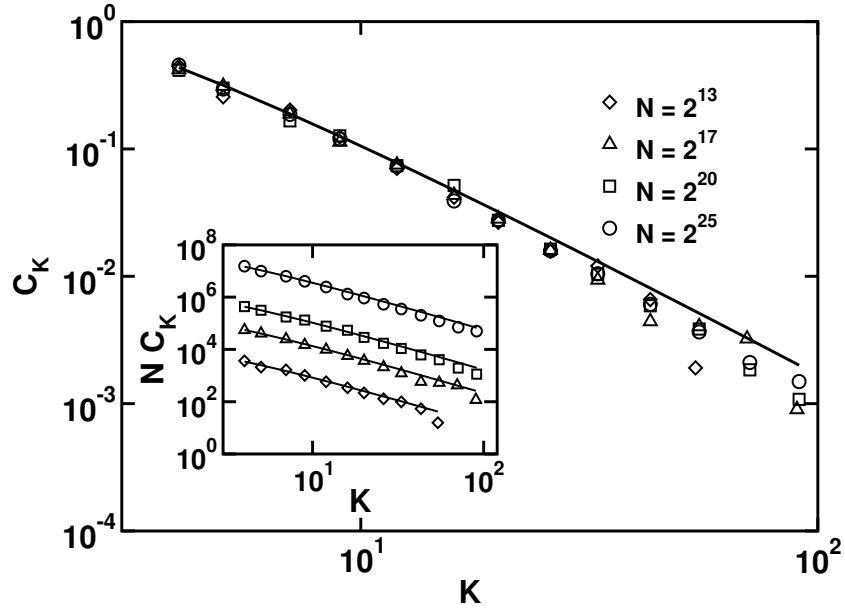


Figura 18: O gráfico acima mostra em log-log a variação C_K em função K para $m = 3$ e diferentes tamanhos de redes. A linha contínua representa o ajuste dado pela equação 2.15. O *inset* é mostrado a constante C_K multiplicado pelo seu respectivo tamanho de rede N .

Em nossas análises, o comportamento exponencial da massa retirada $\langle s_K(t) \rangle$ é o mesmo tanto para $m = 1$ quanto para $m = 7$, permitindo a generalização do decaimento exponencial para qualquer valor de m . De fato é possível concluir o decaimento exponencial para $\langle s_K(t) \rangle$ raciocinando da seguinte maneira. Suponhamos que no tempo $t = 1$, a fração de vértices retirados seja proporcional a uma fração inicial de vértices retirados, ou seja,

$$\langle s_K(1) \rangle = \frac{1}{b_K} C_K, \quad (2.13)$$

onde b_K é uma constante maior que um de modo que ela represente a retirada de vértices e C_K é uma constante que representa a fração inicial de vértices retirados do sistema. Supondo agora que a fração de vértices retirados em um tempo $t + 1$ mantenha sempre a mesma proporcionalidade de vértices retirados em relação ao passo de tempo anterior t , ou seja, $\langle s_K(t + 1) \rangle = \langle s_K(t) \rangle / b_K$, teremos como resultado um decaimento exponencial do tipo 2.12, onde $\lambda_K = \ln(b_K)$. Chegamos, portanto, a partir de suposições teóricas relativamente simples, a uma expressão que se ajusta perfeitamente aos dados obtidos a partir das simulações computacionais.

Analisando mais detalhadamente a Fig. 16, observamos que o tempo característico λ_K (Eq. 2.12) varia para diferentes valor de conexões K . A forma dessa variação é mostrada no gráfico principal da Fig. 17, onde podemos perceber o crescimento logarítmico de λ_K

em função de K na forma

$$\lambda_K = \delta \ln(K a_m) , \quad (2.14)$$

com $\delta = 0.89$. Nesse comportamento é importante notar que o parâmetro δ é praticamente o mesmo para os diferentes números de conexões iniciais m , onde a única mudança ocorre no valor da constante a_m . No *inset* da Fig. 17 mostramos a sobreposição das diferentes curvas por um fator de escala $m^{-\nu}$ com $\nu = 1.25$. Ainda analisando a Fig. 16, podemos observar que o valor da constante da fração inicial de vértices retirados C_K (Eq. 2.12) também muda à medida em que mudamos o valor da conexão K . No gráfico principal da Fig. 18 é mostrada a variação da constante C_K em função de K , onde podemos observar a sobreposição de várias curvas com diferentes tamanhos de redes N e no *inset* cada variação da constante C_K multiplicado pelo seu respectivo tamanho de rede N . O ajuste encontrado para C_K é dado por

$$C_K \sim K^{\delta-\alpha} \lambda_K. \quad (2.15)$$

Sabendo como as componentes da equação exponencial (2.12) se comportam com K , devemos agora poder de fato recuperar o expoente $\alpha = 3$ da variação de $\langle S_K \rangle$ com K (Eq. 2.10). Para isso, aproximamos o somatório (Eq. 2.10) de uma integração exponencial do tipo

$$\begin{aligned} \langle S_K \rangle &= \int_1^T \langle s_K(t) \rangle dt \\ \langle S_K \rangle &= \int_1^\infty C_K e^{-\lambda_K t} dt , \end{aligned} \quad (2.16)$$

onde podemos fazer $T \rightarrow \infty$ uma vez que λ_K e C_K são independentes do tempo de iteração t , ou seja, eles não dependem do tamanho do sistema. A integral é, portanto, facilmente calculada, resultando em

$$\langle S_K \rangle = C_K \lambda_K^{-1} K^{-\delta} . \quad (2.17)$$

Substituindo C_K na equação acima, recuperamos a lei de potência $\langle S_K \rangle$, tornando, desta forma, o método de decomposição aqui proposto auto-consistente.

Por último, podemos ainda utilizar o decaimento exponencial de $\langle s_K(t) \rangle$ (Eq. 2.12) para deduzir uma equação que descreva o comportamento da quantidade total de iterações T_K necessária para a realização de todo um processo de decomposição para um determinado grau de conexão K (limite superior do somatório 2.10). Neste sentido, consideremos que no instante T_K (última iteração) seja retirado da rede em média apenas um vértice,

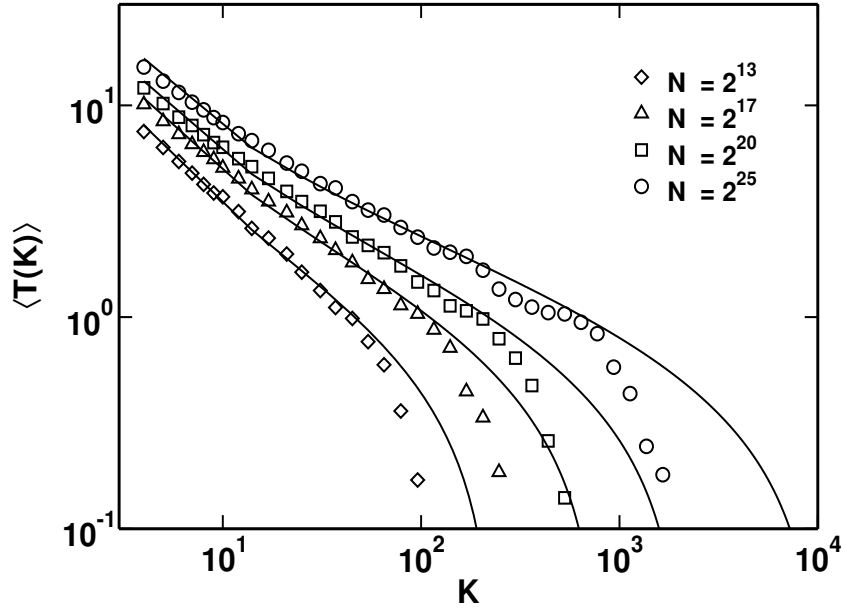


Figura 19: O gráfico mostra o tempo total médio $\langle T(K) \rangle$ necessário para o término do processo de decomposição para cada valor de K . Utilizamos diferentes tamanhos N de redes para um mesmo valor de número de conexões iniciais $m = 3$. A curva de linha contínua representa o ajuste da equação 2.20 com os parâmetros $\alpha = 3$, $\delta = 0.89$ e $a_3 = 0.72$.

com isso temos que $\langle s_K(T_K) \rangle$ será proporcional a N^{-1} , ou seja,

$$s_K(T_K) = C_K \exp(-\lambda T_K) = DN^{-1}, \quad (2.18)$$

onde D é uma constante de proporcionalidade. Isolando o tempo T_K , teremos

$$T_K = \lambda_K^{-1} \ln(C_K ND) \quad (2.19)$$

Substituindo C_K e λ_K , temos

$$T_K = \frac{1}{\delta \ln(K a_m)} \ln(NDK^{\delta-\alpha} \ln(K a_m)), \quad (2.20)$$

onde agora D é uma constante de proporcionalidade que engloba o termo de proporção da constante C_K com relação a K (Eq. 2.15) e de $\langle s_K(T_K) \rangle$ em relação ao tamanho de rede N (Eq. 2.18) e a e δ são a constante e o coeficiente de proporção logarítmica de λ_K (Eq. 2.14), respectivamente. A variação da iteração total T_K com K é mostrada na Fig. 19, onde a linha contínua representa o ajuste dado pela Eq. 2.20. Neste ajuste foram utilizados os parâmetros α , δ , a_3 e $m = 3$ fixos e um único parâmetro livre D para diferentes valores de tamanho de rede N de modo que podemos perceber uma boa concordância da equação 2.20 com os dados computacionais.

2.3 Conclusão

Em nossa primeira abordagem, analisamos a dependência da fração total média de vértices retirados $\langle S_K \rangle$ em relação ao grau de conectividade K e, então, constatamos que esta dependência segue um decaimento em lei de potência com o expoente $\alpha = 3$ (2.11). Intuitivamente, este comportamento pode até ser previsto tendo em vista o conhecimento da forma da distribuição de conectividades no modelo rede Barabási-Albert, porém, a conexão matemática entre os dois tipos de decaimento não pôde ser analiticamente deduzida neste trabalho.

Em seguida estudamos mais detalhadamente o processo iterativo da decomposição, onde analisamos como a fração de vértices retirados $\langle s_K(T_K) \rangle$ varia a cada iteração t . Verificamos, portanto, que a variação segue um decaimento exponencial (2.12) e deduzimos teoricamente este decaimento supondo apenas que a quantidade de vértices que serão retirados em um dado instante de tempo é proporcional à quantidade de vértices retirados no passo de tempo anterior. Depois observamos que os parâmetros C_K e λ_K do decaimento exponencial mudam para cada valor de K , sendo possível na continuação de nossas análises estabelecer equações que descrevem com boa aceitação o comportamento de C_K (2.15) e λ_K (2.14) em função de K .

Com o conhecimento detalhado do processo iterativo, foi possível verificar a auto-consistência dos resultados de duas maneiras diferentes. Primeiramente, realizamos a integração analítica da equação exponencial encontrada para $\langle s_K(T_K) \rangle$ (2.16), onde foi possível recuperar o mesmo expoente $\alpha = 3$ calculado computacionalmente para $\langle S_K \rangle$ em função de K (2.11). A segunda verificação foi deduzir a partir da equação encontrada para $\langle s_K(T_K) \rangle$ uma equação que descrevesse o comportamento da quantidade total de iterações para o término de um dado processo de decomposição (2.20).

Como resultado final de nosso trabalho, temos a constatação de que o modelo de decomposição proposto é auto-consistente com os seus resultados. Isto se deve basicamente à observação de que todos os expoentes aqui encontrados tanto estão relacionados entre si quanto são invariantes em relação à mudança dos parâmetros iniciais de construção da rede, definindo assim uma classe de universalidade.

3 PERCOLAÇÃO EM MULTI-CAMADAS

Neste capítulo apresentaremos os estudos realizados para determinar quais as mudanças ocorridas nas propriedades de transporte de fluido devido à presença da anisotropia. Mais precisamente, utilizamos o modelo rede de percolação em multi-camadas com diferentes densidades para gerar *backbones*¹ anisotrópicos no ponto crítico. A flexibilidade do modelo nos permitiu observar uma forte relação entre o grau de anisotropia e os diferentes valores da dimensão fractal e expoente da distribuição de massa. Este e outros estudos estão contidos neste capítulo, o qual está inicialmente organizado com uma introdução ao modelo de percolação isotrópica (3.1). Em seguida (3.2) definimos mais rigorosamente o modelo de percolação em multi-camadas, discutimos o problema dos erros causados efeito de tamanho finito na determinação dos expoentes críticos e propomos um novo método para a minimização destes erros. Por fim, encerramos o capítulo com a apresentação dos nossos resultados (3.3) e conclusões (3.4).

3.1 Percolação

Muitos sistemas físicos que envolvem fenômenos de escoamento em meios porosos tem atraído não somente o interesse industrial como também o científico. Por parte da indústria, o interesse se dá por exemplo na busca de materiais capazes de filtrar e selecionar partículas de diferentes tamanhos sujeitas a algum processo de escoamento, no desenvolvimento produtos com variados índices de permeabilidade ou ainda em processos de extração de fluidos de algum meio poroso. Já o interesse científico está na elaboração de teorias que podem servir não apenas para o entendimento do processo de escoamento, mas também para uma diversidade de fenômenos físicos que vão desde a mecânica estatística de

¹O *backbone*, cuja palavra pode ser traduzida como esqueleto condutor, são estruturas sob a qual há o transporte efetivo de fluidos em um meio percolante. A definição precisa do *backbone* está na seção 3.1.2 deste capítulo.

sistemas no ponto crítico até modelos de propagação de epidemias e queimadas florestais.

Um exemplo clássico e de grande interesse econômico ligado ao escoamento em meios porosos é o processo de extração de petróleo. Comumente temos nos métodos de extração petrolífera a utilização de injeção de água ou gás (geralmente dióxido de carbono ou metano) em um ou mais poços de maneira que o petróleo seja deslocado através dos poros das rochas até o poço de extração. Este processo continuará até que a interface de separação dos fluidos (água ou gás e petróleo) alcance o poço de extração, onde a partir daí a retirada do petróleo passará a diminuir. Devido à produção industrial de larga escala, a busca por métodos mais eficazes e baratos na produção de petróleo tem atraído um grande interesse dos pesquisadores e principalmente da própria indústria. Em particular, desenvolver um conhecimento mais aprimorado sobre a dinâmica de injeção de fluidos é de fundamental importância, já que o tempo relacionado à injeção está intimamente ligado à quantidade de petróleo retirado.

Uma característica que está presente no exemplo acima e em outros vários sistemas que envolve processos de escoamento é a desordem associada ao meio poroso, que torna a geometria espacial do sistema não trivial. Dependendo do tipo de desordem, um sistema poderá ser classificado como homogêneo ou heterogêneo. A diferença crucial entre os dois tipos de sistemas é que no homogêneo haverá uma escala típica na qual as propriedades intensivas² poderão ser medidas e válidas para uma parte ou totalidade do sistema. Já no heterogêneo a escala típica será inexistente, fazendo com que a compreensão das propriedades físicas estejam condicionadas ao conhecimento detalhado da morfologia do meio.

Neste contexto, a teoria da percolação tem alcançado um grande grau de aceitação devido principalmente à simplicidade em sua definição e à presença de transição de fases com expoentes críticos bem definidos. Foi inicialmente proposta por Broadbent e Hammersley, nos anos 50, como um modelo matemático para descrever a propagação de fluidos em meios aleatórios [54]. Para um simples exemplo deste tipo de propagação, imagine-mos um material sólido com poros em seu interior distribuídos aleatoriamente. Temos que se a porosidade do meio for suficientemente grande, os poros poderão se conectar ao longo de todo material, tornando-o permeável à passagem de algum tipo fluido. Nesta situação, um fluido poderá escoar através dos poros por todo material, ocorrendo assim uma percolação no sistema. Vale salientar ainda que neste tipo de processo, a desordem

²Propriedades intensivas são propriedades que não dependem do tamanho do sistema. No entanto, devido à ocorrência de flutuações intrínsecas ao sistema estatísticos, algumas propriedades intensivas só farão sentido a partir de uma determinada escala típica.

está unicamente associada ao meio, sendo a dinâmica do fluido um processo totalmente determinístico.

O modelo de percolação consiste em estudar processos de escoamento, propagação, transporte etc. em uma rede formada a partir de uma rede inicial da qual as conexões são removidas com uma probabilidade p . Neste tipo de rede podemos identificar por exemplo os sítios com os poros, as conexões com as ligações existentes entre cada par de poro e p a porosidade do meio. O modelo de rede mais simples de ser estudado é o de uma rede quadrada de primeiros vizinhos onde a existência de cada conexão é escolhida igual e independentemente com probabilidade p . A questão fundamental na teoria da percolação é, portanto, determinar a probabilidade $P(p)$ a partir da qual é possível haver um *cluster*³ infinito, ou seja, haver um sítio pertencente a um único aglomerado de sítios conectados capaz de abranger toda a extensão de uma rede. Tal questão é de suma importância, pois a existência de um *cluster* infinito é a condição necessária para a ocorrência de percolação.

Ao analisarmos os extremos da probabilidade p , podemos perceber claramente que para $p = 0$ não haverá nenhuma conexão na rede, o que resultará em $P(0) = 0$, enquanto para $p = 1$ a rede estará totalmente conectada, resultando em $P(1) = 1$. Também é fácil perceber que a probabilidade $P(p)$ é uma função crescente de p , pois quanto maior o número de conexões na rede, maiores são as chances de haver um *cluster* infinito. Desta forma, podemos concluir que a probabilidade $P(p)$ de ocorrer este tipo de *cluster* será dada a partir de um certo valor de probabilidade $p = p_c$, chamada de probabilidade crítica, tal que para $p < p_c$ temos $P(p) = 0$ e para $p > p_c$ temos $P(p) > 0$. Como resultado final desta nossa pequena análise, temos que o sistema possuirá comportamentos globais completamente diferentes tanto para $p < p_c$ quanto para $p > p_c$ e, conseqüentemente, apresentará uma transição de fase no limite $p = p_c$.

A presença de transição de fase no modelo de percolação atraiu grande atenção dos físicos tanto pela facilidade em analisar várias propriedades importantes próximas do ponto crítico quanto pela possibilidade destas propriedades servirem por analogia para análises de propriedades críticas de outros sistemas mais complexos. Como exemplos, podemos citar a magnetização dos materiais ferromagnéticos ou a resistência efetiva de uma rede elétrica desordenada. Uma característica muito marcante na teoria da percolação é que grande parte das propriedades analisadas se comportam como uma lei de potência, com expoentes críticos bem estabelecidos e definindo uma classe de universalidade que depende apenas da dimensão do modelo de rede utilizado. Na tabela 4 mostramos alguns valores

³Um *cluster* é formado por um aglomerado de sítios conectados de tal forma que seja possível obter um caminho ininterrupto entre dois pares quaisquer de sítios pertencentes ao mesmo aglomerado.

Rede	Sítios	Ligações
Quadrada	0.59275	0.5
Triangular	0.5	0.652
Cúbica	0.3116	0.2488

Tabela 4: Tabela contendo valores de probabilidades críticas para diferente tipos de redes [55].

de probabilidades críticas p_c para diferentes tipos de redes [55].

Neste capítulo temos por objetivo demonstrar o efeito das multi-camadas na distribuição de massa e na dimensão fractal na distribuição dos tamanhos dos *backbones*. Entretanto, faremos antes uma breve introdução ao modelo de percolação e ao método do perímetro, que será importante para determinar a probabilidade crítica p_c das multi-camadas. Por último, é importante esclarecer os termos isotrópico e anisotrópico aqui empregados. Em um modelo de percolação isotrópica a probabilidade p é a mesma em todas as direções enquanto que no modelo anisotrópico a probabilidade p é diferente.

3.1.1 Modelo de Percolação

Desde a sua criação, o modelo de percolação tem sido adaptado para vários tipos de sistemas diferentes. O mais comum deles é definir, sem perda de generalidade, o modelo como uma rede formada por sítios (Fig. 20(a)). Desta forma, para obtermos uma rede de percolação devemos alocar os sítios na rede com uma probabilidade p de eles existirem e $1 - p$ de não existirem. Desde que os sítios sejam distribuídos aleatoriamente, haverá uma possibilidade de que alguns deles sejam alocados juntos, passando a formar *clusters*. Os tamanhos destes *clusters* aumentam à medida em que aumentamos o valor da probabilidade p . Neste processo, ao atingirmos valor crítico $p = p_c$, teremos a formação de um *cluster*, chamado de *cluster percolante ou infinito*, capaz de se ramificar e alcançar toda a extensão da rede, tornando possível a conexão entre lados opostos.

A figura 20 mostra três simulações computacionais para o modelo de rede quadrada de sítios com ligações entre os primeiros vizinhos (Fig. 20(a)) para diferentes valores de probabilidades p . Quando a probabilidade de ocupação é baixa ($p < p_c$) temos a formação de pequenos *clusters* finitos e quando ela é alta ($p > p_c$) temos a formação de um *cluster* percolante que ocupa quase que a totalidade da rede. Já para o caso em que a probabilidade é crítica ($p = p_c$), temos um comportamento bastante peculiar, que é a formação tanto do *cluster* percolante quanto de *clusters* finitos de tamanhos variados. A

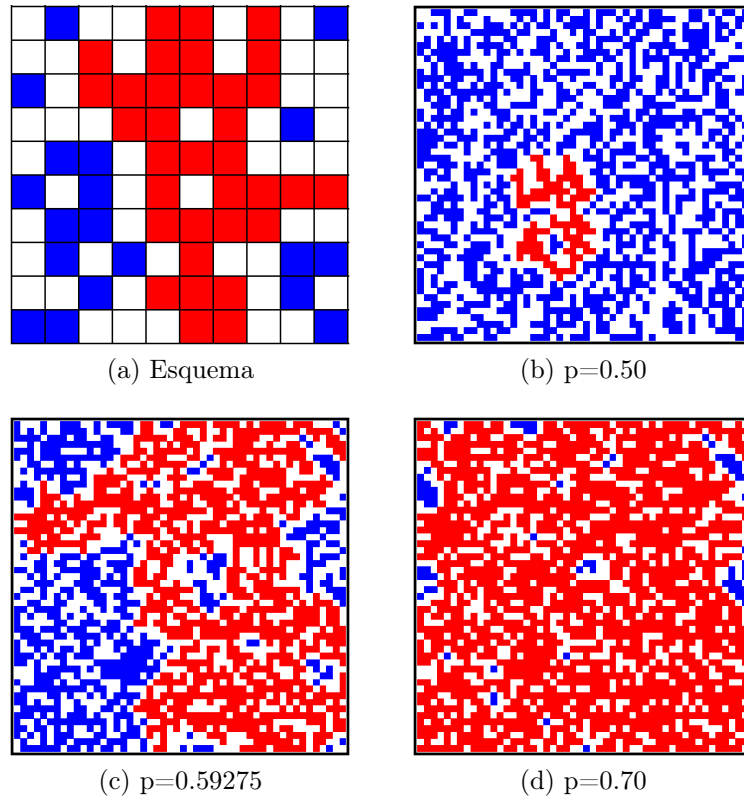


Figura 20: Conjunto de quatro figuras ilustrativas do modelo de percolação. a) Esquema de percolação por sítios de uma rede quadrada 10×10 de primeiros vizinhos, onde os sítios azuis representam os *clusters* finitos, o vermelho e o *cluster* percolante os brancos os sítios vazios; b), c) e d) são figuras de simulações de uma rede quadrada 50×50 com diferentes probabilidades de ocupação p , onde em c) e d) as cores seguem a mesma representação de a) enquanto que em b) a cor vermelha representa o maior *cluster* finito da rede e o azul os demais.

distribuição do tamanho destes *clusters* finitos segue uma lei de potência cuja principal característica é a existência de *clusters* de todos os tamanhos, fato que implica na falta de uma escala típica para o sistema [56]. Na Fig. 21 é mostrado um exemplo de rede quadrada de sítios na probabilidade crítica $p = p_c = 0.59275$.

Na seção anterior definimos a probabilidade $P(p)$ como a probabilidade de um sítio pertencer a um aglomerado que alcance toda a extensão de uma determinada rede. Na prática, esta probabilidade pode ser definida como sendo a fração de sítios pertencentes ao maior *cluster* da rede. Definindo $P(L, p)$ como sendo esta fração para cada tamanho L de rede, temos que a probabilidade $P(L, p)$ converge para um valor limite quando o tamanho da rede for muito grande, ou seja,

$$P_\infty(p) = \lim_{L \rightarrow \infty} P(L, p). \quad (3.1)$$

Temos que se $P_\infty(p) \neq 0$, então o *cluster* percolante existe e possui uma fração finita da

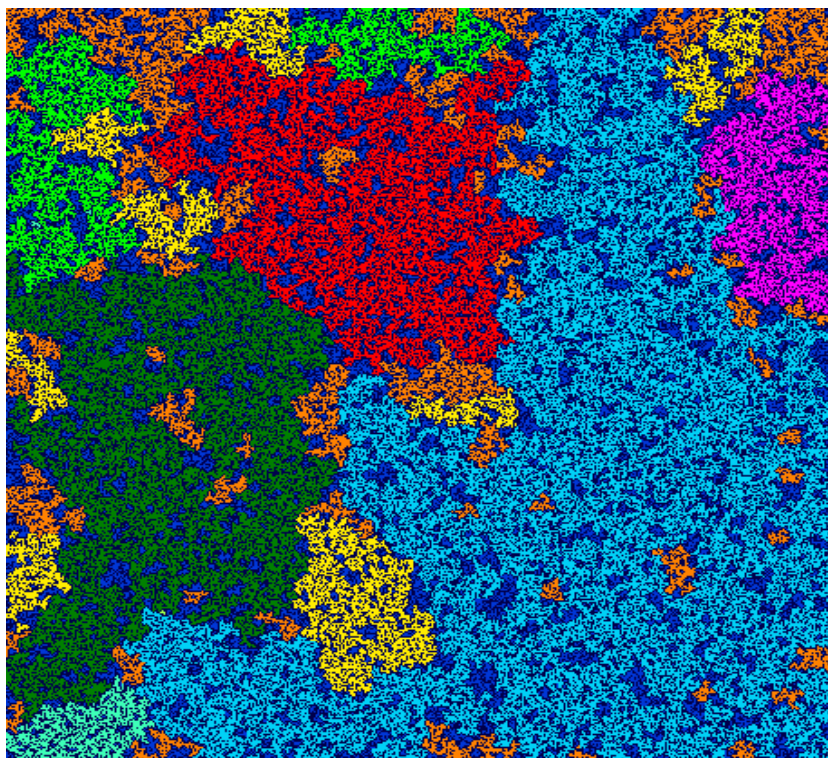


Figura 21: Ilustração de uma rede quadrada $L \times L$ de percolação. A rede foi gerada no ponto crítico $p = p_c = 0.59275$ e com $L = 500$. O *cluster* percolante é identificado pela cor azul claro, os maiores *clusters* finitos são representados na ordem decrescente pelas cores verde escuro, vermelho, rosa, verde claro, amarelo, laranja, os demais por azul escuro e os desocupado por preto. Através das cores, podemos perceber que no ponto crítico existem *clusters* de todos os tamanhos.

rede. Definimos, portanto, a massa $M(L, p)$ como sendo a quantidade de sítios pertencentes ao *cluster* percolante, L^d como o tamanho da rede e d a dimensão topológica do sistema. Desta forma, podemos definir a probabilidade $P_\infty(p)$ como

$$P_\infty(p) = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{M(L, p)}{L^d}. \quad (3.2)$$

Se $P_\infty(p) \neq 0$, teremos a partir do resultado acima que

$$M(L, p) \propto L^d, \text{ para } L \rightarrow \infty. \quad (3.3)$$

Isto nos diz que a massa do *cluster* percolante e o número total possível de sítios da rede escalonam da mesma forma, resultando numa homogeneidade na distribuição de massa por toda a rede (a massa se distribui igualmente por toda a rede). Podemos, agora, definir mais precisamente a probabilidade crítica p_c como sendo o maior valor de p para o qual $P_\infty(p) = 0$. Dada esta definição, temos que em torno de p_c a probabilidade $P_\infty(p)$ se

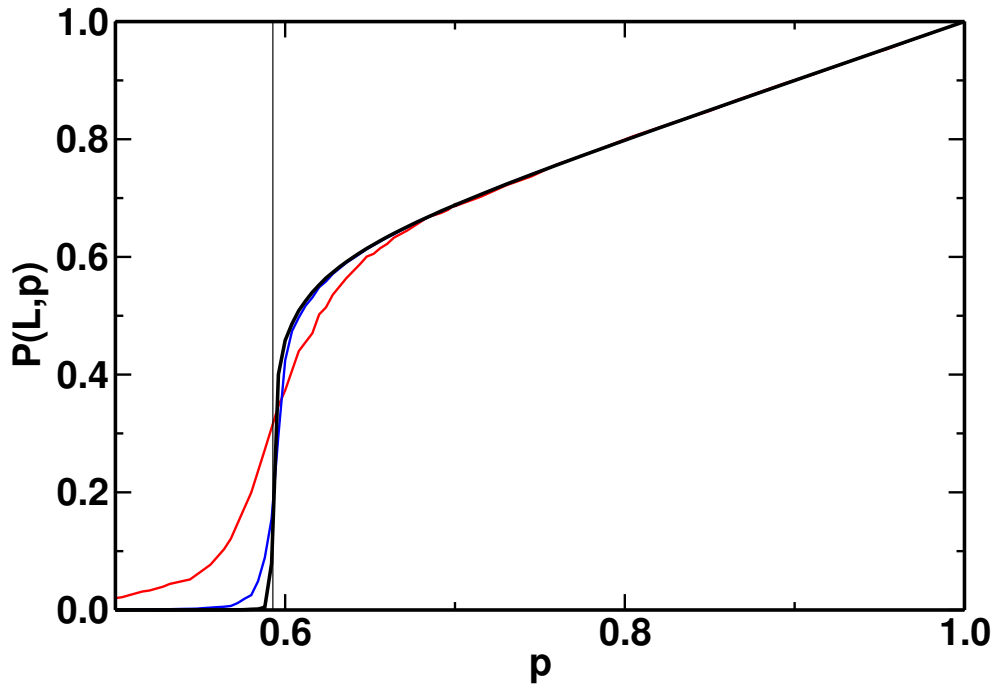


Figura 22: Gráfico que representa a probabilidade de haver um cluster percolante $P_\infty(p)$ em função da probabilidade de sítios ocupados p . As curvas foram obtidas a partir de uma rede quadrada $L \times L$ com $L = 10^2$ (linha vermelha), $L = 10^3$ (linha azul), $L = 10^4$ (linha preta). A linha vertical serve de referência no ponto $p = p_c = 0.59275$.

comporta como uma lei de potência, ou seja,

$$M(L, p) \propto |p - p_c|^\beta, \quad \text{para } p \rightarrow p_c, \quad (3.4)$$

com o expoente β dependendo apenas da dimensão topológica d , como por exemplo $\beta = 5/36$ para $d = 2$ e $\beta = 0.41$ para $d = 3$ [55].

Os gráficos da Fig. 22 mostram o comportamento da probabilidade $P_\infty(p)$ em função de p para diferentes tamanhos de rede $L \times L$. Os dados foram obtidos selecionando sempre o maior *cluster* de cada realização de um total de 1000 e, então, calculando média de $P_\infty(p)$ a partir da Eq. (3.2) com $d = 2$. Partindo de $p = 0$, percebemos que para baixos valores de p a probabilidade $P_\infty(p)$ é praticamente nula. Entretanto, à medida que p cresce e se aproxima de $p_c = 0.59275$ o comportamento de $P_\infty(p)$ cresce de forma considerável até que em $p \simeq p_c$ acontece um crescimento abrupto em $P_\infty(p)$, mais adiante, para p um pouco acima de p_c , a probabilidade $P_\infty(p)$ cresce de maneira praticamente linear até $P(p = 1) = 1$. Podemos observar que no aumento do tamanho L da rede, a transição de fase vai se tornando cada vez mais abrupta em $p_c = 0.59275$, levando à conclusão de que seu limite é atingido quando $L \rightarrow \infty$.

Acabamos de ver como a massa do *cluster* percolante se comporta em função da

probabilidade de ocupação p mantendo o tamanho da rede fixo. No entanto, como seria o comportamento da massa se invertermos nossa abordagem e analisássemos a massa em função do tamanho da rede L mantendo a probabilidade p fixa? Se considerarmos o caso em que $p > p_c$, o *cluster* percolante se comportará aproximadamente como a Eq. (3.3), sendo a proporcionalidade substituída pela probabilidade $P_\infty(p)$ de encontrarmos o *cluster* percolante, ou seja, $M(L, p) \simeq P_\infty(p)L^d$. Para $p < p_c$, temos a inexistência do *cluster* percolante, porém, analisando apenas a massa do maior *cluster* da rede, constatamos um crescimento logarítmico da forma $M(L, p) \sim \ln(L)$. Quando $p = p_c$ o sistema se encontrará no ponto crítico e o crescimento da massa se caracterizará por um crescimento em lei de potência na forma $M(p_c) \sim L^{D_f}$, sendo D_f é a dimensão fractal do sistema. Este expoente depende apenas da dimensão topológica do sistema, como por exemplo $D_f = 1.89$ e $D_f = 2.53$ para redes em duas e três dimensões, respectivamente. A Fig. 23(a) mostra o comportamento da massa em função do tamanho da rede L para os três regimes de probabilidade p .

Em sistemas auto-similares não é possível distinguir a totalidade das suas partes constituintes, gerando, assim, uma invariância de escala. Matematicamente essa invariância é descrita por uma lei de potência cujo expoente é denominado de dimensão fractal. Uma das consequências diretas da auto-similaridade para a teoria da percolação é que no ponto crítico a distribuição de massa dos *clusters* será sempre a mesma (exceto por um *cutoff* de tamanho finito) não importando a escala observada. Na prática, uma das maneiras de se constatar esta igualdade é através do cálculo da distribuição de massa pelo método *finitary size scale* [56] para o *cluster* percolante e o método do raio de giração [56] para os *clusters* finitos (Fig. 23).

O estudo ligado ao modelo de percolação é realmente um campo muito vasto na física e discutir os seus múltiplos aspectos não é, aqui, nossa intenção. Na seção seguinte faremos apenas uma breve abordagem a respeito de *backbones* em redes isotrópicas como uma introdução ao foco principal deste capítulo, que são *backbones* em multi-camadas.

3.1.2 Backbone

Em sistemas físicos reais, temos que nem todo o espaço ocupado pelo meio percolante é realmente acessível ao processo de escoamento. Como exemplo, podemos citar os processos de infiltrações, onde há um caminho preferencial seguido pelo fluido, ou ainda a extração de petróleo, que apesar do meio rochoso estar conectado como um todo, há regiões onde o petróleo não poderá ser deslocado. A partir destas e de várias outras situações, podemos

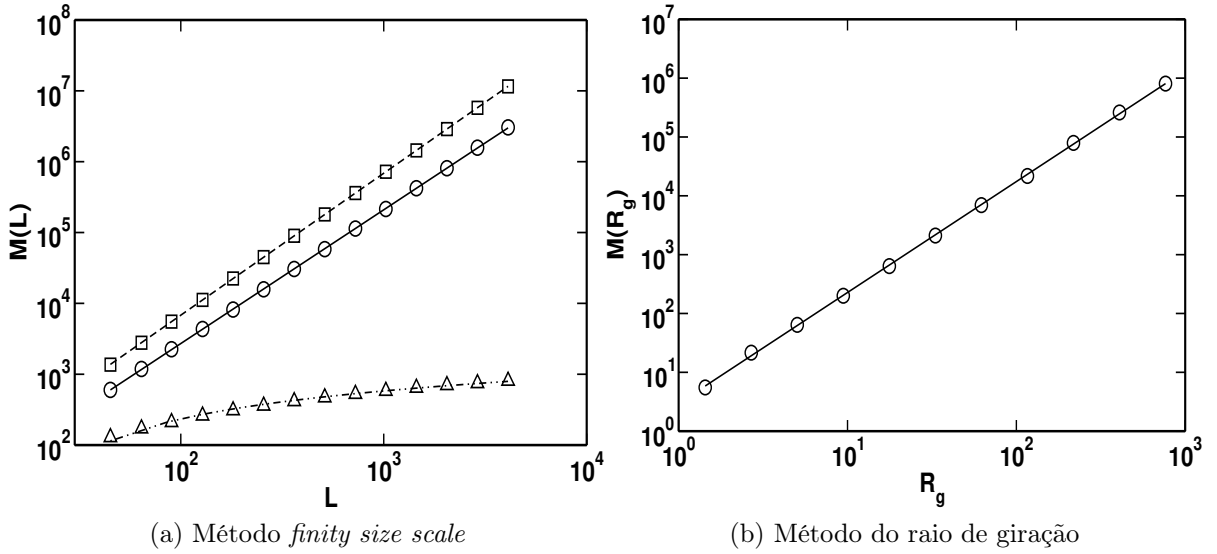


Figura 23: Gráfico que mostra o comportamento da distribuição de massa dos *clusters* para vários níveis de tamanhos com três probabilidades p diferentes. Em a) temos o método *finity size scale* que determina em função do tamanho da rede L o comportamento da massa do maior *cluster* com probabilidade de ocupação $p = 0.5$ (triângulos) e do *cluster* percolante com probabilidades $p = p_c = 0.59275$ (círculos) e $p = 0.7$ (quadrados). A linha pontilhada com traços (triângulos) representa o ajuste logarítmico e a linha contínua (círculos) e a tracejada (quadrados) os ajustes em lei de potência com expoentes $D_f \approx 1.89$ e $D \approx 2.0$, respectivamente. Cada ponto foi obtido a partir de uma média de 1000 amostras. Em b) temos o método do raio de giração que determina a massa do *cluster* finito em função do tamanho do seu raio médio. Cada ponto foi obtido a partir da média da massa de todos os *clusters* (apenas os que não tocam nas bordas) contidos em um intervalo logarítmico de raio médio e a linha contínua representa um ajuste em lei de potência com o expoente $D_f \approx 1.89$. A simulação foi realizada utilizando uma rede quadrada $10^4 \times 10^4$ com probabilidade de ocupação $p = p_c = 0.59275$.

perceber o quanto é importante conhecermos quais as propriedades e características estão associadas à propagação de fluidos em meios percolantes.

Sabemos que para que haja deslocamento de fluido em algum meio é necessária a aplicação de uma diferença de pressão entre dois ou mais pontos. No entanto, em um *cluster* percolante poderão eventualmente existir regiões em que não seja possível haver diferença de pressão, como aquelas regiões que se conectam ao agregado percolante apenas por uma ligação. Neste caso, a região terá o ponto de entrada, mas não o ponto de saída (Fig. 24(a)), tornando-se, assim, uma região morta ou estagnada. A parte do *cluster* em que é possível haver fluxo é chamada de *backbone*, podendo ser definida como a união de todos os caminhos que não cruzam a si mesmos, chamados de *self-avoiding walk*, capazes de conectar os pontos de entrada e saída de fluidos. Para exemplificar, a Fig. 24(b) mostra o resultado de uma simulação de um *backbone* sob um *cluster* percolante no ponto

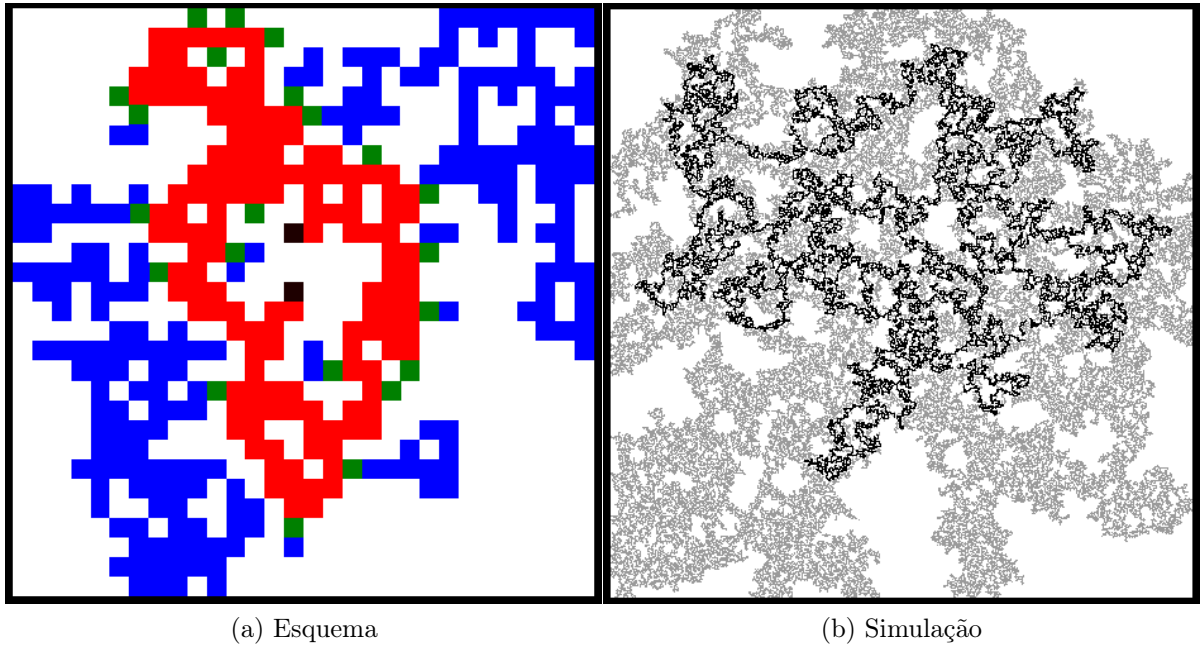


Figura 24: Ilustração de *backbone* sob *cluster* percolante gerado em uma rede quadrada. Em a) temos um exemplo esquemático onde *backbone* são os sítios vermelhos e o *cluster* percolante os azuis. A entrada e saída de fluido são representados pelos sítios de cor preta e os sítios verdes representam a conexão entre regiões estagnadas ao restante do *cluster*. Em b) mostramos uma simulação em uma rede 500×500 de um *backbone* de cor preta sob um *cluster* percolante de cor cinza.

crítico p_c gerado em uma rede quadrada 500×500 .

Vimos na seção anterior que no ponto crítico a massa do *cluster* percolante possui uma dimensão fractal quando relacionada ao crescimento do tamanho do sistema. Desta forma, é natural pensar que este comportamento fractal também se reflita nas propriedades do *backbone*. No trabalho desenvolvido por Grassberger [59], pode-se constatar que a massa do *backbone* M_B cresce em função do tamanho do sistema como uma lei de potência com o expoente $D_B = 1.6432 \pm 0.0008$. Na Fig. 25(a) é mostrada a distribuição de pontos (círculos) que representa a massa média do *backbone* em função do seu raio de giração R_g , onde a inclinação nos dá com boa precisão a dimensão fractal do *backbone* ($D_B = 1.638 \pm 0.006$). Uma importante análise é saber como a massa do *backbone* varia com as componentes do raio de giração R_g . Pela definição temos que

$$\begin{aligned}
 R_g^2 &= \frac{1}{S} \sum_{i=1}^S (\vec{r}_i - \vec{r}_{cm})^2 \\
 &= R_{gx}^2 + R_{gy}^2,
 \end{aligned} \tag{3.5}$$

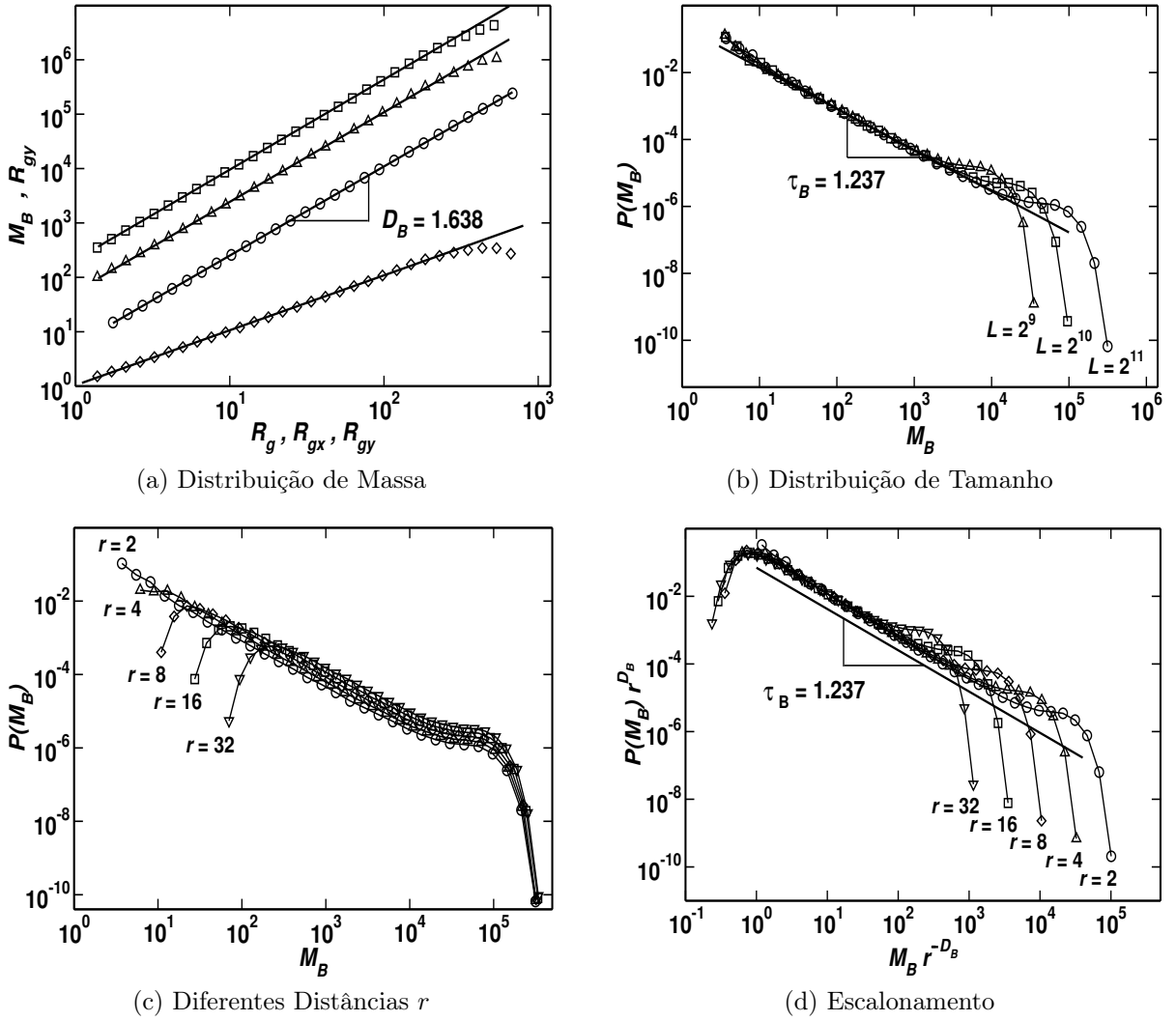


Figura 25: Gráficos que mostram os comportamentos críticos da massa do *backbone* em uma rede quadrada ($L \times L$). Em a) temos a distribuição da massa média M_B (para $r = 2$ e $L = 2^{11}$) em função do seu raio de giração R_g (círculos) e em função das componentes R_{gx} (triângulos) e R_{gy} (quadrados) do raio de giração. Para uma melhor visualização, multiplicamos por 5 e 20 as distribuições de massa das componentes R_{gx} e R_{gy} , respectivamente. Podemos perceber os comportamentos nas formas $M_B \sim R_g^{D_B}$, $M_B \sim R_{gx}^{D_{Bx}}$ e $M_B \sim R_{gy}^{D_{By}}$, onde as linhas contínuas representam os ajustes com inclinações $D_B = 1.638 \pm 0.006$, $D_{Bx} = 1.646 \pm 0.007$ e $D_{By} = 1.65 \pm 0.008$. Os pontos representados por diamantes mostram a componente R_{gy} em função de R_{gx} , onde podemos perceber uma relação em lei de potência com expoente D_{Bxy} aproximadamente igual a 1.0. Em b) temos a probabilidade de distribuição de massa do *backbone* para $r = 2$, que decai como uma lei de potência na forma $P(M_B) \sim M_B^{-\tau_B}$ seguida por um pequeno platô e depois por um *cutoff* com decaimento abrupto. A linha contínua representa o ajuste com inclinação $\tau_B = 1.237 \pm 0.02$ e os símbolos representam os diferentes tamanhos de redes ($L \times L$). Em c) mostramos a probabilidade de distribuição de massa $P(M_B)$ para diferentes tamanhos de $r = 2, 4, 8, 16$ e 32 e em d) o escalonamento pelos fatores r^{D_B} no eixo $P(M_B)$ e r^{-D_B} no eixo M_B . Nos itens c) e d) usamos redes de tamanho $L = 2^{11}$ e em todos os itens foram utilizados 10^5 amostras.

onde S é a quantidade de sítios do *backbone*, \vec{r}_i a posição de cada sítio na rede, \vec{r}_{cm} o centro de massa do *backbone* e

$$R_{gx}^2 = \frac{1}{S} \sum_{i=1}^S (\vec{r}_x - \vec{r}_{xcm})^2 \quad , \quad R_{gy}^2 = \frac{1}{S} \sum_{i=1}^S (\vec{r}_y - \vec{r}_{ycm})^2 \quad (3.6)$$

as componentes x e y , respectivamente. Sabendo que $M_B \sim R_g^{D_B}$, $M_B \sim R_g^{D_{Bx}}$ e $M_B \sim R_g^{D_{By}}$, temos

$$M_B^{2/D_B} = P M_B^{2/D_{Bx}} + Q M_B^{2/D_{By}} \quad , \quad (3.7)$$

onde P e Q são constantes de proporcionalidades. Rearranjando os expoentes, teremos

$$M_B^{2/D_B} = M_B^{1/D_{Bx}+1/D_{By}} (P M_B^{1/D_{Bx}-1/D_{By}} + Q M_B^{-1/D_{Bx}+1/D_{By}}) \quad . \quad (3.8)$$

Como o meio é isotrópico, é razoável concluir que a massa do *backbone* não tenha uma direção preferencial para se distribuir, ou seja, a massa cresce igualmente para ambas as direções com o mesmo expoente crítico $D_{Bx} = D_{By}$. Devido a esta igualdade, teremos que a subtração dos expoentes da equação 3.8 será nula, o que resultará em sua linearidade e consequentemente na relação

$$\frac{2}{D_B} = \frac{1}{D_{Bx}} + \frac{1}{D_{By}} \quad . \quad (3.9)$$

A equação 3.9 estabelece que $D_B = D_{Bx} = D_{By}$, o que de fato pode ser comprovado numericamente. Na figura 25(a) mostramos a massa do *backbone* M_B em função das componentes x (triângulos) e y (quadrados), onde podemos perceber que ambas são praticamente paralelas entre si ($D_{Bx} = 1.646 \pm 0.007$ e $D_{By} = 1.65 \pm 0.008$) e entre a distribuição de massa em função do raio de giração (círculos) ($D_{By} = 1.638 \pm 0.006$). Para uma melhor visualização dos resultados, deslocamos a distribuição de massa na direção x por um fator de $5M_B$ e na direção y por um fator de $20M_B$. Por fim, é também interessante saber como as componentes se relacionam à medida em que a massa do *backbone* cresce. Na figura 25(a) (diamantes) mostramos que a componente R_{gy} cresce como uma lei de potência em relação a R_{gx} , cujo expoente D_{Bxy} é igual a 1.0. Este comportamento é coerente com o fato da distribuição do *cluster* não ter um direção preferencial, pois para um dado tamanho de *cluster*, temos em média o mesmo comprimento na direção x e y . A igualdade entre os expoentes $D_B = D_{Bx} = D_{By}$ mostra não apenas o aspecto da invariância de escala do comportamento fractal do *backbone* crítico como também o seu aspecto de auto-similaridade estatística, que é reflexo da característica anisotrópica do sistema.

Outra propriedade importante é a probabilidade de distribuição de tamanhos de massa

backbone $P(M_B)$, que se comporta como uma lei de potência do tipo $P(M_B) \sim M_B^{-\tau_B}$. A partir dos estudos realizados por Herrmann e Stanley [60], é possível demonstrar por um processo de integração simples que o expoente τ_B está relacionado com a dimensão espacial do meio D e a dimensão fractal do *backbone* D_B sob a forma $\tau_B = D/D_B$ [61], onde para o caso bidimensional ($D = 2$) temos $\tau_B \sim 1.22$. Na Fig 25(b) podemos observar que o valor encontrado numericamente $\tau_B = 1.237 \pm 0.02$ é coerente com a relação anterior. O decaimento de $P(M_B)$ ocorre até encontrar um pequeno platô seguido de um decaimento abrupto devido ao limite do tamanho do sistema. Temos ainda leis de escalonamento para distribuições de $P(M_B)$ quando o *backbone* é gerado com diferentes distâncias r muito menor que o tamanho do sistema, neste caso Barthélémy *et al* [61] mostram que o fator de escala é dado por r^{D_B} (Ver Figs. 25(c) e 25(d)).

O *backbone* crítico é uma estrutura contida dentro de outra estrutura crítica, o *cluster* percolante. A partir disto, podemos esperar que as mudanças provocadas na estrutura do *cluster* devido à presença de multi-camadas [62] também se reflitam nas propriedades do *backbone*, como veremos na seção de multi-camadas mais adiante.

3.1.3 Método *Self-Avoiding Random Walk*

No modelo de percolação, o perímetro é definido como sendo um caminho contínuo dos sítios ocupados nas fronteiras de um *cluster*, podendo ser externo (se for ao redor do *cluster*) ou interno (contorno dos buracos dentro do *cluster*). Em seu trabalho, Sapoval *et al* [57] estabeleceram que a dimensão fractal do tamanho de perímetro D_H de uma rede isotrópica ($D_H = 1.75$ para redes quadradas) está relacionada com o expoente de correlação ν por $D_H = 1 + 1/\nu$, tornando, assim, possível o estudo das propriedades de percolação pela análise direta do comportamento do perímetro. Este fato é muito importante, pois possibilita o desenvolvimento de métodos de simulação computacional mais rápidos e precisos já que as informações associadas à massa do cluster não precisam mais ser nem guardadas nem analisadas.

Neste contexto, Ziff *et al* [58] desenvolveram um algoritmo eficiente para o cálculo mais preciso da probabilidade crítica de uma rede quadrada de primeiros vizinhos, chamado de método *Self-Avoiding Random Walk*⁴ (SARW). Este algoritmo permite uma considerável redução tanto no custo de memória (possibilitando a criação de redes muito grandes) quanto no tempo de simulação. O método simula em uma rede quadrada apenas a criação

⁴Um tradução livre para o termo *Self-Avoiding Random Walk* seria caminhante aleatório auto-excludente

do perímetro de um *cluster* aleatório sem se preocupar com a sua distribuição de massa. A idéia principal do método SARW para determinar o ponto crítico é que neste ponto a probabilidade de haver perímetros internos e externos são iguais, ou seja, estatisticamente teremos a mesma quantidade de perímetros internos e externos.

O algoritmo SARW pode ser definido da seguinte maneira. Primeiramente, criamos uma rede quadrada $L \times L$, onde os sítios poderão assumir apenas três estados, ou seja, nulo, ocupado e desocupado. Inicialmente a rede se encontra com os sítios todos nulos e então seguimos os seguintes passos:

- (1) Escolha um par de sítios adjacentes no centro da rede e atribua os estados ocupado para um e desocupado para o outro. Defina uma direção desenhando uma seta do sítio desocupado para o ocupado e mova esta seta para o sítio ocupado;
- (2) De acordo com a seta, olhe para o sítio da esquerda e veja se o estado do sítio é:
 - (a) nulo, então escolha para o sítio o estado ocupado com uma probabilidade p e desocupado com uma probabilidade $(1 - p)$ e vá para o item (b) ou (c) de acordo com a escolha do estado;
 - (b) desocupado, então vá para o item (2) olhando para a próxima direção segundo a ordem esquerda, em frente ou direita;
 - (c) ocupado, então apontamos a seta do atual sítio ocupado para o novo sítio ocupado observado e em seguida movemos a seta para o novo sítio. Feito isto, vá para o item (2) começando a olhar o sítio adjacente que fica a esquerda da seta;
- (3) Continue o procedimento até que o caminhante chegue ao ponto inicial de partida com a seta apontando na mesma direção.

O algoritmo acima gera perímetros de *clusters* em uma rede quadrada a partir de um caminhante aleatório que nunca cruza o caminho o qual ele já tenha percorrido. Isto ocorre uma vez que mantemos fixos os estados (ocupado ou desocupado) escolhidos para cada sítio visitado até o término da simulação, onde o caminhante encontra seu ponto de partida. Devido à independência no processo de escolha dos estados ocupado ou desocupado, podemos perceber que a probabilidade com que um dado perímetro é gerado pelo algoritmo SARW é a mesma probabilidade com que o acharíamos em uma rede já preenchida. A grande vantagem do algoritmo SARW é a geração de apenas um perímetro por cada realização, acarretando na minimização considerável dos efeitos de tamanho finito

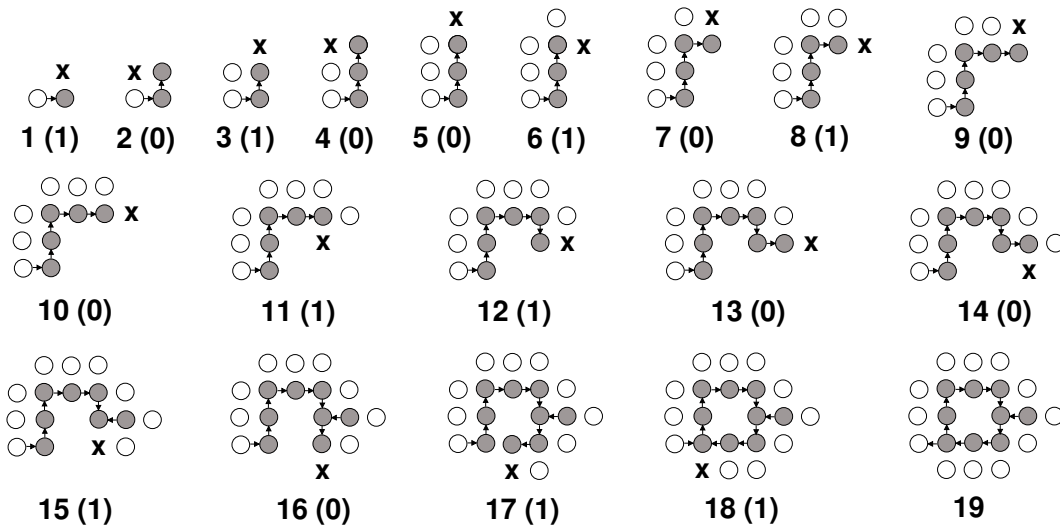


Figura 26: Ilustração que representa a geração de um perímetro através do algoritmo SARW. Os círculos representam os sítios desocupados, as bolas cinzas os sítios ocupados e o **X** o próximo sítio com estado nulo que será visitado. Os números fora do parênteses significam o tempo de cada passo do caminhante e os que estão entre parênteses indicam a escolha do próximo estado, sendo 1 para ocupação e 0 para desocupado. O resultado final do processo nos dá um perímetro externo com $N_o = 9$ sítios ocupados e $N_v = 12$ sítios desocupados.

do sistema (fato que será de grande relevância na determinação do ponto crítico em multicamadas). No término do processo de simulação, poderemos identificar um perímetro externo quando os sítios desocupados estiverem no lado de fora do perímetro formado pelos sítios ocupados e o perímetro interno quando os sítios desocupados estiverem no lado de dentro (Ver Fig. 26 e 27).

Na Fig. 26 é ilustrado um processo de formação de um perímetro a partir do método SARW. O primeiro passo em ($t = 1$) é mostrado um par de sítios iniciais com uma seta apontando do sítio desocupado para o sítio ocupado. Ainda em $t = 2$, o algoritmo nos diz que devemos olhar para o sítio adjacente ao sítio ocupado que está a esquerda da seta, que no caso se encontra com o estado nulo. Devemos então determinar aleatoriamente o novo estado do sítio nulo, o seja, atribuiremos o valor 1 com probabilidade p na rede caso o sítio deva ser ocupado e 0 com probabilidade $(1 - p)$ caso deva ser desocupado. O valor entre parênteses (igual a 1 em $t = 1$) indica que o novo sítio será ocupado e, portanto, devemos desenhar a seta como mostra a Fig. 26 em $t = 2$. No passo de tempo seguinte ($t = 2$), temos (à esquerda) um sítio nulo, entretanto, a nova escolha é desocupado. O processo é continuado seguindo as seguintes escolhas aleatórias de estado a partir de $t = 3$: 1 0 0 1 0 1 0 0 1 1 0 0 0 1 0 1 1. Notemos que em $t = 14$ o sítio nulo passa a ser desocupado, fazendo com que a seta mude o sentido atribuído anteriormente e o caminhante ocupe

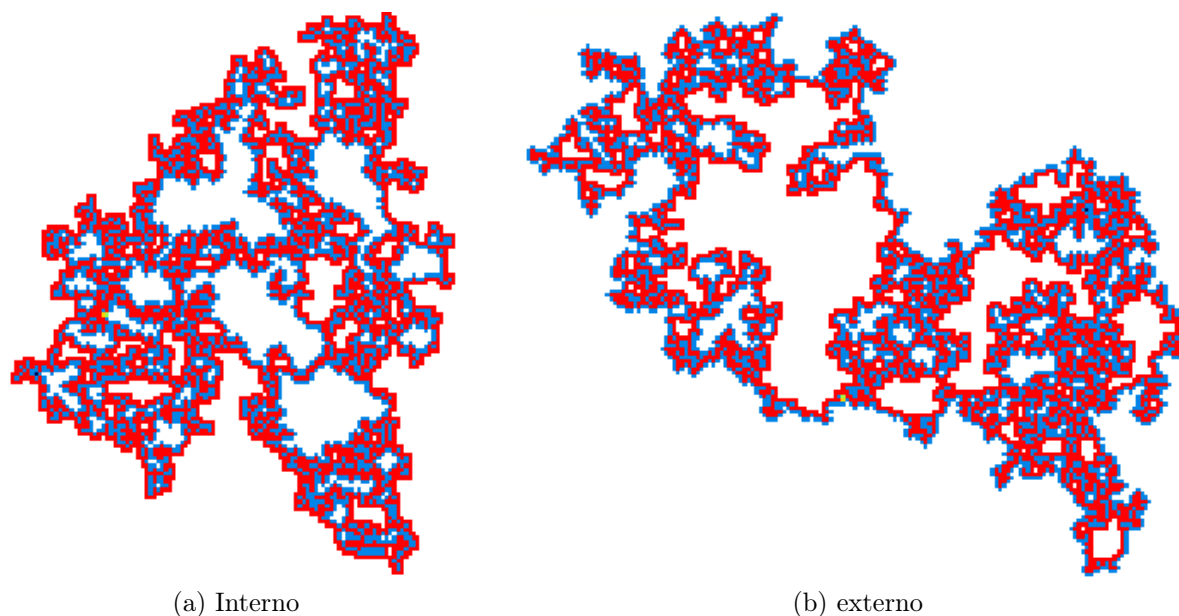


Figura 27: Exemplo ilustrativo de dois perímetros gerados a partir de um programa computacional baseado no algoritmo SARW. Os sítios ocupados estão em vermelho e desocupados em azul. O perímetro da esquerda é um exemplo de perímetro interno e o da direita um perímetro externo.

automaticamente o sítio já ocupado em $t = 12$. No passo de tempo $t = 18$ o sítio nulo passa a ser desocupado e em $t = 19$ o caminhante chega ao seu início, ocasionando o fim do processo.

É importante notar que o algoritmo SARW produz um caminhante aleatório com dois lados, um composto por sítios ocupados e o outro por sítios desocupados. Neste processo, o caminhante nunca cruza os sítios desocupados enquanto que os sítios ocupados sempre serão unidos ao se encontrarem. Quando $p < p_c$, o caminhante tem uma forte tendência de girar para a direita, fazendo surgir com maior frequência perímetros externos (Fig. 27(b)). Para $p > p_c$, o caminhante tenderá fortemente a dobrar para a esquerda, fazendo aumentar a frequência de perímetros internos (Fig. 27(a)). No entanto, próximo do ponto crítico ($p = p_c$), teremos a formação de grandes perímetros com igual probabilidade de girarem tanto para a esquerda quanto para a direita. Isto nos leva a concluir estatisticamente que no ponto crítico p_c o número de perímetros internos e externos são iguais. A Fig. 28 mostra esse comportamento, onde o perímetro interno é praticamente inexistente e o externo é máximo para $p < p_c$ e o contrário disto para $p > p_c$. Próximo do ponto crítico $p = p_c$, temos uma mudança abrupta do comportamento, de forma que cada vez que p se aproxima de p_c , o número de perímetros tende a ficar igual. O método SARW permitiu que determinássemos a probabilidade crítica com uma precisão de três dígitos, ou seja, $p_c = 0.5929$.

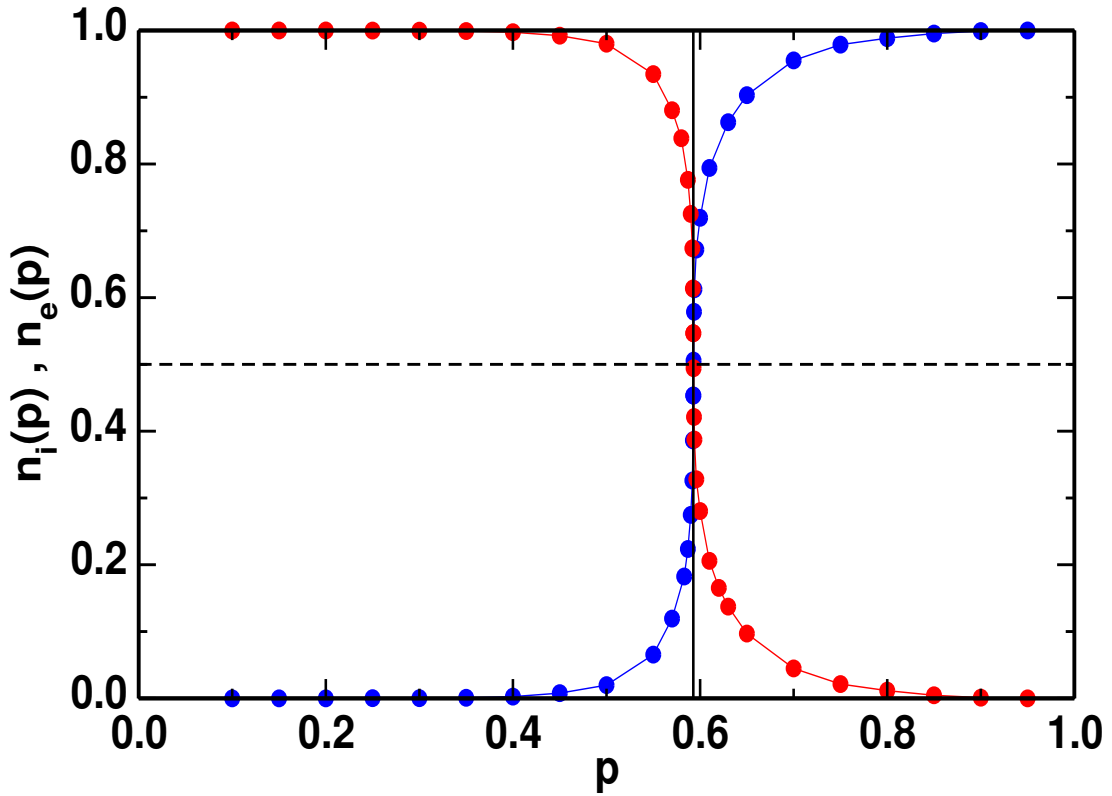


Figura 28: Gráfico que mostra o comportamento da fração de número de perímetro interno $n_i(p)$ (bolas azuis) e externo $n_e(p)$ (bolas vermelhas) em função da probabilidade p . Podemos perceber que abaixo da probabilidade crítica ($p < p_c = 0.59275$) o número de perímetros externos é máximo enquanto os internos é praticamente nulo e quando a probabilidade está acima ($p > p_c = 0.59275$) temos o comportamento inverso. Para a probabilidade p próxima do ponto crítico $p_c = 0.59275$ há um comportamento abrupto e o número de perímetros internos e externos tendem a permanecer iguais. As linhas contínua e tracejadas servem de referências, indicando respectivamente o ponto crítico $p_c = 0.5927$ e a igualdade do número de perímetros internos e externos ($n_i(p) = n_e(p)$).

3.2 Multi-camadas

Muitos sistemas na natureza exibem anisotropia de diferentes maneiras, podendo por exemplo se manifestar nas propriedades geométricas, magnéticas, ópticas etc. Particularmente, é possível que a geometria de algumas rochas reais exibam algum tipo de comportamento anisotrópico, ou seja, exibam, após o processo de formação rochoso, uma disposição de porosidade (permeabilidade) dependendo da sua localização ou posição espacial relativa. Isto pode, de fato, ser constatado se considerarmos os casos em que as rochas ou campos geológicos são formados pelo processo de sedimentação, onde as propriedades geométricas e de transportes nestes meios poderão ser caracterizadas por alguma anisotropia [63, 64, 65]. Como exemplo, temos o arenito, um tipo de rocha sedimentar, que exibe anisotropia espacial devido à tendência das camadas morfológicas se disporem

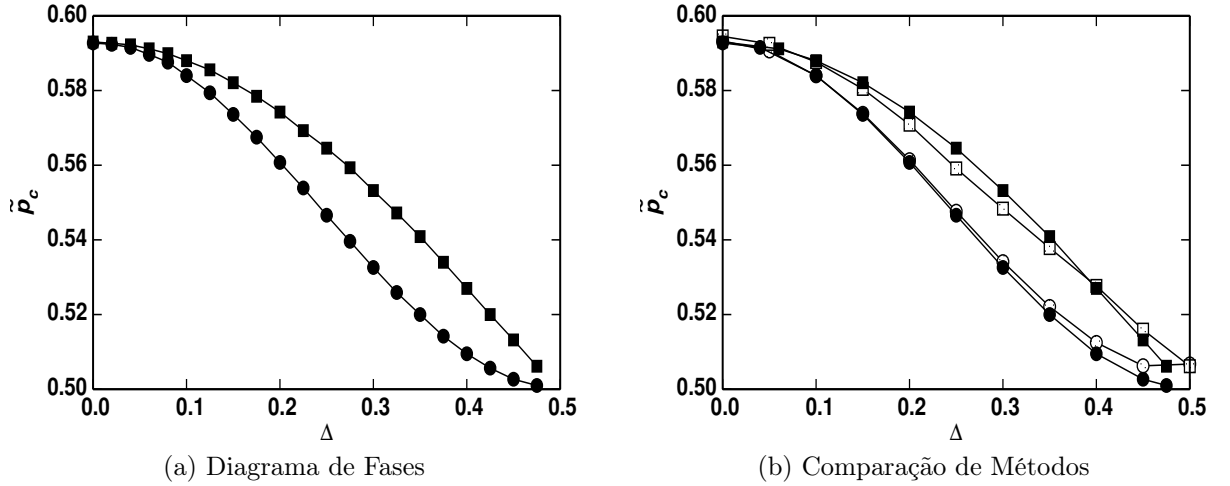


Figura 29: Gráficos de diagrama de fases para o modelo PM. Em a) temos o diagrama de fases de \tilde{p}_c em função do parâmetro Δ com o cálculo computacional baseado no algoritmo SARW para os casos alternado (bolas) e aleatório (quadrados). Em b) temos a comparação entre os algoritmos da baseados no método da bisseção utilizando (símbolos vazios) uma rede quadrada e no método SARW (símbolos preenchidos) para o cálculo do diagrama de fases de \tilde{p}_c . Note que à medida que o parâmetro Δ aumenta, a diferença entre os métodos se tornam cada vez maior, principalmente para o caso aleatório. No limite de $\Delta = 0.5$ deveremos ter $\tilde{p}_c = 0.5$, o que não ocorre para o método da bisseção em redes quadradas.

com maior probabilidade na direção horizontal. Em casos como estes, o modelo de percolação em multi-camadas (PM) visa prover uma metodologia teórica mais realista para descrever a fenomenologia dos meios porosos anisotrópicos [62], consistindo basicamente de um modelo d-dimensional com camadas de diferentes concentrações de probabilidades.

O modelo PM [62] consiste de uma rede d-dimensional construída a partir de uma sequência de sub-redes (camadas) com (d-1) dimensões dispostas ao longo de um eixo arbitrário. Semelhantemente às camadas de diferentes porosidades dos sistemas geológicos, atribuímos uma probabilidade de ocupação predefinida p para cada sub-rede. Como no trabalho desenvolvido por Dayan *et al.* [62], restringimos nossos estudos para o caso bidimensional ($d = 2$) e para dois esquemas de simulações. O primeiro é o esquema aleatório, onde a disposição das camadas varia ao longo do eixo y inteiro. Neste esquema a escolha da probabilidade de ocupação p_1 e p_2 de cada camada é uma variável independente da posição no eixo y , ou seja, $Pr(p(y) = p_1) = Pr(p(y) = p_2) = 1/2$. Para o caso específico em que $p_1 = p_2$, temos o modelo padrão de percolação isotrópica, no entanto, o modelo anisotrópico surge quando temos $p_1 > p_2$ ou $p_1 < p_2$. O segundo esquema é o alternado, onde a probabilidade de ocupação $p(y)$ é determinada periodicamente pela simples escolha $p(y) = p_1$ se y for par ou $p(y) = p_2$ se y for ímpar. Em ambos os casos o grau de anisotropia pode ser mais convenientemente representado pela reparametrização

$\tilde{p} = (p_1 + p_2)/2$ e $\Delta = (p_2 - p_1)/2$, onde podemos notar que quanto maior o parâmetro Δ maior será a extensão do *cluster* na direção x e menor na direção y . No caso limite em que $\Delta = 0.5$, teremos uma rede composta por camadas com probabilidade de ocupação nula $p_1 = 0$ ou máxima $p_2 = 1$, acarretando a impossibilidade de percolação no eixo y .

Da mesma forma que ocorre no modelo padrão de percolação isotrópica ($\Delta = 0.0$), o trabalho de Dayan *et al.* [62] mostra que uma transição de fase de segunda ordem também ocorre no modelo PM. Evidências numéricas indicam que a transição de fase no modelo PM possui somente um único valor crítico de probabilidade $\tilde{p} = \tilde{p}_c$ para cada valor de (Δ). Na figura 29 (a) mostramos os diagramas de fases de p_c em função de Δ para ambos os casos alternados e aleatório obtidos pelo método SARW (ver seção 3.1.3). Podemos notar que para o mesmo valor de Δ , a probabilidade crítica \tilde{p}_c para o caso alternado é ligeiramente menor do que para o caso aleatório exceto nos extremos $\Delta = 0.0$ e $\Delta = 0.5$, onde os modelos tendem para o mesmo valor.

3.2.1 Backbone em Multi-camadas

Como discutido acima, a anisotropia afeta a maneira como a probabilidade de ocupação se distribui no espaço, fazendo com que o *cluster* gerado seja mais alongado em uma certa direção do que em outra. Este fato, caso não seja considerado, pode causar uma má interpretação dos resultados obtidos por meio de alguns métodos de simulações computacionais. Comumente utilizamos uma rede quadrada de dimensão ($L_x \times L_y$), com $L_x = L_y = L$, para simular sistemas percolantes isotrópicos de modo em que os efeitos de tamanho finito sejam minimizados à medida que aumentamos o tamanho L da rede. Com a presença da anisotropia surge um outro fator complicador que se não for devidamente observado, poderá aumentar os efeitos de tamanho finito. Isto pode ser constatado, por exemplo, nas simulações do modelo PM em redes quadradas, onde observaremos uma limitação maior do crescimento de massa na direção perpendicular à anisotropia. Na figura 29 (b) mostramos uma comparação de métodos para a obtenção do diagrama de fases da probabilidade crítica \tilde{p}_c em função de Δ , onde utilizamos o método da bipartição em uma rede quadrada (símbolos vazios) e o método SARW (símbolos preenchidos). Podemos constatar, no entanto, que o método SARW é mais preciso por gerar apenas um perímetro por simulação em redes com limites extremamente grandes, possibilitando, assim, uma considerável minimização dos efeitos de tamanho finito (inclusive o efeito anisotrópico). Esta precisão pode ser de fato verificada, pois temos a probabilidade crítica $\tilde{p}_c \rightarrow 0.5$ quando tomamos o limite $\Delta \rightarrow 0.5$. Abstraindo um pouco mais as idéias expostas an-

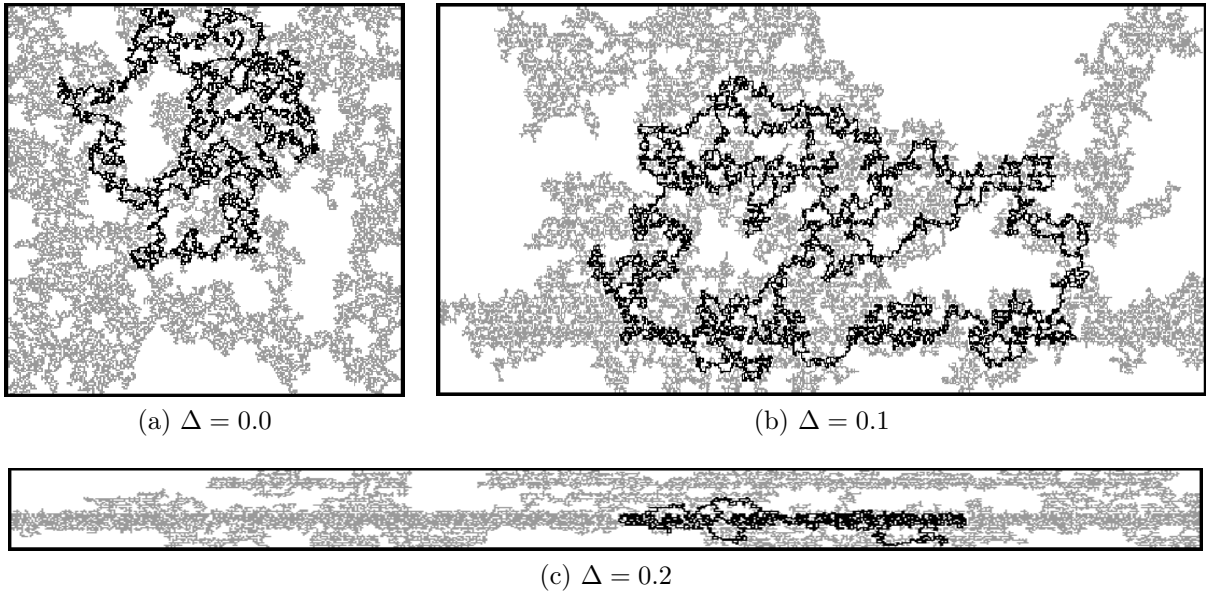


Figura 30: Ilustrações de *backbones* sob *clusters* percolantes em diferentes graus de anisotropia segundo o modelo PM aleatório. Em a) temos uma rede quadrada (250×250), $\tilde{p}_c = 0.59725$ e $\Delta = 0.0$, em b) uma rede retangular (550×250), $\tilde{p}_c = 0.588$ e $\Delta = 0.1$ e em c) uma rede retangular (700×60), $\tilde{p}_c = 0.57423$ e $\Delta = 0.2$. Em ambos os casos utilizamos $r = 2$.

teriormente, podemos concluir que os métodos que utilizam redes com d-dimensões de comprimentos iguais não são boas opções para se determinar os expoentes críticos em sistemas anisotrópicos.

A metodologia aqui empregada visa diminuir os efeitos de tamanho finito para poder determinar com melhor precisão os expoentes críticos relacionados à dimensão fractal e a probabilidade de distribuição de tamanhos de massa de *backbone* em multi-camadas. Inicialmente determinamos o diagrama de fases da probabilidade crítica \tilde{p}_c em função de Δ para ambos os casos alternado e aleatório através do método SARW (seção 3.1.3). No entanto, há neste método um grande problema que impossibilitou a determinação de *backbones*: o método SARW simula apenas o perímetro do *cluster* sem dar qualquer informação a respeito da sua estrutura interna.

Propomos neste trabalho um método que nos permite trabalhar redes retangulares ($L_x \times L_y$), com $L_x \neq L_y$, de modo que seja possível minimizar os efeitos de tamanho finito provocados pela anisotropia. Para isto, observemos primeiro o modelo isotrópico no ponto crítico. Sabemos que neste tipo de modelo não há uma preferência de direção na distribuição de massa, conseqüentemente, temos que a probabilidade de ocorrer percolação na direção x ou y são em média iguais se considerarmos uma rede quadrada ($L \times L$). Baseado nesta idéia, poderemos elaborar para o modelo anisotrópico um algoritmo que

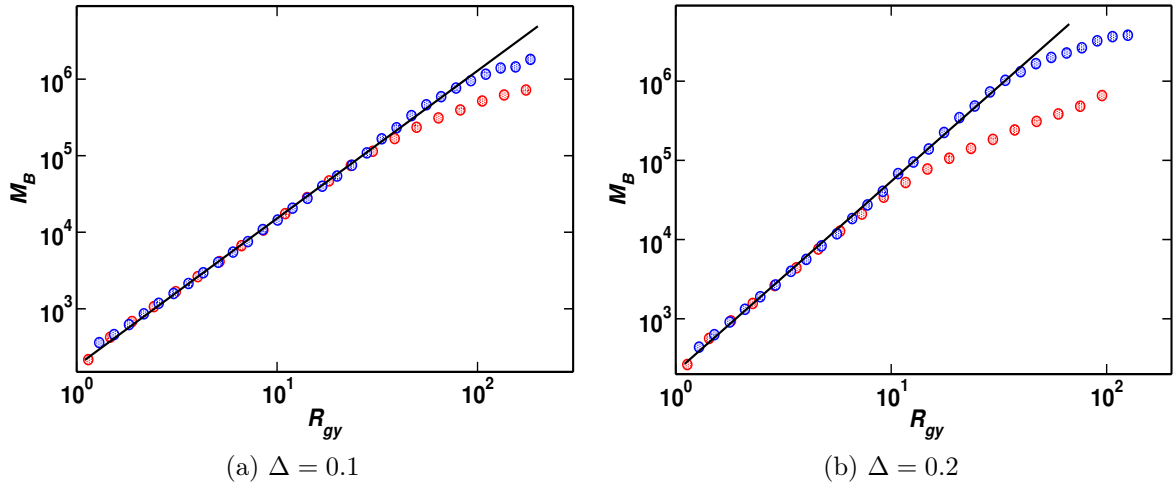


Figura 31: Gráficos da distribuição de massa M_B em função da componente R_{gy} do raio de giração gerados em redes de multi-camadas aleatórias. Nos itens a) e b) mostramos o efeito de tamanho finito causados pelos limites das redes quadradas (símbolos vermelhos) e retangulares (símbolos azuis). Podemos perceber que à medida que o parâmetro Δ aumenta, os efeitos de tamanho finito ficam cada vez mais acentuados na rede quadrada. Em ambos os itens utilizamos redes quadradas (512×512) e redes retangulares (1800×512) e (4000×400) com $\Delta = 0.1$ e 0.2 e $r = 2$.

ajuste as dimensões L_x e L_y da rede de modo que elimine o máximo possível a maior tendência de percolação na direção oposta à anisotropia. O algoritmo consiste basicamente em mantermos fixos a probabilidade crítica p_c (encontrada pelo método SARW) e um dos comprimentos de uma rede bidimensional, a partir daí ajustamos o outro comprimento contabilizando o número de percolações ocorridas em cada direção. O processo é encerrado quando a quantidade de percolações nas direções x e y forem iguais. Na implementação do algoritmo, observamos que à medida em que aumentamos o grau de anisotropia, aumentamos também a diferença entre os comprimentos da rede, tornando-a cada vez mais retangular. Estas idéias podem ser facilmente estendidas para redes com dimensões maiores $D = 2$ sempre que a anisotropia ocorrer em uma dada direção, onde passaremos a obter redes retangulares.

Uma vez que determinamos a probabilidade crítica \tilde{p}_c para cada valor do parâmetro Δ e as dimensões L_x e L_y da rede, estaremos aptos para gerar em redes retangulares ($L_x \times L_y$) os *clusters* percolantes e seus respectivos *backbones*. Na Fig. 30 mostramos três exemplos de *backbones* no ponto crítico gerados em uma rede PM aleatória para $r = 2$ e $\Delta = 0.0, 0.1$ e 0.2 , onde podemos observar com mais detalhe o aspecto retangular da rede. No apêndice 5 mostramos uma tabela com as probabilidade críticas \tilde{p}_c para diferentes valores do parâmetro Δ .

3.3 Resultados

Nesta seção apresentaremos a análise e discussões de resultados obtidos numericamente para algumas das propriedades dos *backbones* gerados em redes PM no ponto crítico com diferentes níveis de anisotropia. Mais precisamente, estudamos como se comportam a dimensão fractal D_B e o expoente τ_B da probabilidade de distribuição de massa diante das mudanças estruturais causadas pelo modelo PM para os casos alternado e aleatório. Em nossas análises, utilizamos um total de 10^5 amostras de *backbones* para cada valor específico do parâmetro Δ . As simulações numéricas foram realizadas em redes retangulares ($L_x \times L_y$) de modo que os comprimentos L_x e L_y estivessem sempre de acordo com as idéias de ajustes discutidas na seção 3.2.1. Para facilitar a comparação entre os resultados, seria necessário manter as propriedades comuns a cada tipo de sistema na mesma ordem de grandeza. Procuramos manter a quantidade total de sítios da rede variando sempre em torno de $2,5 \times 10^6$ sítios. Desta forma usamos (2048×2048) , (1800×512) , (512×3000) , (4000×400) , (6000×400) e (1200×400) para $\Delta = 0.0, 0.10, 0.15, 0.20, 0.25$ e 0.30 , respectivamente.

As análises dos resultados obtidos para os *backbones* gerados em redes de multi-camadas alternadas mostram que os expoentes críticos são os mesmos que os encontrados para a rede de percolação isotrópica, indicando que ambos pertencem à mesma classe de universalidade. Este fato pode ser facilmente explicado pela regularidade na disposição intercalada das camadas, a qual impede a formação de faixas com duas ou mais camadas com a mesma probabilidade de ocupação. Devido à falta de anisotropia no modelo de multi-camadas alternadas [62], focaremos nossas discussões apenas no modelo de percolação de multi-camadas aleatórias.

Na seção 3.2.1 expomos nossa preocupação em minimizarmos o efeito de tamanho finito, principalmente daquele causado pela anisotropia. Na figura 31 temos um exemplo onde mostramos a massa do *backbone* M_B em função da componente R_{gy} do raio de giração para dois tipos de redes. A reta (cor preta) é o melhor ajuste para as curvas, as quais foram geradas em redes quadradas (símbolos vermelhos) e em rede retangulares (símbolos azuis). O efeito de tamanho finito será maior sempre o que desvio no limite superior das curvas em relação à reta aumentar. Desta forma, podemos constatar através dos gráficos da figura 31 que o efeito de tamanho finito é mais acentuado na rede quadrada do que na rede retangular, aumentando cada vez mais à medida em que aumentamos o grau de anisotropia da rede. Mesmo sendo observado em menor proporção visual nas demais propriedades estudadas, o efeito de tamanho finito provocado pelos limites das redes

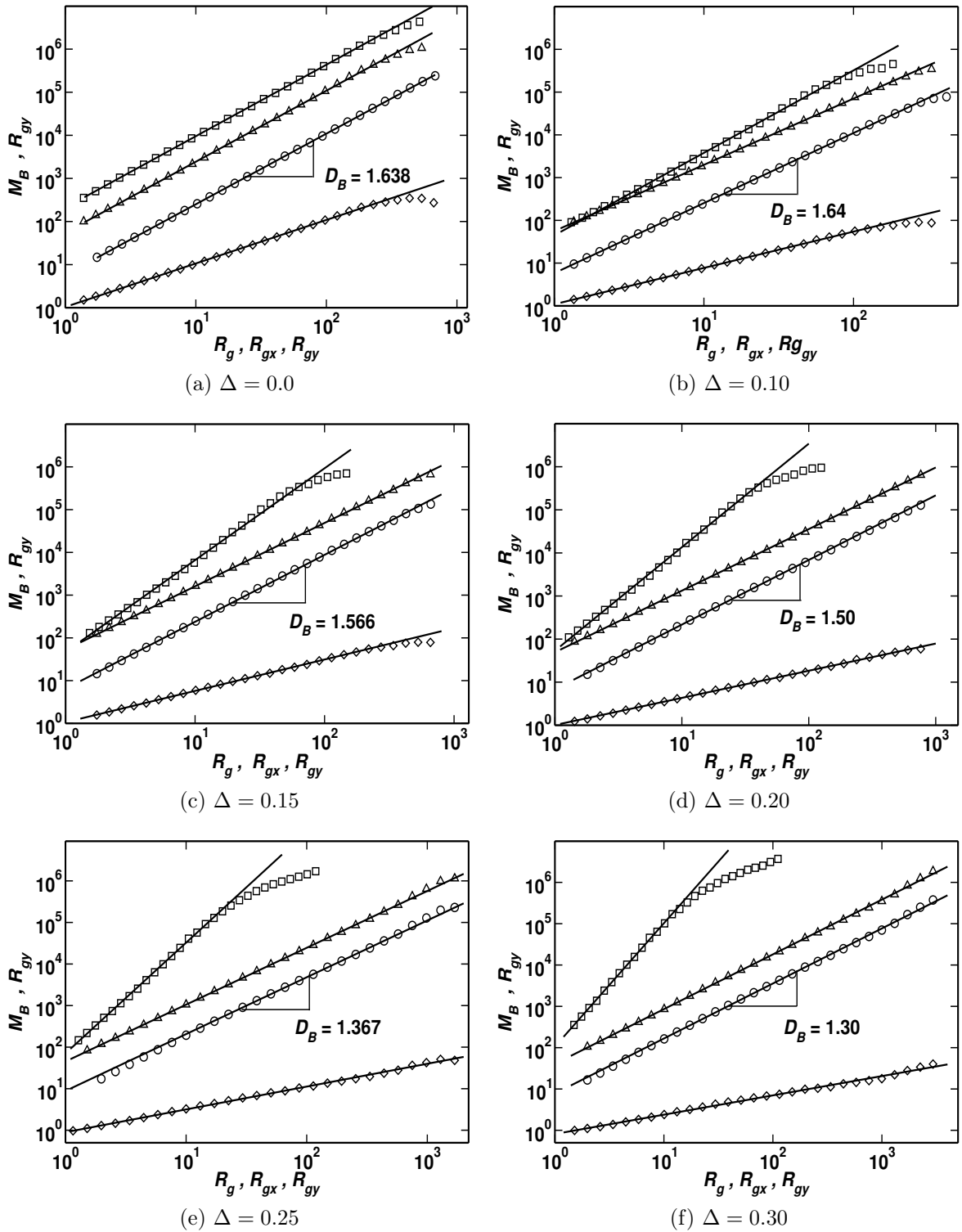


Figura 32: Conjunto de gráficos que mostram o comportamento da distribuição de massa do *backbone* M_B em função do raio de giração R_g (círculo) e das componentes R_{gx} (triângulo) e R_{gy} (quadrado) do raio de giração e mostramos também R_{gy} em função de R_{gx} (diamante). Em todos os casos temos o comportamento em lei de potência na forma $M_B \sim R_g^{D_B}$, $M_B \sim R_{gx}^{D_{Bx}}$, $M_B \sim R_{gy}^{D_{By}}$ e $R_{gy} \sim R_{gx}^{D_{Bxy}}$. Para facilitar a visualização da figura, multiplicamos por 5 a distribuição de massa das componentes R_{gx} e R_{gy} .

quadradas comprometeu a exatidão da maioria dos resultados, chegando até mesmo em alguns casos a gerar conclusões equivocadas. Com base nessa análise, podemos concluir que as redes retangulares são capazes de nos fornecer resultados mais coerentes e confiáveis devido, principalmente, à melhor adequação das redes à forma resultante da distribuição de massa dos *clusters*.

Assim como os sistemas isotrópicos, os *clusters* formados em redes de multi-camadas aleatórias também são caracterizados por um conjunto de propriedades com expoentes críticos bem definidos [62]. Sabemos que os *backbones* gerados em redes isotrópicas no ponto crítico tem uma dimensão fractal $D_B \sim 1.64$. Da mesma forma, também encontramos uma dimensão fractal característica para os *backbones* que são gerados nas redes de multi-camadas aleatórias. Isto pode ser verificado na figura⁵ 32, onde mostramos uma série de gráficos para vários valores de Δ . Podemos, portanto, perceber que a variação de massa M_B em função do raio de giração R_g (círculos) é em forma de lei de potência e que as inclinações das curvas se tornam cada vez menores conforme aumentamos o valor de Δ , acarretando a variação do valor da dimensão fractal do sistema.

Uma das características mais importantes no estudo de sistemas fractais anisotrópicos é o aspecto da auto-afinidade⁶. Podemos de fato observar o aspecto auto-afim no modelo PM aleatório através da análise da distribuição da massa do *backbone* nas direções x e y do raio de giração. Na figura 32 mostramos os gráficos da massa do *backbone* em função das componentes R_{gx} e R_{gy} (ver eq. 3.6), onde podemos perceber o comportamento em lei de potência na forma $M_B \sim R_{gx}^{D_{Bx}}$ e $M_B \sim R_{gy}^{D_{By}}$. Podemos observar na figura 32 que as inclinações D_{Bx} e D_{By} começam a se tornar cada vez mais diferentes à medida em que o valor de Δ aumenta, onde os expoentes D_{Bx} passa a diminuir e D_{By} a aumentar. Esse comportamento é coerente com a realidade do problema, pois os *backbones* passam a ficar cada vez mais alongados na direção x à medida em que aumentamos o valor de Δ (ver fig. 30). Isto nos leva, portanto, a concluir que o grau de anisotropia está não apenas associado à desordem provocada pela aleatoriedade na disposição das camadas, mas também ao aumento da diferença de probabilidades de ocupação que as camadas utilizam.

⁵Os valores dos expoentes da figura 32 são $D_B = 1.638 \pm 0.006$, $D_{Bx} = 1.646 \pm 0.007$, $D_{By} = 1.650 \pm 0.008$ e $D_{Bxy} = 1.001 \pm 0.002$ para $\Delta = 0.0$, $D_B = 1.640 \pm 0.008$, $D_{Bx} = 1.550 \pm 0.007$, $D_{By} = 1.930 \pm 0.010$ e $D_{Bxy} = 0.850 \pm 0.003$ para $\Delta = 0.10$, $D_B = 1.566 \pm 0.006$, $D_{Bx} = 1.482 \pm 0.005$, $D_{By} = 2.149 \pm 0.020$ e $D_{Bxy} = 0.734 \pm 0.003$ para $\Delta = 0.15$, $D_B = 1.500 \pm 0.007$, $D_{Bx} = 1.430 \pm 0.007$, $D_{By} = 2.400 \pm 0.020$ e $D_{Bxy} = 0.630 \pm 0.003$ para $\Delta = 0.20$, $D_B = 1.367 \pm 0.007$, $D_{Bx} = 1.367 \pm 0.007$, $D_{By} = 2.665 \pm 0.020$ e $D_{Bxy} = 0.550 \pm 0.004$ para $\Delta = 0.25$, $D_B = 1.300 \pm 0.006$, $D_{Bx} = 1.300 \pm 0.006$, $D_{By} = 3.000 \pm 0.020$ e $D_{Bxy} = 0.467 \pm 0.004$ para $\Delta = 0.30$.

⁶Segundo Barabási e Stanley [66], auto-afinidade é definida quando um objeto fractal deve ser reescalado de maneiras diferentes em suas direções.

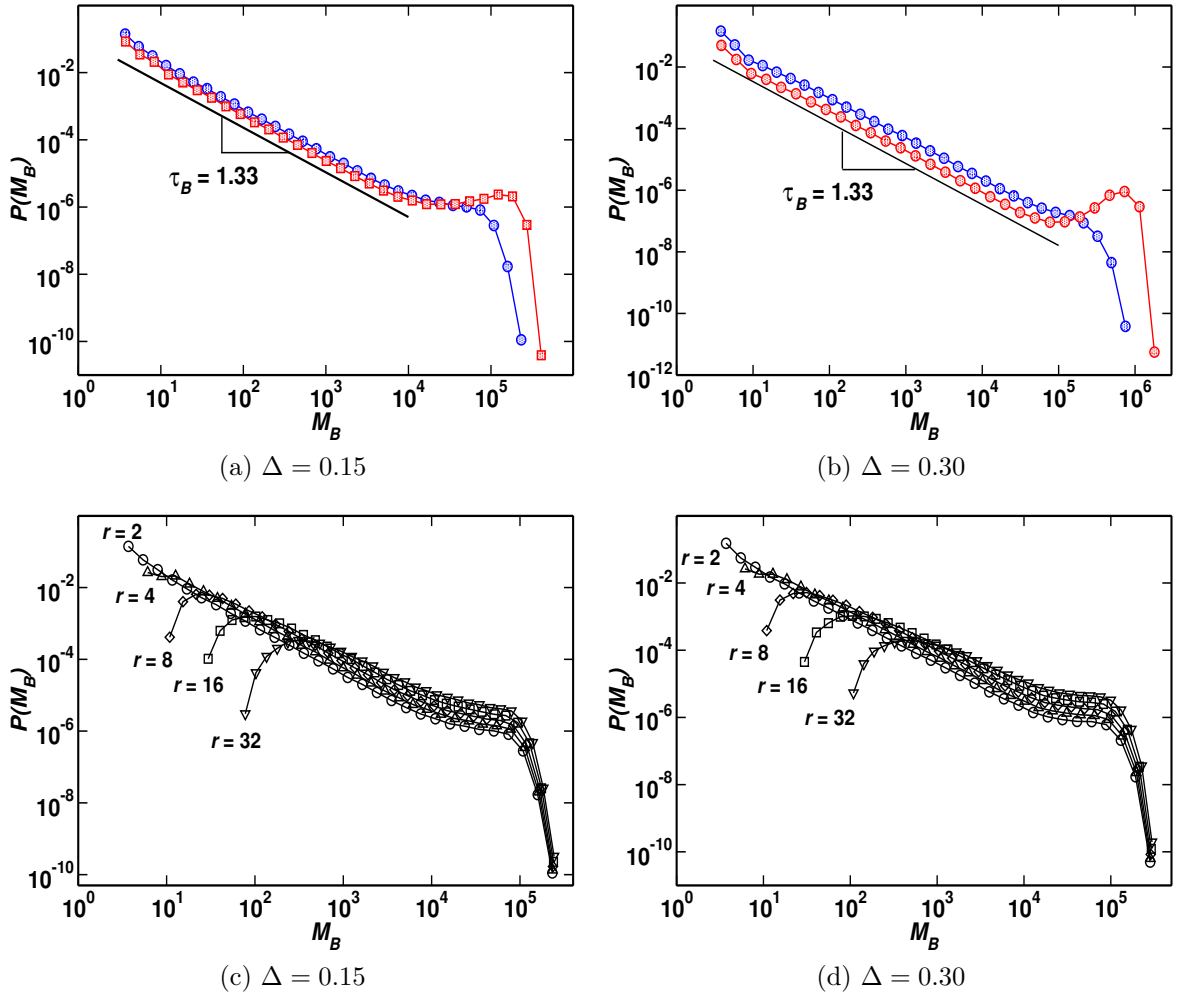


Figura 33: Conjunto de gráficos que mostram o comportamento da densidade de probabilidade da distribuição de massa do *backbone* $P(M_B)$ para diferentes valores de Δ . Em a) e b) mostramos distribuições com massa dos *backbones* que tocam nos limites da rede (vermelho) e daqueles que não tocam (azuis) para $\Delta = 0.15$ e 0.30 . Em c) e d) temos a distribuição para diferentes valores de distância r entre os sítios.

Analisando ainda a fractalidade das multi-camadas aleatórias, os resultados indicam uma igualdade assintótica entre a dimensão fractal D_B e o expoente D_{Bx} . Isto pode ser explicado a partir da equação 3.7, onde podemos perceber que o termo que possui o expoente D_{Bx} se torna mais significativo do que o termo que possui o expoente D_{By} no limite de grandes massas M_B e/ou grandes valores de D_{By} . Este comportamento assintótico dos expoentes D_B e D_{Bx} foi comprovado numericamente, onde podemos observar nos gráficos da figura 32 que as curvas da distribuição de massa M_B em função do raio de giração R_g e da componente R_{gx} se tornam praticamente paralelas para $\Delta = 0.25$ e 0.30 ,

Mudando o foco da nossa análise para investigar o comportamento da densidade de probabilidade da distribuição de massa dos *backbones*, observamos que o expoente τ_B não é o mesmo que o encontrado para as redes isotrópicas. Entretanto, os resultados

indicam que independente do valor de $\Delta = 0.15, 0.20, 0.25$ e 0.30 , o valor de τ_B é sempre o mesmo, ou seja, $\tau_B = 1.33 \pm 0.01$, exceto para $\Delta = 0.1$, onde encontramos $\tau_B = 1.30 \pm 0.005$. Esse comportamento sugere que o expoente τ_B varia rapidamente para um limite com o aumento da anisotropia. É importante ainda observar que a relação $\tau_B = D/D_B$ encontrada para as redes isotrópicas não é válida para as rede de multi-camadas aleatórias. Nos gráficos das figuras 33(a) e 33(b) podemos observar que a probabilidade da distribuição de massa que inclui os *backbones* que tocam nas bordas (cor vermelha) possui uma saliência antes do *cutoff* no limite de grandes massas, tornado-se cada vez mais pronunciada conforme o aumento da anisotropia. Essa saliência surge devido ao efeito de tamanho finito, fato que pode ser comprova se observamos apenas a massa dos *backbones* que não tocam nas bordas da rede (símbolos azuis dos gráficos das figuras 33(a) e 33(b)). Mostramos nas figuras 33(c) e 33(d) a densidade de probabilidade $P(M_B)$ para cinco valores de separação de sítios, $r = 2, 4, 8, 16$ e 32 , para os valores de $\Delta = 0.15$ e 0.30 . O efeito da variação de r na distribuição é simplesmente modificar o alcance da região de escala, mantendo constante o valor do expoente τ_B . Concluimos, portanto, que quanto menor a distância r entre os sítios maior é o alcance da região que se comporta como uma lei de potência.

3.4 Conclusões

Neste capítulo, expomos inicialmente uma breve introdução sobre a teoria geral da percolação, onde buscamos introduzir as principais propriedades utilizadas no estudo de *backbones* em redes de percolação em multi-camadas. Na sequência expomos também o método *Self-Avoid Random Walk* (SARW), o qual nos permitiu determinar com boa precisão a probabilidade crítica de cada tipo de sistema. Este, no entanto, se mostrou inviável para determinar os *backbones* devido à falta de qualquer informação a respeito da distribuição de massa do *cluster*.

A geração dos *clusters* em redes PM enfrentou outra dificuldade devido ao aparecimento da anisotropia. Observamos que nestes tipos de sistemas os *clusters* passam a se distribuir preferencialmente em uma dada direção, causando um forte efeito de tamanho finito nos resultados. Diante desta dificuldade, propomos um algoritmo que utiliza a probabilidade da frequência de percolação para ajustar as dimensões da rede à preferência da distribuição de massa do *cluster*, tendo como resultado final a formação de redes retangulares. O uso deste algoritmo implicou numa considerável minimização do efeito de tamanho finito, tornando os resultados mais precisos para determinar os expoentes

críticos.

As propriedades fractais dos *backbones* sofreram mudanças significativas devido à desordem causada pela aleatoriedade na disposição das multi-camadas. Na análise dos resultados pudemos constatar a quebra da classe de universalidade em relação ao modelo isotrópico através da diminuição da dimensão fractal dos *backbones* com o aumento do parâmetro Δ . Analisamos também o comportamento da massa em relação às componentes do raio de giração e observamos a diminuição de D_{Bx} e o aumento D_{By} quando aumentamos o valor de Δ . Constatamos que a diferença entre esses expoentes está intimamente ligada ao grau de anisotropia do sistema, o que pode ser explicado pela preferência da massa dos *backbones* em se distribuir na direção x (direção oposta à anisotropia) conforme aumentamos o valor de Δ . Observamos ainda que assintoticamente a dimensão fractal D_B e o expoente D_{Bx} convergem para o mesmo valor no limite de grandes massas e/ou grandes valores de D_{By} .

A densidade de probabilidade de massa também sofreu mudanças com a presença da anisotropia. Observamos que o expoente τ_B aumenta seu valor rapidamente até atingir um valor limite ($\tau = 1.33$) quando aumentamos o valor de Δ . Observamos ainda uma saliência na distribuição no limite de grandes massas, onde constatamos que esse comportamento ocorre devido ao efeito de tamanho finito do sistema.

Apesar dos vários aspectos aqui investigados, novas perspectivas de estudos ainda estão em aberto. Como exemplo, a determinação do expoente Hölder, também chamado de expoente de afinidade, que caracteriza a função de afinidade de um objeto fractal anisotrópico. Outro exemplo é o estudo das classes de multi-camadas quase-periódicas. Esse tipo de estrutura já é bem conhecida na literatura, principalmente por sua aplicação em super-redes magnéticas. A principal característica presente na quase-periodicidade é a possibilidade de regular o grau de aleatoriedade da estrutura, que pode ser de grande importância para o entendimento de alguns fenômenos naturais e desenvolvimento de novas tecnologias. Por fim, podemos ainda utilizar o modelo de percolação em multi-camadas como um modelo de meio poroso para estudar propriedades de transportes que estão intimamente ligadas ao fenômeno de deslocamento de fluidos.

4 CONCLUSÕES

Apresentamos aqui uma conclusão geral dos estudos realizados em três sistemas diferentes, cuja essência comum repousa na complexidade produzida pela desordem e não-homogeneidade da regulação e organização das interações dos elementos constituintes. Diante deste contexto, nossos estudos foram pautados sempre numa investigação sistematizada e coerente dos fenômenos, possibilitando a formulação de novas idéias, conceitos e relações matemáticas.

No capítulo 1 estudamos a dinâmica das redes booleanas sujeita a uma pequena perturbação. Para isto utilizamos o tempo de relaxação, que pode ser definido como a quantidade de tempo necessário para um pequeno dano desaparecer por completo do sistema. Observamos que a distribuição cumulativa do tempo de relaxação no ponto crítico segue um decaimento em lei de potência com expoente $\beta = 1$. Este fato está de acordo com a conjectura que diz que tanto a dinâmica de propagação de danos em redes *annealed* como o modelo de percolação direcionada pertencem à mesma classe de universalidade [20, 21, 25].

Constatamos, entretanto, que na condição crítica há um truncamento para um decaimento exponencial do tempo de relaxação, que escalona com o tamanho do sistema a partir do tempo característico dado por $\tau_x \sim N^{1/2}$. Constatamos ainda que próximo do ponto crítico o *crossover* do tempo de relaxação segue para dois comportamentos diferentes, ou seja, na fase ordenada próxima do ponto crítico a distribuição tem um *crossover* para um decaimento exponencial enquanto na fase caótica próxima do ponto crítico o *crossover* vai para um regime plano, indicando que o dano se propagará indefinidamente.

Estudamos no capítulo 2 um novo método de decomposição, que consiste basicamente de uma retirada simultânea e iterativa de grupos de vértices com um determinado grau K de conectividade. Analisamos inicialmente a fração total média de sítios retirados $\langle S_K \rangle$ em função da conectividade K e constatamos um decaimento em forma de lei de potência com um expoente $\alpha = 3$. No estudo mais detalhado do processo iterativo, analisamos

como a fração média de sítios retirados $\langle s_K(t) \rangle$ varia a cada iteração t . Verificamos que esta variação segue um decaimento exponencial, o qual foi possível deduzir teoricamente a partir de suposições relativamente simples. Observamos ainda que os parâmetros C_K e λ_K do decaimento exponencial de $\langle s_K(t) \rangle$ varia para cada valor de K , sendo possível estabelecer uma relação direta entre esses parâmetros e a conectividade K .

A partir do conhecimento detalhado do processo iterativo, foi possível verificar a auto-consistência dos resultados através da integração de $\langle s_K(t) \rangle$ de forma que pudemos recuperar o expoente $\alpha = 3$ da fração total de sítios retirados $\langle S_K \rangle$ (calculado anteriormente por simulação numérica). Outra forma de verificação de auto-consistência foi deduzir a partir da equação encontrada para $\langle s_K(t) \rangle$ uma equação que descrevesse o comportamento da quantidade total de iterações T_K necessária para o término de um dado processo de decomposição.

Por fim estudamos no capítulo 3 como a anisotropia afeta as propriedades do *backbone*. Para isto, analisamos primeiro os principais aspectos envolvidos na minimização de erros provocados pelo efeito de tamanho finito, onde propomos um algoritmo que gera redes retangulares que se adaptam melhor à distribuição de massa do *backbone*. Este algoritmo foi capaz de minimizar de forma considerável o efeito de tamanho finito e permitiu uma melhor precisão nos resultados.

Estudamos basicamente duas propriedades. A primeira delas foi a dimensão fractal do *backbone* D_B , onde pudemos constatar uma forte relação com o grau de anisotropia. Observamos que o valor da dimensão fractal D_B diminui com o aumento da anisotropia e que no limite assintótico de grandes massas e/ou de grandes valores do expoente D_{By} , a dimensão fractal D_B e o expoente D_{Bx} tendem a ficar iguais. A segunda propriedade estudada foi a probabilidade de distribuição de tamanhos de massa, onde pudemos observar uma dependência do expoente τ_B com a anisotropia. A dependência ocorre de maneira rápida para uma convergência de um valor limite dado por $\tau_B = 1.33 \pm 0.01$ conforme aumentamos a anisotropia. Observamos ainda uma saliência no limite das grandes massas, que é causado pela limitação do tamanho do sistema.

Finalizamos este trabalho com a grande satisfação de um dever cumprido, onde buscamos em todos os momentos a verdade dos fatos.

5 APÊNDICE

Δ	p_{cram}	p_{calt}
0.000	0.5929	0.5929
0.020	0.5926	0.5924
0.040	0.5922	0.5915
0.060	0.5912	0.5897
0.080	0.5899	0.5876
0.100	0.5880	0.5840
0.125	0.5855	0.5794
0.150	0.5821	0.5736
0.175	0.5784	0.5675
0.200	0.5742	0.5607
0.225	0.5692	0.5539
0.250	0.5645	0.5466
0.275	0.5593	0.5396
0.300	0.5532	0.5326
0.325	0.5472	0.5259
0.350	0.5410	0.5200
0.375	0.5340	0.5142
0.400	0.5270	0.5095
0.425	0.5200	0.5056
0.450	0.5132	0.5027
0.475	0.5061	0.5010

Tabela 5: Tabela contendo os valores de probabilidades críticas para diferentes valores de Δ . Na coluna do meio temos a probabilidade crítica para o modelo aleatório p_{cram} e na coluna da direita a probabilidade crítica para o modelo alternado p_{calt} . Os valores foram obtidos a partir de simulações baseadas no método *Self-Avoid Random Walk*.

Referências

- [1] Moreira A.A. and Amaral L.A.N., *Phys. Rev. Lett.* *94*, **218702** (2005).
- [2] S. A. Kalffman, *The Origins of Order*, Ed. Oxford University Press, Oxford (1993).
- [3] L. A. N. Amaral e J. M. Otino, *Eur. Phys. J. B.* *38*, **147** (2004).
- [4] S. A. Kalffman, *Jour. Of Theo. Bio.* *22*, **437** (1969).
- [5] T. Akutsu, S. Miyano e S. Kuhara, *Pac. Symp. Biocomput.*, **17** (1999).
- [6] S. Bornholdt e K. Sneppen, *Phys. Rev. Lett.* *81*, **36** (1998).
- [7] S. Bornholdt e T. Rohlf, *Phys. Rev. Lett.* *84*, **6114** (2000).
- [8] L. Wang, E. E. Pichler e J. Ross, *Proc. Nat. Acad. Sci. USA* *87*, **9467** (1990).
- [9] K. E. Kürten, *J. Phys A*, **L615** (1988).
- [10] B. Derrida, E. Gardner and A. Zippelius, *Europhysics Letters* *4*, **167** (1987).
- [11] B. Derrida e H. flyvbjerg, *J. Phys A* *19*, **1003** (1986).
- [12] B. Derrida and Y. Pomeau, *Europhy. Lett* *1 (2)*, **45** (1986).
- [13] Flyvbjerg H., *J. Phys. A* *21*, **L955** (1986).
- [14] Luque B. e Solé R. V., *J. Phys. A* *33*, **284** (2000).
- [15] S. H. Strogatz, *Nature* *410*, **268** (2001).
- [16] R. Albert e A.-L. Barabási, *Rev. Modern Phys.* *74*, **47** (2002).
- [17] A. Wuensche, Genomic Regulation Modeled as a Network with Basins of Attraction, *Pacific Symposium on Biocomputing*, 3:89-102 (1998).
- [18] A. Wuensche, Discrete Dynamical Networks and their Attractor Basins *Complexity International* *6*, (1998). Also *SFI Working Paper* 98-11-101.
- [19] M. Aldana-Gonzalez, Susan Coppersmith and Leo P. Kadanoff. *Perspectives and Problems in Nonlinear Science. A celebratory volume in honor of Lawrence Sirovich*. Springer Applied Mathematical Sciences Series. Ehud Kaplan, Jerrold E. Marsden, and Katepalli R. Sreenivasan Eds. (May 2003), 23-89. ISBN: 0-387-00312-6; Um link alternativo é <http://arxiv.org/abs/nlin.AO/0204062>
- [20] H. K. Janssen, *Z. Phys. B: Condens. Matter* *42*, **151** (1981).
- [21] G. Odor, *Rev. Mod. Phys.* *76*, **663** (2004).

- [22] B. Derrida and D. Stauffer, *Europhys. Lett.* 2, **739** (1986).
- [23] H. E. Stanley, D. Stauffer, J. Kertész e H. Herrmann, *Phys. Rev. Lett.* 59, **2326** (1987).
- [24] U. M. S. Costa, *J. Phys. A* 20, **L583** (1987).
- [25] P. Grassberger, *J. Stat. Phys.* 79, **13** (1995).
- [26] P. Erdős e A Rényi, *Publ. Math. Inst. Hung. Acad. Sci.* 79, **17** (1960).
- [27] B. Bollobás. *Discrete Math.* 33(1), **1** (1981).
- [28] Derek J. De Solla Price, *Science* 149, **510** (1965).
- [29] Stanley Milgram, *Psychology Today* 2, **60** (1967).
- [30] D. J. Watts e S. H. Strogatz, *Nature* 393, **440** (1998).
- [31] S. Redner, *Eur. Phys. J. B* 4, **131** (1998).
- [32] R. Albert, H. Jeong, and A.-L. Barabási, *Nature* 401, **130** (1999).
- [33] R. Albert e A.-L. Barabási, *Rev. Mod. Phys.* 74, **47** (2002).
- [34] M. Faloutsos, P. Faloutsos e C. Faloutsos, *Comput. Commun. Rev.* 29, **251** (1999).
- [35] F. Liljeros, C. R. Edling, L. A. N. Amaral, H. E. Stanley e Y. Aberg, *Nature (London)* 411, **907** (2001).
- [36] J. E. M. Newman, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 98, **404** (2001), J. E. M. Newman, *Phys. Rev. E* 64, **016131** (2001), J. E. M. Newman, *Phys. Rev. E* 64, **016132** (2001).
- [37] A.-L. Barabási e R. Albert, *Science* 286, **509** (1999).
- [38] H. Jeong, B. Tombor, R. Albert, Z. N. Oltvai, and A.-L. Barabási, *Nature*, 407, **651** (2000).
- [39] J. Abello, P. M. Pardalos e M. G. C. Resende, *DIMACS Series in Discrete Mathematics and Theoretical Computer Science (American Mathematical Society, Providence)* 50, **119** (1999).
- [40] H. E. Stanley, *Rev. of Mod. Phys.* 71, **S358** (1999).
- [41] K. G. Wilson, *Rev. Mod. Phys.* 47, **773** (1975).
- [42] H. E. Stanley, L. A. N. Amaral, P. Gopikrishnan, P. C. Ivanov, T. H. Keittb e V. Pleroua, *Physica A* 281, **60** (2000).
- [43] S. N. Dorogovtsev e J. F. F. Mendes, *Phys. Rev. E* 63, **056125** (2001).
- [44] P. L. Krapivsky e S. Redner, *Phys. Rev. Lett.* 86, **5401** (2001).
- [45] A.-L. Barabási, R. Albert, H. Jeong, *Physica A* 272, **173** (1999).

- [46] S. Carmi, S. Havlin, S. Kirkpatrik, Y. Shavitt and E. Shir, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **104**, 11150 (2007).
- [47] V. Batagelj, M. Zaversnik, <http://arxiv.org/abs/cs/0202039v1>
- [48] S. N. Dorogovtsev, A. V. Goltsev and J. F. F. Mendes, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 040601 (2006)
- [49] B. Pittel, J. Spencer and N. Wormald, *J. Comb. Theo., Series B* **67**, 111 (1996)
- [50] J. I. A. Hamelin, L. Dall'Asta, A. Barrat and A. Vespignani, <http://arxiv.org/abs/cs/0511007v4>.
- [51] M. Baur and M. Gaertler, R. Görke, M. Krug and D. Wagner, *Proc. Euro. Conf. Comp. Sys. (ECCS'07)* (2007)
- [52] S. N. Dorogovtsev, A. V. Goltsev and J. F. F. Mendes, *Physica D* **224**, 7 (2006).
- [53] A.-L. Barabási, R. Albert, and H. Jeong, *Phys. A* **281** **69** (2000).
- [54] S. R. Broadbent and J.M. Hammersley, *Proc. of the Camb.e Phyl. Soc.* **53**, **629** (1957).
- [55] D. Stauffer e A. Aharony, *Introduction to Percolation Theory*, Taylor & Francis, Philadelphia, 1994.
- [56] J. Feder, *Fractals*, Plenum Press. 1998
- [57] B. Sapoval, M Rosso e J. F. Gouyet, *J. Physique Lett.* **46**, **L149** (1985).
- [58] R. M. Ziff, P. T. Cummings e G. Stell, *J. Phys Q: Math Gen.* **17**, **3009** (1984).
- [59] P. Grassberger, *Physica A* **262**, **251** (1999).
- [60] H. J. Herrmann e H. E. Stanley, *Phys. Rev. Lett.* **53**, **1121** (1984).
- [61] M. Barthélémy, S. V. Buldyrev, S. Havlin e H. E. Stanley, *Phys. Rev. E* **60**, **R1123** (1999).
- [62] I. Dayan, J. F. Gouyet e S. Havlin, *J. Phys. A* **24**, **L287** (1991).
- [63] M. Sahimi, *Applications of Percolation Theory*, Taylor & Francis, London, 1994.
- [64] F. A. Dullien, *Porous Media - Fluid Transport and Pore Structure*, Academic, New York, 1979.
- [65] H. A. Makse, G.W. Davies, S. Havlin, P. C. Ivanov, P. R. King, and H. E. Stanley, *Phys. Rev. E* **54**, **3129** (1996); H. A. Makse, S. Havlin, P. C. Ivanov, P. R. King, S. Prakash, and H. E. Stanley, *Physica A* **233**, **587** (1996); H. A. Makse, S. Havlin, P. R. King, and H. E. Stanley, *Nature* **386**, **379** (1997).
- [66] A. -L. Barabási e H.E. Stanley, *Fractal Concepts in Surface Growth*, Cambridge University Press (1995).