



UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA - UFBA  
INSTITUTO DE FÍSICA

Pós-Graduação

**Caracterização da dinâmica de difusão e  
caminhadas aleatórias em redes  
complexas e multicamadas com conexões  
de longa distância**

Alfredo Blanco Serrano

Tese de Doutorado

Salvador - Bahia  
2022



UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA - UFBA  
INSTITUTO DE FÍSICA

Alfredo Blanco Serrano

**Caracterização da dinâmica de difusão e caminhadas  
aleatórias em redes complexas e multicamadas com conexões  
de longa distância**

*Proposta de tese apresentada ao programa de pós-graduação em Física da Universidade Federal da Bahia, como requisito parcial para obtenção do grau de doutor em Física.*

Orientador: *Prof. Dr. Roberto Fernandes Silva Andrade*  
Co-orientador: *Prof. Dr. Alfonso Allen-Perkins*

Salvador - Bahia  
2022



*"Ainda neste momento o tempo mostra como não estamos  
preparados para afrontar o futuro, só temos nossas  
escolhas e coragem para encarar o que esta por vir"  
A meu padre.*



# Agradecimentos

Neste processo de formação como Doutor em Física conheci diversas pessoas que me ajudaram em muitas ocasiões e, provavelmente, elas não sejam conscientes do grande aporte que realizaram a minha vida profissional e pessoal. Neste pequeno espaço eu quero plasmar um reconhecimento a todas aquelas pessoas e seus grandes corações.

- A meus amigos: Leonardo Fabio, Luz Adriana, Laura Lara, Fabio Alexis, Edwin David, Carolina Luna, Stepfany Chacon, Edgar Mozo, Nain, Marcos Paulo, Maria Angelica e minha namorada Fiorella Lopez.
- A meu orientador o Dr Roberto Fernandes Silva Andrade e meu co-orientador o Dr Alfonso Allen-Perkins, que me ajudaram muito na realização deste trabalho tanto no profissional como com sua amizade.

Quero dar um agradecimento especial a minha mãe Sara Serrano Rueda junto com minha irmã Olga Lucia Blanco Serrano que nunca hesitaram em me dar sua ajuda e amor. A meu pai que sempre me mostrou seu orgulho e respeito agradeço por suas ensinanças e bom coração, sempre estará em minha memória.

Finalmente agradeço ao instituto de Física da UFBA por seu apoio tanto humano como de recursos e à CAPES e CNPQ por apoiar minha formação.





# Resumo

Neste trabalho aborda-se a difusão em redes finitas considerando o modelo de caminhantes aleatórios com voos de Lévy e uma nova formulação da teoria espectral com conexões de longa distância. A caracterização da difusão se analisa sobre um espaço discreto que é descrito pela topologia da cadeia linear unidimensional, pelos casos específicos de redes bidimensionais como o toro helicoidal e o toro normal, e pelo modelo de redes multi-camadas. Em geral, a abordagem clássica da difusão é descrita como o resultado das interações entre vértices adjacentes. Não obstante, nesta investigação a difusão é estendida para um processo que pode considerar todas as interações possíveis entre vértices de uma rede. Neste caso, as interações de longa distância são controladas por um parâmetro  $\alpha$ . Assim, o formalismo apresentado neste trabalho será uma generalização da abordagem clássica da difusão. Especificamente para o método de caminhantes aleatórios com voos de Lévy, a difusão é descrita no tempo discreto. Neste caso, é esperado que a distância quadrática média dos caminhantes aleatórios possa ser descrita por uma lei de potências  $MSD \equiv \langle r^2 \rangle \sim t^\gamma$  durante um intervalo de tempo finito, onde o parâmetro  $\gamma$  permite caracterizar o comportamento difusivo. Usando a abordagem do problema inverso e a propriedade circulante do toro helicoidal, mostra-se uma dedução analítica de uma expressão que realiza um ajuste preciso na distribuição de probabilidade dos caminhantes aleatórios para descrever um processo de super-difusão bem definido até o estado de saturação. Isto permite que os resultados mostrem uma redução drástica do tempo computacional quando utilizamos redes da ordem de  $10^4$  nós. Para complementar esta investigação, mostra-se também um novo formalismo de um modelo de rede multi-camada que esta fundamentado na Transformada de Mellin ou na Transformada de Laplace. Assim, estudamos a difusão no modelo de rede Multiplex analisando as propriedades espectrais da matriz Laplaciana com conexões de longa distância. Os resultados conseguidos para uma rede Multiplex com duas camadas mostram que o tempo de relaxação das camadas com ligações de longa distância pode ser mais rápido do que a rede Multiplex. Isto sugere que o tempo de relaxamento do processo de difusão no modelo de rede Multiplex pode ser manipulado com um aumento das interações em uma das camadas.

**Palavras-chave:** Difusão em Redes, Distância quadrática média, Conexões de longa distância, Super-difusão em Redes, Transformada de Mellin, Transformada de Laplace.



# Abstract

In this work we address diffusion in finite networks by considering the Lévy random walks model and a new formulation of spectral theory with long-distance connections. The characterization of diffusion is analyzed on discrete-space that is described by the topology of a the linear chain, the specific cases of two-dimensional networks such as the helical tori and the normal tori, and by the multi layer network model. In general, the classical approach to diffusion is described as the result of interactions between adjacent vertices. Nevertheless, in this investigation the diffusion is extended to include processes that can consider all possible interactions between vertices in a network. In such case, the long-range interactions are controlled by a parameter  $\alpha$ . Thus, the formalism presented in this work is a generalization of the classical approach to diffusion. Specifically for the Lévy random walks model, the diffusion is described on discrete-time. It is expected that the mean square displacement of a random walker behaves like a power law  $MSD \equiv \langle r^2 \rangle \sim t^\gamma$  during a finite time interval, where  $\gamma > 0$  allows to characterize the diffusive behavior. Using the inverse problem approach and the circulant property of the helical tori, here it is shown an analytical deduction of an expression that realize a precise tuning on the probability distribution of the random walkers to describe a well-defined super-diffusion process up to the saturation state. This allows that the results show a drastic reduction of the computational time when we use networks of the order of  $10^4$  nodes. To complement this investigation it is also shown a new formalism on a multi-layer network model that is based on Mellin transform or Laplace transform. Thus, we study diffusion in the Multiplex network model by analyzing the spectral properties of Mellin-transformed Laplacian matrix. The results for the case of a Multiplex networks with two layers show that timescale of layers with long-distance connections may be faster than that Multiplex network. This suggests that the relaxation time of the diffusion process on Multiplex network model can be manipulated with a increase the long-distance connections in a layer.

**Keywords:** Diffusion on Networks, mean square displacement, long-distance connections, Super-diffusion on Networks, Mellin transform, Laplace transform.



# Sumário

	<b>Página</b>
<b>Capítulo 1—Agradecimentos</b>	<b>vii</b>
<b>Capítulo 2—Introdução</b>	<b>1</b>
<b>Capítulo 3—Redes Complexas</b>	<b>7</b>
3.1 Redes complexas e conceitos básicos.	7
3.2 Rede regular	12
3.3 Rede circulante	15
3.4 Rede aleatória	18
3.5 Redes de mundo pequeno	19
3.6 Redes Multiplex	23
<b>Capítulo 4—Difusão em Redes</b>	<b>27</b>
4.1 Introdução	27
4.2 Caminhantes aleatórios	29
4.3 Difusão em redes usando caminhantes aleatórios	32
4.4 Análise da difusão usando o espectro da matriz Laplaciana	36
4.5 Difusão em redes Multiplex	39
<b>Capítulo 5—Difusão em redes com conexões de longa distância e o problema inverso</b>	<b>43</b>
5.1 Método de LRW no espaço discreto	44
5.2 Problema inverso	47
5.3 Análise espectral da difusão com conexões de longa distância	52
5.4 Difusão em redes Multiplex com conexões de longa distância	53
<b>Capítulo 6—Resultados e Discussões</b>	<b>57</b>
6.1 Difusão em redes de cadeia Circular	58
6.2 Super-difusão em RCC através do método do problema inverso	64
6.3 Difusão usando LRW no Toro Helicoidal	66
6.4 Super-difusão no Toro Helicoidal	72
6.5 Indução de super-difusão em uma rede não circulante	76

6.6	Análise da redução do tempo computacional	78
6.7	Análise espectral da difusão com conexões de longa distância	80
<b>Capítulo 7—Conclusões</b>		<b>89</b>

# Lista de Figuras

- 2.1 (a) Desenho da cidade de Königsberg ilustrando com diferentes números coloridos as porções de terra que estão separadas pelas pontes. (b) Grafo criado por Euler para abstrair e solucionar o problema das pontes de Königsberg. Observe que cada vértice ou nó deste grafo corresponde com as porções de terra, portanto, as sete arestas são as pontes. Fonte: Adaptado de wikipedia.org pelo Autor 2
- 2.2 Exemplos de redes regulares infinitas. (a) rede regular hexagonal, observe que cada vértice tem conexão com três vértices vizinhos. (b) rede regular formada como uma composição de varias redes com forma circular. Fonte: Autor 3
- 3.1 Exemplos básicos de redes. (a) Rede não conexa de cinco vértices e duas componentes. (b) Rede simples e conexa. (c) Digrafo de seis vértices não conexo. (d) Rede ponderada de quatro vértices. Fonte: Autor. 8
- 3.2 Comparação de duas redes regulares em um espaço euclidiano. (a) Rede regular bidimensional infinita usada na teoria dos grafos. Fonte: Autor. (b) rede hexagonal do grafeno gerada por seus vetores primitivos  $\vec{a}_1$  e  $\vec{a}_2$ , usada na cristalografia. Fonte: Adaptado de [33] pelo Autor. 12
- 3.3 Redes regulares de diferentes dimensionalidades. (a) Rede de cadeia linear infinita em uma dimensão de grau  $k = 2$ , (b) rede hexagonal infinita em duas dimensões de grau  $k = 3$ , (c) rede cubica em três dimensões com grau  $k = 6$ . Repare que foi ressaltado em vermelho o grau constate característico da rede regular. Fonte: Autor 13
- 3.4 Exemplo da aplicação de condições periódicas de contorno sobre uma rede regular infinita, sem perder sua propriedade regular. (a) Rede quadrada regular infinita. (b) Toro normal (TN), ou rede regular quadrada com condições periódicas de contorno verticais e horizontais. (c) Ilustração do toro normal. Note que apesar das condições de contorno aplicadas sobre a rede quadrada esta mantém o grau constante dos vértices e sua dimensionalidade. Fonte: Autor. 14

- 3.5 Exemplos da rede de cadeia circular com conexão de primeiros vizinhos de tamanho  $N = 10$ . (a) Rede de cadeia circular com primeiros vizinhos,  $m = 1$  e  $k = 2$ . (b) Rede de cadeia circular com primeiros e segundos vizinhos,  $m = 2$  e  $k = 4$ . Note que, o diâmetro da rede de cadeia circular é proporcional ao tamanho da rede  $d_{max} \sim N$ . Fonte: Autor. 14
- 3.6 Representação de um Toro Helicoidal (TH) de tamanho  $N = 5 \times 5$ . Note que, tanto o TN como o TH são redes criadas a partir de uma rede quadrada com condições de contorno periódicas diferentes. Fonte: Autor 17
- 3.7 Comparação da propriedade cíclica para duas redes regulares usando as matrizes de adjacência. (a) Rede cadeia circular com  $N = 8$  e  $k = 2$ . (b) Toro normal de  $N = 4 \times 4$  e  $k = 4$ . Note que, para facilitar a verificação da propriedade cíclica nas matrizes de adjacência das duas redes regulares foram ressaltadas em cor azul e vermelho as duas diagonais a cada lado da diagonal principal. Portanto, apesar que as duas redes são regulares a rede de cadeia circular apresenta a propriedade circulante e o TN não. Fonte: Autor 17
- 3.8 Exemplo de duas redes aleatórias formadas com valores de probabilidade diferentes e  $N = 27$ . (a) Rede aleatória conexa gerada com  $\rho > \ln N/N$ . (b) Rede aleatória desconexa gerada com  $\rho < \ln N/N$ . Note que no painel (b) as arestas em cor preta ressaltam as partes onde a rede aleatória é desconexa. Fonte: Autor 18
- 3.9 Ensemble ou conjunto de todas as redes aleatórias possíveis para uma rede aleatória de tamanho  $N = 3$  e  $E = 2$ . Note que cada rede do ensemble tem igual probabilidade de ser gerada pelo modelo de rede aleatória. Fonte: Autor 19
- 3.10 Desenho apresentado no artigo de Watts-Strogatz, sobre a formação de uma rede de mundo pequeno em função do parâmetro de probabilidade  $\rho$ . Fonte: [45]. 20
- 3.11 Resultados numéricos de 250 realizações do modelo Watts-Strogatz, iniciando com uma rede de cadeia circular de tamanho  $N = 1000$  e  $k = 10$ . Na figura apresentam-se a distância média normalizada  $L(\rho)/L(0)$  e o coeficiente de clusterização normalizado  $C(\rho)/C(0)$ , em função do valor do parâmetro de probabilidade  $\rho$ . A faixa de cor verde é uma guia, para facilitar a observação do regime de mundo pequeno no modelo Watts-Strogatz. Fonte: Autor. 21
- 3.12 Desenho ilustrativo do modelo Newman-Watts. (a) Exemplo de criação de uma rede de mundo pequeno no modelo Newman-Watts, iniciando com uma RCC com  $m = 1$ ,  $N = 24$  e  $E = 24$ . (b) Aplicação do modelo Newman-Watts, usando como substrato uma RCC com conexões de primeiros, segundos e terceiros vizinhos  $m = 3$  de um tamanho  $N = 24$  e número de arestas  $E = 72$ . Note que a densidade de arestas no modelo Newman-Watts varia segundo o valor do parâmetro de probabilidade  $\rho$  e que, em comparação com o modelo Watts-Strogatz, todas as redes geradas pelo modelo Newman-Watts serão sempre redes conectadas. Fonte: [47]. 22
- 3.13 Comparação dos resultados numéricos para 250 realizações do modelo Newman-Watts. (a) RCC de tamanho  $N = 1000$  e  $k = 10$ . (b) RCC de tamanho  $N = 1000$  e  $k=2$ . A faixa de cor verde é uma guia, para facilitar a observação do regime de mundo pequeno no modelo Newman-Watts. Fonte: Autor. 22



- 3.14 Representação ilustrativa de uma rede Multiplex de duas camadas formada por duas redes de 6 vértices. Note que se satisfaz a condição de homogeneidade e a conexão única inter-camada. Fonte: Adaptado de [58] pelo Autor. 24
- 4.1 Relação entre o coeficiente de difusão inter-camada  $D_x$  e o espectro de autovalores de uma rede Multiplex formada por duas redes simples de 6 vértices. Repare que o espectro é dividido em dois subconjuntos quando  $D_x$  tende para infinito. Fonte: Autor 41
- 4.2 Relação entre  $\Lambda$  e  $D_x$  para uma rede Multiplex de duas camadas formada pelas redes Erdős-Rényi e Watts-Strogatz de 500 vértices cada uma. Observe que quando  $D_x < 1$  o segundo autovalor do Multiplex exibe um regime linear  $\Lambda = 2D_x$ . Por outra parte, quando  $D_x \rightarrow \infty$  o valor de  $\Lambda$  converge ao estado de relaxamento que está definido pelo segundo autovalor da matriz Laplaciana de uma rede formada pela superposição das redes que compõem o Multiplex, ou seja,  $\lambda_2$  de  $(L_1 + L_2)/2$ . Note que as linhas horizontais tracejadas correspondem ao segundo autovalor de cada uma das redes que compõem a rede Multiplex e à superposição destas. Fonte:Autor. 42
- 6.1 Cálculo do  $MSD$  em uma RCC de tamanho  $N = 10000$  com  $m = 1$ . (a) Resultados analíticos conseguidos através da Equação 6.2 (linha vermelha) e simulação de 30000 caminhantes aleatórios (círculos azuis). (b) Cálculo da derivada numérica dos resultados analíticos apresentados na figura (a). Repare que o ajuste linear apresentado no gráfico (a) foi realizado considerando o intervalo  $0 < t < t_{sat}$  e mostra o comportamento médio do parâmetro de difusão  $\gamma$  (ver Equação 6.1). As linhas tracejadas em cor preta, representam uma guia do comportamento esperado em um processo de difusão normal  $\langle r^2 \rangle \sim t$ . Fonte:Autor. 59
- 6.2 Estimação do  $MSD$  usando a Equação 6.2, para diferentes tamanhos da RCC com  $m = 1$ . (a) Evolução temporal do  $MSD$  em função do tempo para  $N = 1001$  (linha vermelha),  $N = 5001$  (linha verde),  $N = 10001$  (linha azul),  $N = 20001$  (linha cinza). (b) Derivada numérica realizada aos resultados apresentados no painel (a). As linhas tracejadas em cor preta representam uma guia do comportamento esperado em um processo de difusão normal, ou seja,  $\langle r^2 \rangle \sim t$ . Fonte:Autor. 60
- 6.3 Generalização do comportamento de difusão mostrado pela Figura 6.2 para diferentes tamanhos da RCC com conexões a primeiros vizinhos. A linha tracejada em cor preta no painel (a) é uma guia do estado de saturação normalizado. O painel (b) corresponde com a derivada numérica do colapso do  $MSD$  apresentado pelo painel (a) e linha tracejada em cor preta representa uma guia do comportamento esperado em um processo de difusão normal  $\langle r^2 \rangle \sim t$ . Observe que através deste gráfico podemos generalizar o comportamento difusivo para uma RCC. Fonte:Autor. 61

- 6.4 Cálculo analítico do  $MSD$  para uma RCC de tamanho  $N = 20000$  e diferentes valores de conectividade local  $k = 2m$ . (a) Comportamento difusivo para  $m = 1$  (linha vermelha),  $m = 2$  (linha verde),  $m = 5$  (linha azul) e  $m = 10$  (linha cinza). Observe que quanto maior é a conectividade da RCC menor é o valor do  $MSD$  no estado de saturação. (b) Derivada numérica do comportamento difusivo apresentado pelo gráfico em (a). Note que nos primeiros passos de tempo o processo difusivo apresenta um transiente de sub-difusão (ou seja,  $(\gamma < 1)$ ). No entanto, este comportamento temporal tende a retornar ao estado de difusão normal mostrando que o teorema do limite central continua válido. A linha tracejada em cor preta representa uma guia do comportamento esperado em um processo de difusão normal  $\langle r^2 \rangle \sim t$ . Fonte:Autor. 62
- 6.5 (a) Relação entre a densidade de arestas  $\xi$  e  $\gamma_{min}$  apresentado na Figura 6.4(b). (b) Relação entre o estado de saturação da RCC e a densidade da arestas. Observe que os ajustes lineares, apresentados nos dois gráficos, permitem mostrar que a relação das duas grandezas com a densidade de arestas segue uma lei de potência para a RCC. Fonte:Autor. 63
- 6.6 Cálculo de  $\alpha(t)$  usando a Equação 5.29 para uma RCC  $N = 16007$ . Série de valores  $\alpha(t)$  usados na TM, para obter um processo difusivo uniforme com  $\gamma = 1.8$  (linha vermelha) e  $\gamma = 2.5$  (linha verde). Fonte:Autor. 64
- 6.7 Resultados numéricos do  $MSD$  para uma RCC de tamanho  $N = 16007$  com  $m = 1$  usando a TM com a série de dados  $\alpha(t)$ , apresentados na Figura 6.6. (a) Comportamentos difusivos quando  $\gamma = 1$  (linha vermelha),  $\gamma = 1.8$  (linha azul),  $\gamma = 2.0$  (linha verde) e  $\gamma = 2.5$  (linha amarela). (b) Derivada numérica do resultado do gráfico (a). As linhas tracejadas em cor preta representam uma guia do comportamento esperado em cada um dos estados super-difusivos. Fonte: Autor. 65
- 6.8 Relação entre  $\log_{10} \alpha(1)$  e  $\log_{10} \gamma$ , para uma RCC com  $N = 2001$ . Note que, quanto maior é o valor de  $\gamma$ , a probabilidade de pular um caminhante aleatório uma distância  $d_{ij} > 1$ , será maior. Fonte:Autor. 66
- 6.9 Gráfico da função  $\chi(t)$  realizado com a utilização da Equação 6.25. Observe que a linha tracejada de cor azul destaca o momento no qual o processo de difusão alcança o estado de saturação para um dado TH (ver Equação 6.22). A linha tracejada em cor preta representa o valor ao qual a função  $\chi(t)$  tende quando  $t \rightarrow t_{sat}$ . Fonte:Autor. 71
- 6.10 Comparação dos resultados analíticos do MSD em um TH de tamanho  $N = 51 \times 51$ . (a) Comportamento difusivo através da Equação 6.2 (círculos azuis) e a Equação 6.22 (linha vermelha). (b) Derivada numérica do comportamento do  $MSD$  apresentado no gráfico (a). A linha tracejada em cor preta, representa uma guia do comportamento esperado em um processo de difusão normal  $\langle r^2 \rangle \sim t$  Fonte: Autor. 71

- 6.11 Cálculo do *MSD* usando a Equação 6.22, para o TH com diferentes tamanhos  $N$ . (a) Comportamento difusivo do TH para  $N = 125 \times 125$  (linha azul),  $N = 185 \times 185$  (linha amarela),  $N = 315 \times 315$  (linha verde),  $N = 401 \times 401$  (linha vermelha). (b) Cálculo numérico da derivada dos resultados do *MSD* apresentados no gráfico (a). Note que os gráficos inseridos apresentam o colapso do comportamento difusivo. A linha tracejada em cor preta representa uma guia do comportamento esperado em um processo de difusão normal  $\langle r^2 \rangle \sim t$ . Fonte: Autor. 72
- 6.12 Comparação do cálculo do *MSD* usando diferentes valores constantes de  $\alpha$  na Equação 6.22 para um TH de tamanho  $N = 51 \times 51$ . (a) Comportamento difusivo para  $\alpha = 1000$  (círculos vermelhos),  $\alpha = 4$  (diamantes verdes),  $\alpha = 3$  (pentágonos azuis) e  $\alpha = 2$  (quadrados amarelos). (b) Derivada numérica dos resultados apresentados no painel(a). Repare que no painel (b) da derivada o gráfico inserido mostra que quanto maior é o comportamento super-difusivo temporal inicial, menor será o valor de  $\alpha$ . A linha tracejada em cor preta representa uma guia do comportamento esperado em um processo de difusão normal, ou seja,  $\langle r^2 \rangle \sim t$ . Fonte: Autor. 73
- 6.13 Evolução temporal de  $\alpha(t)$  conseguida usando a solução do problema inverso (ver Equação 6.26) para um processo de super-difusão no TH quando  $t \leq t_{sat}$ . Os resultados obtidos consideram dois valores diferentes de  $\gamma$  os quais são:  $\gamma = 1.6$  para  $N = 61 \times 61$  (linha pontilhada amarela com círculos) e  $N = 185 \times 185$  (linha tracejada com pontos azul e cruces).  $\gamma = 2.0$  para  $N = 61 \times 61$  (linha preta com diamantes) e  $N = 185 \times 185$  (linha tracejada verde com pentágonos). Fonte: Autor. 75
- 6.14 (a) Evolução temporal do *MSD* para um TH usando a série de valores  $\alpha(t)$  da Figura 6.13 para  $\gamma = 1.6$ ,  $\gamma = 2.0$  e  $N = 61 \times 61$  e  $N = 185 \times 185$ . Note que o código de cores usado neste gráfico é igual ao mostrado na Figura 6.13. (b) Derivada numérica de  $\log_{10} \langle r^2 \rangle$  em função de  $\log_{10} t$ . A linha preta tracejada no gráfico da derivada numérica é uma guia para ressaltar os valores de  $\gamma = 1.6$  e  $\gamma = 2.0$ . Fonte: Autor. 75
- 6.15 (a) Evolução temporal do *MSD* utilizado simulações de caminhantes aleatórios sobre um TH usando a série de valores  $\alpha(t)$  da Figura 6.13 para  $\gamma = 1.6$ ,  $\gamma = 2.0$  e  $N = 185 \times 185$ . Note que o código de cores usado é igual ao mostrado na Figura 6.13. (b) Derivada numérica de  $\log_{10} \langle r^2 \rangle$  em função de  $\log_{10} t$ . A linha preta tracejada no gráfico da derivada numérica é uma guia para ressaltar os valores de  $\gamma = 1.6$  e  $\gamma = 2.0$ . Fonte: Autor. 76
- 6.16 Relação entre o erro relativo  $\zeta$  e o número de caminhadas aleatórias  $\varphi$  usadas para estimar  $\gamma$  no TN e o TH com  $N = 185 \times 185$ . Resultados para o TH com  $\gamma = 2.5$  (linha vermelha) e  $\gamma = 2.0$  (linha pontilhada verde) e, resultados para TN com  $\gamma = 2.5$  (linha tracejada azul) e  $\gamma = 2.0$  (linha traco-ponto amarela). Fonte: Autor. 78

- 6.17 Estimação do tempo computacional como uma função do tamanho de um TH. A linha preta representa o resultado usando a implementação do método geral (MG) através da Equação 5.11, a linha azul corresponde ao algoritmo realizado considerando a propriedade espectral (PE) da rede circulante do TH, e a linha amarela é o algoritmo baseado na no vetor circulante (VC). Note que, todas as estimações realizadas mostram uma lei de potência com expoentes  $\zeta_{MG} = 3.4$ ,  $\zeta_{PE} = 2.1$  e  $\zeta_{VC} = 2.4$ . Fonte: Autor. 79
- 6.18 Relação entre  $\Lambda$  e  $D_x$  para uma rede Multiplex de 2000 nós formada por duas camadas idênticas de redes Watts-Strogatz com conexões de longa distância definidas através dos parâmetros de ajuste  $\alpha$  e  $\beta$ . (a) Resultados da aplicação da TM considerando diferentes valores de  $\alpha$  sobre as duas redes que formam o Multiplex. (b) Resultados da aplicação da TL considerando diferentes valores de  $\beta$  sobre as duas redes que formam o Multiplex. A linha solida preta é uma guia para identificar o regime linear definido por  $\Lambda = 2D_x$ . Fonte: Autor. 82
- 6.19 Relação entre  $\Lambda$  e  $D_x$  para uma rede Multiplex de 2000 nós formada por duas camadas idênticas de redes Erdős-Rényi com conexões de longa distância. (a) Resultados da aplicação da TM sobre as duas redes que formam o Multiplex. (b) Resultados da aplicação da TL sobre as duas redes que formam o Multiplex. A linha solida preta é uma guia para identificar o regime linear definido por  $\Lambda = 2D_x$ . Fonte: Autor. 82
- 6.20 Relação entre  $\Lambda$  e  $D_x$  para uma rede Multiplex de 2000 nós formada por duas redes idênticas Watts-Strogatz com conexões de longa distância sobre uma das camadas. (a) Gráfico espectral que exhibe a aplicação da TM sobre uma das redes que formam o Multiplex. (b) Gráfico espectral da aplicação da TL sobre uma das redes que formam o Multiplex. A linha preta solida e tracejada são uma guia para ressaltar os regimes lineares  $\Lambda = 2D_x$  e  $\Lambda = D_x$ . Fonte: Autor. 84
- 6.21 Relação entre  $\Lambda$  e  $D_x$  para uma rede Multiplex de 2000 nós formada por duas redes idênticas Erdős-Rényi com conexões de longa distância sobre uma das camadas. (a) Gráfico espectral que exhibe a aplicação da TM sobre uma das redes que formam o Multiplex. (b) Gráfico espectral da aplicação da TL sobre uma das redes que formam o Multiplex. A linha preta solida e tracejada são uma guia para ressaltar os regimes lineares  $\Lambda = 2D_x$  e  $\Lambda = D_x$ . Fonte: Autor. 84
- 6.22 Relação de conectividade considerando a Equação 6.29 para uma rede Multiplex com duas camadas idênticas Watts-Strogatz, quando aplicamos conexões de longa distância sobre uma das redes do Multiplex. A linha solida azul com quadrados exhibe a relação de conectividade  $\eta$  e o parâmetro de ajuste  $\beta$  que corresponde à aplicação da TL. A linha verde tracejada com círculos exhibe a relação de conectividade  $\eta$  e o parâmetro de ajuste  $\alpha$  que corresponde à aplicação da TM. Note que a pequena diferença entre estas relações de conectividade são uma consequência das diferenças matemáticas entre a TM e a TL. Fonte: Autor. 85

- 6.23 Relação entre  $\Lambda$  e  $D_x$  para uma rede Multiplex de 2000 nós formada pelas redes Barabási-Albert e Watts-Strogatz com a aplicação da TM. (a) Gráfico espectral que exhibe a aplicação da TM sobre as duas redes que compõem o Multiplex. (b) Gráfico espectral do Multiplex com a aplicação da TM sobre a rede com a menor conectividade. A linha preta sólida e tracejada são uma guia para ressaltar os regimes lineares  $\Lambda = 2D_x$  e  $\Lambda = D_x$ . Fonte:Autor. 87
- 6.24 Relação entre  $\Lambda$  e  $D_x$  para uma rede Multiplex de 2000 nós formada pelas redes Erdős-Rényi e Watts-Strogatz com a aplicação da TL. (a) Gráfico espectral que exhibe a aplicação da TL sobre as duas redes que compõem o Multiplex. (b) Gráfico espectral do Multiplex com a aplicação da TL sobre a rede com a menor conectividade. A linha preta sólida e tracejada são uma guia para ressaltar os regimes lineares  $\Lambda = 2D_x$  e  $\Lambda = D_x$ . Fonte:Autor. 87
- 6.25 Relação de conectividade para as redes Multiplex definidas nas Figuras 6.23 e 6.24 em função do parâmetro de ajuste  $\alpha$  e  $\beta$ . Painel (a) relação entre  $\eta$  e o parâmetro de ajuste  $\alpha$  da TL. A linha vermelha e azul correspondem aos casos onde aplicamos a TM sobre uma camada e sobre as duas camadas que compõem o Multiplex. (b) relação entre  $\eta$  e o parâmetro de ajuste  $\beta$  da TL. A linha verde e roxo correspondem aos casos onde aplicamos a TL sobre uma camada e sobre as duas camadas que compõem o Multiplex. Repare que a linha azul e vermelha representam respectivamente, os casos onde são aplicadas conexões de longa distância sobre uma das camadas e sobre as duas camadas do Multiplex. A linhas pretas tracejadas nos dois gráficos ajuda a identificar quando há super-difusão. Repare que a máxima super difusão nos dois painéis corresponde com  $\lambda^1 \simeq \lambda^2$ . Fonte:Autor. 88



# Capítulo 2

## Introdução

O progresso das ciências se deve em muitas circunstâncias, a uma busca para descrever e analisar fenômenos que são observados na natureza. Por esse motivo os cientistas realizam investigações que desembocam na criação de diferentes ferramentas analíticas e experimentais o que permite, em muitos casos, evidenciar as informações necessárias para realizar uma análise rigorosa dos efeitos físicos apresentados por um problema. Desta forma, pode-se pensar que tanto a física como a matemática apresentam um grande potencial de recursos abstratos e analíticos que são usadas como ferramentas para grandes investigações com resultados plausíveis que mostram uma melhor visão dos processos que acontecem ao nosso redor. Toda esta informação resultante é concentrada de forma rigorosa em definições e teoremas que permitem complementar as investigações realizadas em outras áreas, portanto, a ciência representa um papel importante no desenvolvimento da humanidade. Por outra parte, quando consegue-se mostrar os princípios que descrevem um novo problema observado na natureza ocasiona-se a criação de diferentes linhas de investigação. Isto permite que a informação resultante seja uma consequência da conexão e complementaridade entre todas as linhas de investigação e outras disciplinas além da física.

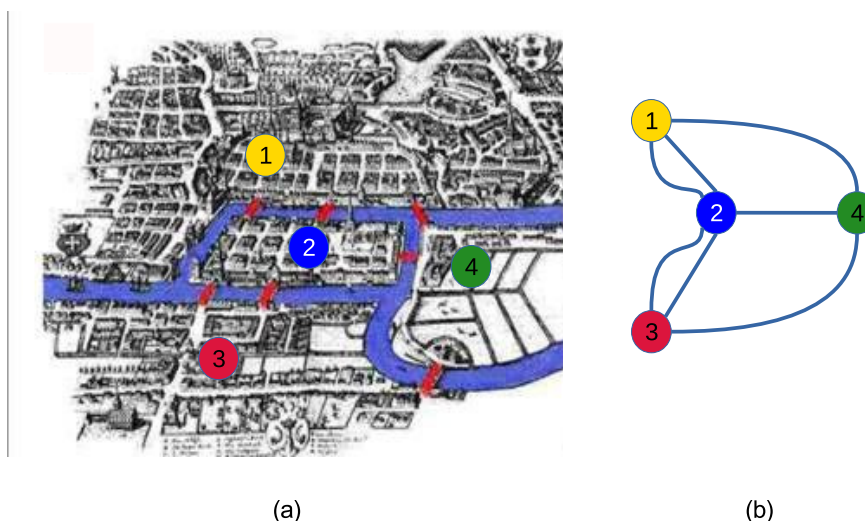
Um caso importante que iniciou com um problema aparentemente simples e que é relevante para o conteúdo desta tese, é o começo da teoria dos grafos. Na literatura se relaciona o início da teoria dos grafos com a solução do problema *das sete pontes de Königsberg* (ver Figura 2.1). Este problema consistia em verificar se alguém poderia atravessar todas as pontes, em uma única caminhada continua, com a restrição de que cada ponte fosse atravessada uma única vez (ver Figura 2.1(a)). Apesar que este problema não aparentava ser de grande importância o matemático e físico suíço Leonhard Euler (1707 – 1783) encontrou uma resposta ao problema em 1736 e dois anos depois em 1738 Euler escreveu um artigo com a solução não formal do problema [1] <sup>1</sup>. Inicialmente para Euler o problema de Königsberg parecia banal ou trivial, mas ele reconhecia seu interesse em achar uma resposta já que não tinha uma solução aparente mediante as ferramentas matemáticas dadas naquela época. Isto foi evidenciado por meio de uma série de mensagens que intercambiaram Euler e o matemático italiano Giovanni

---

<sup>1</sup>A versão em inglês do artigo, está disponível no livro Graph Theory, 1736-1936 [2].

Jacopo Marinoni (1676 – 1755) [3] onde discutia-se que a solução não era plausível usando a geometria ou a álgebra.

O grande aporte dado por Euler para resolver este problema foi a criação de um modelo geométrico que conseguia abstrair as informações do problema de Königsberg (ver Figura 2.1(b)). Desta forma, Euler conseguiu mostrar uma visão diferente e simplificada do problema que permitiu realizar uma análise e solução. Na Figura 2.1, apresenta-se um desenho do modelo realizado pelo Euler para resolver o problema de Königsberg. Este modelo consiste em representar as porções de terra por pontos (vértices) e as pontes por linhas (arestas) que ligavam esses pontos. Assim, Euler mostrou ter uma grande habilidade para a abstração e criação de um modelo geométrico simples. Hoje em dia este desenho geométrico apresentado pelo Euler é um dos primeiros grafos da história. No entanto, apesar de que Euler conseguiu formular uma solução para o problema de Königsberg, esta foi criticada por não ter um rigor matemático suficiente e ser uma resposta unicamente com as condições necessárias mais não suficientes<sup>2</sup>. Apesar de tudo Euler conseguiu impactar de forma significativa a física e a matemática, de tal forma que sua solução intuitiva e equivalente do problema deu o primeiro tijolo para o início da teoria dos grafos na matemática e, tempo depois, das redes complexas na física.



**Figura 2.1** (a) Desenho da cidade de Königsberg ilustrando com diferentes números coloridos as porções de terra que estão separadas pelas pontes. (b) Grafo criado por Euler para abstrair e solucionar o problema das pontes de Königsberg. Observe que cada vértice ou nó deste grafo corresponde com as porções de terra, portanto, as sete arestas são as pontes. Fonte: Adaptado de wikipedia.org pelo Autor

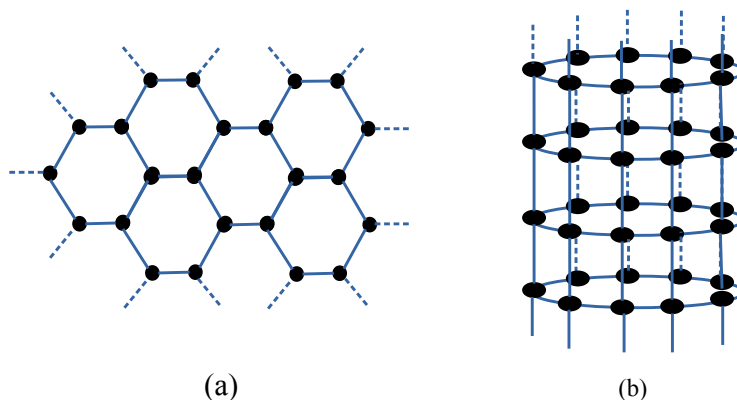
Devido à solução apresentada por Euler para o problema das sete pontes de Königsberg, outros problemas com características semelhantes começaram a surgir. Por exemplo, o problema do caixeiro ambulante [5], das quatro cores [6], e do carteiro chinês [7]. A teoria dos grafos conseguiu ter um melhor formalismo matemático como consequência do desenvolvimento que apresentou a matemática discreta. Portanto, se definiu matematicamente um grafo mediante a

<sup>2</sup>O problema de Königsberg foi resolvido formalmente após 137 anos [4].



composição de dois conjuntos  $G(\mathcal{V}, \mathcal{E})$ , onde  $\mathcal{V}$  e  $\mathcal{E}$  são, respectivamente, o conjunto de vértices (nós) e arestas (conexões). Por exemplo, no grafo de Euler, apresentado na Figura 2.1(b), os vértices do grafo são facilmente identificados como os pontos que estão numerados. Assim, o conjunto ordenado  $\mathcal{V}$  estará formado por quatro elementos e as linhas que conectam os vértices serão as arestas do grafo que pertencem ao conjunto não ordenado  $\mathcal{E}$ . O grafo de Euler é um grafo conexo, em consequência, não existe um vértice que não seja acessível por um caminho que inicia desde qualquer vértice e passa pelas arestas do grafo. Em outras palavras, existe pelo menos um caminho que passa (conecta) por todos os vértices do grafo. Além disso, foram determinadas algumas propriedades métricas e definições básicas. Por exemplo, a distância entre dois vértices  $i$  e  $j$ , que pertencem ao grafo, corresponde com a soma aritmética das arestas que compõem o menor caminho entre os dois vértices<sup>3</sup>.

O intenso desenvolvimento que apresentou a teoria dos grafos conseguiu abstrair de forma plausível as informações estruturais e dinâmicas de numerosos problemas das redes reais. No entanto, isto permitiu também o estudo das diversas propriedades apresentadas por grafos que não tinham sua forma estrutural baseada em problemas reais, ou seja, grafos sintéticos ou teóricos. Devido a sua aparente simplicidade estrutural, um dos primeiros modelos sintéticos usados foram os grafos regulares. Este tipo de modelo apresenta uma formação estrutural uniforme, em consequência, todos os vértices do grafo possuem um igual número de conexões. Em outras palavras, cada vértice terá uma conexão com um número constante de vértices vizinhos ou adjacentes. Como um exemplo ilustrativo na Figura 2.2 são apresentados dois desenhos de grafos regulares conexos e infinitos.



**Figura 2.2** Exemplos de redes regulares infinitas. (a) rede regular hexagonal, observe que cada vértice tem conexão com três vértices vizinhos. (b) rede regular formada como uma composição de varias redes com forma circular. Fonte: Autor

Devido às propriedades estruturais que apresentam os grafos regulares eles podem desempenhar um papel importante na investigação de modelos dinâmicos em redes já que sua regularidade permite realizar investigações de caráter analítico. Por outra parte, as redes regulares

<sup>3</sup>Note que, entre dois vértices em um grafo conexo, existem uma multiplicidade de caminhos diferentes e não necessariamente todos são iguais ao menor caminho.

são bastante utilizadas como modelos de sólidos na cristalografia [8]. Neste contexto, por meio estruturas regulares, conseguia-se descrever a topologia apresentada pelos átomos de materiais cristalinos. Por exemplo, observa-se que a disposição dos átomos nos semimetais apresentam uma configuração geométrica uniforme. A física do estado sólido [9] e a cristalografia [8] usam as redes regulares para realizar uma análise das configurações estruturais uniformes apresentadas pelos átomos e seus efeitos quânticos. Desta forma, podem ser investigadas as propriedades químicas e físicas da matéria.

Como podemos observar a teoria dos grafos mostrou um grande desenvolvimento desde a solução do problema das pontes de Königsberg. No entanto, os resultados apresentados por investigações teóricas estavam limitados a estudar redes que apresentavam um número de vértices de  $N \cong 100$ . Este pequeno tamanho que apresentavam as redes não permitia o uso de argumentos estatísticos, portanto, conseguir realizar estudos de fenômenos de transporte de informação não era uma tarefa fácil. Assim, em vista do desenvolvimento apresentado pelos computadores, a teoria dos grafos conseguiu trabalhar com tamanhos maiores de redes, o que permitiu automatizar os cálculos estatísticos e, mediante simulações, implementar programas computacionais que conseguiram descrever processos dinâmicos. Todo este avanço computacional permitiu também o surgimento de novas propriedades e modelos de redes. Por exemplo, a rede aleatória que consiste em um conjunto de vértices onde as conexões estão restringidas por uma determinada distribuição de probabilidade.

Por outra parte, sistemas que apresentam processos dinâmicos onde há diversas interações entre seus elementos, como o movimento Browniano <sup>4</sup>, são descritos por meio de algoritmos baseados em métodos estocásticos e simulações que consideram a propriedade de Markov <sup>5</sup>. Desta forma, o fenômeno da difusão pode-se caracterizar através de diversos métodos matemáticos ou simulações de caminhantes aleatórios sobre uma rede. Embora o desenvolvimento dos métodos que caracterizavam processos dinâmicos conseguiram resultados plausíveis, observa-se que os mesmos foram elaborados considerando a ideia de transporte de informação como um resultado de interações entre vértices adjacentes. Portanto, processos difusivos que apresentam contribuições entre vértices que estão separados por uma determinada distância, como a auto-difusão de átomos de palladium (Pd) [10, 11], não são caracterizados por este tipo de métodos. Por este motivo recentemente foi apresentado um novo formalismo no espaço discreto no qual mediante caminhantes aleatórios, é considerado um processo de difusão em que um caminhante pode saltar, desde sua posição atual com uma probabilidade diferente de zero, a um vértice que está a uma certa distância. Este método será uma generalização do método clássico dos caminhantes aleatórios e se conhece como o método de Lévy Random Walks (LRW) [12–15]

Neste trabalho pretende-se explorar as implicações de considerar um processo de difusão onde apresentam-se contribuições de longa distância. Através de dois desenvolvimentos analíticos pretende-se abordar a difusão desde duas perspectivas diferentes que permitem sua caracterização. Desde o ponto de vista da matemática esta nova formulação pode ser considerada

---

<sup>4</sup>O botânico escocês Robert Brown com suas investigações descreveu o movimento aleatório das partículas de porem dissolvidas em água isto foi conhecido como o movimento Browniano.

<sup>5</sup>Um processo no qual a probabilidade de realizar um certo evento é independente dos eventos anteriores conhece-se como processo de Markov.

uma generalização dos métodos clássicos. O conteúdo desta tese está organizado da seguinte forma. No Capítulo 3 mostra-se as definições básicas da teoria de redes e alguns modelos de redes complexas usados neste trabalho. No Capítulo 4 mostra-se a caracterização da difusão considerando uma rede finita sobre um espaço discreto através do método de caminhantes aleatórios e a teoria espectral da matriz Laplaciana para um modelo de rede multicamada. No Capítulo 5 mostra-se a reformulação dos métodos apresentados no Capítulo 4 para caracterizar um processo de difusão que apresenta conexões de longa distância. Além do mais, neste capítulo mostra-se a formulação do problema inverso cuja solução consegue dar as condições necessárias para conseguir um processo de super-difusão bem definido utilizando o método de caminhantes aleatórios. No Capítulo 6 mostra-se os resultados mais relevantes conseguidos através da formulação apresentada no Capítulo 5 junto com sua respectiva análise. Finalmente no Capítulo 7 apresentam-se as conclusões destacando os resultados mais relevantes deste trabalho.



# Capítulo 3

## Redes Complexas

Neste capítulo o objetivo principal é introduzir e familiarizar ao leitor com conceitos e propriedades básicas apresentadas na teoria de redes complexas. Desta forma, o leitor terá um melhor entendimento do trabalho teórico e a análise desenvolvido nos capítulos posteriores. O conteúdo neste capítulo está distribuído da seguinte forma: na Seção 3.1 define-se uma rede complexa e algumas propriedades básicas do formalismo da teoria dos grafos, como distância entre vértices, a matriz de adjacência, a matriz de vizinhança [16], entre outros. Nas Seções 3.2, 3.3, 3.4 e 3.5, estudam-se as propriedades e configurações estruturais dos principais modelos desenvolvidos pela teoria de redes, como as redes regulares, as redes circulantes, as redes aleatórias, as redes de mundo pequeno e as redes Multiplex.

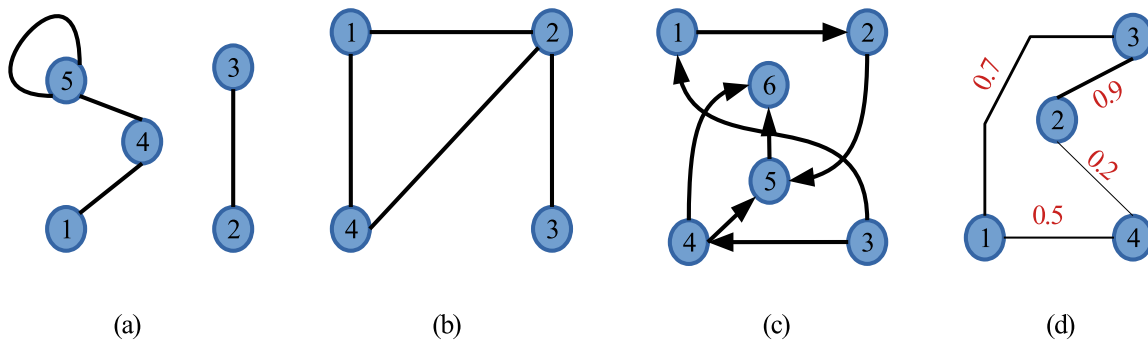
### 3.1 REDES COMPLEXAS E CONCEITOS BÁSICOS.

Hoje em dia na literatura existem uma abundante quantidade de artigos e livros [17–22], que possuem um conteúdo abrangente com os conceitos e fundamentos de grafos e da teoria de redes complexas. No entanto, ainda persiste uma discussão sobre a definição de uma rede complexa. Alguns autores preferem usar critérios baseados em propriedades estruturais e outros preferem utilizar o tamanho da rede segundo o número de vértices. Devido a esta falta de consenso, neste trabalho consideramos que uma rede complexa é um conjunto de objetos matemáticos desenvolvidos na teoria dos grafos que conseguem abstrair as propriedades estruturais que apresenta um sistema real ou sintético. Como se observa nesta definição, as redes complexas podem ser usadas como uma ferramenta de análise de problemas apresentados em outras disciplinas, além da física ou a matemática. Por exemplo, a biologia [23], a sociologia [24, 25], as comunicações [26], a neurociência [27] e a epidemiologia [28], entre muitas outras. Portanto, as redes complexas possuem uma grande interdisciplinaridade frente a diversos problemas que apresentam complexidades tanto estruturais como dinâmicas.

De forma mais explícita, uma rede complexa é definida por dois conjuntos  $G(\mathcal{V}, \mathcal{E})$ , onde  $\mathcal{V}$  é um conjunto contável e ordenado formado pelos vértices ou nós que compõem a rede, e o conjunto  $\mathcal{E}$  é formado pelas arestas da rede e representam as interações ou conexões que existem entre os vértices da rede. Ou seja,  $\mathcal{E}$  é um conjunto não ordenado de pares de vértices  $(i, j)$  que

pertencem a  $\mathcal{V}$ . Usando os conjuntos  $\mathcal{E}$  e  $\mathcal{V}$ , é possível capturar as informações estruturais que apresentam as redes complexas. Por exemplo, os vértices e suas interações (ou seja, as arestas) podem representar redes de amizades de pessoas, como se observa em Facebook e/o Instagram. Por outra parte, temos também outros exemplos como: redes de interações de animais e plantas que estão conectados pela relação predador presa, redes de conexões entre routers na internet conectados por fibras ópticas, etc. Neste trabalho se referirá ao vértice  $i$  em uma rede por sua posição no conjunto ordenado  $\mathcal{V}$ , e a aresta  $(i, j)$  representará que os vértices  $i$  e  $j$  são vértices vizinhos ou adjacentes. O número total de vértices  $N$  corresponde com a cardinalidade do conjunto  $\mathcal{V}$  e, de forma semelhante, o número total de arestas  $E$  será a cardinalidade do conjunto  $\mathcal{E}$ .

Um aspecto central no estudo de redes complexas é modelar e caracterizar as informações obtidas de uma rede. Desde um ponto de vista gráfico, as informações dos integrantes da rede e suas interações são representadas usualmente por pontos (vértices) e linhas (arestas). No entanto, existem uma série de fenômenos dinâmicos que mostram uma dependência com a forma estrutural da rede e, conseqüentemente, a estrutura de uma rede não pode ser representada usando uma forma única. Por exemplo, na Figura 3.1 apresentam-se quatro tipos de estruturas de redes, onde os círculos azuis com numeração e as linhas correspondem respectivamente ao conjunto de vértices  $\mathcal{V}$  e arestas  $\mathcal{E}$ . Na Figura 3.1(a), apresenta-se uma rede formada por cinco vértices distribuídos em duas componentes e, observe que o vértice 5 apresenta um auto-laço, ou seja, uma aresta que inicia e termina no mesmo vértice. Na Figura 3.1(b) mostra-se uma rede conexa de quatro vértices que formam uma única componente.



**Figura 3.1** Exemplos básicos de redes. (a) Rede não conexa de cinco vértices e duas componentes. (b) Rede simples e conexa. (c) Digrafo de seis vértices não conexo. (d) Rede ponderada de quatro vértices. Fonte: Autor.

Por outra parte, nas Figuras 3.1(c) e (d) observamos duas redes cujas arestas além de representar interações entre os vértices guardam diferentes informações estruturais. Este tipo de redes são conhecidas na literatura [29] como digrafos (Figura 3.1(c)) e redes ponderadas (Figura 3.1(d)). Neste trabalho se usaram redes simples que se caracterizam por ser redes conexas sem auto-laços e não ponderadas. Note que, a depender do problema a ser desenvolvido, as redes podem ser separadas em duas formas gerais. A primeira será aquela onde uma informação estrutural

básica é suficiente e, portanto, as redes são definidas unicamente por arestas e vértices sem precisar de outra informação. Já na segunda categoria o problema a ser tratado pode requer mais informação, como por exemplo, a intensidade da interação entre vértices. Assim, nesta segunda categoria tanto os vértices como as arestas podem ser alterados com valores adjuntos ou características como se observa nas Figuras 3.1(c) e (d). Estas duas formas permitem conseguir resultados coerentes para as questões formuladas. Portanto, representar de forma apropriada um problema de redes é um passo crucial na modelagem de modelos dinâmicos como o transporte de informação. Por outra parte, na literatura se conhece uma rede completa como uma rede simples que possui o número máximo conexões possíveis entre seus vértices, ou seja,  $E = \frac{1}{2}N(N - 1)$ .

Devido à natureza topológica apresentada pelas redes complexas e ao desenvolvimento da teoria dos grafos, pode-se definir algumas métricas básicas que ajudam no análises das propriedades estruturais e dinâmicas. Uma das mais importantes e de especial interesse neste trabalho é comprimento do caminho  $l$  entre dois vértices  $i$  e  $j$ . Esta grandeza é descrita como uma sucessão de vértices adjacentes, sem repetição, iniciando no vértice  $i$  e finalizando no vértice  $j$ . O seu comprimento corresponde à soma das arestas que compõem o caminho, ou equivalentemente, ao número de vértices da sequência menos um. Note que o caminho entre dois vértices não apresenta a propriedade de unicidade, portanto, é de se esperar que entre dois vértices  $i$  e  $j$  existam diferentes caminhos com comprimento iguais ou distintos. Por exemplo, em uma rede completa de tamanho  $N$ , o comprimento entre dois vértices  $i$  e  $j$  será igual a um, mas existem também  $N - 2$  caminhos de comprimento igual a dois entre  $i$  e  $j$ .

Usando a definição de caminho entre vértices, pode-se determinar quando uma rede está formada por uma única componente, ou seja, uma rede conexa como a rede da Figura 3.1(b), ou uma rede desconexa formada por varias componentes como na Figura 3.1(a). Assim, uma rede é conexa quando existe pelo menos um caminho que passa através das arestas e conecta todos os vértices; caso contrario, será uma rede desconexa. Note que o menor número de arestas possíveis para uma rede conexa é  $E = N - 1$ , que corresponde a uma rede de cadeia linear, onde um único caminho passa por todos os vértices da rede, sem repetição. Portanto, se  $E$  é o número de arestas de uma rede simples, então dissemos que,  $E$  terá como limite inferior  $E = N - 1$  (rede de cadeia linear) e como limite superior  $E = \frac{1}{2}N(N - 1)$  (rede completa). Por outra parte, define-se a densidade de arestas em uma rede  $\xi$ , como uma relação entre a proporção de arestas da rede e todas as arestas possíveis. Ou seja, a densidade de arestas é a comparação relativa com uma rede completa de igual tamanho,  $\xi = E / [N(N - 1)/2]$ . Em função da densidade  $\xi$ , uma rede pode-se classificar como uma rede esparsa ou não. Desta forma, uma rede conexa ou desconexa, é esparsa quando sua densidade de arestas é  $\xi \ll 1$ , caso contrario, a rede não é esparsa. Note que, a densidade de arestas para uma rede conexa estará limitada entre a densidade da cadeia linear e a rede completa, ou seja  $2/N \leq \xi \leq 1$ . No entanto, para uma rede desconexa temos que,  $0 \leq \xi \leq 1$ .

Na teoria dos grafos, as informações topológicas e estruturais das redes (como por exemplo as redes da Figura 3.1), podem ser apresentadas matematicamente em uma forma matricial. Isto permite que através da matemática matricial se realize uma análise analítica que relacione diferentes operações com propriedades estruturais e dinâmicas das redes complexas. Desta

forma, uma matriz fundamental no início de qualquer estudo, é a matriz de adjacência, que guarda as informações quantitativas das interações entre vértices adjacentes. Os elementos que compõem a matriz de adjacência são definidos pela Equação 3.1:

$$A_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{Se } (i, j) \in \mathcal{E}, \\ 0 & \text{Se } (i, j) \notin \mathcal{E}. \end{cases} \quad (3.1)$$

Para uma rede simples, a matriz de adjacência  $A$  assume apenas os valores um ou zero que representam a existência ou não da aresta entre um par de vértices. Ou seja, quando um elemento matricial  $A_{ij}$  é igual a um, significa que os vértices  $i$  e  $j$  são vértices adjacentes. Por outra parte, no caso da rede ponderada (ver Figura 3.1(d)), sua representação matricial será uma matriz de adjacência ponderada  $W$ , com elementos matriciais reais  $W_{ij}$ , que estarão determinados pelo contexto do problema <sup>1</sup>. A matriz de adjacência, no caso de uma rede simples é uma matriz quadrada e simétrica <sup>2</sup>, onde existe uma correspondência entre o número de linhas (colunas) e o número de vértices que a rede tem. Note que, como consequência da simetria apresentada pela matriz de adjacência de uma rede simples, a informação estrutural guardada será redundante. Ou seja,  $A_{ij} = A_{ji}$ .

Com ajuda da matriz de adjacência, é possível obter diversas grandezas que identificam tanto propriedades estruturais globais de uma rede como propriedades individuais dos vértices. Por exemplo, o grau de um vértice  $k_i$  é uma propriedade local que determina a conectividade, ou o grau de interação, de um vértice  $i$  com seus vizinhos mais próximos. Ele é definido, para um vértice  $i$  em uma rede simples, como a soma da  $i$ -ésima linha (coluna) da matriz de adjacência. Portanto, a conectividade, ou grau de um vértice  $i$  em uma rede simples é quantificado pelo número de vértices adjacentes ao vértice  $i$ .

$$k_i = \sum_{j=1}^N A_{ij}. \quad (3.2)$$

O grau em uma rede é uma grandeza que está limitada pelo número total de vértices da rede ( $0 \leq k_i \leq N - 1$ ), e seu valor pode determinar se a rede é conexa ou não. Por exemplo, quando todos os vértices em uma rede possuem uma conectividade máxima,  $k_i = k = N - 1$ , a rede é uma rede completa e não esparsa. Por outra parte, quando pelo menos um vértice  $i$  possui o menor valor de conectividade possível  $k_i = 0$  a rede é não conexa <sup>3</sup>.

Em uma rede complexa um caminho entre dois vértices  $i$  e  $j$  não é único. Portanto, existem diferentes caminhos, com diferentes comprimentos, que conectam dois vértices  $i$  e  $j$  <sup>4</sup>. Assim, apresenta-se o seguinte problema de difícil solução prática devido ao enorme número de

<sup>1</sup>Alguns problemas clássicos da teoria de grafos usam redes ponderadas como o problema do caixeiro ambulante [5] e também o problema do carteiro chinês [7].

<sup>2</sup>No caso dos dígrafos e as redes com auto-laço, a matriz de adjacência não é uma matriz simétrica.

<sup>3</sup>No caso dos dígrafos, um vértice  $i$  na rede possui dois tipos de grau, o grau de entrada  $k_i^{in}$  e o grau de saída  $k_i^{out}$  [29].

<sup>4</sup>Por exemplo, observe que os vértices 1 e 3 da rede da Figura 3.1(b) mostram dois caminhos com comprimentos diferentes que são: 1, 2, 3 e 1, 4, 2, 3.



caminhos que podem ser encontrados entre dois vértices: como saber o menor caminho entre dois vértices? Este problema, tem uma solução computacional bastante eficiente encontrada pelo cientista da computação Edsger Dijkstra (1930 – 2002) em 1959 [30,31]. Hoje em dia na literatura [16,20,29], o menor caminho entre dois vértices  $i$  e  $j$  é conhecida como distância  $d_{ij}$ . Portanto, a distância entre dois vértices  $i$  e  $j$  é a soma aritmética das arestas que pertencem ao menor caminho entre os vértices. Por outra parte, a maior distância entre dois vértices em uma rede (ou seja,  $d_{\max} = \max \{d_{ij}\}$ ) se conhece como o diâmetro da rede. Repare que a distância entre dois vértices em uma rede conexa é uma grandeza limitada  $0 \leq d_{ij} \leq d_{\max}$  e, no caso de uma rede não conexa esta não é bem definida e em algumas situações, pode-se atribuir que ela diverge para infinito.

Usando a definição de distância, é possível definir a matriz de distâncias. Esta matriz, é apresentada na Equação 3.3 e seus elementos matriciais mostraram todos os vértices que possuem uma distância igual a  $d$ . Note que, o valor da distância entre dois vértices é único. Ou seja, quando o valor da distância entre dois vértices em uma rede está definido  $d_{ij} = d_0$ , não pode existir outro valor de distância entre esse par de vértices que seja maior ou menor. Portanto, quando somamos duas ou mais matrizes com valores de distâncias diferentes  $\mathcal{M}_1 + \mathcal{M}_2$ , não haverá superposição dos elementos matriciais. Por outra parte, a matriz de distâncias é limitada desde  $\mathcal{M}_1$ , que é a matriz de adjacência definida na Equação 3.1, até a matriz  $\mathcal{M}_{d_{\max}}$ , que identifica os vértices que possuem a maior distância na rede, ou seja, mediante esta matriz pode-se obter o valor do diâmetro.

$$(\mathcal{M}_d)_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{Se } d_{ij} = d, \\ 0 & \text{Caso contrario.} \end{cases} \quad (3.3)$$

Usando a matriz de distâncias definimos a matriz de vizinhança  $\tilde{\mathcal{M}}$  a qual é uma matriz que guarda tanto os valores métricos locais (distância entre vértices adjacentes), como também os valores métricos globais (distância entre vértices não adjacentes) de uma rede [16]. Assim, para uma rede conexa, a matriz de vizinhança  $\tilde{\mathcal{M}}$  será formada pela combinação linear de todas as matrizes de distâncias

$$\tilde{\mathcal{M}} = \sum_{d=1}^{d_{\max}} d\mathcal{M}_d. \quad (3.4)$$

As matrizes e propriedades apresentadas ajudam a ter uma melhor descrição e permitem realizar análises estruturais das redes complexas, tanto a nível local como global. No entanto, para analisar e caracterizar de forma detalhada os processos dinâmicos em redes complexas, existem outro tipo de ferramentas teóricas, algumas das quais baseadas nas propriedades estruturais como a matriz de adjacência. Por exemplo, em processos como a difusão é necessário saber tanto as propriedades estruturais como a evolução do estado dos vértices em um tempo contínuo ou discreto <sup>5</sup>.

---

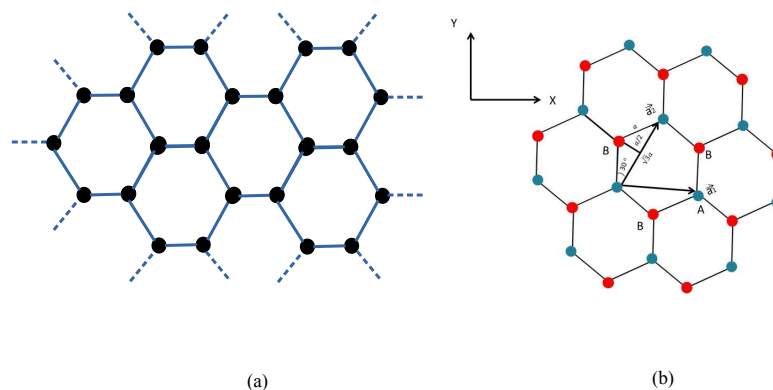
<sup>5</sup>Existem muitos outros processo dinâmicos, como os epidemiológicos que necessitam saber propriedades estruturais e identificar a dinâmica das relações entre os vértices adjacentes e não adjacentes, definidos como pessoas ou animais.

### 3.2 REDE REGULAR

Uma das primeiras topologias de redes usadas na teoria dos grafos foram figuras geométricas regulares dentro de um espaço euclidiano. Isto permite ter uma visão mais analítica das propriedades estruturais e sua influência nos processos dinâmicos. Por exemplo, uma rede regular pode ser considerada como uma rede que descreve um arranjo geométrico no qual todos os vértices possuem uma conectividade constante. Ou seja, o valor do grau  $k_i$  de um vértice  $i$  será igual para todos os vértices que compõem a rede regular,  $k_i = k = cte$ . Portanto, o grau de um vértice é uma propriedade global para as redes regulares e a distribuição de grau é descrita mediante a seguinte equação:

$$\chi(k_i) = \begin{cases} 1 & \text{Se } k_i = k, \\ 0 & \text{Caso contrario.} \end{cases} \quad (3.5)$$

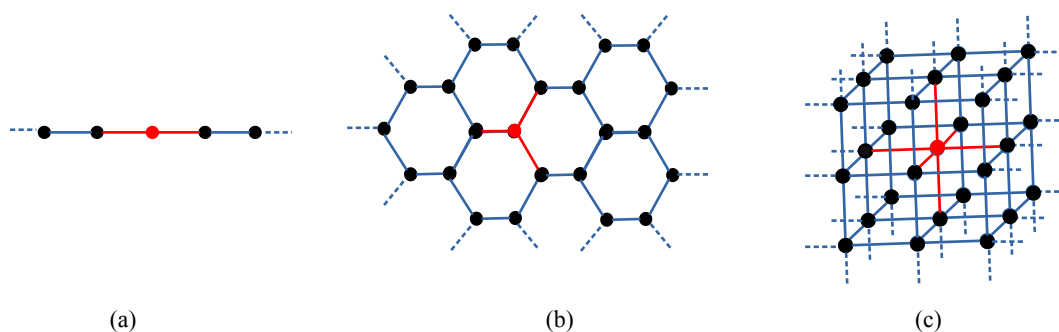
Devido a que a rede regular facilita realizar estudos teóricos seu uso não se limita exclusivamente à teoria dos grafos. Em 1783 o mineralogista francês René Just Haüy (1743 – 1822) percebeu que os cristais em uma amostra do mineral calcita tinham um arranjo geométrico regular [32], e como consequência, se iniciou o desenvolvimento matemático da cristalografia que forma parte fundamental da física do estado sólido [9]. Desta forma, as figuras geométricas regulares observadas por René foram estudadas com topologias estruturais semelhantes com as usadas na teoria dos grafos, ou seja, as redes regulares. Por exemplo, na Figura 3.2 apresentam-se duas redes regulares e apesar de sua semelhança uma é usada na teoria dos grafos e a outra na cristalografia. A rede (a) da Figura 3.2, no contexto da teoria dos grafos, é uma rede regular hexagonal bidimensional infinita que está formada por vértices e arestas, e por outra parte, a rede (b) é a rede hexagonal que representa o grafeno no espaço real, com seus respectivos vetores primitivos  $\vec{a}_1$  e  $\vec{a}_2$ .



**Figura 3.2** Comparação de duas redes regulares em um espaço euclidiano. (a) Rede regular bidimensional infinita usada na teoria dos grafos. Fonte: Autor. (b) rede hexagonal do grafeno gerada por seus vetores primitivos  $\vec{a}_1$  e  $\vec{a}_2$ , usada na cristalografia. Fonte: Adaptado de [33] pelo Autor.

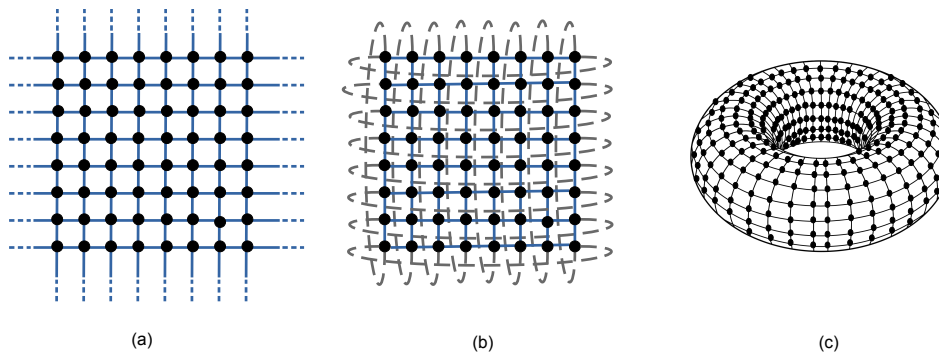
Embora o formalismo matemático das redes regulares em cristalografia apresenta diferenças evidentes com o desenvolvido na teoria dos grafos, os dois conseguem caracterizar propriedades estruturais e dinâmicas. Por exemplo, no contexto da cristalografia o estudo da configuração topológica regular do grafeno consegue mostrar que este é o material mais forte, mais leve e mais fino. Equivalentemente na teoria de grafos o modelo de rede regular permite estudar propriedades estruturais importantes como a robustez [34], que é definida como a resistência para conservar propriedades estruturais ou dinâmicas quando são retirados vértices ou arestas de uma rede <sup>6</sup>.

As redes regulares na literatura [9] classificam-se em função de sua dimensão euclidiana  $n$ . Como consequência, o número de vértices  $x$ , dentro de uma distância  $r$  cuja origem está localizada em um vértice  $i$ , aumentará como  $x(r) \sim r^n$ . Na Figura 3.3 apresentam-se três tipos de redes regulares com dimensionalidades diferentes e diversas formas topológicas. Repare que, toda rede regular será conexa devido a que o grau de todos os vértices permanece constante. Por outra parte, na Figura 3.4(a) apresenta-se uma rede quadrada bidimensional infinita e na Figura 3.4(b) uma rede quadrada com condições de contorno periódicas nas direções verticais e horizontais. Note que a Figura 3.4(b) é equivalente à Figura 3.4(c), que é denominada de toro. As redes regulares quadradas apresentadas na Figura 3.4, são redes que representam uma especial importância na física já que permitem sua aplicação como substratos de processos dinâmicos estocásticos. Como por exemplo, os fenômenos de transporte de informação, como a difusão [15,36,37], ou a modelagem de diversos sistemas físicos relevantes em duas dimensões, como o modelo de Ising [38].



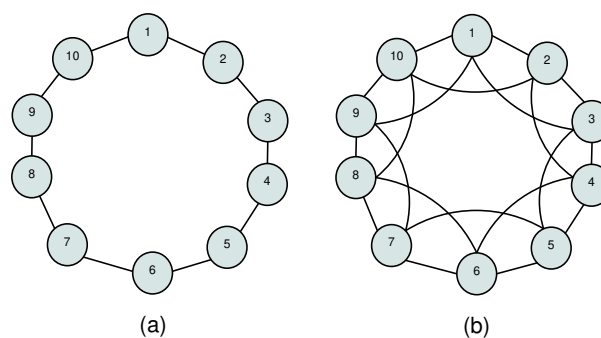
**Figura 3.3** Redes regulares de diferentes dimensionalidades. (a) Rede de cadeia linear infinita em uma dimensão de grau  $k = 2$ , (b) rede hexagonal infinita em duas dimensões de grau  $k = 3$ , (c) rede cubica em três dimensões com grau  $k = 6$ . Repare que foi ressaltado em vermelho o grau constante característico da rede regular. Fonte: Autor

<sup>6</sup>Por exemplo, algumas aplicações da robustez são, a retirada do ar de sites na rede de internet, a falha de uma ou varias plantas geradoras de energia, que pertencem a uma rede de abastecimento energético [35].



**Figura 3.4** Exemplo da aplicação de condições periódicas de contorno sobre uma rede regular infinita, sem perder sua propriedade regular. (a) Rede quadrada regular infinita. (b) Toro normal (TN), ou rede regular quadrada com condições periódicas de contorno verticais e horizontais. (c) Ilustração do toro normal. Note que apesar das condições de contorno aplicadas sobre a rede quadrada esta mantém o grau constante dos vértices e sua dimensionalidade. Fonte: Autor.

Considere uma rede regular infinita de cadeia linear (ver Figura 3.3(a)) na qual pode-se realizar um procedimento semelhante ao ilustrado na Figura 3.4 para conseguir o toro. Desta forma, definindo condições de contorno periódicas sobre uma rede de cadeia linear infinita conseguimos a chamada rede de cadeia circular (RCC) <sup>7</sup>. Na literatura as topologias de caminho fechado como a RCC classificam-se em função do número de vizinhos  $m$  que cada vértice tem. Por exemplo, na Figura 3.5 apresentamos duas RCC que possuem diferentes conectividades de primeiros vizinhos. A Figura 3.5(a), apresenta uma RCC com primeiros vizinhos com  $m = 1$ , e na Figura 3.5(b) temos uma RCC com primeiros e segundos vizinhos  $m = 2$ . Portanto, a relação entre o grau  $k$  de uma RCC e a ordem de conectividade  $m$  é  $k = 2m$ .



**Figura 3.5** Exemplos da rede de cadeia circular com conexão de primeiros vizinhos de tamanho  $N = 10$ . (a) Rede de cadeia circular com primeiros vizinhos,  $m = 1$  e  $k = 2$ . (b) Rede de cadeia circular com primeiros e segundos vizinhos,  $m = 2$  e  $k = 4$ . Note que, o diâmetro da rede de cadeia circular é proporcional ao tamanho da rede  $d_{max} \sim N$ . Fonte: Autor.

<sup>7</sup>Em inglês cycle graph.

O conjunto de todas as possíveis RCC com  $N > 2$  e grau constante  $k \geq 2$  estão relacionadas com o diâmetro  $d_{max}$  como se mostra na Equação 3.6. Note que, quando consideramos uma RCC com  $m \neq 1$  há uma alta probabilidade que dois vértices adjacentes possuam vértices em comum<sup>8</sup>. Esta propriedade observada em redes é conhecida na literatura como clusterização ou coeficiente de aglomeração. Portanto, pode-se observar que a RCC apresenta propriedades locais como alta clusterização e globais como uma grande distância média  $\langle L \rangle$  entre vértices<sup>9</sup>.

$$k = \begin{cases} 2m \forall m = 1, 2, \dots, d_{max} - 1 & \text{Se } N = \textit{par}, \\ 2m \forall m = 1, 2, \dots, d_{max} & \text{Se } N = \textit{impar}. \end{cases} \quad (3.6)$$

Apesar que a RCC é uma rede regular, sua principal diferença de outras topologias semelhantes e modelos de redes complexas é a relação entre o diâmetro e sua distância média. Assim, o diâmetro da RCC escala com o tamanho da rede  $d_{max} \sim N$  e não como outros modelos de redes complexas, que apresentam um diâmetro que é proporcional ao logaritmo do número de vértices da rede, ou seja,  $d_{max} \sim \log N$  [39]. Devido a esta grande diferença, destaca-se a RCC como uma importante ferramenta na observação e análises detalhado de fenômenos discretos de transporte de informação, como por exemplo, na difusão [36], na epidemiologia [40], na robustez [35], entre outros.

### 3.3 REDE CIRCULANTE

Uma rede circulante é caracterizada pelo fato que sua matriz de adjacência satisfaz a propriedade cíclica. Por exemplo, na Equação 3.7 apresenta-se a forma geral de uma matriz circulante quadrada  $N \times N$  com a propriedade cíclica. Portanto, definimos que uma matriz circulante é aquela cujos elementos em suas linhas (ou colunas) são todos iguais entre si e entre duas linhas consecutivas os elementos apresentam um deslocamento a direita<sup>10</sup>. Note que uma consequência desta definição é a possibilidade de condensar toda a informação da matriz circulante em um único vetor que satisfaça a propriedade cíclica  $\vec{x}_1 = \textit{Circ} [c_0, c_{N-1}, \dots, c_2, c_1]$ . Este vetor corresponde com a primeira linha da matriz circulante, portanto, a  $i$ -ésima linha da matriz circulante é um vetor no qual o termo  $c_0$  se deslocou a direita até a  $i$ -ésima posição. Desta forma, toda a informação proporcionada pela matriz de adjacência de uma rede circulante pode ser usada com maior versatilidade na implementação de algoritmos computacionais que requerem de operações simples entre matrizes de tamanho considerável.

<sup>8</sup>Coloquialmente falando "os amigos de seus amigos são meus amigos".

<sup>9</sup>A distância média  $\langle L \rangle$  é definida como a media aritmética das distâncias entre todos os pares de vértices da rede.

<sup>10</sup>Podemos observar também que entre duas colunas consecutivas há um deslocamento.

$$C = \begin{pmatrix} c_0 & c_{N-1} & \cdots & c_2 & c_1 \\ c_1 & c_0 & c_{N-1} & \cdots & c_2 \\ \vdots & c_1 & c_0 & \vdots & \vdots \\ c_{N-2} & \vdots & \ddots & \ddots & c_{N-1} \\ c_{N-1} & c_{N-2} & \cdots & c_1 & c_0 \end{pmatrix}. \quad (3.7)$$

Por outra parte, os autovetores e autovalores da matriz circulante podem ser expressos em função das raízes unitárias  $\omega_N = \exp(2\pi\hat{i}/N)$ , onde  $\hat{i}$  é a unidade imaginária dos números complexos. Desta forma, na Equação 3.8 mostra-se a matriz  $U$  que está formada pelos autovetores da rede circulante. Ou seja, a  $k$ -ésima coluna da matriz  $U$  corresponde com o  $k$ -ésimo autovetor da matriz circulante e formam uma base ortogonal. Note que, o vetor  $\vec{x}_0 = \{1, 1, \dots, 1\}$  é um autovetor de todas matrizes circulantes de ordem  $N$ , e o autovalor que lhe corresponde é expresso pela soma dos elementos matriciais da matriz circulante sem repetição. Ou seja,  $\lambda_0 = \sum_{i=0}^{N-1} c_i$ .

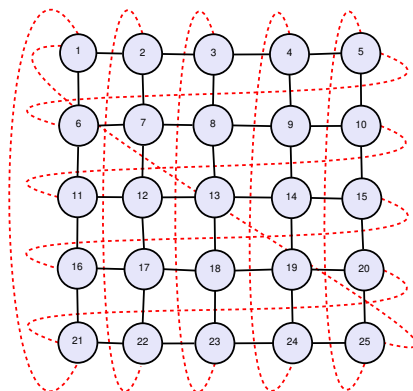
$$U = \begin{pmatrix} \omega_N^{00} & \omega_N^{01} & \cdots & \omega_N^{0(N-1)} \\ \omega_N^{10} & \omega_N^{11} & \cdots & \omega_N^{1(N-1)} \\ \omega_N^{20} & \omega_N^{21} & \cdots & \omega_N^{2(N-1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \omega_N^{(N-1)0} & \omega_N^{(N-1)1} & \cdots & \omega_N^{(N-1)(N-1)} \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

A matriz  $U$  na Equação 3.8 é uma matriz muito conhecida na literatura, porque sua multiplicação por um vetor é equivalente a se tomar sua transformação de Fourier discreta (TFD). Assim  $U$  é uma das mais importantes matrizes na matemática, e ajuda nos estudos de análises de Fourier em análises de processamento de sinais, processamento de imagens, ciência computacional, entre muitas outras [41]. Por exemplo, se aplicamos a TFD a um vetor que coincide com a primeira linha da matriz circulante  $(c_0, c_{N-1}, \dots, c_2, c_1)$ , o resultado será um vetor com todos os autovalores da matriz circulante  $(\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{N-1})$ . Portanto, usando a TFD, é possível encontrar uma expressão analítica, como se apresenta na Equação 3.9, para gerar o  $k$ -ésimo autovalor de uma rede circulante.

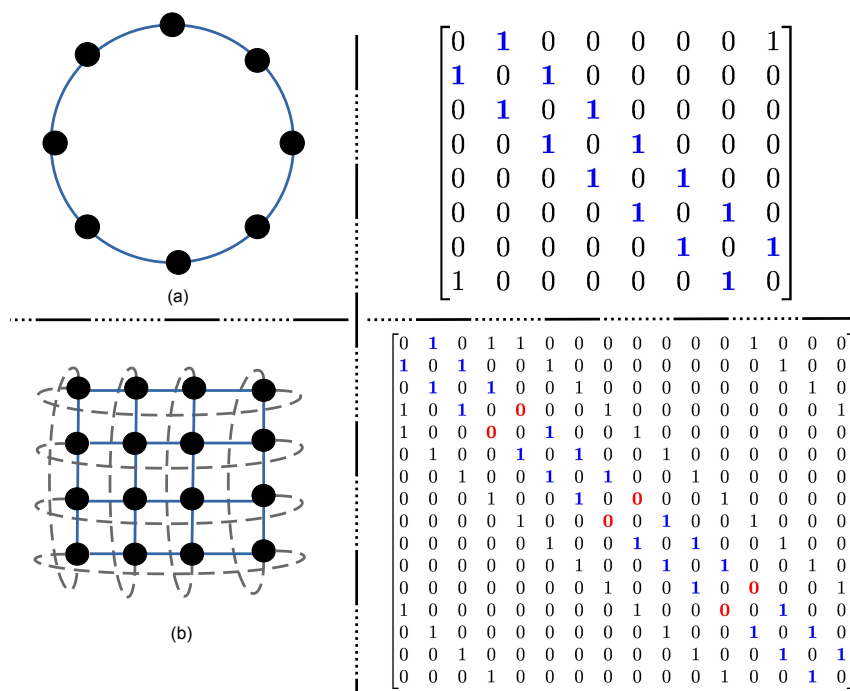
$$\lambda_k = \sum_{j=0}^{N-1} c_j \omega_N^{jk}. \quad (3.9)$$

Como exemplos de redes circulantes, considere as Figuras 3.6 e 3.7. Na Figura 3.6, apresenta-se um Toro Helicoidal (TH) de tamanho  $N = 5 \times 5$ . Note que, o TH apresenta uma grande semelhança estrutural com o TN, mas uma das diferenças entre estas duas redes é que o TN não é uma rede circulante, enquanto o TH sim. Por outra parte, na Figura 3.7, apresentamos o TN e a RCC com suas matrizes de adjacência. Note que, devido ao grau constante que tem as redes regulares, as duas matrizes de adjacência na Figura 3.7, tem igual número de elementos em suas linhas (colunas). Porém, a matriz de adjacência do TN não possui a propriedade

cíclica, como se resalta em sua diagonal. Portanto, apesar que duas redes sejam regulares ou semelhantes topologicamente, não necessariamente, são redes circulantes.



**Figura 3.6** Representação de um Toro Helicoidal (TH) de tamanho  $N = 5 \times 5$ . Note que, tanto o TN como o TH são redes criadas a partir de uma rede quadrada com condições de contorno periódicas diferentes. Fonte: Autor



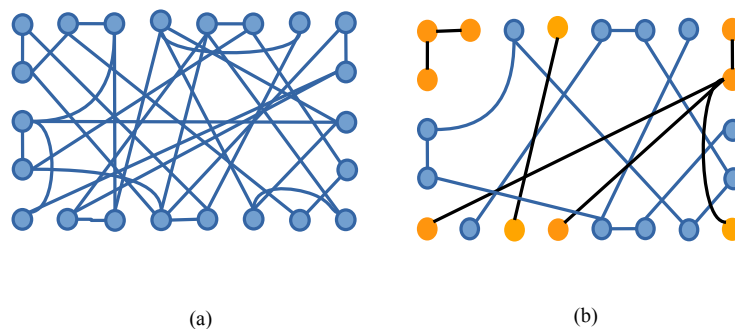
**Figura 3.7** Comparação da propriedade cíclica para duas redes regulares usando as matrizes de adjacência. (a) Rede cadeia circular com  $N = 8$  e  $k = 2$ . (b) Toro normal de  $N = 4 \times 4$  e  $k = 4$ . Note que, para facilitar a verificação da propriedade cíclica nas matrizes de adjacência das duas redes regulares foram ressaltadas em cor azul e vermelho as duas diagonais a cada lado da diagonal principal. Portanto, apesar que as duas redes são regulares a rede de cadeia circular apresenta a propriedade circulante e o TN não. Fonte: Autor

### 3.4 REDE ALEATÓRIA

O modelo de rede aleatória foi introduzido pelos trabalhos dos matemáticos Paul Erdős e Alfréd Rényi, com a publicação de três artigos [42–44] entre 1959 e 1964, onde se descreve tanto a estrutura topológica como as propriedades da rede aleatória. O modelo Erdős-Rényi destaca-se por juntar ferramentas desenvolvidas na teoria da probabilidade com o formalismo da teoria dos grafos. Assim, as redes aleatórias não estão limitadas unicamente a estudos individuais já que elas permitem realizar investigações de propriedades estatísticas considerando um conjunto de diversas redes aleatórias.

A construção de uma rede aleatória inicia com um conjunto definido de  $N$  vértices, e posteriormente são agregadas arestas que conectam pares de vértices. A introdução de cada aresta depende de um parâmetro de probabilidade  $\rho$ , sendo independente da existência de outras arestas. Usando a teoria de redes aleatórias, se iniciou diversos estudos que descrevem propriedades estatísticas das redes, tais como a distribuição de componentes em uma rede, a existência de uma componente gigante e a distância média entre vértices [29].

Entre os resultados dos trabalhos de Paul Erdős e Alfréd Rényi, mostra-se que, se o parâmetro de probabilidade  $\rho$  é maior que um valor crítico  $\rho_c \simeq \ln N/N$ , a rede aleatória será uma rede conexa [39]. Em caso contrário, a rede será uma rede desconexa. Na Figura 3.8, apresentam-se dois exemplos, mostrando uma rede aleatória conexa ( $\rho > \rho_c$ ) e uma rede aleatória não conexa ( $\rho < \rho_c$ ). Por outra parte, uma rede aleatória conexa possui a chamada propriedade do mundo pequeno, ou seja, observa-se que sua distância média entre os vértices escala com o logaritmo do tamanho da rede  $\langle L \rangle \sim \log N$  [39].



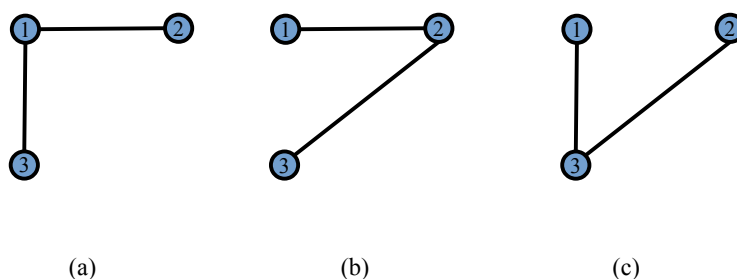
**Figura 3.8** Exemplo de duas redes aleatórias formadas com valores de probabilidade diferentes e  $N = 27$ . (a) Rede aleatória conexa gerada com  $\rho > \ln N/N$ . (b) Rede aleatória desconexa gerada com  $\rho < \ln N/N$ . Note que no painel (b) as arestas em cor preta ressaltam as partes onde a rede aleatória é desconexa. Fonte: Autor

O modelo Erdős-Rényi foi um grande avanço na teoria de redes e, devido a sua natureza es-



tatística, foi possível a caracterização de novas propriedades para um ensemble de redes. Um ensemble de redes aleatórias, é o conjunto de todas as redes possíveis restritas por alguns parâmetros, como o tamanho da rede  $N$ , a probabilidade  $\rho$  e o número de arestas  $E$ . Na literatura, são conhecidos dois tipos de ensembles. O primeiro é o ensemble de redes aleatórias com um tamanho e número de arestas bem definido  $G_{N,E}$ , e o segundo é o conjunto de todas as redes aleatórias, com um tamanho e probabilidade bem definida  $G_{N,\rho}$ . Os dois ensembles apresentam semelhanças se  $E = \binom{N}{2}\rho$ , sempre e quando  $\rho$  não seja próximo de 1 ou 0.

Por exemplo, quando se constrói uma rede aleatória definida, ou seja, com um tamanho  $N = N_0$  e um número de arestas  $E = E_0$ , se está selecionando de forma aleatória, uma rede do ensemble  $G_{N_0,E_0}$ . Na Figura 3.9, apresentamos o ensemble  $G_{3,2}$ . Note que a probabilidade de gerar uma das redes pelo método de rede aleatória será de  $1/3$ .



**Figura 3.9** Ensemble ou conjunto de todas as redes aleatórias possíveis para uma rede aleatória de tamanho  $N = 3$  e  $E = 2$ . Note que cada rede do ensemble tem igual probabilidade de ser gerada pelo modelo de rede aleatória. Fonte: Autor

A rede aleatória apresenta grandes diferenças com relação à rede regular. Por exemplo, a distribuição de grau de sus vértices  $P_k$  é binomial, como é indicado pela Equação 3.10. Note que na Equação 3.10, a distribuição binomial da rede aleatória pode ser aproximada por uma distribuição de Poisson (onde  $z = \langle k \rangle$ ), para um tamanho de rede grande. Por outra parte, a matriz de adjacência de uma rede aleatória será uma matriz quadrada que não possui a propriedade cíclica, ou seja, não é uma rede circulante.

$$P_k = \binom{N}{2} \rho^k (1 - \rho)^{N-k} \simeq \frac{z^k e^{-z}}{k!} \quad (3.10)$$

### 3.5 REDES DE MUNDO PEQUENO

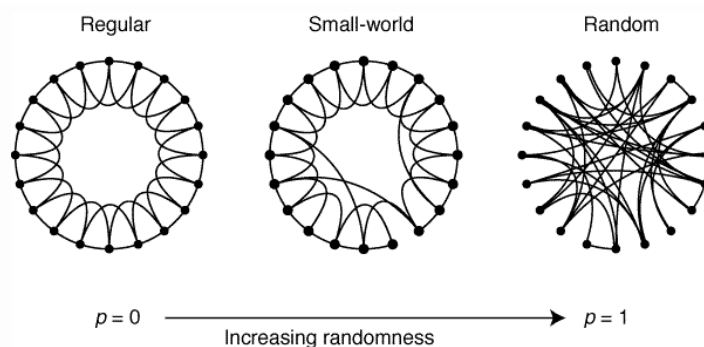
Os primeiros modelos elaborados na teoria de redes que exibiam algumas das propriedades estruturais observadas nas redes reais, foram os modelos de redes de mundo pequeno. Na literatura, destaca-se o modelo de Watts-Strogatz [45], e o modelo de Newman-Watts [46]. Ambos possuem propriedades estruturais como alta clusterização, são muito esparsas, e têm

uma pequena distância média entre vértices. Nesta seção se pretende realizar uma descrição dos modelos Watts-Strogatz e Newman-Watts destacando suas principais propriedades e diferenças.

Em 1998 o físico e sociólogo Duncan J. Watts junto com o físico Steven Strogatz publicaram o primeiro modelo de rede de mundo pequeno [45], tentando assim de forma simples buscar uma aproximação das topologias estruturais mais complexas que se observavam nas redes reais. O modelo Watts-Strogatz inicia com uma RCC conectada a seus primeiros  $m \geq 2$  vizinhos (ver Figura 3.5(b)). Considerando o número de arestas constantes, este modelo substitui uma fração  $\phi$  de arestas por arestas que conectam pares de vértices aleatoriamente. Assim, neste modelo uma determinada probabilidade consegue mudar a estrutura regular da RCC para uma rede que exhibe propriedades como uma alta clusterização e uma pequena distancia media entre vértices. Portanto, o modelo Watts-Strogatz consegue reunir as propriedades estruturais da RCC e da rede aleatória.

Para ilustrar o processo de elaboração do modelo Watts-Strogatz e suas propriedades estruturais, observe as Figuras 3.10 e 3.11. Note que, a grande ideia de Watts e Strogatz foi usar o parâmetro de probabilidade  $\rho$  para tentar juntar a alta clusterização apresentada pela RCC com a pequena distância média das redes aleatórias. Desta forma, para um determinado intervalo de probabilidade consegue-se que uma rede exiba as propriedades de mundo pequeno.

Por outra parte, na Figura 3.11 apresenta-se a estimacão da clusterização e a distância média em função da probabilidade  $\rho$  para o modelo Watts-Strogatz. Este resultado numérico foi realizado considerando um conjunto de 250 redes para cada valor de probabilidade  $\rho$ . Note que na Figura 3.11 a distância média e o coeficiente de clusterização estão normalizados, e a faixa verde, destaca o intervalo de probabilidades onde uma RCC com  $N = 1000$  e  $k = 10$  consegue-se transformar em uma rede de mundo pequeno. Ou seja, para uma rede de  $N = 1000$  e  $E = 5000$  é necessário substituir aproximadamente 50 arestas aleatoriamente para conseguir uma rede de mundo pequeno.

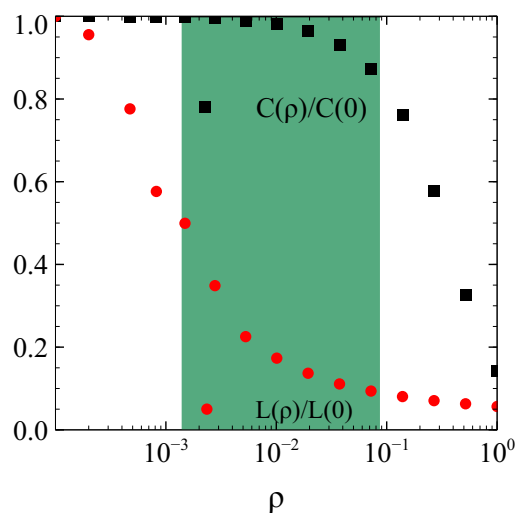


**Figura 3.10** Desenho apresentado no artigo de Watts-Strogatz, sobre a formação de uma rede de mundo pequeno em função do parametro de probabilidade  $\rho$ . Fonte: [45].

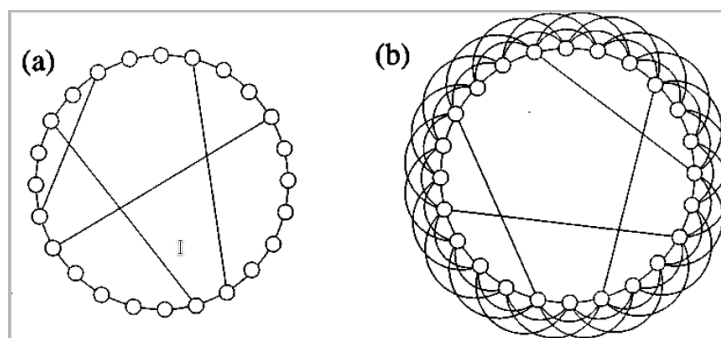
Um ano depois da publicação do modelo Watts-Strogatz, o físico Mark Newman junto com Duncan J. Watts publicaram um novo modelo de rede de mundo pequeno [46]. Este modelo está baseado no modelo Watts-Strogatz e, na Figura 3.12 apresenta-se de forma ilustrativa.

Observe que neste caso, o modelo Newman-Watts inicia com uma RCC conectada a seus primeiros  $m \geq 1$  vizinhos, e são agregadas arestas de forma aleatória, conectando pares de vértices na RCC. Note que, no modelo Watts-Strogatz o numero de arestas é constante, isto pode ocasionar que em um pequeno número de casos a rede conseguida seja não conexa. No entanto, no modelo Newman-Watts este problema não se observa, já que o número de arestas não permanece constante. Portanto, a densidade de arestas no modelo Newman-Watts é proporcional ao parâmetro de probabilidade  $\rho$ .

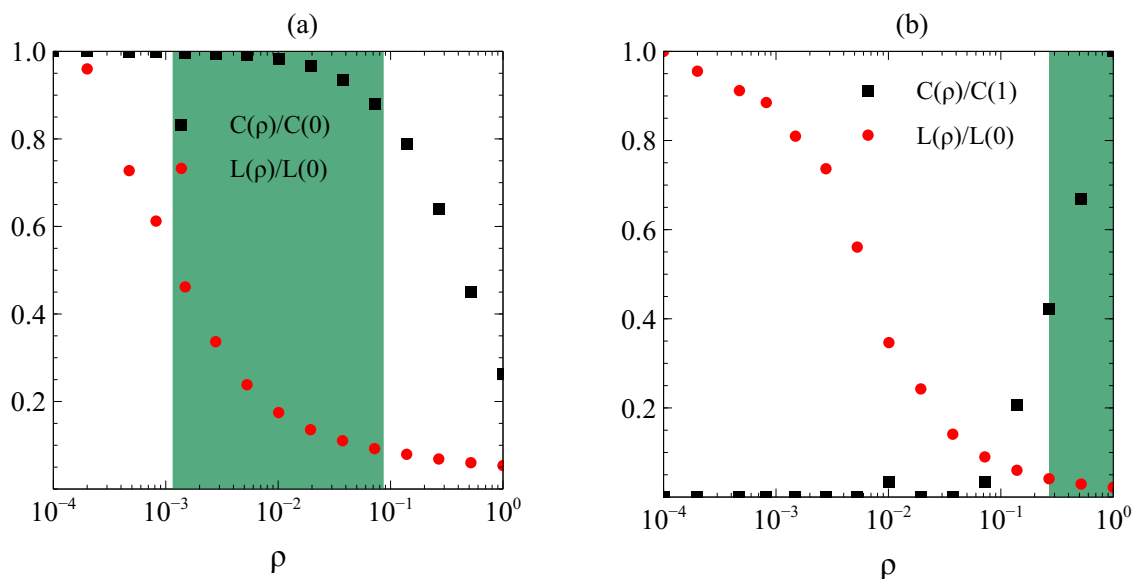
Na Figura 3.13, apresentam-se os resultados numéricos para o modelo Newman-Watts. Note que, na Figura 3.13(a) o modelo Newman-Watts mostra um comportamento semelhante ao gráfico dos resultados numéricos do modelo Watts-Strogatz (ver Figura 3.11). Por outra parte, na Figura 3.13(b), apresenta-se o caso de uma RCC conectada a primeiros vizinhos  $m = 1$ . Ou seja, cada vértice da RCC tem grau  $k = 2$  (ver Figura 3.12(a)). Note que, a faixa verde na Figura 3.11(b) mostra que as propriedades das redes de mundo pequeno são exibidas para valores altos do parâmetro de probabilidade  $\rho$ . Portanto, neste caso a rede conseguida será uma rede não esparsa.



**Figura 3.11** Resultados numéricos de 250 realizações do modelo Watts-Strogatz, iniciando com uma rede de cadeia circular de tamanho  $N = 1000$  e  $k = 10$ . Na figura apresentam-se a distância média normalizada  $L(\rho)/L(0)$  e o coeficiente de clusterização normalizado  $C(\rho)/C(0)$ , em função do valor do parâmetro de probabilidade  $\rho$ . A faixa de cor verde é uma guia, para facilitar a observação do regime de mundo pequeno no modelo Watts-Strogatz. Fonte: Autor.



**Figura 3.12** Desenho ilustrativo do modelo Newman-Watts. (a) Exemplo de criação de uma rede de mundo pequeno no modelo Newman-Watts, iniciando com uma RCC com  $m = 1$ ,  $N = 24$  e  $E = 24$ . (b) Aplicação do modelo Newman-Watts, usando como substrato uma RCC com conexões de primeiros, segundos e terceiros vizinhos  $m = 3$  de um tamanho  $N = 24$  e número de arestas  $E = 72$ . Note que a densidade de arestas no modelo Newman-Watts varia segundo o valor do parâmetro de probabilidade  $\rho$  e que, em comparação com o modelo Watts-Strogatz, todas as redes geradas pelo modelo Newman-Watts serão sempre redes conexas. Fonte: [47].



**Figura 3.13** Comparação dos resultados numéricos para 250 realizações do modelo Newman-Watts. (a) RCC de tamanho  $N = 1000$  e  $k = 10$ . (b) RCC de tamanho  $N = 1000$  e  $k=2$ . A faixa de cor verde é uma guia, para facilitar a observação do regime de mundo pequeno no modelo Newman-Watts. Fonte: Autor.

Embora os dois modelos apresentem características estruturais próprias das redes de mundo pequeno, existem algumas diferenças importantes. Por exemplo, no modelo Watts-Strogatz, existe a probabilidade de se criar uma rede não conexa <sup>11</sup> e, como consequência, o cálculo

<sup>11</sup>No artigo [48], Béla Bollobás e Andrew Thomason, reportam que é necessário que,  $N \gg k \gg \ln N \gg 1$  onde

da distância média entre vértices será divergente <sup>12</sup>. Por outro lado, devido a que no modelo de Newman-Watts são agregadas arestas sempre se terá uma rede de mundo pequeno conexa. Outra das diferenças apresentadas está no tipo de substrato utilizado inicialmente. Por exemplo, se usamos uma RCC a primeiros vizinhos, ou seja com grau  $k = 2$ , o modelos Watts-Strogatz terá uma grande probabilidade de gerar uma rede não conexa e portanto, não será possível criar uma rede de mundo pequeno. Por outra parte, no modelo Newman-Watts, se garanta desde o início do processo que o resultado será uma rede com as características das redes de mundo pequeno, como se mostra na Figura 3.13(b).

### 3.6 REDES MULTIPLEX

Durante o transcurso deste capítulo foram apresentadas tanto propriedades e definições básicas como também alguns modelos importantes da teoria de redes. Não obstante, quando observamos as redes reais percebemos que exibem, em alguns casos, uma topologia na qual diversas redes estão interagindo entre si. Por exemplo, em uma rede social, que considera as pessoas como vértices e as diversas interações como arestas, observa-se que cada pessoa forma pequenas sub-redes que estão determinadas por preferências específicas como amizade, trabalho, família etc. Portanto, a dinâmica de interação das pessoas que pertencem a uma rede social é semelhante a um conjunto de pequenas redes que estão interagindo. Devido a este panorama recentemente foi elaborado um novo modelo de redes que tenta modelar este tipo de estruturas que são observadas em distintos âmbitos como nas redes biológicas, redes de transporte aéreo, redes neuronais etc. Este novo modelo, conhecido na literatura como redes multicamadas [49], está formado por um conjunto de redes que apresentam dois tipos de interações. A primeira será a interação entre os vértices que estão em uma mesma camada, ou seja, interações intra-camada e a segunda corresponderá com aquelas interações entre vértices que pertencem a diferentes camadas, em outras palavras, interações inter-camada. Por outra parte nos últimos anos, foram também produzidos outros trabalhos que tentavam explicar este tipo de estrutura multicamada e sua dinâmica [50–53]. Muitas propostas foram apresentadas, tais como: redes de redes [54, 55], redes multidimensionais [50], redes multi-nível [56], redes Multiplex [57, 58], redes interagentes [59], redes interdependentes [60]. Nesta seção, vamos a apresentar as propriedades estruturais e principais características do modelo da rede Multiplex, o qual é considerado um tipo especial do modelo multicamada.

Seja  $\mathcal{M} = (\mathcal{G}, \mathcal{C})$  uma rede Multiplex de  $M$  camadas onde  $\mathcal{G}$  é uma família de redes simples e  $\mathcal{C}$  representa as interações inter-camada, ou seja

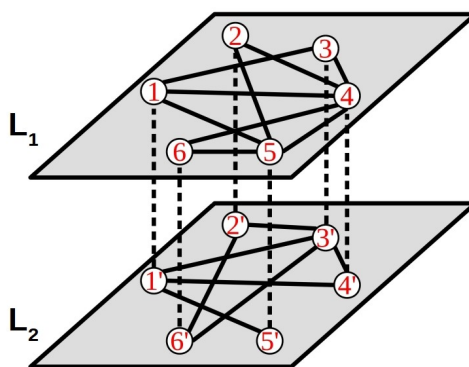
$$\begin{aligned}\mathcal{G} &= \{G_i; i \in \{1, 2, 3, \dots, M\}\} \\ \mathcal{C} &= \{E_{ij} \subseteq X_i \times X_j; i, j \in \{1, 2, 3, \dots, M\}\},\end{aligned}\tag{3.11}$$

onde  $G_i(X_i, E_i)$  é uma rede simples com  $N$  vértices definidos como  $X_i = \{x_1^i, \dots, x_N^i\}$  e  $E_i$  é

$k \gg \ln N$ ), para que uma rede aleatória seja conexa.

<sup>12</sup>Devido a que não existe pelo menos um caminho que passe por todos os vértices da rede, o valor da distância entre dois vértices considera-se como sendo infinito, ou, simplesmente, considera-se infinito.

o conjunto não ordenado de arestas intra-camada. Note também que  $G_i$  corresponde à rede que está na  $i$ -ésima camada do Multiplex, e  $E_{ij}$  será o conjunto de arestas que representam as interações inter-camada. Por outra parte, uma das características estruturais que diferencia a rede Multiplex de outros modelos multicamada é a condição de homogeneidade das conexões inter-camada. Isto significa que um vértice de uma rede que pertence a uma dada camada está conectado apenas com os vértices correspondentes a ele em outras camadas. Portanto, para que a rede Multiplex satisfaça esta condição, todas as redes que integram este modelo devem possuir um número igual de vértices. Ou seja, neste modelo ressaltam-se duas condições estruturais que são: a homogeneidade  $X = X_1 = X_2 = \dots = X_M$  e a condição de ligação única das conexões inter-camada. Sem perda de generalização, na Figura 3.14 apresenta-se de forma ilustrativa uma rede Multiplex de duas camadas. Repare que, neste exemplo qualitativo, as duas redes que formam o Multiplex satisfazem as duas condições características já mencionadas deste modelo.



**Figura 3.14** Representação ilustrativa de uma rede Multiplex de duas camadas formada por duas redes de 6 vértices. Note que se satisfaz a condição de homogeneidade e a conexão única inter-camada. Fonte: Adaptado de [58] pelo Autor.

A matriz de adjacência de uma rede Multiplex é definida por,

$$A = A_0 + A_s, \quad (3.12)$$

onde  $A_0$  e  $A_s$  são, respectivamente, as matrizes de adjacência que mostram as interações entre primeiros vizinhos intra- e inter-camada. Para uma rede Multiplex composta por  $M$  camadas temos que para cada camada associa-se uma matriz de adjacência que está definida pela Equação 3.1. Portanto, a matriz de adjacência de uma rede Multiplex está dividida por blocos e seu tamanho será de  $NM \times NM$ . Para o exemplo apresentado na Figura 3.14 a matriz de adjacência apresenta-se da seguinte forma,

$$A = \begin{pmatrix} A^1 & 0 \\ 0 & A^2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.13)$$

onde  $A^1$  e  $A^2$  são respectivamente as matrizes de adjacência das redes que estão na primeira e segunda camada. Por outra parte,  $I$  é uma matriz  $N \times N$  que representa a matriz identidade,

a qual é uma matriz diagonal com todos seus elementos matriciais iguais a um. Finalmente é evidente que as redes Multiplex mostram uma grande versatilidade já que é possível explorar diferentes tipos de modelos de redes interagentes entre si, quando consideramos métodos dinâmicos de transporte de informação como a difusão. Isto será mostrado com um maior detalhe no Capítulo 4 mediante a teoria espectral. Finalmente é importante destacar que uma rede Multiplex pode estar formada por digrafos ou redes ponderadas e, a matriz de adjacência do Multiplex estará em função das características que apresentam este tipo de redes.





# Capítulo 4

## Difusão em Redes

### 4.1 INTRODUÇÃO

A difusão, de forma geral, é um fenômeno no qual observa-se uma dinâmica de transporte através de interações entre os elementos que compõem um sistema. Por exemplo, na biologia observa-se o transporte de gás dentro das vias respiratórias no pulmão. Este mecanismo permite a difusão de moléculas de  $O_2$  através das paredes dos alvéolos para o sistema sanguíneo [61]. Por outra parte, a condução de calor em um meio material relaciona o transporte de energia térmica entre regiões de temperaturas diferentes [62]. Portanto, estudar e caracterizar a difusão é fundamental para entender fenômenos naturais e sociais que são matéria de estudo em diversas disciplinas como a biologia, economia, psicologia, ciência da computação, ecologia, química e física. De forma mais precisa, a difusão, em um meio homogêneo de partículas, pode ser descrita como um processo que está associado ao transporte de massa, quando há um gradiente de concentração química. Outra forma de se caracterizar a difusão é através do movimento aleatório das partículas em um espaço com características bem definidas. Por outra parte, a descrição de um processo difusivo considerando suas partículas microscópicas apresenta uma grande complexidade, devido a que não podem ser descritas usando equações deterministas. Portanto, para caracterizar a dinâmica temporal microscópica de um processo difusivo usam-se métodos estocásticos, que consideram o espaço e tempo como discreto ou contínuo.

Uma definição simples de um processo estocástico sobre um espaço discreto considerá-lo como uma sequência de passos aleatórios de comprimento fixo. Desta forma, mediante métodos estocásticos consegue-se analisar as propriedades apresentadas pelos problemas difusivos e sua relação com outras grandezas físicas. Por exemplo, quando consideramos a difusão das moléculas de uma gota de tinta em água observa-se uma relação entre a evolução do processo difusivo e as variáveis termodinâmicas [63]. Por outra parte, uma das maiores vantagens que apresentam os métodos estocásticos é sua facilidade de uso, tanto para descrever processos apresentados na natureza, como também, processos em sistemas sintéticos criados pelo homem. Por exemplo, a análise da dinâmica do preço das ações na bolsa de valores mostram um comportamento indeterminado, mesmo que se conheçam as condições iniciais das variáveis envolvidas durante sua evolução. Portanto, para realizar uma análise e caracterizar o preço de

uma determinada ação, usam-se com frequência diversos métodos estocásticos que permitem dar uma ideia da possível evolução temporal do preço.

Uma das primeiras pessoas a estudar sistemas de partículas que aprestavam uma natureza estocástica foi o botânico escocês Robert Brown. Os principais resultados apresentados nas investigações realizadas por Robert Brown em 1828 e 1829 [64, 65] detalham a natureza do movimento das partículas de pólen dissolvidas em água. Algumas das principais observações de Robert Brown foram que: i) o movimento é irregular e formado por translação e rotação; ii) não existe correlação alguma entre os movimentos das partículas de pólen, ou seja, cada partícula tem um movimento independente; iii) o movimento é incessante e está relacionado com as propriedades físicas do fluido, como a viscosidade e a temperatura. Diversas teorias foram propostas para explicar estes fenômenos, porém foi Albert Einstein em 1905 [66] que apresentou uma explicação plausível para este movimento estocástico, conhecido como o movimento Browniano. As consequências do trabalho de Einstein conseguiram mudar a forma como realizavam-se os estudos em mecânica estatística, dando assim, uma solução à discussão sobre a existência dos átomos e o movimento perene e errático observado por Robert Brown. Adicionalmente, o comportamento das partículas em um processo de difusão pode ser entendido também mediante a equação de Langevin [67, 68] e a equação de Fokker-Planck [69, 70].

A solução realizada por Einstein propõe uma dedução de caráter probabilístico da equação de difusão. Isto consegue relacionar o movimento microscópico dos átomos e moléculas com as leis da termodinâmica observadas no mundo macroscópico. Especificamente Einstein mostrou que a distância quadrática média de uma partícula de pólen, no movimento Browniano, apresenta uma relação linear com o tempo. Desta forma, o movimento aleatório observado por Robert Brown é uma consequência das incessantes colisões das moléculas de água com as partículas macroscópicas de pólen e sua principal característica está em não depender do tempo nem da posição. Hoje em dia existem muitas aplicações para o movimento Browniano, por exemplo, em matemática financeira [71] ou em engenharia [72]. Por outra parte, no raciocínio probabilístico desenvolvido por Einstein, destaca-se a relação com o método estocástico dos caminhantes aleatórios em uma dimensão. Este método apresenta uma grande importância neste trabalho e frequentemente é discutido nos livros de física estatística [73].

O problema dos caminhantes aleatórios é tratado frequentemente por meio de métodos estocásticos que apresentam a propriedade Markoviana <sup>1</sup>. Desta forma, usando este método consegue-se descrever e caracterizar um processo difusivo tanto no espaço discreto como contínuo. Uma descrição geral deste método será considerar os caminhantes executando passos aleatórios de comprimento fixo em intervalos de tempo iguais, tais que o número de passos dados tendem ao infinito e a distribuição de probabilidade de encontrar um caminhante aleatório a uma distância  $m$  de seu ponto de origem aproxima-se a uma função gaussiana. Por outra parte, uma definição mais rigorosa, do ponto de vista da matemática considera o método dos caminhantes aleatórios como um processo formado por uma sucessiva somatória de variáveis aleatórias independentes que estão identicamente distribuídas. Alguns exemplos de aplicações de caminhantes aleató-

---

<sup>1</sup>Em matemática se define um processo estocástico com uma propriedade Markoviana quando o estado atual não depende dos eventos que o precederam. Portanto, a decisão de deslocamento de um caminhante aleatório não está condicionada pelos passos anteriores.

rios são a trajetória formada por uma molécula que está em um líquido ou gás [74], a migração de animais em busca de alimento [75], o preço das ações na bolsa [76] e, em ciência computacional, usam-se estes métodos, para estimar o tamanho e as características da Internet [77].

Além desta descrição de difusão, dentro de uma perspectiva aleatória, existe um modelo através de uma equação determinística que é conhecido como a equação de difusão. Ela foi obtida inicialmente por Fick em 1855 [78] como uma descrição macroscópica para processos reais de difusão (leis de Fick <sup>2</sup>). No entanto, ela pode ser utilizada para entender o processo em outros espaços, como redes complexas. Este modelo interpreta a difusão entendendo esta como um processo no espaço discreto (sobre uma rede) no qual existe uma transferência de informação realizada com total facilidade através das arestas da rede de um vértice a outro em cada passo. Isto permite descrever um processo dinâmico difusivo mediante a equação de difusão em redes que é semelhante à equação para difusão ordinária de um gás, com a única diferença que o fator laplaciano  $\nabla^2$  presente na difusão é neste caso representado por uma matriz que se conhece como matriz Laplaciana, cuja importância se estende a muitas outras situações além dos processos de difusão [20, 79, 80]. Usando as propriedades espectrais da matriz Laplaciana, se consegue mostrar as implicações entre as características topológicas da rede e o tempo total requerido pelo processo difusivo, ou seja, o tempo de relaxação [29].

Neste capítulo apresenta-se uma breve descrição analítica do processo de difusão em redes complexas. Assim, na Seção (3.1) se deduz a solução da equação diferencial de difusão para o método dos caminhantes aleatórios em uma dimensão. Este resultado é igualmente válido para dimensões superiores. Na Seção (3.2) mostra-se as condições necessárias para estimar a posição do caminhante aleatório com respeito a um ponto de referencia no tempo  $t = 0$ . Em outras palavras, o deslocamento quadrático médio ou  $MSD$  <sup>3</sup> é uma grandeza que estima o espaço coberto ou explorado pelos caminhantes aleatórios em função do tempo e permite caracterizar o processo de difusão como normal ou anômala [37, 81, 82]. Para complementar a caracterização da difusão sobre uma rede, mostra-se também nas seguintes seções a dedução da equação de difusão para redes e as implicações da teoria espectral. Na ultima seção apresentamos uma adaptação da teoria espectral de difusão sobre as redes Multiplex. Desta forma mostramos a relação entre o tempo de relaxação do processo difusivo e o coeficiente de difusão inter-camada.

## 4.2 CAMINHANTES ALEATÓRIOS

Processos reais ou sintéticos no mundo macroscópico e microscópico mostram frequentemente uma aleatoriedade intrínseca durante seu desenvolvimento. Para descrever e caracterizar esta dinâmica apresentada por um processo aleatório, é comum usar um conjunto de variáveis cujas propriedades permitem que elas assumam valores aleatórios e independentes. No contexto da teoria das probabilidades, este conjunto se conhece como *variáveis aleatórias independentes* e estão definidas através de uma distribuição de probabilidades. Em outras palavras, seja  $\{X_1, X_2, X_3, \dots, X_j, \dots, X_n\}$  um conjunto de  $n$  variáveis aleatórias independentes, onde  $X_j$  sa-

<sup>2</sup>Um processo difusivo no qual se seguem as leis de Fick se define como difusão normal, portanto, um processo de difusão anômala é aquele onde as leis de Fick não se satisfaz.

<sup>3</sup>Acrônimo da expressão em inglês Mean Square Displacement.

tisfaz uma distribuição de probabilidades em um determinado intervalo do tempo, ou seja,  $\{X_j : j \in t\}$ . As variáveis  $X_j$  e  $j$  podem ser definidas tanto no espaço contínuo como no espaço discreto, isto dependendo do contexto do problema onde as variáveis aleatórias sejam usadas. Desta forma, um sistema homogêneo será definido quando todas as variáveis aleatórias, que ajudam a descrever um processo aleatório, usam uma única distribuição de probabilidades. Por exemplo, na física estatística considera-se o método clássico dos caminhantes aleatórios como sendo um sistema homogêneo. Este método é bastante conhecido, existindo uma extensiva quantidade de artigos e livros que mostram sua aplicação em diversos processos estocásticos, como a difusão [73, 83]. Nesta seção apresenta-se uma breve descrição do método dos caminhantes aleatórios e sua aplicação para descrever e caracterizar a difusão no espaço discreto.

Sem perda de rigor matemático, apresentamos o método dos caminhantes aleatórios em uma dimensão definido o espaço e tempo como discretos. Portanto, o espaço unidimensional está formado por uma série, finita ou infinita, de posições que vão estar separadas a igual distância. Isto significa que em uma caminhada aleatória de  $n$  passos, as posições de um caminhante aleatório serão descritas por um conjunto  $\{x_0, x_1, x_2, \dots, x_n\}$ , onde  $x_j$  indica a posição do caminhante no  $j$ -ésimo passo e  $x_0$  corresponde com a posição inicial da caminhada aleatória. Quando consideramos um intervalo de tempo  $\tau = t_{i+1} - t_i$ , um caminhante aleatório executa um deslocamento a direita ou esquerda a partir de sua posição atual. Ou seja, em cada passo de tempo um caminhante aleatório executa um deslocamento  $l = 1$  para a direita, com probabilidade  $p$ , ou de um passo  $l = -1$  para a esquerda, com probabilidade  $q = 1 - p$ . Uma propriedade importante apresentada pelos caminhantes aleatórios é a propriedade de Markov <sup>4</sup>. Em consequência, a probabilidade de um caminhante aleatório para pular de sua posição para um sitio vizinho não está influenciada pelo histórico de sítios já visitados pelo caminhante. Assim o cálculo da probabilidade de deslocamento está relacionado unicamente com sua posição atual. Vale a pena ressaltar que os resultados e propriedades apresentados para caminhantes aleatórios em uma dimensão serão de igual forma válidos em outras dimensões de ordem superior.

Seja  $\{X_1, X_2, X_3, \dots, X_j, \dots, X_n\}$  um conjunto de variáveis aleatórias independentes onde,  $X_j$  corresponde ao  $j$ -ésimo passo, executado para a direita ou esquerda com probabilidade  $p$  ou  $q$  respectivamente. Portanto, a posição de um caminhante aleatório unidimensional está determinada pela soma dos  $n$  passos individuais, ou seja

$$m = X_1 + X_2 + X_3 + \dots + X_n = \sum_{k=1}^n X_k, \quad (4.1)$$

onde  $m > 0$  ( $m < 0$ ) determina a posição do caminhante a direita (esquerda) de sua posição inicial em  $x_0$ . Em outras palavras, a caracterização da posição e o tempo de uma caminhada aleatória de  $n$  passos com comprimento  $l$ , está definida respectivamente como  $h = lm$  e  $t = n\tau$ . Por outra parte, a média e a variância da variável aleatória  $X_j$  será

---

<sup>4</sup>Um processo estocástico é um processo markoviano de primeira ordem quando o estado futuro do processo depende unicamente do estado atual e um processo markoviano considera-se de segunda ordem, quando o estado futuro depende do estado atual e de um estado anterior. Assim, um processos markovianos de ordem superior dependerão do estado atual e de um número maior de estados passados [84]. Neste trabalho consideramos unicamente processos markovianos de primeira ordem.

$$\bar{X} = \langle X_j \rangle = p - q, \quad (4.2)$$

$$\sigma^2 = \langle X_j^2 \rangle - \langle X_j \rangle^2 = 4pq, \quad (4.3)$$

onde  $\langle . \rangle$  é a média e a variância está definida como  $\sigma^2 = \langle (X_j - \langle X_j \rangle)^2 \rangle$ . Repare que, na Equação 4.1 a grandeza  $m$  está em função das  $n$  variáveis aleatórias, portanto, podemos definir a média e variância de  $m$  em função das Equações 4.2 e 4.3,

$$\langle m \rangle = n\bar{X}, \quad (4.4)$$

$$\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2 = n\sigma^2. \quad (4.5)$$

Por meio das equações apresentadas podemos caracterizar a caminhada aleatória de um único caminhante aleatório. No entanto, para descrever e caracterizar um determinado processo estocástico deve-se considerar um grande número de caminhantes aleatórios. Portanto, suponha um processo estocástico que se descreve usando  $r$  caminhantes aleatórios independentes sobre um espaço unidimensional. No tempo  $t = 0$ , os  $r$  caminhantes aleatórios estarão concentrados em um único ponto do espaço unidimensional. Desta forma, considera-se que todos os caminhantes aleatórios iniciam desde a posição  $x_0$ . Por outra parte, cada caminhada aleatória é independente e após  $n$  passos de tempo, os  $r$  caminhantes aleatórios estarão dispersos sobre o espaço unidimensional em diferentes posições. O método clássico dos caminhantes aleatórios considera a distribuição uniforme para calcular a probabilidade de dar um passo a direita ou esquerda. Portanto, a probabilidade  $\rho_n(m)$  de encontrar um caminhante aleatório na posição  $m$  após  $n$  passos de tempo terá a forma da distribuição binomial [83, 85]

$$\rho_n(m) = \frac{1}{\binom{n+m}{2}! \binom{n-m}{2}!} p^{(n+m)/2} q^{(n-m)/2}. \quad (4.6)$$

Quando consideramos um grande número  $n$  de passos, podemos aproximar a distribuição binomial por uma distribuição normal centrada em  $x_0$ ,

$$\rho_n(m) = \frac{1}{\sqrt{2\pi n\sigma^2}} e^{-(m-n\bar{X})^2/2n\sigma^2}, \quad (4.7)$$

onde  $\bar{X}$  e  $\sigma^2$  são, respectivamente, a média e a variância da variável aleatória  $X_j$  (ver Equações 4.2 e 4.3). Note que o resultado apresentado na Equação 4.7 esta conforme com o teorema do limite central [83, 85]. Por outra parte, a densidade de probabilidade será  $\rho_n(h, t) = \rho_n(m)/l$ , ou seja,

$$\rho_n(h, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-(h-ct)^2/4Dt}, \quad (4.8)$$

onde  $D$  é um parâmetro de caráter macroscópico conhecido como o coeficiente de difusão e está relacionada com a variância (ver Equação 4.7) de um processo microscópico estocástico de muitas partículas. Portanto, com o resultado da Equação 4.8 pode-se definir que a média e a variância são proporcionais ao coeficiente de difusão, com um comportamento que exhibe uma relação linear,

$$\langle m \rangle = ct, \quad (4.9)$$

$$\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2 = 2Dt, \quad (4.10)$$

onde a velocidade média do caminhante aleatório é  $c = p - q$ . Desta forma, quando  $c > 0$  ( $c < 0$ ), a caminhada aleatória diverge e tende para  $\infty$  ( $-\infty$ ). Portanto, a velocidade média mostra que existe um comportamento assintótico, quando as variáveis aleatórias que descrevem o processo estocástico são definidas por uma distribuição não uniforme. No entanto, quando  $c = 0$  (ou seja, os caminhantes aleatórios possuem igual probabilidade de se mover para a esquerda ou para a direita), o processo estocástico descreve um comportamento irregular. Ou seja, a natureza estocástica deste processo consegue que o caminhante aleatório transite para a direita ou para a esquerda sem nenhum tipo de regularidade. Em consequência, o comportamento se observa que o caminhante aleatório está na vizinhança da posição inicial  $x_0$ . Por outra parte, é importante notar que, a expressão 4.8 corresponde à solução da equação diferencial de difusão,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho}{\partial h^2}. \quad (4.11)$$

Finalmente ressaltamos que, os resultados apresentados para caracterizar caminhantes aleatórios unidimensionais são igualmente válidos em dimensões de ordem superior. No entanto, é importante estabelecer uma correspondência entre a formulação dos caminhantes aleatórios e a equação de difusão em redes complexas como será tratado a seguir.

### 4.3 DIFUSÃO EM REDES USANDO CAMINHANTES ALEATÓRIOS

Quando descrevemos um processo estocástico no espaço discreto utilizando caminhantes aleatórios, observamos que a topologia do espaço é semelhante com a estrutura que apresentam as redes. Desta forma, podemos representar diversos espaços discretos, onde os caminhantes aleatórios pulam entre os vértices (através das arestas) com uma probabilidade diferente de zero. Portanto, o método dos caminhantes aleatórios em redes deve considerar redes conexas, onde um caminhante aleatório pula entre dois vértices se existe uma aresta que os conecta.

Os problemas estocásticos abordados com caminhantes aleatórios em uma rede permitem realizar análises de uma grande variedade de problemas. Por exemplo, em diversas redes reais

como a Internet é importante conhecer sua forma estrutural e organizacional. No entanto, encontrar detalhes precisos da topologia deste tipo de redes é um grande desafio, devido a sua complexidade e tamanho. De forma geral estas redes apresentam uma estrutura modular, na qual os vértices estão conectados de forma não homogênea. Desta forma, uma solução para conhecer suas propriedades estruturais e organizacionais é mapear uma parte da rede usando o método dos caminhantes aleatórios. Assim, podemos observar e classificar as subestruturas que apresentam uma concentração de vértices conectados [86, 87]. Nesta seção apresentamos a aplicação do método dos caminhantes aleatórios em uma rede finita para descrever a dinâmica do processo de difusão.

A difusão em uma rede modelada através de caminhantes aleatórios é um processo estocástico que descreve a transmissão de informação através dos vértices, e sua dinâmica estará influenciada pela configuração estrutural da rede. Nesta seção se caracterizará a difusão realizando a estimação do deslocamento quadrático médio (*MSD*). Esta grandeza é definida como o conjunto médio das distancias médias entre a posição inicial do caminhante e sua posição após um numero de passos de tempo. Em outras palavras,

$$MSD = \langle r^2(t) \rangle = \langle (x(t) - x_0)^2 \rangle \sim t^\gamma. \quad (4.12)$$

Note que a Equação 4.12 é semelhante ao resultado apresentado pela Equação 4.9 e 4.10 na seção anterior e, portanto, a lei de potências exibida pela Equação 4.12 permite classificar o comportamento difusivo em função do parâmetro  $\gamma$ . Quando o *MSD* descreve um comportamento linear com  $\gamma = 1$ , o processo difusivo é conhecido como difusão normal. No entanto, quando o *MSD* descreve um comportamento com  $\gamma < 1$  ou  $\gamma > 1$ , temos, sub-difusão e super-difusão, respectivamente. Quando realizamos o cálculo do *MSD* para descrever um processo difusivo em um substrato finito, observamos que este se caracteriza por dois estados. O primeiro, é quando o *MSD* segue a lei de potências como se observa na Equação 4.12 e é geralmente encontrado no intervalo de tempo  $0 \leq t \leq \lfloor t_{sat} \rfloor$ , onde  $t_{sat}$  é o tempo de saturação. O segundo se conhece como o estado de saturação no qual a probabilidade de encontrar um caminhante aleatório após  $m$  passos de tempo é a mesma para todos os vértices da rede. Uma descrição aproximada deste comportamento é descrita pela seguinte equação:

$$\langle r^2(t) \rangle \approx \begin{cases} t^\gamma & \text{Se } 0 \leq t \leq \lfloor t_{sat} \rfloor, \\ \langle r^2(t) \rangle_{sat} & \text{Se } t > t_{sat}, \end{cases} \quad (4.13)$$

onde  $\langle r^2(t) \rangle_{sat}$  é o estado de saturação do processo difusivo. É importante ressaltar que o estado de saturação é uma consequência dos efeitos finitos da rede e apresenta uma relação com seu diâmetro. Assim, tanto a topologia como as propriedades estruturais da rede influenciam o comportamento da dinâmica de difusão e, quanto maior é o diâmetro de uma rede, maior será o número de passos de tempo necessários para atingir o estado de saturação<sup>5</sup>. Embora o *MSD* seja uma grandeza que oferece uma descrição dos três comportamentos difusivos que estão

<sup>5</sup>Em uma rede com um tamanho "infinito" o *MSD* diverge, portanto, nunca atinge o estado de saturação em um tempo finito.

caracterizados pelo parâmetro  $\gamma$ , existem outras grandezas que permitem também caracterizar e mostrar outros aspectos de um processo difusivo, como por exemplo, a primeira passagem [88–90].

O processo difusivo descrito pelos caminhantes aleatórios em uma rede terá um comportamento semelhante ao caso descrito no espaço discreto unidimensional. Ou seja, um caminhante aleatório, cuja posição é o vértice  $i$ , saltará com igual probabilidade a qualquer vértice adjacente  $j$ , que está conectado através de uma aresta com o vértice  $i$ . Este processo será repetido em cada passo de tempo e satisfaz a propriedade de Markov. Portanto, a probabilidade de pular entre dois vértices adjacentes  $i$  e  $j$  será independente dos passos já realizados. Para calcular a probabilidade que apresentam os caminhantes aleatórios e o *MSD*, primeiro vamos considerar algumas definições da teoria de redes. Seja  $G(\mathcal{V}, \mathcal{E})$  uma rede simples de tamanho  $N$ , então a matriz de adjacência está definida pela Equação 3.1,

$$A_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{Se } (i, j) \in \mathcal{E}, \\ 0 & \text{Se } (i, j) \notin \mathcal{E}. \end{cases} \quad (4.14)$$

A probabilidade  $\rho_{ij}$ , de um caminhante aleatório, para saltar entre dois vértices adjacentes deve estar relacionada com as propriedades estruturais do espaço discreto e, para que o processo seja homogêneo localmente, define-se

$$\rho_{ij}(t) = \frac{A_{ij}}{k_i}, \quad (4.15)$$

onde  $k_i$  é o grau do vértice  $i$  e  $\sum_{j=1}^N \rho_{ij} = 1$ . Desta forma, definimos a matriz de transição como  $\mathcal{P} = \mathcal{S}^{-1}A$ , onde  $\mathcal{S}$  é uma matriz diagonal cujos elementos matriciais são  $(\mathcal{S})_{ij} = (\mathcal{S})_i = k_i$ . Repare que, o elemento matricial  $(\mathcal{P})_{ij}$  corresponde à probabilidade  $\rho_{ij}$ . Desta forma, usando a matriz de transição temos que a evolução temporal da probabilidade em um tempo  $t$  é dada por

$$\vec{P}_t = \mathcal{P}^T \vec{P}_{t-1}, \quad (4.16)$$

onde  $\mathcal{P}^T$  é a matriz transposta de  $\mathcal{P}$  e  $\vec{P}_t$  é um vetor cuja  $j$ -ésima entrada corresponde com à probabilidade do caminhante aleatório estar no vértice  $j$  no tempo  $t$ . Repare que a Equação 4.16 satisfaz um processo no qual a probabilidade de um dado instante depende do valor das probabilidades do estado anterior. Este processo é conhecido como cadeia de Markov e possui uma grande relevância em diferentes problemas físicos [74, 80, 83]. Por outra parte, o vetor  $\vec{P}_t$  deve satisfazer

$$\sum_{k=1}^N \vec{P}_{t,k} = 1. \quad (4.17)$$

Portanto, os elementos do vetor  $\vec{P}_t$  correspondem com as probabilidades de um caminhante aleatório estar em um determinado vértice no tempo  $t$ . Repare que, para um caminhante aleatório



em uma rede simples a matriz de transição é uma matriz estocástica e simétrica. Por outra parte, aplicando de forma sucessiva a Equação (4.16), podemos deduzir a evolução temporal do vetor  $\vec{P}_t$  para um caminhante aleatório que inicia sua caminhada no vértice  $i$  no tempo  $t = 0$ ,

$$\vec{P}_{t,i} = \mathcal{P}^T \vec{P}_{t-1,i} = \mathcal{P}^T \mathcal{P}^T \vec{P}_{t-2,i} = \mathcal{P}^T \mathcal{P}^T \mathcal{P}^T \vec{P}_{t-3,i} = \dots = (\mathcal{P}^T)^t \vec{P}_{0,i}, \quad (4.18)$$

onde o vetor coluna  $\vec{P}_{0,i}$  indica que o caminhante aleatório inicia no vértice  $i$ . Portanto, os elementos deste vetor coluna devem ser zero menos o elemento  $i$ -ésimo que será igual a um. Ou seja,  $(\vec{P}_{0,i})_j = \delta_{ij}$ , onde  $\delta_{ij}$  é o delta de Kronecker. Por outro lado, o vetor  $\vec{P}_{t,i}$  na Equação 4.18 indica a probabilidade que tem um caminhante aleatório de estar novamente na posição inicial no vértice  $i$  após  $t$  passos do tempo. Usando o vetor  $\vec{P}_t$ , definido pela Equação 4.18, podemos obter o deslocamento quadrático para um caminhante aleatório depois de  $t$  passos de tempo estar no vértice  $i$

$$r^2(t,i) = \sum_{j=1}^N (d_{ij})^2 (\vec{P}_{t,i})_j, \quad (4.19)$$

onde  $d_{ij}$  é a distância do menor caminho entre os vértices  $i$  e  $j$  (ver Capítulo 3). Finalmente usando a Equação 4.19 podemos conseguir uma equação para o cálculo do *MSD*

$$\langle r^2(t) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N r^2(t,i) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (d_{ij})^2 (\vec{P}_{t,i})_j. \quad (4.20)$$

Repare que a Equação 4.20 é função implícita da matriz de adjacência, o que se deve ao vetor de probabilidades que depende da matriz de transição (ver Equação 4.16). Por outra parte, no artigo [37] foi informado que o comportamento difusivo mostrado pelo *MSD* em um processo de difusão normal, ou seja, com  $\gamma = 1$ , sobre uma RCC pode ser descrito da seguinte forma:

$$\langle r^2 \rangle = \begin{cases} t & \text{Se } t \ll N^2/12, \\ \ell^2 & \text{Se } t \gg N^2/12, \end{cases} \quad (4.21)$$

onde  $\ell^2$  é a distância mínima quadrada média entre um par de vértices. Note que o termo  $\ell^2$  para uma RCC será aproximadamente o valor de saturação do *MSD*, ou seja,  $\langle r^2 \rangle_{sat} \simeq \ell^2$ , cujo valor pode ser expresso analiticamente por

$$\ell^2 = \frac{1}{N} \left( -\frac{4}{3}mD^3 + (N-1+m)D^2 + \frac{m}{3}D \right), \quad (4.22)$$

onde,

$$D = \left[ \frac{N}{2m} \right], \quad (4.23)$$

e  $\lceil x \rceil$  corresponde com função teto. De forma geral para qualquer tipo de rede simples pode-se demonstrar que o valor de  $\ell^2$  está em função da matriz de vizinhança [37] (ver Capítulo 3),

$$\ell^2 = \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (\tilde{\mathcal{M}} \circ \tilde{\mathcal{M}})_{ij}, \quad (4.24)$$

onde  $\circ$  é o operador que representa a multiplicação Hadamard, ou seja,  $(A \circ B)_{ij} = (A)_{ij}(B)_{ij}$ . No entanto, como a RCC possui a propriedade circulante (ver Capítulo 3), podemos reduzir a expressão dada pela Equação 4.24 da seguinte forma,

$$\ell^2 = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N d_{ij}^2. \quad (4.25)$$

Note que, considerando uma RCC com  $m = 1$  e  $N$  ímpar, a Equação 4.25 será igual a

$$\ell^2 = \frac{N^2 - 1}{12} \approx \frac{N^2}{12}. \quad (4.26)$$

#### 4.4 ANÁLISE DA DIFUSÃO USANDO O ESPECTRO DA MATRIZ LAPLACIANA

Como se mostrou na seção anterior, o método dos caminhantes aleatórios permite caracterizar determinados aspectos de um processo difusivo. No entanto, existem outros métodos e grandezas que possibilitam a utilização de outros pontos de vista para descrever e caracterizar o fenômeno da difusão. Esta diversidade de métodos e grandezas estão presentes tanto no espaço contínuo como no espaço discreto. Desta forma, pode-se ter uma melhor ideia das propriedades e características suficientes que permitem o desenvolvimento de processos de transporte de informação. Por exemplo, considerações das propriedades espectrais da matriz Laplaciana<sup>6</sup> permitem relacionar a escala temporal de um processo difusivo com as propriedades estruturais da rede [58, 91]. Nesta seção, apresenta-se a caracterização de um processo difusivo, considerando o tempo contínuo e as propriedades espectrais da matriz Laplaciana.

De forma geral, a difusão em uma rede é vista como um processo pelo qual se transmite uma substância ou informação de um vértice a outro, através das arestas da rede. Portanto, em um processo difusivo consideramos naturalmente as propriedades métricas da rede, já que elas influenciam de forma significativa a dinâmica do processo.

Para descrever matematicamente a difusão considere uma rede simples  $G(\mathcal{V}, \mathcal{E})$  de tamanho  $N$ , onde  $\phi_i(t)$  representa o estado temporal do  $i$ -ésimo vértice. Desta forma, a equação que descreve a evolução temporal do processo de transmissão de informação entre dois vértices  $i$  e  $j$  será definida como

<sup>6</sup>Em matemática considera-se o espectro de uma matriz como o conjunto de seus autovalores.

$$\frac{d\phi_i}{dt} = D \sum_j A_{ij} (\phi_j - \phi_i), \quad (4.27)$$

onde  $D$  é a constante de difusão que permite mensurar a facilidade com que a informação passa de um vértice a outro. Por outra parte,  $A_{ij}$  corresponde com os elementos da matriz de adjacência da rede e seu papel na Equação 4.27 é garantir que o processo de difusão se realize unicamente entre vértices conectados através de uma aresta, ou seja, vértices adjacentes. Processos complexos, como a difusão não homogênea consideram a rede ponderada cuja representação matricial  $W$  deve substituir os elementos da matriz de adjacência na Equação 4.27. Separando os termos na Equação 4.27 e reorganizando obtemos

$$\frac{d\phi_i}{dt} = D \sum_j (A_{ij} - \delta_{ij}k_i) \phi_j, \quad (4.28)$$

onde  $k_i$  é o grau do  $i$ -ésimo vértice, e  $\delta_{ij}$  é a função delta de Kronecker. Para generalizar a Equação 4.28 escrevemos sua forma matricial

$$\frac{d\phi}{dt} = D(A - \mathcal{S})\phi, \quad (4.29)$$

onde  $\phi$  e  $\mathcal{S}$  são, respectivamente, o vetor de estado temporal dos vértices e, a matriz diagonal cujos elementos matriciais são o grau de cada vértice da rede. Finalmente para obter a equação que descreve o processo de difusão na rede definimos a matriz Laplaciana como  $L = \mathcal{S} - A$ , desta forma temos seguinte equação diferencial

$$\frac{d\phi}{dt} + DL\phi = 0. \quad (4.30)$$

A Equação 4.30 é semelhante à equação de difusão para um gás, onde o operador  $\nabla^2$  corresponderá com a matriz Laplaciana. Portanto, considera-se a matriz Laplaciana uma discretização do operador Laplaciano [13, 14]. Esta interpretação permite usar suas propriedades espectrais para caracterizar diversos aspectos de um processo difusivo.

Por outra parte, a matriz Laplaciana permite também caracterizar outros tipos de processos dinâmicos em redes. Por exemplo, a sincronização é um fenômeno investigado em diversas áreas do conhecimento, como a física, a química, a engenharia, a biologia etc. Este fenômeno ocorre quando um determinado conjunto de vértices em uma rede atinge um consenso coletivo. Na literatura, observa-se que o tempo necessário para sincronizar a fase dos osciladores e a estabilidade do estado de sincronização estão relacionados com o segundo menor autovalor da matriz Laplaciana [79, 92, 93]. Assim, os autovetores e autovalores da matriz Laplaciana mostram uma relação entre as propriedades estruturais de uma rede e o desenvolvimento de um processo dinâmico. A matriz Laplaciana é uma matriz simétrica na qual a soma dos elementos de uma linha (coluna) são iguais a zero. Como foi mencionado na introdução o espectro da matriz

Laplaciana é formado por  $N$  autovalores reais positivos que, por convenção, são enumerados de forma ascendente

$$0 = \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \lambda_3 \leq \dots \leq \lambda_N. \quad (4.31)$$

O primeiro autovalor da matriz Laplaciana é sempre igual a zero e seu autovetor associado será o vetor  $\vec{1}$  cujas entradas são todas iguais a um. Por outra parte, a multiplicidade do primeiro autovalor do espectro corresponde com o número de componentes que formam a rede. Por exemplo, para uma rede conexa existe uma única componente e conseqüentemente, um único autovalor igual a zero. Por outra parte, para redes desconexas formadas por  $m$  componentes separadas, existem  $m$  autovalores cujo valor será igual a zero <sup>7</sup>. Neste trabalho consideramos unicamente redes conexas, isto implica que  $\lambda_2 > 0$  <sup>8</sup>. A matriz Laplaciana é uma matriz singular, portanto, não terá inversa já que o determinante é o produto de seus autovalores. De forma geral a matriz Laplaciana é definida como,

$$L = \begin{cases} k_i & \text{Se } i = j, \\ -1 & \text{Se } i \neq j \text{ se existe uma aresta entre } i \text{ e } j, \\ 0 & \text{Se } i \neq j \text{ se não existe uma aresta entre } i \text{ e } j. \end{cases} \quad (4.32)$$

A solução para a Equação 4.30, expressa em função da base formada pelos autovetores da matriz Laplaciana, ou seja, o estado temporal dos vértices da rede, corresponde a uma combinação linear dos autovetores

$$\phi(t) = \sum_i a_i(t) \vec{V}_i, \quad (4.33)$$

onde  $\vec{V}_i$  corresponde com o  $i$ -ésimo autovetor. Substituindo a Equação 4.33 na Equação 4.30 e considerando que  $\mathcal{L}\vec{V}_i = \lambda_i \vec{V}_i$  encontramos que

$$a_i(t) = a_i(0) e^{-D\lambda_i t}. \quad (4.34)$$

Observe que, definindo a condição inicial na Equação 4.34 podemos obter uma descrição do processo difusivo usando a Equação 4.30. Por outra parte, os autovalores da matriz laplaciana são todos reais positivos (ver Equação 4.31), portanto, a Equação 4.34 apresenta um decaimento exponencial e a solução tende para um equilíbrio estável quando  $t \rightarrow \infty$ . Este estado estável é conhecido como o estado de relaxação do processo difusivo. Examinando a Equação 4.33 e 4.34 consegue-se deduzir a relação entre o tempo de relaxação e o segundo autovalor da matriz Laplaciana. Com efeito, escrevendo os termos da somatória da Equação 4.33 de forma explícita, temos

<sup>7</sup>Fiedler mostrou com ajuda do teorema de Perron- Frobenius que um grafo é conexo se, e somente se, o seu segundo menor autovalor da matriz Laplaciana é positivo [94].

<sup>8</sup>O segundo autovalor da matriz Laplaciana de uma rede conexa se conhece na literatura como a conectividade algébrica de um grafo.

$$\phi(t) = a_1(0)\vec{V}_1 + a_2(0)e^{-D\lambda_2 t}\vec{V}_2 + \dots + a_N(0)e^{-D\lambda_N t}\vec{V}_1. \quad (4.35)$$

Quando consideramos que o tempo tende para o infinito na Equação 4.35, observamos como os termos que compõem a somatória começaram a se aproximar a zero. Portanto, a solução do estado de relaxação será  $a_1(0)\vec{V}_1$ . No entanto, o ultimo termo a se aproximar a zero será  $a_2(0)e^{-D\lambda_2 t}\vec{V}_2$ . Com esta informação podemos concluir que o tempo no qual o processo difusivo entra no estado de relaxação estará relacionado com o segundo autovalor do espectro. Para deduzir esta relação multiplicamos a Equação 4.35 pelo segundo autovetor e considerando que os autovetores formam uma base ortonormal, ou seja  $\vec{V}_i \cdot \vec{V}_j = \delta_{ij}$ , chegamos à seguinte expressão

$$\Phi = a_2(0)e^{-D\lambda_2 t}, \quad (4.36)$$

onde  $\Phi = \phi \cdot \vec{V}_2$ . Desta forma, podemos concluir que o tempo de relaxação, de um processo difusivo em uma rede conexa  $t_x$ , será inversamente proporcional ao segundo autovalor da matriz Laplaciana.

$$t_x \sim \frac{1}{\lambda_2}. \quad (4.37)$$

#### 4.5 DIFUSÃO EM REDES MULTIPLEX

O estudo dos autovalores da matriz Laplaciana de uma rede ajuda a descrever e caracterizar tanto propriedades topológicas como também processos dinâmicos como o fenômeno de difusão. No entanto, a observação de processos dinâmicos de transporte de informação mostram que a difusão é o resultado da interação de diversas redes. Portanto, a descrição e caracterização de processos difusivos devem considerar estruturas de redes que estão interagindo como é o caso da rede Multiplex. Na Seção 3.6 do Capítulo 3 foi discutido este tipo de estruturas multicamadas onde cada camada corresponde a uma rede. Assim, usando a topologia da rede Multiplex (ver Figura 3.14) pretende-se nesta seção abordar a caracterização da difusão desde a perspectiva da teoria espectral. Desta forma, o calculo dos autovalores permitiram caracterizar as propriedades difusivas neste modelo multicamada.

Considerando as propriedades estruturais da rede Multiplex, discutidas no Capítulo 3, seja  $\mathcal{M} = (\mathcal{G}, \mathcal{C})$  uma rede Multiplex formada por  $M$  camadas, onde cada camada corresponde a uma rede simples de tamanho  $N$ . Desta forma, a interação entre as redes é devida à conexão entre vértices de uma camada com suas contrapartes nas outras camadas. Por outra parte, de forma semelhante que na seção anterior, vamos a deduzir a equação de difusão para uma rede Multiplex usando o argumento de uma substância que se propaga através das arestas. Portanto, a equação que descreve a dinâmica do estado temporal do  $i$ -ésimo vértice na camada  $K$  é

$$\frac{d\phi_i^K}{dt} = D_K \sum_{j=1}^N A_{ij}^K (\phi_j^K - \phi_i^K) + \sum_{H=1}^M D_{KH} (\phi_i^H - \phi_i^K). \quad (4.38)$$

onde  $D_L$  e  $D_{KH}$  são respectivamente, as constantes de difusão intra-camada e inter-camada. Repare que se  $M = 1$  na Equação 4.38 obtemos a Equação 4.27 que descreve o estado temporal dos vértices em um processo de difusão em uma rede. Assim, a Equação 4.38 apresenta um termo somatório a mais que representa a contribuição das interações das redes que compõem o Multiplex. Por outra parte, realizando um procedimento semelhante ao apresentado na seção anterior para a Equação 4.27 podemos deduzir também a forma matricial da Equação 4.38

$$\frac{d\phi}{dt} + \mathcal{L}\phi = 0, \quad (4.39)$$

onde  $\mathcal{L}$  é a matriz supra-Laplaciana da rede Multiplex e, é definida como

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_0 + \mathcal{L}_s, \quad (4.40)$$

onde  $\mathcal{L}_0$  e  $\mathcal{L}_s$  são respectivamente as contribuições intra-camada e inter-camada. De forma mais específica, a matriz supra-Laplaciana de uma Multiplex é uma matriz de  $M \times M$  blocos, com um total de  $NM \times NM$  elementos. Ou seja,

$$\mathcal{L} = \begin{pmatrix} D^1 L^1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & D^2 L^2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & D^M L^M \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sum_{H \neq 1}^M D^{1H} I & -D^{12} I & \dots & -D^{1M} I \\ -D^{21} I & \sum_{H \neq 2}^M D^{2H} I & \dots & -D^{2M} I \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -D^{M1} I & -D^{M2} I & \dots & \sum_{H \neq M}^M D^{MH} I \end{pmatrix}, \quad (4.41)$$

onde  $L^i$  é a matriz Laplaciana da  $i$ -ésima camada do Multiplex e  $I$  é a matriz identidade com  $N \times N$  elementos. Note que os blocos na diagonal principal da matriz supra-Laplaciana correspondem com as contribuições das interações intra-camada, portanto, os blocos que não pertencem à diagonal principal correspondem com as contribuições das interações inter-camada. Note também que, as propriedades da matriz Laplaciana discutidas na seção anterior são igualmente válidas para a matriz supra-Laplaciana. Portanto, a solução da Equação 4.39 é expressa em função dos autovalores e autovetores da matriz supra-Laplaciana.

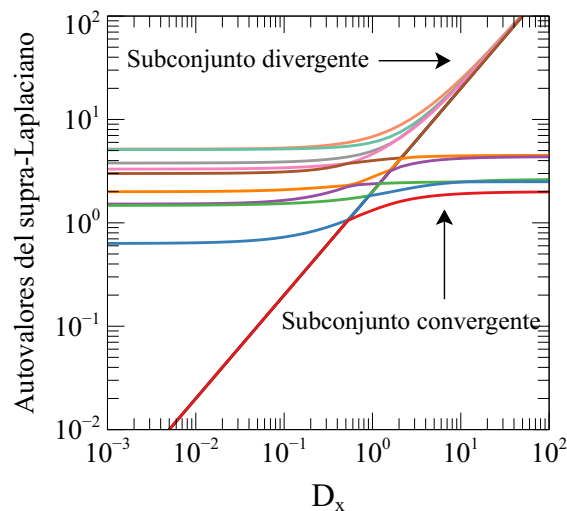
Neste tese vamos a usar  $\Lambda$  para indicar o segundo autovalor da matriz supra-Laplaciana e  $\lambda^i$  para nos referir ao segundo autovalor da  $i$ -ésima camada do Multiplex. É importante ressaltar que a investigação do fenômeno de difusão em redes Multiplex, que se apresenta neste trabalho, está focada na análise do espectro da matriz supra-Laplaciana. Portanto, o tempo de relaxação do processo difusivo é determinado pelo menor autovalor diferente de zero, ou seja  $t_x \sim 1/\Lambda$ .

Nos artigos [91] e [58] se caracteriza a difusão em uma rede Multiplex através da relação entre o espectro de autovalores da matriz supra-Laplaciana e a constante de difusão inter-camada.

Desta forma, o segundo autovalor da matriz supra-Laplaciana  $\Lambda$  caracteriza o processo de difusão. Estas investigações mostram também como o processo de difusão é sensível ante mudanças topológicas em alguma das redes que formam o Multiplex. Para observar melhor estas propriedades sem perda de rigor matemático, vamos considerar uma rede Multiplex de duas camadas, onde os coeficientes de difusão intra-camada e inter-camada serão definidos respectivamente por  $D^1 = D^2 = 1$  e  $D^{12} = D_x$ . Com estas considerações a matriz supra-Laplaciana da rede Multiplex é

$$\mathcal{L} = \begin{pmatrix} L^1 & 0 \\ 0 & L^2 \end{pmatrix} + D_x \begin{pmatrix} I & -I \\ -I & I \end{pmatrix}. \quad (4.42)$$

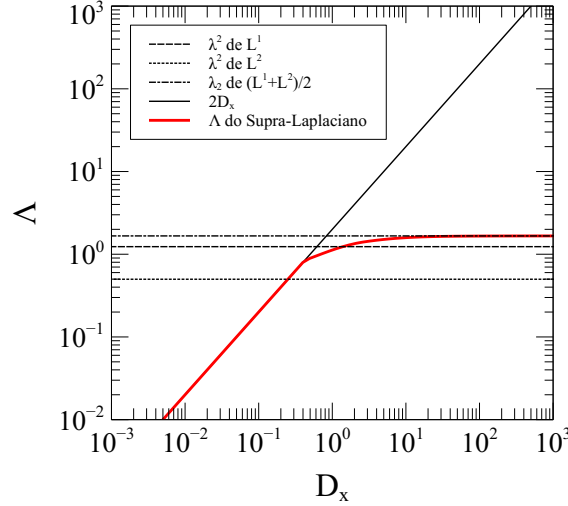
Na Figura 4.1 apresenta-se o espectro de uma rede Multiplex de duas camadas formada por duas redes simples de 6 vértices cada uma. Observe que neste gráfico o segundo autovalor do Multiplex  $\Lambda$  (linha vermelha) exhibe um comportamento linear quando a constante de difusão inter-camadas  $D_x$  é menor que um. Ou seja,  $\Lambda = 2D_x$  se  $D_x < 1$ . Por outra parte, quando  $D_x \rightarrow \infty$  observa-se que o espectro do Multiplex se divide em dois subconjuntos. O primeiro subconjunto corresponde com os autovalores que exibem um comportamento assintótico divergente e, o segundo subconjunto apresenta um comportamento convergente. Desta forma, observa-se que  $\Lambda$  pertence ao segundo subconjunto onde está no estado de saturação.



**Figura 4.1** Relação entre o coeficiente de difusão inter-camada  $D_x$  e o espectro de autovalores de uma rede Multiplex formada por duas redes simples de 6 vértices. Repare que o espectro é dividido em dois subconjuntos quando  $D_x$  tende para infinito. Fonte: Autor

Para conseguir uma melhor descrição do segundo autovalor da matriz supra-Laplaciana observe a Figura 4.1, neste gráfico mostra-se a relação entre  $\Lambda$  e  $D_x$  considerando uma rede Multiplex formada por uma rede Erdős-Rényi e uma rede Barabási-Albert com 500 vértices cada uma. Observe que  $\Lambda$  (linha vermelha) é igual a  $2D_x$  se  $D_x < 1$  e,  $\Lambda$  converge para o segundo autovalor

de uma matriz Laplaciana formada pela superposição das duas redes que compõem o Multiplex, quando  $D_x \rightarrow \infty$ . Ou seja,  $\Lambda$  tende para  $\lambda_2$  de  $(L_1 + L_2)/2$  quando  $D_x \rightarrow \infty$ . Por outra parte, observe que no gráfico mostra-se também os valores de  $\lambda_2$  de cada uma das camadas do Multiplex.



**Figura 4.2** Relação entre  $\Lambda$  e  $D_x$  para uma rede Multiplex de duas camadas formada pelas redes Erdős-Rényi e Watts-Strogatz de 500 vértices cada uma. Observe que quando  $D_x < 1$  o segundo autovalor do Multiplex exibe um regime linear  $\Lambda = 2D_x$ . Por outra parte, quando  $D_x \rightarrow \infty$  o valor de  $\Lambda$  converge ao estado de relaxamento que está definido pelo segundo autovalor da matriz Laplaciana de uma rede formada pela superposição das redes que compõem o Multiplex, ou seja,  $\lambda_2$  de  $(L_1 + L_2)/2$ . Note que as linhas horizontais tracejadas correspondem ao segundo autovalor de cada uma das redes que compõem a rede Multiplex e à superposição destas. Fonte: Autor.

Por outra parte, na literatura específica sobre Multiplex define-se a super-difusão em função da relação entre a conectividade da rede Multiplex e as redes que o compõem [58, 91]. Em outras palavras, se  $\Lambda$  é maior que  $\lambda^1$  e  $\lambda^2$  dizemos que a rede Multiplex apresenta super-difusão. Assim, podemos identificar a eficiência do processo de difusão na rede Multiplex através de uma comparação com suas camadas. Matematicamente definimos esta relação de conectividade como

$$\eta = \frac{\Lambda}{\max\{\lambda^1, \lambda^2\}}. \quad (4.43)$$

onde  $\max\{\lambda^1, \lambda^2\}$  corresponde ao maior segundo autovalor das camadas que formam o Multiplex. Note que a super-difusão ocorre quando  $\eta > 1$  já que isto significa que o tempo de relaxação do Multiplex é menor em relação a suas camadas.



## Capítulo 5

# Difusão em redes com conexões de longa distância e o problema inverso

No Capítulo 4 apresentou-se uma descrição do fenômeno de difusão em redes considerando dois tipos de formalismos. O primeiro estima o deslocamento quadrático médio usando caminhantes aleatórios e considera, para esse fim, o espaço e tempo discretos. O segundo explora as propriedades espectrais que apresenta a matriz Laplaciana e considera o tempo como contínuo. Embora cada método caracteriza diferentes aspectos da difusão em redes seus formalismos estão baseados nas interações entre vértices vizinhos. Assim, observamos que o procedimento para caracterizar um processo difusivo sobre uma rede finita usa a chamada estratégia clássica. Esta consiste em descrever o fenômeno da difusão como uma consequência de contribuições entre vértices adjacentes até atingir um estado de saturação, caracterizado por  $\langle r^2 \rangle_{sat}$  que assume um valor constante independente do tempo. Apesar que a estratégia clássica consiga caracterizar diferentes propriedades dos fenômenos difusivos, existem processos que exibem contribuições entre vértices não necessariamente adjacentes. Por exemplo, experimentalmente se observou o processo de auto-difusão de átomos de palladium (Pd) sobre uma superfície metálica <sup>1</sup>. Os resultados mostraram que existem contribuições significativas nas propriedades termodinâmicas do sistema que são causadas por interações entre segundos e terceiros vizinhos na superfície metálica [10, 11]. Portanto, a abordagem clássica não será eficiente para descrever processos difusivos onde existem contribuições que dependem da distância de separação dos vértices. Isto mostra que deve-se reformular os métodos que descrevem este tipo de difusão. Ou seja, uma generalização que permita considerar processos com diferentes tipos de contribuições entre os vértices da rede. Neste capítulo se pretende mostrar uma generalização dos métodos apresentados no capítulo anterior e, mediante o formalismo do problema inverso conseguir estados de super-difusão bem definidos.

Este capítulo está dividido em três seções. Na primeira parte, apresenta-se o método de Lévy Random Walks (LRW). Este modelo é uma generalização do método dos caminhantes aleatórios e está baseada em um formalismo apresentado recentemente [12, 95], que considera cami-

---

<sup>1</sup>Uma superfície metálica é considerada como uma rede regular bidimensional.

nhantes aleatórios com conexões de longa distância. Na segunda parte, apresentamos o formalismo do *problema inverso* [36], que permite ao modelo de LRW obter estados de super-difusão bem definidos em qualquer tipo de rede simples. Na parte final do capítulo será apresentado um formalismo que permite considerar conexões de longa distância usando as propriedades espectrais da matriz supra-Laplaciana.

## 5.1 MÉTODO DE LRW NO ESPAÇO DISCRETO

Processos difusivos que apresentam contribuições entre vértices não necessariamente adjacentes podem ser caracterizados no espaço contínuo usando o método dos caminhantes aleatórios com voos de Lévy [12, 96]. Este método considera caminhantes que realizam deslocamentos aleatórios  $l$ , com uma distribuição de probabilidade que segue uma lei de potências <sup>2</sup>. Outros métodos no espaço contínuo são as equações de difusão não linear [101], e as equações diferenciais fracionárias [102, 103]. Por outra parte, recentemente foi elaborado um novo formalismo de caminhantes aleatórios com voos de Lévy (LRW) <sup>3</sup> no espaço discreto [95, 104–106]. Este método permite caracterizar processos difusivos considerando o espaço discreto como uma rede simples na qual apresentam-se contribuições entre vértices adjacentes e vértices que possuem diferentes distâncias de separação. Assim, podemos obter uma nova visão das propriedades difusivas no espaço discreto que não necessariamente serão iguais das apresentadas por sua contraparte no espaço contínuo. O formalismo de LRW é considerada uma generalização do método clássico dos caminhantes aleatórios. Portanto, realizando um ajuste adequado consegue-se recobrar os resultados apresentados por caminhantes aleatórios que saltam entre vértices adjacentes.

De forma matematicamente mais formal, a probabilidade no método de LRW é definida como uma lei de potências  $p \sim d_{ij}^{-\alpha}$ , onde  $d_{ij}$  é a distância de caminho mais curta entre os vértices  $i$  e  $j$ . Por outra parte,  $\alpha$  é um parâmetro de ajuste que caracteriza a lei de potências. Note que a probabilidade de um caminhante aleatório para saltar entre dois vértices apresenta uma relação que decai com a distância. Ou seja, quanto maior é a distância de separação entre dois vértices menor será a probabilidade que terá um caminhante aleatório para saltar. Nesta seção será apresentado o formalismo do método de LRW no espaço discreto para redes finitas.

Para apresentar o formalismo de LRW, considere  $G(\mathcal{V}, \mathcal{E})$  como uma rede simples de  $N$  vértices e seja  $A$  a matriz de adjacência que lhe corresponde. Por outra parte, a matriz de distâncias da rede foi definida no capítulo 3 como

$$(\mathcal{M}_d)_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{Se } d_{ij} = d, \\ 0 & \text{Caso contrario,} \end{cases} \quad (5.1)$$

onde  $1 \leq d \leq d_{max}$ , e  $d_{max}$  é o diâmetro da rede. Na Equação 5.1, a matriz  $\mathcal{M}_d$  define as

<sup>2</sup>Uma das aplicações dos caminhantes de aleatórios com voos de Lévy está relacionada com os movimentos de animais na procura de comida [97–100]. Desta forma, quando um predador está em uma região onde há uma grande oferta de comida se observará um deslocamento entre locais próximos. No entanto, quando por um determinado motivo ocorre uma escassez, o predador precisará fazer um deslocamento maior.

<sup>3</sup>Do inglês 'Lévy random walks'.

informações topológicas da rede para uma determinada distância  $d$ . Portanto, se  $d = 1$  a Equação 5.1 será a matriz de adjacência da rede, ou seja,  $\mathcal{M}_1 = A$ . Usando a Equação 5.1 definimos a transformada da matriz de vizinhanças como

$$\hat{M}^\tau = A + \sum_{d=2}^{d_{max}} c_d^\tau \mathcal{M}_d, \quad (5.2)$$

onde  $\tau = Mel$  ou  $\tau = Lapl$  significam, respectivamente, a transformada de Mellin ou a transformada de Laplace. Em outras palavras,

$$c_d^\tau = \begin{cases} c_d^{\tau=Mel} = d^{-\alpha} & \text{para } \alpha > 0, \\ c_d^{\tau=Lapl} = e^{-\beta d} & \text{para } \beta > 0. \end{cases} \quad (5.3)$$

Note que usando as Equações 5.3 e 5.2 conseguimos a matriz de adjacência  $A$  quando definimos a transformada de Mellin (Laplace) e consideramos  $\alpha = \infty$  ( $\beta = \infty$ ). Por outra parte, quando  $\alpha = 0$  e  $\tau = Mel$  a Equação 5.2 se reduz à conhecida matriz de vizinhança [16]. Observe que podemos considerar a matriz  $\hat{M}^\tau$  como a matriz de adjacência de uma rede ponderada (ver Capítulo 3), e o grau de um vértice  $i$  é definido como

$$\hat{s}_i^\tau = \sum_{j=1}^N \hat{M}_{ij}^\tau = \left( \hat{M}^\tau \vec{1} \right)_i, \quad (5.4)$$

onde  $\vec{1}$  é um vetor com todos os elementos igual a um. Desta forma, a probabilidade de transição de um caminhante aleatório que passa do vértice  $i$  ao vértice  $j$  se define da seguinte forma

$$\rho_{ij}^\tau = \frac{(c_d^\tau)_{ij}}{\sum_{l=1}^N (c_d^\tau)_{il}}. \quad (5.5)$$

Se consideramos  $\tau = Mel$  na Equação 5.5 conseguimos uma expressão em função de uma lei de potências que depende do valor do parâmetro ajuste  $\alpha$

$$\rho_{ij}^\tau = \frac{d_{ij}^{-\alpha}}{\sum_{l=1}^N d_{il}^{-\alpha}}. \quad (5.6)$$

A probabilidade de transição, apresentada pela Equação 5.5, ajuda a definir a dinâmica de transição dos caminhantes aleatórios durante um processo difusivo em uma rede. Desta forma, com um ajuste adequado do parâmetro  $\alpha$  ( $\beta$ ) na transformada de Mellin (Laplace), os caminhantes aleatórios podem pular a qualquer vértice da rede com uma probabilidade diferente de zero. Por outra parte, observe que as Equações 5.3 e 5.5 mostram como a probabilidade  $\rho$  depende do parâmetro de ajuste  $\alpha$  ( $\beta$ ) e da distância entre os vértices da rede. Portanto, a probabilidade de transição para qualquer valor positivo  $\alpha$  ( $\beta$ ) diminui com a distância entre os vértices da

rede. Por exemplo, na Tabela 5.1 apresenta-se o cálculo da probabilidade de transição usando a Equação 5.6, em uma rede linear com  $N = 5$ . Note que, quando  $\alpha \rightarrow \infty$ , a probabilidade de transição indica que os caminhantes podem pular unicamente entre vértices adjacentes (ou seja, recobramos a abordagem clássica dos caminhantes aleatórios, apresentada no Capítulo 4). Finalmente quando  $\alpha = 0$ , os caminhantes aleatórios terão igual probabilidade de pular a qualquer vértice da rede<sup>4</sup>, correspondendo assim a uma caminhada sobre a rede completa [37, 95].

Mellin				
$d$	$\alpha = 0$	$\alpha = 0.8$	$\alpha = 2.5$	$\alpha \rightarrow \infty$
1	0.25	0.43	0.79	1.0
2	0.25	0.25	0.14	0.0
3	0.25	0.18	0.05	0.0
4	0.25	0.14	0.02	0.0

**Tabela 5.1** Cálculo da probabilidade de transição, considerando a transformada de Mellin (ver Equação 5.6), em uma rede linear de cinco vértices. A primeira coluna corresponde a diferentes valores da distância  $d$ , e as colunas seguintes, mostram o valor da probabilidade de transição para diferentes valores do parâmetro de ajuste  $\alpha$ . Note que, quanto maior é o valor de  $\alpha$ , a probabilidade de transição tende a zero mais rapidamente para distâncias maiores que um. Ou seja, a medida que  $\alpha$  aumenta, recobramos a probabilidade correspondente ao método dos caminhantes aleatórios apresentado no Capítulo 4.

Considerando as Equações 5.2 e 5.4 e, de forma semelhante ao formalismo dos caminhantes aleatórios apresentado no Capítulo 4, definimos a matriz estocástica de transição da seguinte forma

$$\mathcal{P}^\tau = (\hat{S}^\tau)^{-1} \hat{M}^\tau, \quad (5.7)$$

onde  $\hat{S}^\tau$  é uma matriz diagonal e seus elementos matriciais são  $\hat{S}_{ii}^\tau = \hat{s}_i^\tau$  (ver Equação 5.4). Com ajuda da matriz estocástica apresentada na Equação 5.7, podemos definir o vetor de probabilidades de transição de um caminhante aleatório que inicialmente está no vértice  $i$  através de

$$\vec{P}_{ii}^\tau = (\mathcal{P}^\tau)^T \vec{P}_{t-1i}, \quad (5.8)$$

onde  $(\mathcal{P}^\tau)^T$  é a matriz transposta de  $\mathcal{P}^\tau$ . A distribuição de probabilidades dos caminhantes aleatórios, após  $t$  passos do tempo, estará dada pela generalizando a Equação 5.8,

$$\vec{P}_{ii}^\tau = \left( \prod_{\kappa=0}^{t-1} (\mathcal{P}^\tau)_{\kappa}^T \right) \vec{P}_{0i}. \quad (5.9)$$

<sup>4</sup>Resultados semelhantes são obtidos se consideramos a transformação de Laplace na Equação 5.5.

Note que o vetor  $\vec{P}_{0i}$  tem todas suas entradas iguais a zero menos sua  $i$ -ésima entrada que é igual a um. Repare que a probabilidade de achar um caminhante aleatório em um vértice  $j$ , após  $t$  passos de tempo, será dada pela  $j$ -ésima entrada do vetor de probabilidades  $\vec{P}_t^\tau$ . Usando a Equação 5.9 podemos definir o deslocamento quadrático médio como

$$r^2(t, i) = \sum_{j=1}^N (d_{ij})^2 \left( \vec{P}_{ti}^\tau \right)_j. \quad (5.10)$$

Finalmente, para estimar o deslocamento quadrático médio (ou *MSD*), usamos a Equação 5.10 considerando todas as diferentes posições iniciais dos caminhantes aleatórios,

$$MSD = \langle r^2(t) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (d_{ij})^2 \left( \vec{P}_{ti}^\tau \right)_j. \quad (5.11)$$

Note que a Equação 5.11 depende do valor do parâmetro  $\alpha$  ou  $\beta$  quando definimos que  $\tau = Mel$  ou  $\tau = Lapl$ . Portanto, apesar da Equação 5.11 apresentar uma grande semelhança com a Equação 4.20, que corresponde com o cálculo do *MSD* no método clássico dos caminhantes aleatórios, suas diferenças estão dadas pela influência realizada pelo parâmetro  $\alpha$  ou  $\beta$  que permite ajustar a distribuição de probabilidades dos caminhantes aleatórios.

Devido à importância do parâmetro  $\alpha$  ( $\beta$ ) e suas implicações, é possível pensar que existem valores para os quais o processo difusivo estará caracterizado por super-difusão, ou seja,  $MSD \sim t^\gamma$  com  $\gamma > 1$  antes de atingir o estado de saturação. Isto será discutido no Capítulo 6 onde os resultados mostram que em certas condições é possível conseguir super-difusão durante um pequeno intervalo de tempo. Por outra parte, na seguinte seção será apresentado o método do problema inverso [36] que permitirá obter estados de super-difusão bem definidos quando usamos LRW.

## 5.2 PROBLEMA INVERSO

O método de LRW, apresentado na seção anterior, ajuda na descrição e caracterização de um maior número de problemas difusivos, e isto é devido a que o parâmetro  $\alpha$  permite ajustar a distribuição de probabilidades que seguem os caminhantes aleatórios durante o processo difusivo. Embora o método de LRW permita realizar um ajuste que consiga obter uma descrição mais próxima de um processo difusivo desejado, na prática isto não é uma tarefa fácil e este problema é mais complexo quando o objetivo de uma investigação é saber as condições suficientes e necessárias para gerar um determinado processo difusivo que apresenta super-difusão ou sub-difusão.

Recentemente foram apresentados alguns estudos [15, 36, 106, 107], que exploram de forma analítica a possibilidade de obter um processo difusivo não linear usando o parâmetro de ajuste  $\alpha$ . As investigações foram realizadas considerando LRW no espaço contínuo e no espaço discreto e conseguem mostrar resultados satisfatórios. Especificamente no espaço discreto, considerando redes finitas, mostrou-se que o *MSD* descrevia um processo de super-difusão bem

definido<sup>5</sup> utilizando o método de LRW em uma rede simples e finita [36]. Não obstante, tanto no espaço discreto como no contínuo as metodologias usadas para obter de forma analítica processos que exibem super-difusão não são semelhantes. Isto mostra a complexidade das condições necessárias para obter um determinado processo não linear. Por exemplo, no espaço contínuo o artigo [106] considerou LRW através da transformada de Mellin em uma rede linear infinita e se mostrou de forma analítica que há super-difusão quando  $1 < \alpha < 3$ . Por outra parte, no artigo [36] foi mostrado, tanto analiticamente como por simulações de caminhantes aleatórios, que valores de  $\alpha$  semelhantes não geram super-difusão em redes finitas no espaço discreto. Desta forma, se  $1 < \alpha < 3$  observa-se no espaço discreto um processo difusivo linear que experimenta uma aceleração conseguindo atingir o estado de saturação em um número menor de passos de tempo. Para conseguir um processo de super-difusão bem definido no espaço discreto usando LRW, no artigo [36] foi desenvolvido e resolvido um novo formalismo denominado *o problema inverso*. O objetivo nesta seção é apresentar este método. Sem perda de generalização vamos a considerar durante a dedução do problema inverso a transformada de Mellin, já que resultados semelhantes são obtidos considerando a transformada de Laplace.

O problema inverso é um método cuja formulação considera o espaço discreto e sua solução permite descrever um processo de super-difusão bem definido. A primeira consideração realizada neste método é definir o parâmetro de ajuste  $\alpha$  como uma variável que pode variar em função do tempo e da topologia da rede. Se assume que um estado de super-difusão bem definido será o resultado da aplicação de um conjunto de valores  $\alpha(t)$ . Ou seja, o objetivo principal do problema inverso é a busca do conjunto  $\{\alpha(0), \alpha(1), \alpha(2), \dots, \alpha(\lfloor t_{sat} \rfloor)\}$ , onde  $t_{sat}$  é o tempo de saturação e  $\lfloor x \rfloor$  define a função piso. Para  $t > t_{sat}$ ,  $\langle r^2(t) \rangle$  assume um valor constante indicado por  $\langle r^2 \rangle_{sat}$ . Assumindo  $\alpha$  como uma grandeza que depende do tempo definimos a probabilidade de transição

$$\rho_{ij}(t) = \frac{d_{ij}^{-\alpha(t)}}{\sum_{l=1}^N d_{il}^{-\alpha(t)}}. \quad (5.12)$$

Para conseguir a série de valores  $\alpha(t)$ , no artigo [36] foi proposta a busca de soluções para  $\alpha(t)$  impondo-se que  $\langle r^2(t) \rangle = \langle r^2(1) \rangle t^\gamma$ . Portanto, usando as Equações 5.9 e 5.11,

$$\langle r^2(1) \rangle t^\gamma = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (d_{ij})^2 \left( \left[ \prod_{k=0}^{t-1} \mathcal{P}_k^T \right] \vec{P}_{0i} \right)_j. \quad (5.13)$$

Note que a Equação 5.13 está definida dentro do intervalo de tempo  $0 \leq t \leq \lfloor t_{sat} \rfloor$  já que os elementos da matriz de transição  $\mathcal{P}$  estão em função de  $\alpha(t)$ . Ou seja, a Equação 5.13 depende de  $\alpha(t)$  de forma implícita. Se consideramos que  $\alpha_0 = \alpha(t=0) = \infty$ , então,  $\langle r^2(1) \rangle = 1$ . Desta forma, o tempo de saturação  $t_{sat}$  é expresso em função de  $\langle r^2 \rangle_{sat}$ , portanto

<sup>5</sup>Um estado de super-difusão bem definido corresponde com um processo onde o parâmetro  $\gamma > 1$  e constante no tempo até observar os efeitos finitos, ou seja, o estado de saturação.

$$t_{sat} = \left( \frac{\langle r^2 \rangle_{sat}}{\langle r^2(1) \rangle} \right)^{1/\gamma} = \langle r^2 \rangle_{sat}^{1/\gamma}. \quad (5.14)$$

Para realizar a busca do conjunto de valores  $\alpha(t)$  que correspondem à solução do problema inverso, basta usar de forma recorrente a Equação 5.13. No entanto, para iniciar este processo deve-se selecionar primeiro um valor de  $\gamma > 1$  e considerar que  $\alpha_0 = \infty$ . Desta forma, se procede a estimar sequencialmente os valores restantes de  $\alpha(t)$ . Por exemplo, no caso particular de  $t = 2$  a Equação 5.13 dependerá do valor de  $\alpha(1)$  e mediante estimação numérica se consegue o valor para  $\alpha(2)$ . Este processo será repetido até conseguir todos os valores restantes de  $\alpha(t)$ .

Usando a Equação 5.13 no artigo [36], foi mostrado como um conjunto de valores  $\alpha(t)$  consegue gerar processos de super-difusão bem definidos sobre redes finitas unidimensionais e bidimensionais. No entanto, devido à complexidade computacional que apresenta a solução do problema inverso, no artigo [36] foi desenvolvido um procedimento analítico que usa as propriedades da matriz circulante para uma RCC com  $m = 1$  e  $N$  ímpar. Desta forma, consegue-se evitar a complexidade computacional e, obter assim, resultados onde o *MSD* exhibe um processo de super-difusão bem definida. Este desenvolvimento analítico inicia com a transformada de Mellin na Equação 5.7 e considera que o parâmetro de ajuste  $\alpha$  depende do tempo, desta forma, temos

$$\mathcal{P} = (\hat{S})^{-1} \hat{M}_t, \quad (5.15)$$

onde

$$\hat{M}_t = A + \sum_{d=2}^{d_{max}} d^{-\alpha(t)} \mathcal{N}_d. \quad (5.16)$$

Observe que para uma RCC com  $m = 1$  as matrizes  $\hat{M}_t$ , definidas na Equação 5.16, são matrizes circulantes e simétricas que podem ser escritas em termos de uma base de autovalores e autovetores da seguinte forma

$$\hat{M}_t = U D_t U^*, \quad (5.17)$$

onde  $U$  é a transformação de Fourier discreta unitária (ver Equação 3.8),  $U^*$  é sua conjugada e  $D_t$  é uma matriz diagonal formada pelos autovalores de  $\hat{M}_t$ . Repare que os elementos da matriz  $U$  são definidos em função das raízes unitárias  $\omega_N$  (ver Capítulo 3),

$$U_{ij} = \left( \frac{\omega_{-1}^{(i-1)(j-1)}}{\sqrt{N}} \right). \quad (5.18)$$

Por outro lado, usando a Equação 3.9 podemos definir o  $k$ -ésimo autovalor da matriz  $D_t$  como:

$$\varepsilon_k = \sum_{d=1}^{N-1/2} \frac{2}{d^\alpha} \cos\left(\frac{2\pi kd}{N}\right). \quad (5.19)$$

Através da Equação 5.9 e as Equações 5.15 e 5.17 podemos definir a distribuição de probabilidade dos caminhantes aleatórios, após  $t$  passos do tempo, da seguinte forma

$$\vec{P}_{ti} = \left( \prod_{\kappa=0}^{t-1} \mathcal{P}_\kappa^T \right) \vec{P}_{0i} = U \left( \prod_{\kappa=0}^{t-1} \frac{\mathcal{D}_\kappa}{\hat{s}_\kappa} \right) U^* \vec{P}_{0i} = U \mathcal{D}_{t-1} U^* \vec{P}_{0i}, \quad (5.20)$$

onde o  $i$ -ésimo elemento da matriz diagonal  $\mathcal{D}_{t-1}$  é

$$(\mathcal{D}_{t-1})_i = \prod_{\kappa=0}^{t-1} \frac{(\varepsilon_\kappa)_{i-1}}{\hat{s}_\kappa}, \quad (5.21)$$

e

$$\hat{s}_\kappa = \sum_{d=1}^{(N-1)/2} \frac{2}{d^{\alpha_\kappa}} = 2H_{\frac{N-1}{2}}^{\alpha_\kappa}. \quad (5.22)$$

Observe que na Equação 5.22 o termo  $H_{c,n}^m = \sum_{k=1}^n \frac{1}{(c+k)^m}$  é o número harmônico generalizado para valores não negativos  $n$ , de ordem complexa  $m$ , e deslocamento (*offset*) complexo  $c$  [108]. Considerando a Equação 5.20 podemos definir a probabilidade de encontrar um caminhante aleatório em um vértice  $q$ , após  $t$  passos do tempo, da seguinte forma,

$$\left( \vec{P}_{ti} \right)_q = \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N U_{qk} (\mathcal{D}_{t-1})_k U_{kj}^* \left( \vec{P}_{0i} \right)_j. \quad (5.23)$$

Tendo em consideração a topologia simétrica da RCC podemos afirmar que  $r^2(t, i) = r^2(t, j)$  para  $i \neq j$ . Usando a Equação 5.23 podemos reescrever a Equação 5.11, para uma RCC com  $N$  ímpar e  $\alpha$  dependendo do tempo,

$$\begin{aligned} \langle r^2(t) \rangle &= \frac{1}{N} \sum_{q=1}^N r^2(t, q) = r^2(t, i) = \sum_{q=1}^N (d_{qi})^2 \left( \vec{P}_{ti} \right)_q \\ &= \sum_{q=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N (i-q)^2 U_{qk} (\mathcal{D}_{t-1})_k U_{kj}^* \left( \vec{P}_{0i} \right)_j, \end{aligned} \quad (5.24)$$



onde em uma RCC com  $N$  ímpar a distância pode ser definida como  $(d_{qi})^2 = (i - q)^2$ . Devido a que  $(\vec{P}_{0i})_j = \delta_{ij}$  podemos escrever a Equação 5.24 em uma forma mais compacta como se mostra em seguida,

$$\begin{aligned} \langle r^2(t) \rangle &= \sum_{q=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N (i - q)^2 \frac{1}{N} \exp(\hat{i}\theta_k(i - q)) (\mathcal{D}_{t-1})_k \\ &= \sum_{q=1}^N (i - q)^2 \frac{1}{N} \sum_{q=1}^N \sum_{k=2}^N (i - q)^2 \frac{1}{N} \exp(\hat{i}\theta_k(i - q)) (\mathcal{D}_{t-1})_k \\ &= \frac{N^2 - 1}{12} + \sum_{k=2}^N \frac{1}{N} (\mathcal{D}_{t-1})_k \sum_{q=1}^N (i - q)^2 \exp(\hat{i}\theta_k(i - q)), \end{aligned} \quad (5.25)$$

onde,

$$(\mathcal{D}_{t-1})_k = \prod_{\kappa=0}^{t-1} \left( 2H_{0, \frac{N-1}{2}}^{\alpha_\kappa} \right)^{-1} \left[ \sum_{d=1}^{(N-1)/2} \frac{2}{d^{\alpha_\kappa}} \cos \theta_k d \right]. \quad (5.26)$$

No material suplementar do artigo [36] mostrou-se matematicamente que a Equação 5.25 pode ser escrita da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \langle r^2(t) \rangle &= \frac{N^2 - 1}{12} + \sum_{k=2}^N (\mathcal{D}_{t-1})_k \frac{\exp(\hat{i}\theta_k i)}{\exp(\hat{i}\theta_k i) - 1} \left( 2(i - 1) + N - \frac{2}{\exp(\hat{i}\theta_k i) - 1} \right) \\ &= \frac{N^2 - 1}{12} + \sum_{k=2}^N (\mathcal{D}_{t-1})_k \Phi(k). \end{aligned} \quad (5.27)$$

Observe que na Equação 5.27 se definiu a função  $\Phi(k)$  que pode ser reescrita como se mostra a continuação,

$$\Phi(k) = \frac{\exp(\hat{i}\theta_k i)}{\exp(\hat{i}\theta_k i) - 1} \left( 2(i - 1) + N - \frac{2}{\exp(\hat{i}\theta_k i) - 1} \right) = \frac{(-1)^k}{2 \sin\left(\frac{\theta_k}{2}\right)} \left( 2N\hat{i} - \cot\left(\frac{\theta_k}{2}\right) \right), \quad (5.28)$$

onde  $\theta_k = \frac{2\pi}{N}(k - 1)$  e  $i = \frac{N+1}{2}$ . Por outra parte, observe que na Equação 5.27 o primeiro termo é constante e significa o estado de saturação do processo difusivo na RCC. Devido a que  $\theta_k = -\theta_{N+2-k}$ ,  $(\mathcal{D}_{t-1})_k = (\mathcal{D}_{t-1})_{N+2-k, N+2-k}$  e  $\Phi(k) = \Phi^*(N + 2 - k)$  podemos escrever o *MSD* como:

$$\langle r^2(t) \rangle = \frac{N^2 - 1}{12} + \sum_{k=2}^{(N+1)/2} \frac{(-1)^{k+1}}{\sin(\frac{\theta_k}{2})} \cot \frac{\theta_k}{2} (\mathcal{D}_{t-1})_k. \quad (5.29)$$

Repare que, para deduzir a Equação 5.29, se usou a propriedade circulante de uma RCC com  $m = 1$  e  $N$  ímpar. Isto permitiu simplificar significativamente a complexidade computacional do cálculo do  $MSD$  e a solução do problema inverso. No entanto, quando consideramos a aplicação do problema inverso sobre uma rede bidimensional se observou no artigo [36] que o tamanho da rede contribuía à complexidade computacional. Neste trabalho foi possível avançar nas expressões matemáticas necessárias para o cálculo do  $MSD$  e, conseqüentemente, realizar uma otimização dos códigos computacionais de forma que os resultados obtidos usavam redes substancialmente maiores como será mostrado no Capítulo 5.

### 5.3 ANÁLISE ESPECTRAL DA DIFUSÃO COM CONEXÕES DE LONGA DISTÂNCIA

A descrição da difusão usando as propriedades espectrais da matriz Laplaciana foi apresentada no Capítulo 4 e, de forma semelhante ao método dos caminhantes aleatórios, consideramos o fenômeno da difusão como um processo no qual existem unicamente interações entre vértices adjacentes. Nesta seção pretendemos ampliar este conceito e apresentar o formalismo de processos difusivos onde se consideram interações entre vértices adjacentes e vértices que apresentam uma determinada distância de separação. Portanto, vamos a deduzir as equações gerais que permitem descrever um processo difusivo com conexões de longa distância e, usando as propriedades espectrais da matriz Laplaciana, se caracteriza este processo de difusão resultante através do tempo de relaxação.

Considere inicialmente uma rede simples  $G(\mathcal{V}, \mathcal{E})$  de tamanho  $N$ , onde  $\phi_i(t)$  representa o estado temporal do  $i$ -ésimo vértice. A equação que descreve a evolução temporal do processo difusivo com conexões de longa distância será

$$\frac{d\phi_i}{dt} = D_1 \sum_{j=1}^N A_{ij} (\phi_j - \phi_i) + \sum_{d=2}^{d_{max}} \sum_{j=1}^N D_d c_d^\tau (\mathcal{M}_d)_{ij} (\phi_j - \phi_i), \quad (5.30)$$

onde  $D_x$ ,  $c_d^\tau$  e  $\mathcal{M}_d$  representam, respectivamente, as constantes de difusão entre vértices que estão separados por uma determinada distância, os coeficientes da transformada de Mellin (Laplace) e as matrizes de vizinhança. Note que o primeiro termo na Equação 5.30 corresponde com a Equação 4.28 (ver Capítulo 4) e, portanto, o segundo termo descreve as contribuições ao processo difusivo realizadas por vértices que estão a uma distância maior que um. O papel que desempenha a transformada de Mellin (Laplace), no segundo termo da Equação 5.30, permite ajustar a dinâmica das interações entre os vértices da rede durante o transcurso do processo difusivo. Portanto, se o parâmetro de ajuste  $\alpha$  ( $\beta$ ) na transformada de Mellin (Laplace) tende para o infinito, o segundo termo na Equação 5.30 tende a zero. Neste caso, o processo difusivo é descrito como foi apresentado no Capítulo 4, onde unicamente existem interações entre vértices adjacentes (ver Equação 4.28). Sem perda de rigor matemático, podemos considerar  $D = D_1 = D_2 = D_3 = \dots = D_{d_{max}}$  e, portanto, a equação que descreve o processo difusivo é

$$\frac{d\phi}{dt} + D\tilde{L}_d\phi = 0, \quad (5.31)$$

onde  $\tilde{L}_d$  é a transformada da matriz Laplaciana que está formada pela combinação de todas as matrizes Laplacianas das distintas redes que podem ser formadas considerando  $d = 1, 2, 3, \dots, d_{max}$  [16]. Em outras palavras, a transformada de Mellin (Laplace) da matriz Laplaciana é

$$\tilde{L}_d = L_1 + \sum_{d=2}^{d_{max}} c_d^\tau L_d, \quad (5.32)$$

onde  $L_1$  é a matriz Laplaciana como foi definida no Capítulo 4, e  $L_d$  é

$$L_d = \begin{cases} s_d(i) & \text{se } i = j, \\ -1 & \text{se } d_{ij} = d, \\ 0 & \text{se } d_{ij} \neq d. \end{cases} \quad (5.33)$$

Aqui  $s_d(i)$  é o grau do  $i$ -ésimo vértice da rede formada pelos vértices cujas distâncias mais curtas são  $d$ . Note também que  $s_d(i)$  é a soma do número de caminhos mais curtos de distância  $d$  entre os vértices da rede e o  $i$ -ésimo vértice. Por outra parte, a Equação 5.32, que corresponde à transformada de Mellin (Laplace) da matriz Laplaciana, terá as mesmas propriedades que foram apresentadas para a matriz Laplaciana no Capítulo 4. Portanto, seu espectro permite também caracterizar o processo difusivo cujo tempo de relaxação esta relacionado com seu segundo autovalor.

#### 5.4 DIFUSÃO EM REDES MULTIPLEX COM CONEXÕES DE LONGA DISTÂNCIA

Como parte final deste capítulo, apresentamos a adaptação do formalismo da difusão, apresentado na seção anterior, para a rede Multiplex com interações intra-camada entre vértices adjacentes e vértices que apresentam um determinada distancia de separação.

Considere uma rede Multiplex  $\mathcal{M} = (\mathcal{G}, \mathcal{C})$  formada por  $M$  camadas onde cada camada é constituída por uma rede simples de tamanho  $N$ . A equação que descreve o estado temporal do  $i$ -ésimo vértice na camada  $L$  durante o processo difusivo será,

$$\frac{d\phi_i^L}{dt} = D_1^L \sum_{j=1}^N A_{ij}^L (\phi_j^L - \phi_i^L) + \sum_{d=2}^{d_{max}} \sum_{j=1}^N D_d^L c_d^\tau (\mathcal{M}_d^L)_{ij} (\phi_j^L - \phi_i^L) + \sum_{H=1}^M D^{LH} (\phi_i^H - \phi_i^L), \quad (5.34)$$

onde  $D_1^L$  e  $D^{LH}$  são as constantes de difusão intra- e inter-camada. Note que, de forma semelhante à Equação 5.30, o segundo termo na Equação 5.34 descreve como o processo difusivo considera diferentes contribuições entre os vértices de uma mesma camada. Por outra parte,

ajustando o parâmetro  $\alpha(\beta)$  na transformada de Mellin (Laplace) podemos regular as interações entre os vértices que são consideradas durante o transcurso do processo difusivo. Portanto, se o parâmetro de ajuste  $\alpha(\beta)$  tende para o infinito devemos recobrar a Equação 4.38 que foi apresentada no Capítulo 4 para descrever um processo difusivo no Multiplex com contribuições entre vértices adjacentes.

Considerando todas as constantes de difusão na  $L$ -ésima camada iguais (ou seja,  $D^L = D_1^L = D_2^L = \dots = D_{d_{max}}^L$ ), temos que a forma matricial da Equação 5.34 terá a forma compacta apresentada pela Equação 5.31. Ou seja,  $d\phi/dt + \mathcal{L}_d\phi = 0$ , onde  $\mathcal{L}_d$  é a matriz supra-Laplaciana do Multiplex e, portanto, esta deve ser uma matriz de blocos cujos elementos em sua diagonal principal são definidos pela transformada de Mellin (Laplace) da matriz Laplaciana, definida na Equação 5.32. De forma explícita, a matriz supra-Laplaciana do Multiplex é expressa por

$$\mathcal{L}_d = \begin{pmatrix} D^1 \tilde{L}_d^1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & D^2 \tilde{L}_d^2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & D^M \tilde{L}_d^M \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sum_{H \neq 1}^M D^{1H} I & -D^{12} I & \dots & -D^{1M} I \\ -D^{21} I & \sum_{H \neq 2}^M D^{2H} I & \dots & -D^{2M} I \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -D^{M1} I & -D^{M2} I & \dots & \sum_{H \neq M}^M D^{MH} I \end{pmatrix}, \quad (5.35)$$

onde cada termo (ou seja, cada matriz por blocos) representa as contribuições intra-camada e inter-camada do processo difusivo. Observe que, na Equação 5.35 as interações de longa distância não alteram as interações inter-camada e, portanto, as contribuições inter-camada são realizadas unicamente entre os vértices de uma camada e sua contraparte nas outras camadas. Repare também que desde a perspectiva das interações inter-camada todos os vértices são adjacentes.

Como foi discutido no Capítulo 4, o processo difusivo em uma rede monocamada é caracterizado pelo espectro de autovalores da matriz Laplaciana. Portanto, de forma semelhante, os autovalores da matriz supra-Laplaciana caracterizaram este processo difusivo, e o tempo de relaxação será definido considerando a relação com o segundo maior autovalor da matriz supra-laplaciana. Ou seja,

$$t_x \sim \frac{1}{\Lambda}. \quad (5.36)$$

Por outra parte, ressaltamos que a teoria apresentada durante este capítulo permite a caracterização do processo de difusão, quando este mostra uma dinâmica onde as contribuições entre vértices são mais complexas. Desta forma, um problema evidente que surge é a complexidade computacional que está relacionada com a matriz de transição no caso de LRW e, a busca dos autovalores da matriz supra-Laplaciana no caso da teoria espectral no Multiplex. Portanto, isto

não permite o uso de redes de grande porte para a descrição de processos difusivos <sup>6</sup>. Não obstante, no próximo Capítulo 6 apresentaremos um formalismo analítico que permite evitar este problema computacional mediante o uso de redes circulantes. Desta forma, consegue-se a diminuição da complexidade computacional permitindo apresentar e validar resultados que consideram redes da ordem de  $10^4$  nós.

---

<sup>6</sup>Esta complexidade computacional é evidente no artigo [36] o qual especifica que os resultados consideram redes com  $N < 1500$ .



# Capítulo 6

## Resultados e Discussões

Os Capítulos 4 e 5 foram dedicados a mostrar o formalismo que permite descrever e caracterizar processos difusivos em redes simples. Não obstante, tanto o método de Lévy Random Walks (LRW) como a análise espectral da matriz Laplaciana são formalismos que apresentam um grande desafio computacional, quando trabalhamos com redes de tamanho  $N > 1500$ . Portanto, a caracterização da difusão apresenta uma limitação que surge como consequência dos efeitos finitos da rede. Esta limitação impossibilita observar de forma clara o surgimento temporal de processos difusivos não lineares como a super-difusão. Por exemplo, quando foi apresentado o problema inverso, no Capítulo 4, se discutiu como no artigo [106] foi reportado o surgimento de super-difusão em uma rede linear infinita, quando consideram-se equações que usam a *transformada de Mellin da matriz Laplaciana*. Em contraste com isto, nos artigos [36, 37] foi mostrado que resultados semelhantes não são obtidos quando consideramos LRW no espaço discreto sobre uma rede linear finita. Este resultado sugere que efeitos da rede linear finita (tais como transiente e saturação) impossibilitam identificar claramente os comportamentos difusivos temporais. Neste capítulo, apresentamos os resultados obtidos no estudo analítico da super-difusão usando LRW e a teoria espectral da matriz Laplaciana <sup>1</sup>. Também apresentamos resultados de simulações computacionais que ilustram claramente a confiabilidade e a consistência dos primeiros. No caso específico de LRW se conseguiu um desenvolvimento analítico sobre o toro helicoidal (TH) que diminuiu a complexidade computacional e, portanto, foi possível caracterizar processos difusivos em redes maiores da ordem de  $10^4$  vértices. Este desenvolvimento, que otimizou o tempo computacional requerido, foi realizado de duas formas que estão baseadas na propriedade circulante que apresenta o TH. Embora o formalismo que permitiu a redução da complexidade computacional seja restrito ao TH, a formulação geral apresentada para gerar super-difusão em redes é válida para qualquer tipo de rede simples.

O capítulo está estruturado da seguinte forma: na seção 6.1 apresenta-se a análise do comportamento difusivo em redes de cadeia circulante (RCC) junto com suas propriedades e características. Na seção 6.2, mostra-se a aplicação do problema inverso sobre uma RCC e como

---

<sup>1</sup>Lembrando que a super-difusão apresenta diferentes definições tanto para os LRW como a teoria espectral.

este consegue gerar um processo de super-difusão bem definida. Na secção 6.3, usa-se a propriedade circulante do TH para deduzir analiticamente uma equação que permita diminuir a complexidade computacional do cálculo do  $MSD$  e, portanto, consegue-se exibir um processo de super-difusão bem definida sobre redes bidimensionais da ordem de  $10^4$  vértices. Posteriormente na secção 6.5, usam-se os resultados obtidos do problema inverso do TH sobre o toro normal (TN), desta forma, mostra-se como a semelhança topológica que compartilham estas duas redes se reduz quando aumentamos o tamanho da rede e, portanto, consegue-se obter um processo de super-difusão bem definida sobre uma rede não circulante. Na Secção 6.6 realizamos uma análise da complexidade computacional, assim, mostra-se como a propriedade circulante do TH permite uma drástica redução do tempo computacional que permitiu a obtenção dos resultados apresentados neste tese. Finalmente na Secção 6.7 se complementa o estudo da difusão considerando uma análise da teoria espectral de um modelo multicamada com conexões de longa distância.

## 6.1 DIFUSÃO EM REDES DE CADEIA CIRCULAR

No Capítulo 4 se apresentou o método clássico dos caminhantes aleatórios e se assumiu que a distância quadrática média ( $MSD$ ) segue uma lei de potências

$$MSD = \langle r^2(t) \rangle = \langle (x(t) - x_0)^2 \rangle \sim t^\gamma, \quad (6.1)$$

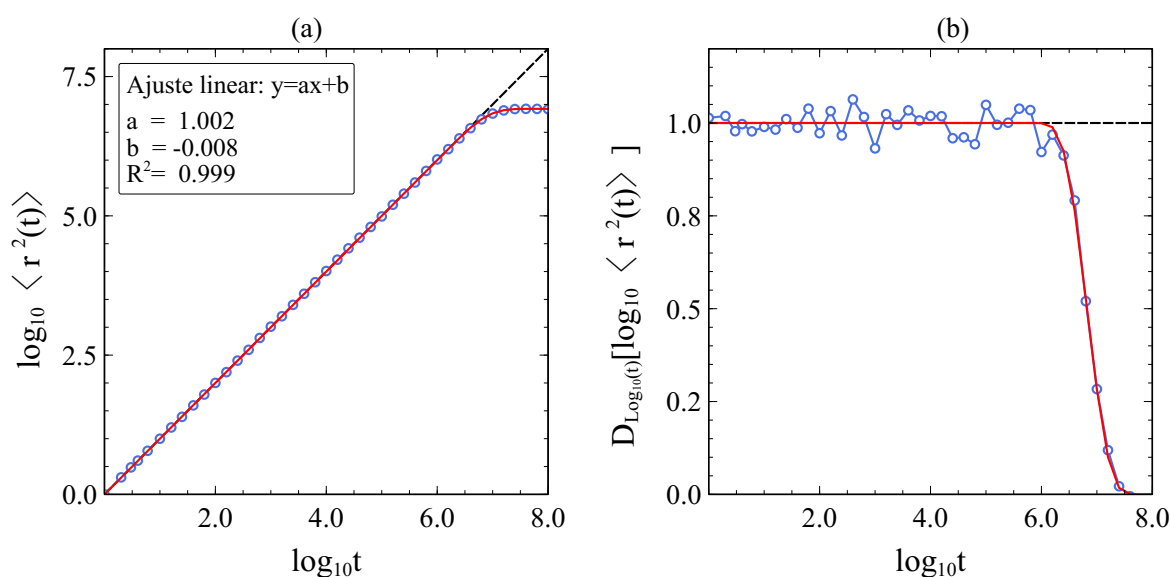
onde o parâmetro  $\gamma$  ajuda a caracterizar o tipo de comportamento difusivo. Desta forma, se o  $MSD$  apresenta uma relação linear com o tempo a difusão será classificada como normal, ao passo que esta relação não é linear temos sub-difusão ou super-difusão. Em outras palavras, caracterizamos a difusão como normal, sub-difusão e super-difusão quando  $\gamma = 1$ ,  $\gamma < 1$  ou  $\gamma > 1$ . O método dos caminhantes aleatórios é um processo que satisfaz a propriedade de Markov e, portanto, o cálculo da probabilidade em um determinado passo de tempo será independente dos passos anteriores. Por outra parte, podemos estimar o  $MSD$  para uma rede simples usando a Equação 4.20

$$\langle r^2(t) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (d_{ij})^2 \left( \vec{P}_{t,i} \right)_j. \quad (6.2)$$

Na Figura 6.1, apresentam-se os resultados da estimação do  $MSD$  considerando como substrato uma RCC de tamanho  $N = 10000$  e  $m = 1$ . A Figura 6.1(a) é o gráfico de  $\log_{10} \langle r^2(t) \rangle$  em função de  $\log_{10} t$ . Repare que a linha vermelha é o resultado conseguido usando a Equação 6.2 e os círculos azuis correspondem com a estimação do  $MSD$  mediante a simulação de caminhantes aleatórios. Ou seja, a Figura 6.1(a) descreve, tanto analiticamente como mediante simulação de caminhantes aleatórios, a difusão sobre uma RCC com conexões de primeiros vizinhos (ver Capítulo 3 Figura 3.5(a)). Na Figura 6.1(b) apresenta-se o cálculo do coeficiente angular das pequenas retas que são formadas juntando pontos vizinhos na Figura 6.1(a). Este cálculo pode ser considerado como a derivada numérica de  $\log_{10} \langle r^2 \rangle$  em função de  $\log_{10} t$ , e permite observar com maior exatidão o comportamento do parâmetro  $\gamma$  durante o transcurso do processo



difusivo. Portanto, o cálculo da derivada numérica é uma ferramenta que facilita a identificação dos estados temporais tais como sub-difusão e super-difusão. Note que a estimação do  $MSD$  mediante simulação de caminhantes aleatórios na Figura 6.1(a), parece ser semelhante ao resultado analítico conseguido com a Equação 6.2. No entanto, quando observamos a derivada numérica podemos constatar as pequenas oscilações realizadas pela simulação ao redor do valor esperado (linha preta tracejada). Estas oscilações apresentadas são uma consequência da presença de flutuações inerentes ao processo de simulação de caminhantes aleatórios, e sua amplitude dependerá do número de caminhantes usados na simulação. Em outras palavras, quanto maior o número de caminhantes no cálculo do  $MSD$ , melhor será o resultado conseguido e, portanto, as flutuações observadas no gráfico da derivada numérica convergem a um valor médio <sup>2</sup>. Para mostrar uma melhor perspectiva dos resultados da simulação numérica sem precisar de um grande consumo computacional, na Figura 6.1(a) é mostrado também o resultado do ajuste linear considerado o intervalo  $0 < t < t_{sat}$ . Note que o valor obtido para a inclinação corresponde ao comportamento médio do parâmetro de difusão  $\gamma$  e pode ser comparado com o comportamento "instantâneo" apresentado pela derivada numérica do resultado analítico expresso pela Equação 4.20 ou 6.2 (ver Figura 6.1(b) linha vermelha).

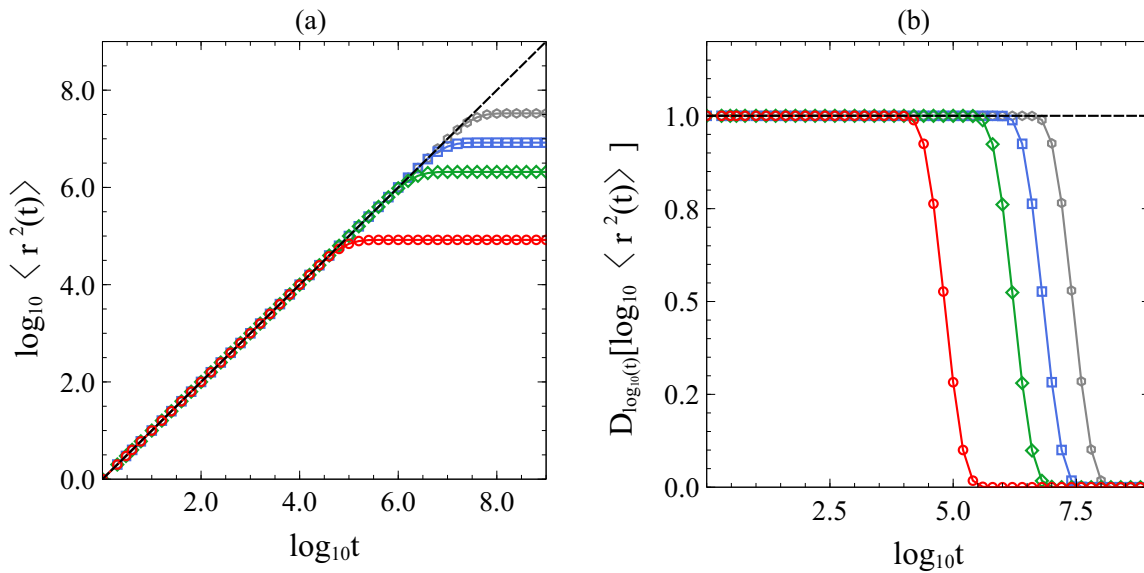


**Figura 6.1** Cálculo do  $MSD$  em uma RCC de tamanho  $N = 10000$  com  $m = 1$ . (a) Resultados analíticos conseguidos através da Equação 6.2 (linha vermelha) e simulação de 30000 caminhantes aleatórios (círculos azuis). (b) Cálculo da derivada numérica dos resultados analíticos apresentados na figura (a). Repare que o ajuste linear apresentado no gráfico (a) foi realizado considerando o intervalo  $0 < t < t_{sat}$  e mostra o comportamento médio do parâmetro de difusão  $\gamma$  (ver Equação 6.1). As linhas tracejadas em cor preta, representam uma guia do comportamento esperado em um processo de difusão normal  $\langle r^2 \rangle \sim t$ . Fonte: Autor.

<sup>2</sup>O número necessário de caminhantes aleatórios durante a simulação numérica, depende do tamanho da rede. Assim, o tempo computacional utilizado em uma simulação resulta do tamanho da rede e do número de caminhantes aleatórios.

O resultado apresentado na Figura 6.1(a) permite de forma geral destacar dos estados do processo de difusão. O primeiro estado corresponde a um crescimento linear, ou seja,  $\gamma = 1$ . O segundo estado ocorre quando o *MSD* apresenta um valor constante no tempo. Este último, chamado estado de saturação que é uma consequência do tamanho finito da rede. Desta forma, existe uma relação entre o tamanho da rede e o estado de saturação. Em outras palavras, quanto maior o tamanho da rede, maior é o um número de passos de tempo necessários para atingir o estado de saturação. Por outra parte, mostraremos em seguida que o resultado analítico do *MSD* permite mostrar de forma mais clara, em comparação da simulação, comportamentos difusivos como sub-difusão ou super-difusão.

Para mostrar de forma geral o comportamento difusivo mostrado na Figura 6.1 observe a Figura 6.2. Neste gráfico apresentamos os resultados do *MSD* para diferentes tamanhos da RCC com  $m = 1$ . O cálculo do *MSD* foi realizado usando unicamente a Equação 6.2. Repare que na Figura 6.2(a), o estado de saturação de cada processo difusivo permite afirmar que existe uma relação com o tamanho da rede. Desta forma, se consideramos uma rede com um tamanho "infinito" o estado de saturação nunca será atingido.



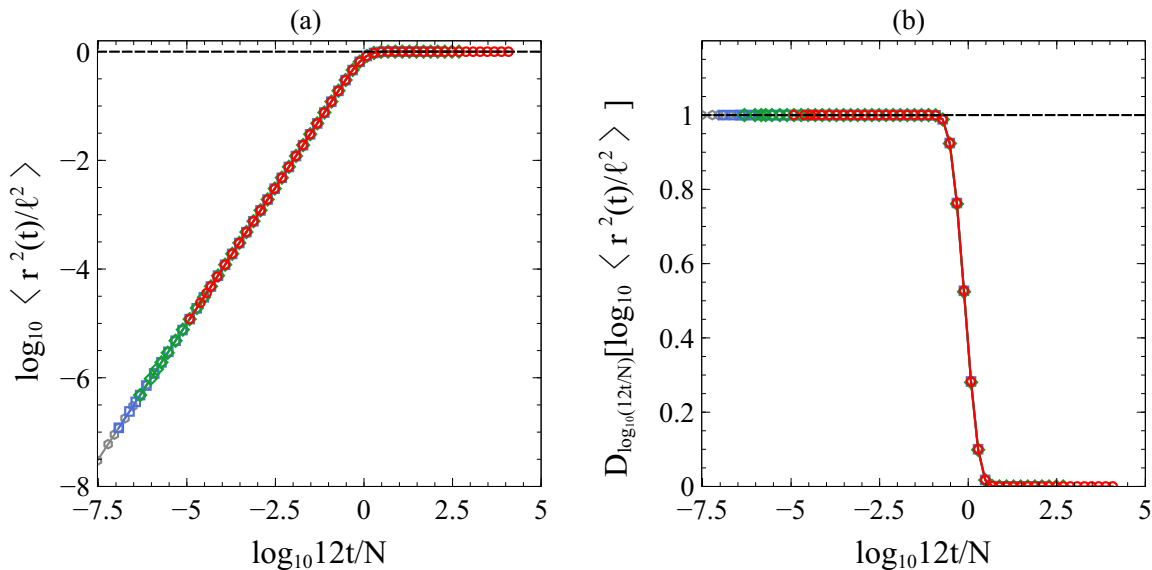
**Figura 6.2** Estimação do *MSD* usando a Equação 6.2, para diferentes tamanhos da RCC com  $m = 1$ . (a) Evolução temporal do *MSD* em função do tempo para  $N = 1001$  (linha vermelha),  $N = 5001$  (linha verde),  $N = 10001$  (linha azul),  $N = 20001$  (linha cinza). (b) Derivada numérica realizada aos resultados apresentados no painel (a). As linhas tracejadas em cor preta representam uma guia do comportamento esperado em um processo de difusão normal, ou seja,  $\langle r^2 \rangle \sim t$ . Fonte: Autor.

Por outra parte, se identifica à observar o processo difusivo de todas as redes na Figura 6.2 que se apresenta uma relação linear antes que apareçam os efeitos finitos da rede, ou seja, saturação. Este comportamento é apreciado também no gráfico da derivada na Figura 6.2(b), onde se constata que em todos os casos  $\gamma = 1$  antes de iniciar a transição ao estado de saturação, caracterizado por  $\gamma = 0$ . Repare que o estado de saturação para uma RCC com  $m = 1$  pode ser

identificado analiticamente pelas Equações 4.26, 5.14 e 5.29. Desta forma, podemos afirmar que a dinâmica difusiva da RCC descreve um processo de difusão normal que é independente do tamanho da rede. Por outra parte, devido a que o diâmetro é proporcional ao tamanho da rede podemos afirmar também que, o estado de saturação é proporcional ao diâmetro da rede, e esta relação será válida para qualquer rede conexa.

Finalmente é importante ressaltar que o cálculo do  $MSD$ , usando a Equação 6.2, apresenta uma grande complexidade computacional que é proporcional ao tamanho da rede. Assim, os resultados apresentados nas Figuras 6.1 e 6.2 permitem estimar que o tempo computacional escala com relação ao número de nós na rede com um expoente  $> 3.4$ . No entanto, para conseguir os resultados exibidos na Figura 6.2 foi necessário realizar uma otimização computacional baseada na característica regular que apresenta a matriz de adjacência da RCC. Assim, foi possível evitar a complexidade computacional que era causada pela multiplicação matricial sequencial e crescente no cálculo do vetor de probabilidades  $\vec{P}_{t,i}$  (ver Equação 4.18).

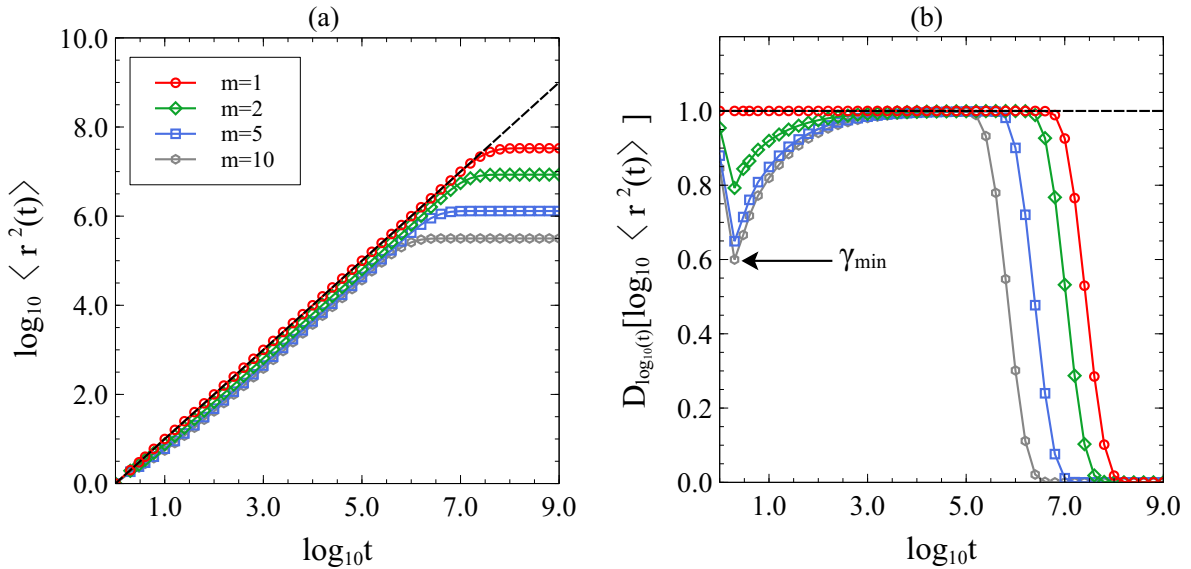
Na Figura 6.3 mostra-se um colapso das curvas do comportamento difusivo mostrado pela Figura 6.2. Repare que este resultado foi conseguido normalizando os valores do  $MSD$  pelo fator  $\ell^2$  definido pela Equação 4.26 (ver Capítulo 4). Por outra parte, o comportamento difusivo observado na Figura 6.3 coincide com a Equação 4.21.



**Figura 6.3** Generalização do comportamento de difusão mostrado pela Figura 6.2 para diferentes tamanhos da RCC com conexões a primeiros vizinhos. A linha tracejada em cor preta no painel (a) é uma guia do estado de saturação normalizado. O painel (b) corresponde com a derivada numérica do colapso do  $MSD$  apresentado pelo painel (a) e linha tracejada em cor preta representa uma guia do comportamento esperado em um processo de difusão normal  $\langle r^2 \rangle \sim t$ . Observe que através deste gráfico podemos generalizar o comportamento difusivo para uma RCC. Fonte:Autor.

A configuração topológica que apresenta uma rede desempenha um papel determinante no

desenvolvimento do processo de difusão. Para observar esta relação com maior clareza, a Figura 6.4 mostra resultados para o cálculo do  $MSD$  em uma RCC de tamanho  $N = 20000$ , mas com diferentes valores de  $m$  que determinam o tipo de conectividade dos primeiros vizinhos de cada vértice da rede. Observe que na Figura 6.4(a), existe uma relação inversa entre o estado de saturação  $\langle r^2(t_{sat}) \rangle$  e os diferentes valores usados de  $m$ . Ou seja, quanto maior é a conectividade entre os vizinhos dos vértices, o processo difusivo requer um número menor de passos de tempo para atingir o estado de saturação. No gráfico da derivada numérica, na Figura 6.4(b), observa-se uma clara diferença entre cada rede e o comportamento difusivo normal quando  $\gamma = 1$ . Isto mostra que quanto maior o valor de  $m$ , o  $MSD$  apresenta um comportamento sub-difusivo transiente mais prolongado e não uniforme, conforme evidenciado pela derivada numérica no início do processo difusivo. Por outra parte, observa-se no gráfico da derivada que cada comportamento difusivo, após o transiente de sub-difusão, tende a recobrar o estado de difusão normal com  $\gamma = 1$ . Desta forma, mostra-se que o teorema do limite central continua válido para o método dos caminhantes aleatórios em uma RCC [88].



**Figura 6.4** Cálculo analítico do  $MSD$  para uma RCC de tamanho  $N = 20000$  e diferentes valores de conectividade local  $k = 2m$ . (a) Comportamento difusivo para  $m = 1$  (linha vermelha),  $m = 2$  (linha verde),  $m = 5$  (linha azul) e  $m = 10$  (linha cinza). Observe que quanto maior é a conectividade da RCC menor é o valor do  $MSD$  no estado de saturação. (b) Derivada numérica do comportamento difusivo apresentado pelo gráfico em (a). Note que nos primeiros passos de tempo o processo difusivo apresenta um transiente de sub-difusão (ou seja,  $\gamma < 1$ ). No entanto, este comportamento temporal tende a retornar ao estado de difusão normal mostrando que o teorema do limite central continua válido. A linha tracejada em cor preta representa uma guia do comportamento esperado em um processo de difusão normal  $\langle r^2 \rangle \sim t$ . Fonte:Autor.

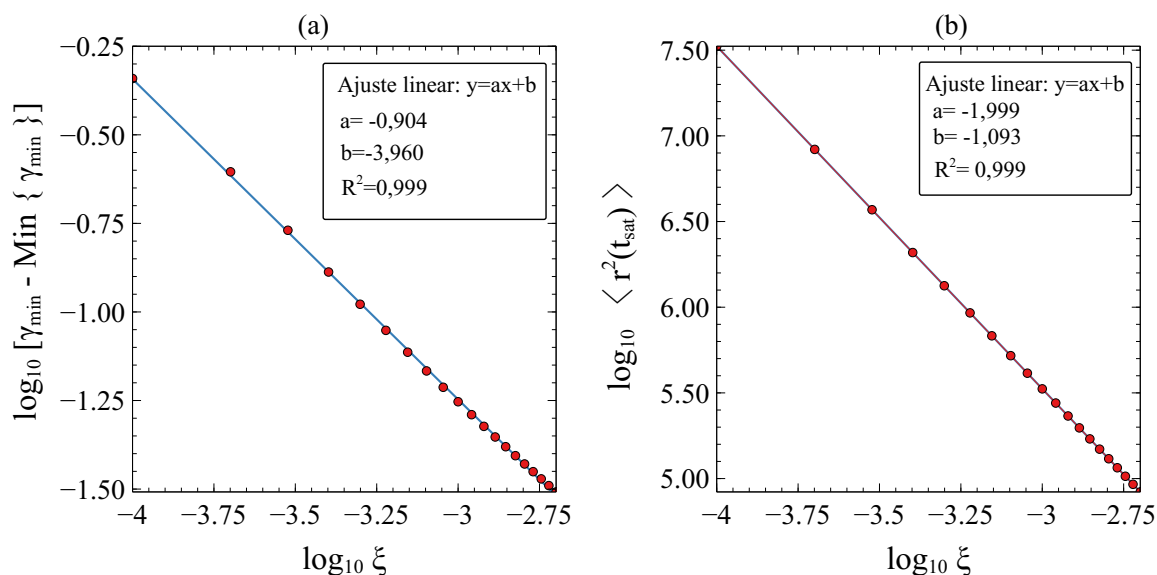
Por outra parte, observamos que para cada valor usado de  $m$  o processo difusivo atinge um valor mínimo do parâmetro  $\gamma$ , no entanto, este valor  $\gamma_{min}$  converge para um determinado valor. Isto mostra que existe um valor de  $m$  para o qual o valor de  $\gamma_{min}$  permanece constante. Em outras

palavras, há uma relação inversa entre o valor de  $m$  e  $\gamma_{min}$  que converge para um determinado valor. Finalmente, destacamos que para obter resultados semelhantes aos apresentados pela Figura 6.4, mediante simulação de caminhantes aleatórios, será necessário um grande gasto computacional que permita distinguir claramente o comportamento de cada rede. Isto mostra o benefício de usar o cálculo analítico para entender o comportamento do processo difusivo na RCC.

Para completar a análise do transiente apresentado na Figura 6.4, considere a equação do cálculo do valor da densidade de arestas em uma RCC,

$$\xi = \frac{2m}{(N-1)}. \quad (6.3)$$

Note que na Equação 6.3 existe uma relação linear entre a densidade de arestas  $\xi$  e o valor de  $m$ . Portanto, deve existir uma relação entre  $\xi$ , o estado de saturação  $\langle r^2(t_{sat}) \rangle$  e  $\gamma_{min}$ . Usando a Equação 6.3 e os resultados apresentados na Figura 6.4 conseguimos mostrar esta relação na Figura 6.5. Note que os gráficos apresentam uma clara relação entre estas grandezas que seguem uma lei de potência. Observe que  $1 > \gamma_{min} > 0$ , ou seja, o valor mais baixo que pode atingir  $\gamma_{min}$  nunca será zero já que isto implica que o processo difusivo se iniciaria em um estado de saturação. Observando a Figura 6.5(a) podemos afirmar que, quando em uma RCC com valor de  $m > 1$ , o processo difusivo apresenta um comportamento de sub-difusão que mostra uma clara relação com  $\xi$ . Por outra parte, a Figura 6.5(b) mostra que quanto maior é a densidade de arestas o processo difusivo atinge o estado de saturação mais rapidamente.



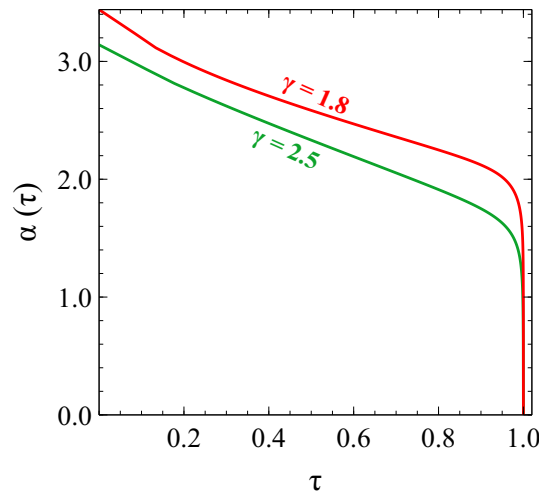
**Figura 6.5** (a) Relação entre a densidade de arestas  $\xi$  e  $\gamma_{min}$  apresentado na Figura 6.4(b). (b) Relação entre o estado de saturação da RCC e a densidade da arestas. Observe que os ajustes lineares, apresentados nos dois gráficos, permitem mostrar que a relação das duas grandezas com a densidade de arestas segue uma lei de potência para a RCC. Fonte: Autor.

Para finalizar esta seção destacamos que o estudo da difusão, mediante caminhantes aleatórios em uma RCC, permite mostrar como as interações entre os vértices apresentam um papel fundamental no comportamento observado na dinâmica difusiva. Portanto, para conseguir obter processos difusivos não lineares deve-se considerar redes com outras configurações topológicas.

## 6.2 SUPER-DIFUSÃO EM RCC ATRAVÉS DO MÉTODO DO PROBLEMA INVERSO

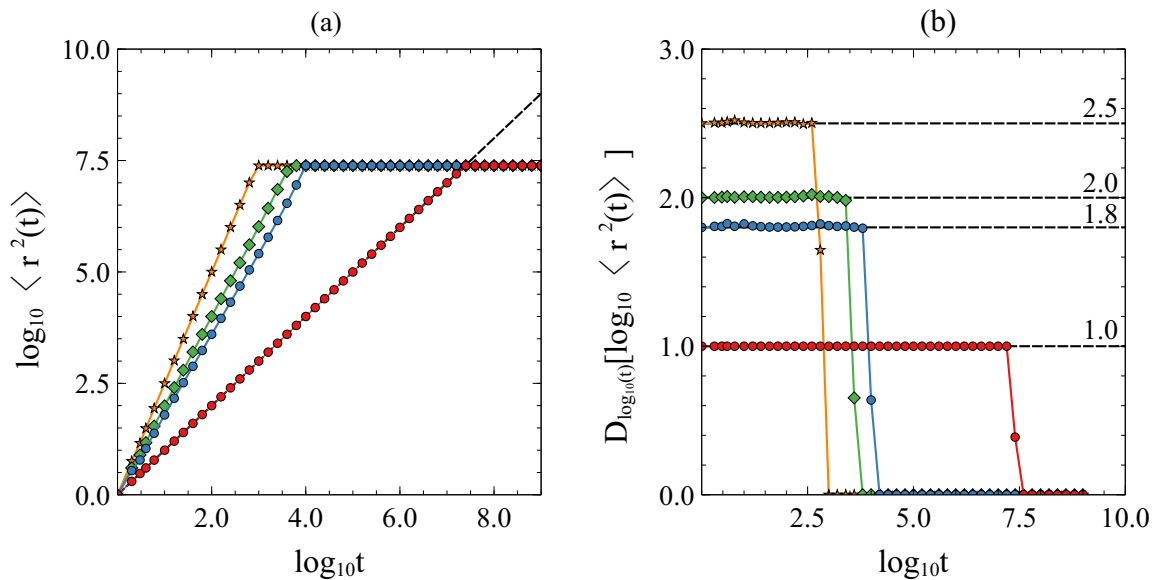
Na seção anterior se mostrou as implicações das modificações estruturais em uma rede quando consideramos um processo de difusão com caminhantes aleatórios que saltam entre vértices adjacentes. Desta forma, a dinâmica difusiva, apresentada pela Figura 6.4, apresentou mudanças tais como transientes. No entanto, realizar modificações na estrutura topológica de uma rede simples não necessariamente significa um processo difusivo que exiba mudanças onde  $\gamma \neq 1$ . Portanto, deve-se considerar as alterações de uma forma estratégica, onde um conjunto de interações entre os vértices consigam processos difusivos não lineares (ou seja, sub-difusão ou super-difusão). Uma forma de resolver isto de forma analítica é através do conceito de problema inverso que foi discutido no Capítulo 5. A solução do problema inverso fornece o conjunto de valores  $\{\alpha(0), \alpha(1), \alpha(2), \dots, \alpha(\lfloor t_{sat} \rfloor)\}$  que permitem ao LRW descrever um processo preciso de difusão com  $\gamma > 1$ . É importante destacar que o problema inverso consegue um processo difusivo que exibe super-difusão bem definida, ou seja, a difusão descrita pelo *MSD* é caracterizada com  $\gamma > 1$  até atingir o estado de saturação, onde  $\gamma = 0$ . Portanto, é de esperar que a transição ao estado de saturação seja de forma abrupta.

Na Figura 6.6 apresenta-se a série de valores  $\alpha(t)$  conseguida usando o formalismo do problema inverso (ver Equação 5.13) com  $\gamma = 1.8$  e  $\gamma = 2.5$  para uma RCC com  $m = 1$ . Note que na Figura 6.6 foi normalizado o tempo, ou seja,  $\tau = \log_{10} t / \log_{10} t_{sat}$  onde  $t_{sat}$  é o tempo de saturação do processo de difusão.



**Figura 6.6** Cálculo de  $\alpha(t)$  usando a Equação 5.29 para uma RCC  $N = 16007$ . Série de valores  $\alpha(t)$  usados na TM, para obter um processo difusivo uniforme com  $\gamma = 1.8$  (linha vermelha) e  $\gamma = 2.5$  (linha verde). Fonte: Autor.

Por outra parte, se observa na Figura 6.6 que  $\alpha(t)$  apresenta uma forma decrescente com uma clara tendencia a zero. Esta forma decrescente é independente do tipo de rede que seja usada no estudo do problema inverso. Portanto, para um processo de super-difusão usando LRW podemos afirmar que  $\alpha(0) > \alpha(1) > \alpha(2) > \dots > \alpha(\lfloor t_{sat} \rfloor) > 0$ . Em outras palavras, conforme o método de LRW usa o conjunto de valores  $\alpha(t)$  as probabilidades dos caminhantes aleatórios devem ser maiores e, desta forma, se conservar o estado de super-difusão uniforme até atingir a saturação. Devido a que  $\alpha(\lfloor t_{sat} \rfloor + 1) = 0$  o processo difusivo estará no estado de saturação e, portanto, os caminhantes aleatórios podem saltar a qualquer vértice da rede com igual probabilidade. Por outra parte, observe que o valor  $\alpha(1)$ , de  $\gamma = 1.8$ , é maior que  $\alpha(1)$  para  $\gamma = 2.5$ . Isto mostra que o processo de super-difusão com  $\gamma = 2.5$  precisa que os caminhantes aleatórios tenham uma maior probabilidade de pular a vértices mais distantes. Como consequência, quanto maior é o valor de  $\gamma$ , usado no problema inverso, menor é o número de passos de tempo necessários para atingir o estado de saturação.

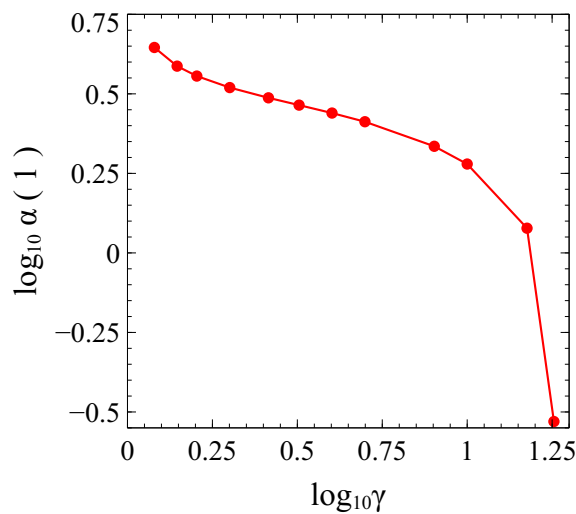


**Figura 6.7** Resultados numéricos do *MSD* para uma RCC de tamanho  $N = 16007$  com  $m = 1$  usando a TM com a série de dados  $\alpha(t)$ , apresentados na Figura 6.6. (a) Comportamentos difusivos quando  $\gamma = 1$  (linha vermelha),  $\gamma = 1.8$  (linha azul),  $\gamma = 2.0$  (linha verde) e  $\gamma = 2.5$  (linha amarela). (b) Derivada numérica do resultado do gráfico (a). As linhas tracejadas em cor preta representam uma guia do comportamento esperado em cada um dos estados super-difusivos. Fonte: Autor.

Usando a série de dados  $\alpha(t)$ , mostrados pela Figura 6.6, apresentamos na Figura 6.7 o cálculo do *MSD* para uma RCC de tamanho  $N = 16007$ . Repare que na Figura 6.7(a) se observa como o valor de saturação  $\langle r^2(t_{sat}) \rangle$  é independente das alterações topológicas dependentes de  $\gamma$ , o que sugere que este valor depende apenas do tamanho da rede. Por outra parte, no gráfico da derivada numérica na Figura 6.7(b) se verifica que o processo de super-difusão é uniforme e o valor de  $\gamma$  será constante até que o estado de saturação seja alcançado. Observe também que quanto maior é o valor de  $\gamma$  o comportamento difusivo precisará um número menor

de passos até o estado de saturação. Desta forma, a solução do problema inverso induz o aparecimento de um estado de super-difusão uniforme, usando caminhantes aleatórios com uma maior acessibilidade a vértices não adjacentes durante o transcurso do processo difusivo. Por outra parte, observa-se que a transição ao estado de saturação, no gráfico da derivada, ocorre de forma abrupta e não de forma suave como pode ser verificado na Figura 6.2(b).

Finalmente na Figura 6.8 apresenta-se a relação entre  $\log_{10} \alpha(1)$  e  $\log_{10} \gamma$ . Observe que  $\alpha(1)$  é inversamente proporcional a  $\gamma$ . Desta forma, as Figuras 6.6 e 6.8 sugerem que quanto maior é o valor de  $\gamma$  usado no problema inverso, as diferentes séries de  $\alpha(t)$  não se cruzam e tendem a zero.



**Figura 6.8** Relação entre  $\log_{10} \alpha(1)$  e  $\log_{10} \gamma$ , para uma RCC com  $N = 2001$ . Note que, quanto maior é o valor de  $\gamma$ , a probabilidade de pular um caminhante aleatório uma distância  $d_{ij} > 1$ , será maior. Fonte: Autor.

### 6.3 DIFUSÃO USANDO LRW NO TORO HELICOIDAL

Como já foi mencionado os métodos de LRW e do problema inverso permitem utilizar qualquer tipo de rede, mas existe uma limitação que está relacionada com a complexidade computacional. Desta forma, observa-se que realizar estimações numéricas, seja com o método de LRW ou com o formalismo do problema inverso, requer de uma considerável quantidade de tempo computacional. Mais especificamente, este problema é causado pelas repetidas e progressivas multiplicações da matriz de transição<sup>3</sup> e, portanto, quanto maior seja o tamanho da rede mais tempo computacional será requerido. O propósito nesta seção será mostrar um desenvolvimento analítico que permite estimar o *MSD* evitando a multiplicação matricial. Este desenvolvimento, é semelhante ao apresentado no Capítulo 5, o qual é baseado na propriedade circulante que apresenta a matriz de adjacência da RCC. Assim, tomando vantagem da propriedade circulante do TH, nesta seção obtemos resultados usando redes bidimensionais conexas com cerca de  $10^4$  nós e, com um tempo de computação relativamente pequeno. Por outra parte,

<sup>3</sup>O tempo de execução computacional da multiplicação de matrizes quadradas, é da ordem  $O(n^3)$ .



conseguir resultados em redes com tamanhos maiores permite observar com um maior detalhe o processo de difusão através do tempo. Desta forma, super-difusão ou transientes serão facilmente mostrados pelo cálculo da derivada numérica.

Sim perda de rigor matemático o desenvolvimento apresentado considera a transformada de Mellin (TM) <sup>4</sup>. Suponha o método de LRW com o parâmetro  $\alpha$  dependente do tempo e um TH de tamanho  $N = n \times n$ , onde  $N$  será um número inteiro ímpar. Desta forma, a equação da TM da matriz de vizinhança, conforme mostrada no Capítulo 5, é

$$\hat{M}_t = A + \sum_{d=2}^{d_{max}} d^{-\alpha(t)} \mathcal{N}_d. \quad (6.4)$$

A matriz  $\hat{M}_t$  pode ser representada usando uma base de auto-valores e auto-vetores da seguinte forma

$$\hat{M}_t = \hat{V} \hat{H}_t \hat{V}^*, \quad (6.5)$$

onde a matriz  $\hat{V}$  é uma matriz formada pelos auto-vetores normalizados da matriz  $\hat{M}_t$ , ou seja,

$$\hat{V} = \frac{1}{\sqrt{N}} \begin{pmatrix} \omega_N^{00} & \omega_N^{01} & \cdots & \omega_N^{0(N-1)} \\ \omega_N^{10} & \omega_N^{11} & \cdots & \omega_N^{1(N-1)} \\ \omega_N^{20} & \omega_N^{21} & \cdots & \omega_N^{2(N-1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \omega_N^{(N-1)0} & \omega_N^{(N-1)1} & \cdots & \omega_N^{(N-1)(N-1)} \end{pmatrix}, \quad (6.6)$$

onde  $\omega_N^{jk} = \exp[\hat{i}2\pi jk/N]$  e correspondem às soluções da equação  $z^N = 1$ . A matriz diagonal  $\hat{H}_t$  é formada pelos auto-valores de  $\hat{M}_t$ . Desta forma, usando a Equação 3.9 e a fórmula de Euler  $e^{\hat{i}x} = \cos(x) + \hat{i} \sin(x)$  definimos o  $j$ -ésimo auto-valor do TH de tamanho  $N$  ímpar como

$$\lambda_j = \sum_{m=1}^{N-1/2} d_{m+1}^{-\alpha(t)} \left( \omega_N^{jm} + \omega_N^{j(N-m)} \right) = \sum_{m=1}^{N-1/2} 2d_{m+1}^{-\alpha(t)} \cos\left(\frac{2\pi jm}{N}\right), \quad (6.7)$$

onde  $d_j = d_{1j}$  e, portanto, representa a distância mais curta entre o primeiro vértice da rede e o vértice  $j$ . Neste caso, a expressão analítica para  $d_j$  é

$$d_j = \frac{x_j}{n} + (J-1) \left( \frac{n-1}{n} \right) + 2\Theta(-J) - 2\Theta\left(J - \frac{n+3}{2}\right) \left( J - \frac{n+3}{2} \right), \quad (6.8)$$

<sup>4</sup>Um procedimento semelhante pode ser realizado considerando a transformada de Laplace, no entanto, os resultados obtidos serão semelhantes.

onde

$$x_j = (N+2)\Theta\left(j - \frac{N+3}{2}\right) + j \operatorname{sgn}\left(\frac{N+2}{2} - j\right) - 1. \quad (6.9)$$

Na Equação 6.8 temos que  $J = (x_j + 1) \bmod (n)$ , onde *mod* representa a operação módulo. Por outra parte,  $\Theta(x)$  é a função de Heaviside (ou seja,  $\Theta(x) = 1$  se  $x \geq 0$ , e  $\Theta(x) = 0$  caso contrário). Na Equação 6.9 temos que  $\operatorname{sgn}(x) = x/|x|$ , que é conhecida como a função sinal. Com ajuda da Equação 6.5 reescrevemos a matriz de transição  $\mathcal{P}_t$  em função dos auto-valores e auto-vetores

$$\mathcal{P}_t = \frac{\hat{M}_t}{\hat{S}} = \frac{\hat{V}\hat{H}_t\hat{V}^*}{\hat{S}}. \quad (6.10)$$

Repare que, devido à propriedade circulante apresentada pela matriz  $\hat{M}_t$ , os elementos matriciais  $\hat{S}_t$  são todos iguais  $(\hat{S}_t)_i = (\hat{S}_t)_j = S_t$ , onde

$$S_t = \sum_{m=1}^{N-1/2} \frac{2}{d_{m+1}^{\alpha(t)}}. \quad (6.11)$$

Desta forma, o vetor de probabilidades dos caminhantes aleatórios é escrito como

$$\vec{p}_{t,i} = \left( \prod_{\kappa=0}^{t-1} \frac{\hat{V}\hat{H}_\kappa\hat{V}^*}{\hat{S}_\kappa} \right) \vec{p}_{0i}, \quad (6.12)$$

$$\vec{p}_{t,i} = \hat{V}H_{t-1}\hat{V}^*\vec{p}_{0i}, \quad (6.13)$$

onde,

$$(H_{t-1})_i = \prod_{\kappa=0}^{t-1} \frac{(\lambda_\kappa)_{i-1}}{S_\kappa}. \quad (6.14)$$

Usando a Equação 6.13 se escreve a probabilidade de um caminhante aleatório que no tempo  $t = 0$  está no vértice  $i$  e em seguida de alguns passos estará no vértice  $q$  em um tempo arbitrário  $t$

$$\left(\vec{P}_{t,i}\right)_q = \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \hat{V}_{qk} (H_{t-1})_k \hat{V}_{kj}^* \left(\vec{P}_{0i}\right)_q. \quad (6.15)$$

Considerando a simetria apresentada pelo TH, ou seja,  $\langle r^2(t) \rangle_i = \langle r^2(t) \rangle_j$ , escreve-se a equação do cálculo do *MSD* da seguinte forma

$$\langle r^2(t) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{q=1}^N (d_{qi})^2 (\vec{P}_{ti})_q = \sum_{q=1}^N (d_{qi})^2 (\vec{P}_{ti})_j. \quad (6.16)$$

Usando a Equação 6.15, reescrevemos a equação do cálculo do *MSD* para caminhantes aleatórios que iniciam no primeiro vértice do TH

$$\langle r^2(t) \rangle = \sum_{q=2}^N \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N (d_q)^2 \hat{V}_{qk} (H_{t-1})_k \hat{V}_{kj}^* (\vec{P}_{01})_j \quad (6.17)$$

Note que na Equação 6.17  $(d_q)^2 = (d_{1q})^2$  e  $(\vec{P}_{01})_j = \delta_{1j}$ , portanto,

$$\langle r^2(t) \rangle = \sum_{q=2}^N \sum_{k=1}^N (d_q)^2 \hat{V}(q, k) (H_{t-1})_k \hat{V}^*(k, 1). \quad (6.18)$$

Finalmente usando a Equação 6.6, temos

$$\langle r^2(t) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{q=2}^N (d_q)^2 + \frac{1}{N} \sum_{q=2}^N \sum_{k=2}^N (d_q)^2 \exp(i\theta_k(q-1)) (H_{t-1})_k, \quad (6.19)$$

onde  $(H_{t-1})_1 = 1$  e  $\theta_k = \frac{2\pi(k-1)}{N}$ . Observamos que a Equação 6.19 é formada por dois termos somatórios. O primeiro é independente do tempo e considera o quadrado da distância, portanto, este termo é convergente corresponde com o valor de saturação do processo de difusão. Por outra parte, o segundo é negativo e, conforme o processo de difusão aproxima-se ao estado de saturação, este termo tende a zero. Através de considerações nas somatórias podemos conseguir o valor ao qual o primeiro termo converge, ou seja, o valor de saturação para um TH com  $N$  ímpar. Desta forma,

$$\begin{aligned} \langle r^2 \rangle_{sat} &= \sum_{q=2}^N (d_q)^2 = 4 \sum_{m=1}^{n-1/2} m^3 + m(n-m)^2 \\ &= 8 \sum_{m=1}^{n-1/2} m^3 + 4n^2 \sum_{m=1}^{n-1/2} m - 8n \sum_{m=1}^{n-1/2} m^2 \\ &= \frac{(n^2 - 1)(7n^2 - 3)}{24} \\ &= \frac{(N - 1)(7N - 3)}{24}. \end{aligned} \quad (6.20)$$

Substituindo a Equação 6.20 na Equação 6.19 temos

$$\langle r^2(t) \rangle = \frac{(N-1)(7N-3)}{24N} + \frac{1}{N} \sum_{q=2}^N \sum_{k=2}^N (d_q)^2 \exp(i\theta_k(q-1)) (H_{t-1})_k. \quad (6.21)$$

Na Equação 6.21 consideramos  $\Re \{ \langle r^2(t) \rangle \}$ , ou seja,

$$\langle r^2(t) \rangle = \frac{(N-1)(7N-3)}{24N} + \frac{1}{N} \sum_{k=2}^N (H_{t-1})_k \varphi(k), \quad (6.22)$$

onde

$$\varphi(k) = \sum_{q=2}^{N+1/2} 2 (d_q)^2 \cos(\theta_k(q-1)). \quad (6.23)$$

Observe que a Equação 6.22 não inclui qualquer multiplicação matricial, sendo equivalente à Equação 6.2. Portanto, ao usar esta equação esperamos que o cálculo do *MSD* precise um menor tempo computacional e permita conseguir resultados para redes com tamanhos maiores.

Por outra parte como já se afirmou, o primeiro termo da Equação 6.22 corresponde a  $\langle r^2 \rangle_{sat}$ , ao passo que o segundo termo deve ser negativo e tende a zero conforme o processo de difusão se aproxima ao estado de saturação. Portanto, considerando que  $\langle r^2(t) \rangle \sim t^\gamma$  podemos concluir que o tempo de saturação é

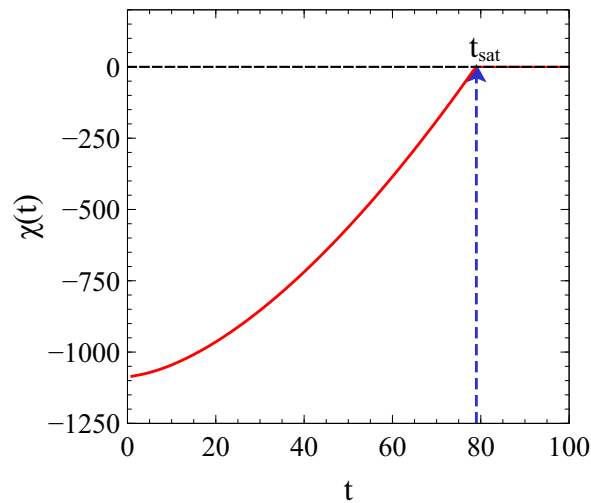
$$t_{sat} = \left[ \left( \frac{(N-1)(7N-3)}{24N} \right)^{1/\gamma} \right]. \quad (6.24)$$

Para observar melhor o papel do segundo termo na Equação 6.22 definimos

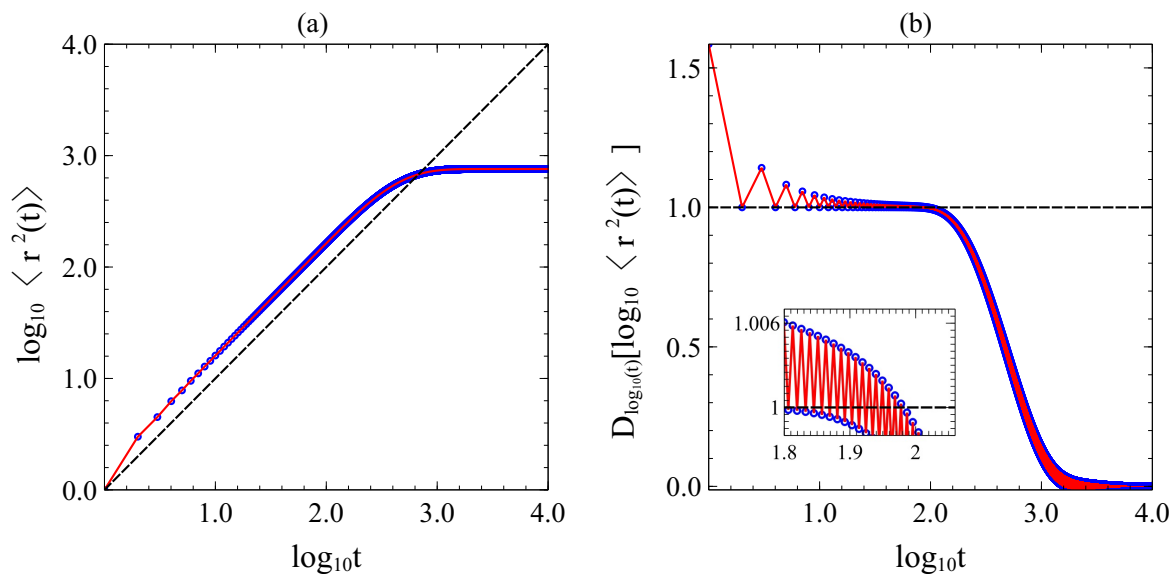
$$\chi(t) = \frac{1}{N} \sum_{k=2}^N (H_{t-1})_k \varphi(k), \quad (6.25)$$

cuja dependência com relação a  $t$  é mostrada na Figura 6.9 a continuação. Observe que o valor de  $\chi(t)$  é negativo e, a medida que o processo difusivo avança, ele mostra uma tendencia a se aproximar de zero, quando o processo de difusão atinge o estado de saturação.

Para corroborar o resultado mostrado nesta seção, apresenta-se na Figura 6.10 o cálculo do *MSD* para um TH de tamanho  $N = 51 \times 51$ . Observe que os resultados da Figura 6.10 foram obtidos com a utilização das Equações 6.22 e 6.2. Repare que, os resultados analíticos no gráfico(a) não apresentam diferenças. Portanto, podemos afirmar que a Equação 6.22, deduzida a partir da propriedade circulante do TH, é válida para o calculo do *MSD* quando  $N$  ímpar.



**Figura 6.9** Gráfico da função  $\chi(t)$  realizado com a utilização da Equação 6.25. Observe que a linha tracejada de cor azul destaca o momento no qual o processo de difusão alcança o estado de saturação para um dado TH (ver Equação 6.22). A linha tracejada em cor preta representa o valor ao qual a função  $\chi(t)$  tende quando  $t \rightarrow t_{sat}$ . Fonte: Autor.

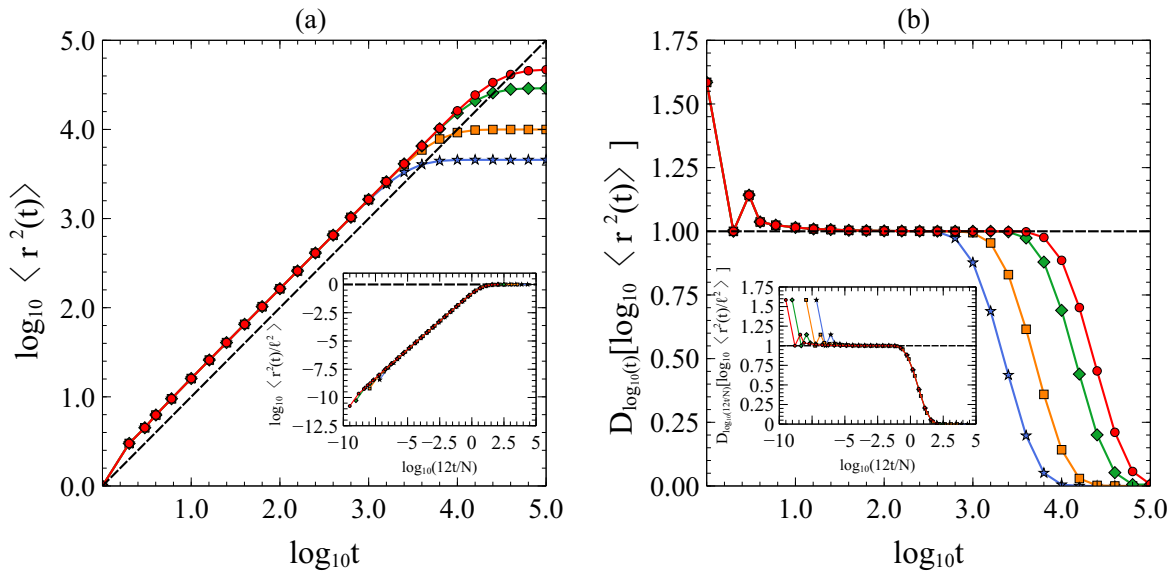


**Figura 6.10** Comparação dos resultados analíticos do MSD em um TH de tamanho  $N = 51 \times 51$ . (a) Comportamento difusivo através da Equação 6.2 (círculos azuis) e a Equação 6.22 (linha vermelha). (b) Derivada numérica do comportamento do MSD apresentado no gráfico (a). A linha tracejada em cor preta, representa uma guia do comportamento esperado em um processo de difusão normal  $\langle r^2 \rangle \sim t$ . Fonte: Autor.

Note que o comportamento difusivo observado na Figura 6.10 não é semelhante com o os resultados apresentados nas Figuras 6.4 e 6.5 para a RCC. Isto é mais evidente quando observamos

o gráfico da derivada numérica que mostra como o parâmetro  $\gamma$  apresenta inicialmente um estado transiente de super-difusão que decresce conforme o processo de difusão se aproxima ao estado de saturação. Este comportamento difusivo é irregular e independente do tamanho da rede. Note também que as variações apresentadas pelo parâmetro  $\gamma$  são apreciadas com maior detalhe no pequeno quadro sobreposto na Figura 6.10(b).

Usando a Equação 6.22 apresenta-se na Figura 6.11 o cálculo do *MSD* considerando diferentes casos do TH com tamanhos da ordem de até  $10^4$ . Repare que, para todas as redes, o gráfico da derivada numérica mostra um transiente de super-difusão para  $t \leq 10$ . Portanto, este comportamento difusivo é uma consequência da estrutura topológica bidimensional do toro e não dos efeitos finitos da rede. Por outra parte, observe que destacamos na Figura 6.11(b) o colapso do comportamento difusivo no TH usando para isto relações da RCC (ver Equação 4.26).



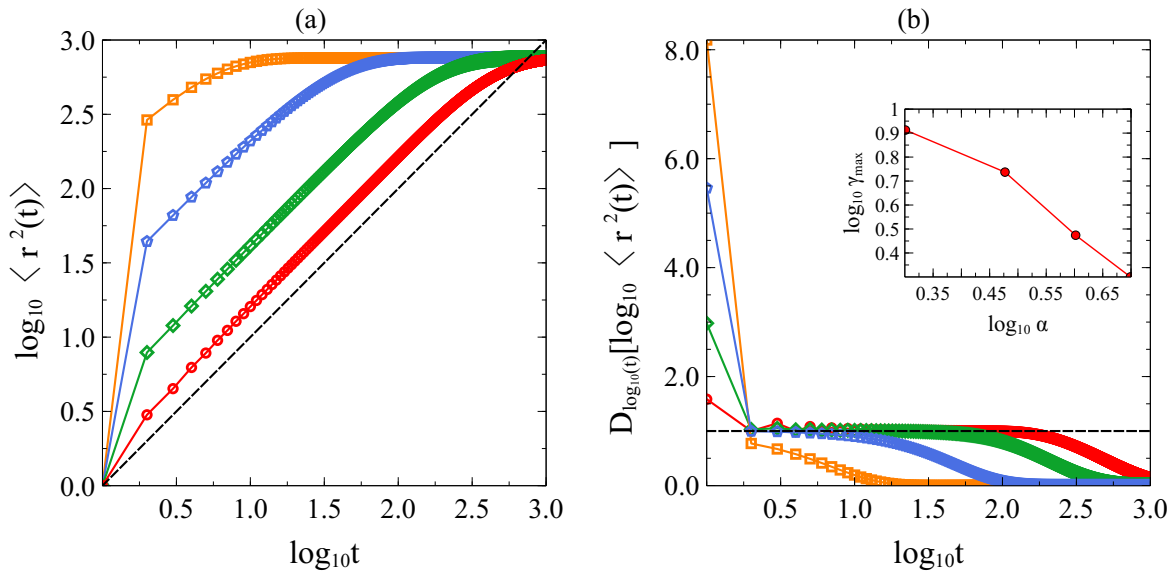
**Figura 6.11** Cálculo do *MSD* usando a Equação 6.22, para o TH com diferentes tamanhos  $N$ . (a) Comportamento difusivo do TH para  $N = 125 \times 125$  (linha azul),  $N = 185 \times 185$  (linha amarela),  $N = 315 \times 315$  (linha verde),  $N = 401 \times 401$  (linha vermelha). (b) Cálculo numérico da derivada dos resultados do *MSD* apresentados no gráfico (a). Note que os gráficos inseridos apresentam o colapso do comportamento difusivo. A linha tracejada em cor preta representa uma guia do comportamento esperado em um processo de difusão normal  $\langle r^2 \rangle \sim t$ . Fonte: Autor.

#### 6.4 SUPER-DIFUSÃO NO TORO HELICOIDAL

Nesta seção, apresenta-se o estudo da super-difusão no TH mediante o cálculo do *MSD*. Para realizar isto, primeiro vamos considerar o método de LRW com  $\alpha$  constante, observando os efeitos que surgem no transcurso do processo difusivo, quando se incrementa a conectividade da rede. Desta forma, quando  $\alpha \rightarrow 0$  os caminhantes aleatórios apresentam uma maior possibilidade de visitar vértices que possuem uma grande distância de separação (ver Capítulo 5). Posteriormente vamos resolver o problema inverso considerando a Equação 6.22, que foi dedu-

zida na seção anterior. Para finalizar esta seção apresentamos os resultados para super-difusão conseguidos através da simulação de caminhantes aleatórios sobre o TH.

Na Figura 6.12 são mostrados os resultados do  $MSD$  para um TH de tamanho  $N = 51 \times 51$ , considerando diferentes valores de  $\alpha$  constantes. Observe que na Figura 6.12(a) o  $MSD$  apresenta um incremento significativo no primeiro passo do processo de difusão. Isto mostra que no TH um incremento da conectividade através de valores constantes do parâmetro  $\alpha$  consegue acelerar o processo difusivo até exibir os efeitos finitos da rede. Em outras palavras, quando  $\alpha$  tende a zero o processo de difusão no TH exibe o estado de saturação em um menor número de passos de tempo. Este comportamento pode ser observado com maior facilidade no gráfico da derivada numérica na Figura 6.12(b). Assim, o valor de  $\gamma$  apresenta uma relação com o parâmetro  $\alpha$  que exibe na Figura 6.12(b) um estado transiente de super-difusão que decai rapidamente em busca da saturação quando  $\gamma = 0$ . Note que na Figura 6.11, o transiente de super-difusão inicial era independente do tamanho da rede. No entanto, quando consideramos diferentes valores constantes de  $\alpha$  como na Figura 6.12, observa-se um comportamento temporal de super-difusão que depende das interações entre os vértices da rede. Observe também que na Figura 6.12(b) mostra-se em detalhe a relação entre o parâmetro  $\alpha$  e o valor máximo conseguido por  $\gamma$  em cada caso mostrado no gráfico da derivada numérica. Assim, quando  $\alpha \rightarrow 0$  (ou seja, para uma rede completa) o valor de  $\gamma_{max}$  se aproxima a 10, para o tamanho de rede usado.



**Figura 6.12** Comparação do cálculo do  $MSD$  usando diferentes valores constantes de  $\alpha$  na Equação 6.22 para um TH de tamanho  $N = 51 \times 51$ . (a) Comportamento difusivo para  $\alpha = 1000$  (círculos vermelhos),  $\alpha = 4$  (diamantes verdes),  $\alpha = 3$  (pentágonos azuis) e  $\alpha = 2$  (quadrados amarelos). (b) Derivada numérica dos resultados apresentados no painel(a). Repare que no painel (b) da derivada o gráfico inserido mostra que quanto maior é o comportamento super-difusivo temporal inicial, menor será o valor de  $\alpha$ . A linha tracejada em cor preta representa uma guia do comportamento esperado em um processo de difusão normal, ou seja,  $\langle r^2 \rangle \sim t$ . Fonte: Autor.

Os resultados apresentados nas Figuras 6.11 e 6.12 sugerem, de forma semelhante à RCC, que é possível conseguir um comportamento de super-difusão bem definido no TH como resultado de alterações estratégicas nas interações da rede. Portanto, para resolver o problema inverso com o TH e conseguir um processo de super-difusão uniforme, deve-se primeiro considerar o parâmetro de ajuste  $\alpha$  em função do tempo e da estrutura da rede. Desta forma, usando a Equação 6.22 e a condição  $\langle r^2(t) \rangle = \langle r^2(1) \rangle t^\gamma$  adaptamos a Equação 5.13, válida na solução do problema inverso para RCC, para o problema equivalente no TH, obtendo

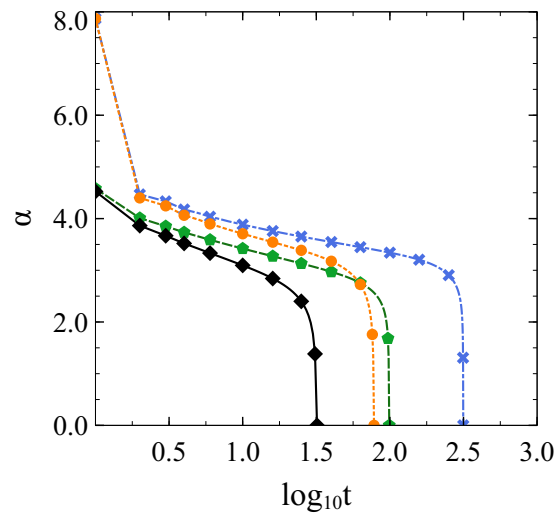
$$\langle r^2(1) \rangle t^\gamma = \frac{(N-1)(7N-3)}{24N} + \frac{1}{N} \sum_{k=2}^N (H_{t-1})_k \varphi(k), \quad (6.26)$$

onde considera-se  $0 \leq t \leq \lfloor t_{sat} \rfloor$  e  $\alpha(0) = \infty$ , o que implica em  $\langle r^2(1) \rangle = 1$  e  $t_{sat} = \langle r^2(t_{sat}) \rangle^{1/\gamma}$ . De forma semelhante, como se estimou o conjunto de valores  $\alpha(t)$  para conseguir super-difusão bem definida na RCC, vamos usar a Equação 6.26 para calcular a série de valores  $\alpha(t)$  necessários para induzir super-difusão uniforme no TH. Repare que os valores de  $\alpha(t)$ , na Equação 6.26, estão de forma implícita na função  $D_{t-1}(k)$  (ver Equação 6.14).

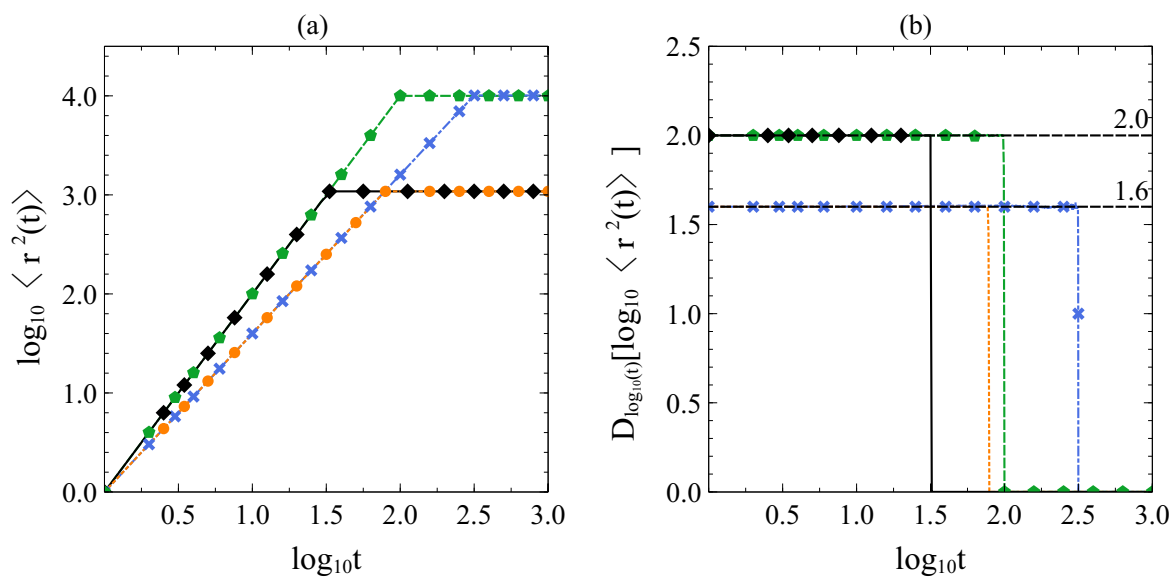
Na Figura 6.13 apresenta-se o resultado para os valores de  $\alpha$  obtidos pela da solução do problema inverso usando a Equação 6.26. Neste cálculo se considerou  $\gamma = 1.6$  e  $\gamma = 2.0$  para dois diferentes tamanhos de redes. Note que o comportamento das séries de valores  $\alpha(t)$  para o TH é semelhante ao resultado apresentado para a RCC na Figura 6.6. Ou seja, tanto para o TH como para a RCC se observa que a série de valores  $\alpha(t)$  apresenta uma tendência decrescente que converge a zero. Desta forma, para conseguir um processo de super-difusão uniforme usando o método de LRW, deve-se considerar uma dinâmica na qual as probabilidades de saltos de longa distância dos caminhantes aleatórios devam ser maiores conforme avança o processo de difusão.

Usando os resultados apresentados na Figura 6.13, realiza-se o cálculo do *MSD* de forma analítica e através de simulações numéricas de caminhantes aleatórios. Os resultados são apresentados respectivamente, nas Figuras 6.14 e 6.15. Observe que, de forma geral, a dinâmica de difusão descreve um comportamento de super-difusão uniforme caracterizado pelo valor do parâmetro  $\gamma$ . Esta caracterização do comportamento difusivo é observada com maior detalhe no gráfico da derivada numérica nas Figuras 6.14(b) e 6.15(b). Note que, os gráficos da derivada mostram um processo de super-difusão bem definido para  $0 \leq t < t_{sat}$  e observa-se uma transição abrupta quando o processo de difusão alcança o estado de saturação. Repare que esta alteração abrupta, observada nos gráficos da derivada numérica, contrasta com a suave transição exibida nos resultados do processo difusivo normal do TH nas Figuras 6.10 e 6.11. Finalmente podemos inferir que os resultados conseguidos de forma analítica, através da Equação 6.26, são congruentes com o comportamento médio mostrado pela simulação de caminhantes aleatórios na Figura 6.15.

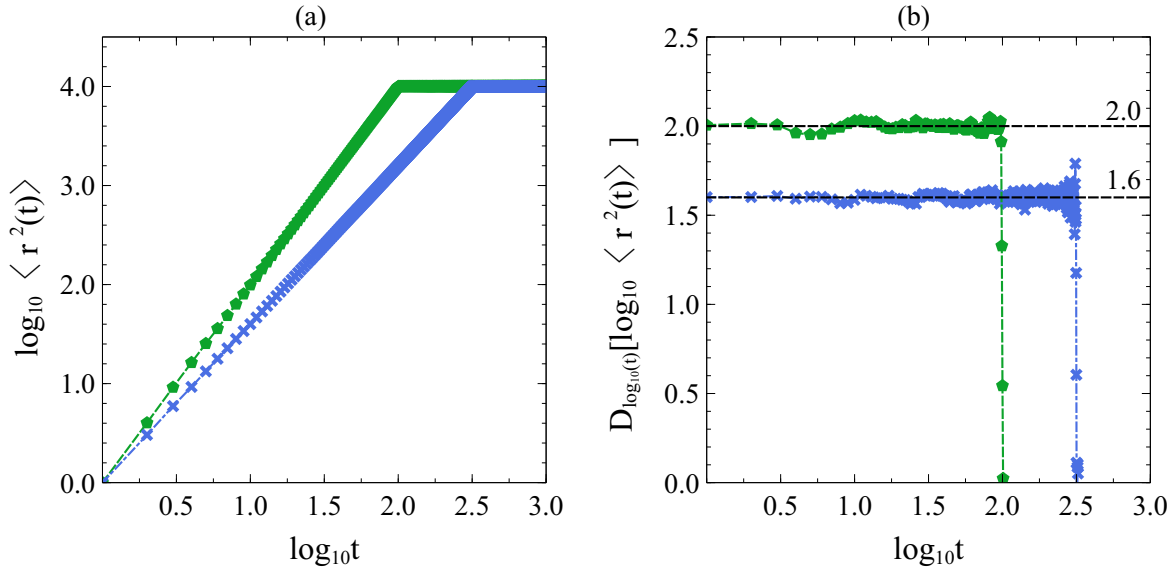




**Figura 6.13** Evolução temporal de  $\alpha(t)$  conseguida usando a solução do problema inverso (ver Equação 6.26) para um processo de super-difusão no TH quando  $t \leq t_{sat}$ . Os resultados obtidos consideram dois valores diferentes de  $\gamma$  os quais são:  $\gamma = 1.6$  para  $N = 61 \times 61$  (linha pontilhada amarela com círculos) e  $N = 185 \times 185$  (linha tracejada com pontos azul e cruzes).  $\gamma = 2.0$  para  $N = 61 \times 61$  (linha preta com diamantes) e  $N = 185 \times 185$  (linha tracejada verde com pentágonos). Fonte: Autor.



**Figura 6.14** (a) Evolução temporal do *MSD* para um TH usando a série de valores  $\alpha(t)$  da Figura 6.13 para  $\gamma = 1.6$ ,  $\gamma = 2.0$  e  $N = 61 \times 61$  e  $N = 185 \times 185$ . Note que o código de cores usado neste gráfico é igual ao mostrado na Figura 6.13. (b) Derivada numérica de  $\log_{10} \langle r^2 \rangle$  em função de  $\log_{10} t$ . A linha preta tracejada no gráfico da derivada numérica é uma guia para ressaltar os valores de  $\gamma = 1.6$  e  $\gamma = 2.0$ . Fonte: Autor.



**Figura 6.15** (a) Evolução temporal do *MSD* utilizando simulações de caminhantes aleatórios sobre um TH usando a série de valores  $\alpha(t)$  da Figura 6.13 para  $\gamma = 1.6$ ,  $\gamma = 2.0$  e  $N = 185 \times 185$ . Note que o código de cores usado é igual ao mostrado na Figura 6.13. (b) Derivada numérica de  $\log_{10} \langle r^2 \rangle$  em função de  $\log_{10} t$ . A linha preta tracejada no gráfico da derivada numérica é uma guia para ressaltar os valores de  $\gamma = 1.6$  e  $\gamma = 2.0$ . Fonte: Autor.

## 6.5 INDUÇÃO DE SUPER-DIFUSÃO EM UMA REDE NÃO CIRCULANTE

Como foi discutido no capítulo 5, o método de LRW para obter o *MSD* usando a Equação 5.11, permite considerar qualquer tipo de rede simples. Porém, neste método apresenta-se uma complexidade computacional que escala rapidamente com o tamanho da rede. Por este motivo, na seção anterior foi deduzida a Equação 6.22 que permite realizar o cálculo analítico do *MSD* em um TH com  $N$  ímpar. Esta expressão analítica foi baseada na propriedade circulante apresentada pelo TH. Com esta formulação, o cálculo do *MSD* apresenta uma complexidade computacional que escala com um expoente significativamente menor. De forma geral, é possível realizar uma dedução semelhante considerando outras redes cuja matriz de adjacência apresente a propriedade circulante. No entanto, devido a que nem todas as redes apresentam a propriedade circulante, é de grande interesse conseguir resultados para redes grandes sem esta propriedade. O objetivo nesta seção será mostrar o cálculo do *MSD* no toro normal (TN) usando a solução do problema inverso do TH. Desta forma, mostra-se que os resultados conseguidos usando o problema inverso para uma rede circulante tem o potencial de ser usados sobre uma rede não circulante que apresenta semelhanças estruturais.

Embora a topologia do TN e o TH sejam semelhantes, o TN não é uma rede circulante (ver Figura 3.7). Portanto, o procedimento normal para conseguir super-difusão bem definida sobre o TN é realizar a busca dos valores de  $\alpha(t)$  usando a Equação 5.13. Em outras palavras, solucionar o problema inverso. No entanto, para evitar a complexidade computacional, apresentada por este cálculo, podemos usar as semelhanças estruturais compartilhadas entre o TH e

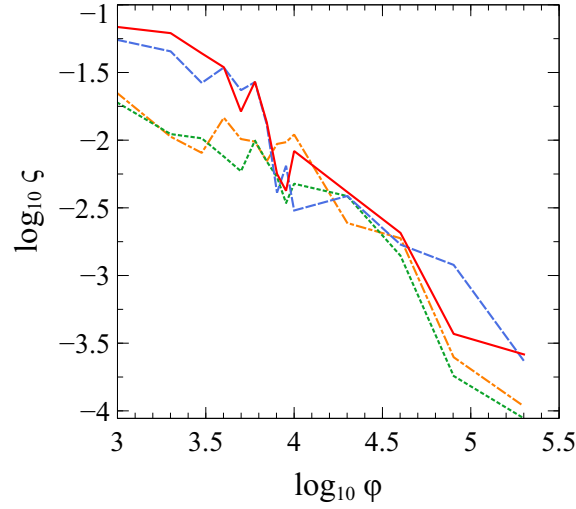
o TN. Assim, é possível usar a Equação 6.26 para conseguir o conjunto  $\alpha(t)$  sobre um TH com  $N$  ímpar e posteriormente aplicar esta série de valores sobre o TN através de simulações de caminhantes aleatórios. Desta forma, consegue-se mostrar que as pequenas diferenças estruturais das duas redes não são relevantes para mudar o comportamento super-difusivo. O motivo deste resultado no TN pode ser explicado como uma consequência da base topológica que compartilham as duas redes bidimensionais, ou seja, a rede quadrada (ver Capítulo 3). Portanto, conforme consideram-se redes com tamanhos maiores as diferenças estruturais entre o TH e o TN tendem a ser insignificantes para os caminhantes aleatórios e o processo de difusão.

Para observar os resultados conseguidos desde uma ótica comparativa apresenta-se a Figura 6.16. Neste gráfico, considera-se a relação entre o erro relativo  $\zeta$  e o número de caminhantes aleatórios  $\varphi$ . O cálculo de  $\zeta$  corresponde à comparação relativa entre o valor esperado de  $\gamma$  e o resultado estimando de  $\gamma$  através de caminhantes aleatórios em um TH ou em um TN, com  $N = 185 \times 185$  nos dois casos. Desta forma, se pretende mostrar que o conjunto de valores  $\alpha(t)$ , que pertencem à solução do problema inverso para o TH (rede circulante), conseguem um processo de super-difusão bem definido no TN (rede não circulante). Observe que na Figura 6.16 o erro relativo, em todos os casos, mostra uma tendência que decai para zero quando o número de caminhantes aleatórios se está incrementando. Além do mais, os resultados, tanto para o TH como para o TN, escalam em igual proporção, mostrando assim que suas diferenças topológicas não interferem no processo de difusão. Portanto, podemos afirmar que a solução do problema inverso para o TH consegue gerar um processo de super-difusão bem definido no TN sem importar a falta da propriedade circulante. Note também que, devido ao tamanho da rede foi necessário que  $\varphi \simeq 10^6$  para conseguir que  $\zeta \simeq 10^{-4}$ .

Por outra parte, para complementar os resultados observados na Figura 6.16, apresenta-se na tabela 6.1 a estimação do ajuste linear de  $\gamma$  quando o número de caminhantes aleatórios é  $\varphi = 10^6$ . Note que este resultado mostra o comportamento médio de  $\gamma$  que caracteriza o processo de difusão no TN e o valor do coeficiente de correlação  $R^2$  ajuda a dar uma ideia da precisão deste resultado. Assim, para este grande número de caminhantes aleatórios e este tamanho da rede observa-se um processo de super-difusão bem definido de forma semelhante que os resultados do TH mostrados nas Figuras 6.14 e 6.15.

Ajuste Linear do TN: $y = ax + b$			
$\gamma$	$a$	$b$	$R^2$
2.0	2.000	$1.084 \times 10^{-6}$	0.999
2.5	2.501	$-649.144 \times 10^{-4}$	0.999

**Tabela 6.1** Ajuste linear para a estimação de  $\gamma$  em um processo difusivo no TN com  $N = 185 \times 185$  através de  $10^6$  caminhantes aleatórios. Repare que, o resultado de  $\gamma$  corresponde ao comportamento médio do processo de difusão. Fonte: Autor.



**Figura 6.16** Relação entre o erro relativo  $\zeta$  e o número de caminhadas aleatórias  $\varphi$  usadas para estimar  $\gamma$  no TN e o TH com  $N = 185 \times 185$ . Resultados para o TH com  $\gamma = 2.5$  (linha vermelha) e  $\gamma = 2.0$  (linha pontilhada verde) e, resultados para TN com  $\gamma = 2.5$  (linha tracejada azul) e  $\gamma = 2.0$  (linha traço-ponto amarela). Fonte: Autor.

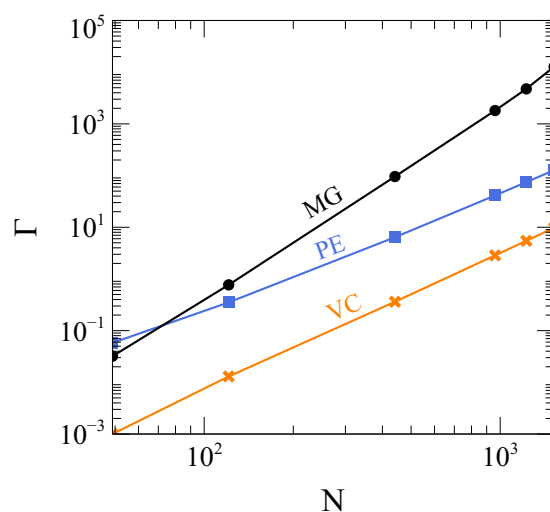
## 6.6 ANÁLISE DA REDUÇÃO DO TEMPO COMPUTACIONAL

Quando realiza-se o cálculo do  $MSD$  para o TH usando a Equação 6.22, observa-se que uma das principais consequências da propriedade circulante corresponde com a redução drástica do tempo computacional. No entanto, a dedução analítica apresentada na seção 6.3 não é a única forma de usar a propriedade circulante para estimar o  $MSD$ . Por exemplo, é possível realizar uma otimização do algoritmo computacional que realiza o cálculo do  $MSD$ , quando consideramos que a matriz circulante é representada através um único vetor que satisfaz a propriedade circulante (ver Capítulo 3). Desta forma, pode-se obter um algoritmo simplificado que substitui a multiplicação matricial, realizada pela matriz de transição, por multiplicações entre vetores. Em outras palavras, usando o vetor circulante consegue-se reduzir uma parte substancial das operações realizadas no algoritmo computacional do  $MSD$  e, como consequência, pode-se realizar cálculos que consideram redes grandes já que apresenta-se uma redução significativa da complexidade que permite um melhor desempenho do algoritmo. Nesta seção, trata-se de dar uma breve descrição dos algoritmos realizados para o cálculo do  $MSD$  e, apresentar uma comparação quantitativa de cada um destes algoritmos utilizados. Com o propósito de comparar cada algoritmo realizado, se estima o tempo computacional requerido para o cálculo do  $MSD$  até o estado de saturação de diferentes tamanhos de redes. Desta forma, se espera mostrar como escala a relação entre o tempo computacional e o tamanho da rede.

Para enfatizar a grande vantagem de usar uma rede bidimensional com a propriedade circulante como o TH, apresenta-se na Figura 6.17 a relação entre o tempo computacional  $\Gamma$  e o tamanho da rede  $N$ , para três diferentes algoritmos cuja execução considera um processo de super-difusão com  $\gamma = 1.6$ , dentro do intervalo  $0 \leq t \leq t_{sat}$ . O primeiro algoritmo está baseado na Equação 5.11 que corresponde com a forma geral usada pelo método de LRW, ou seja,

sem considerar a propriedade circulante do TH; o segundo algoritmo foi realizado com o uso da Equação 6.22, deduzida analiticamente na Seção 6.3 usando as propriedades espectrais que apresenta a matriz circulante do TH; o terceiro algoritmo foi fundamentado na ideia de otimização através do vetor circulante do TH, o que permitiu uma redução substancial do número de operações executadas pelo algoritmo. Vale a pena salientar que a execução dos três algoritmos foi realizada considerando um mesmo hardware computacional.

Na Figura 6.17 observa-se como o tempo computacional e o tamanho da rede apresentam uma relação que segue uma lei de potência, ou seja,  $\Gamma = ZN^\zeta$ , onde  $Z$  e  $\zeta$  são respectivamente, a constante de proporcionalidade e, o coeficiente que caracteriza o comportamento dos três algoritmos usados. Para comparar os resultados definimos para cada algoritmo  $\zeta_{MG}$ ,  $\zeta_{PE}$  e  $\zeta_{VC}$ , onde os subíndices  $MG$ ,  $PE$  e  $VC$  fazem referência a cada um dos algoritmos da seguinte forma: método geral, propriedade espectral e vetor circulante. Para determinar os diferentes valores de  $\zeta$ , em cada caso foi realizado um ajuste linear dos resultados obtidos por cada algoritmo, indicando que o método geral apresenta o maior valor  $\zeta_{MG} = 3.4$ . Por outra parte, os outros dois algoritmos baseados na propriedade circulante do TH são caracterizados por valores significativamente menores do expoente,  $\zeta_{PE} = 2.1$  e  $\zeta_{VC} = 2.4$ . Portanto, os diferentes valores obtidos do coeficiente  $\zeta$  confirmam a importância de considerar a propriedade circulante para estimar o  $MSD$  e caracterizar o processo de difusão em redes simples.



**Figura 6.17** Estimação do tempo computacional como uma função do tamanho de um TH. A linha preta representa o resultado usando a implementação do método geral (MG) através da Equação 5.11, a linha azul corresponde ao algoritmo realizado considerando a propriedade espectral (PE) da rede circulante do TH, e a linha amarela é o algoritmo baseado na no vetor circulante (VC). Note que, todas as estimações realizadas mostram uma lei de potência com expoentes  $\zeta_{MG} = 3.4$ ,  $\zeta_{PE} = 2.1$  e  $\zeta_{VC} = 2.4$ . Fonte: Autor.

Por outra parte, os coeficientes que correspondem com os dois algoritmos baseados na propriedade circulante do TH exibem a relação  $\zeta_{VC} > \zeta_{PE}$ . Assim, a linha amarela e linha azul, que correspondem com cada um dos algoritmos, se interceptam para um determinado tamanho da rede, que definimos como:  $N = N_x$ . Isto mostra que existe um tamanho de rede  $N_x$  para o qual

a execução dos dois algoritmos precisam o mesmo tempo computacional. Desta forma, usando os resultados do ajuste linear podemos determinar que,

$$N_x = \left( \frac{Z_{PE}}{Z_{VC}} \right)^{\frac{1}{\xi_{VC} - \xi_{PE}}}, \quad (6.27)$$

onde  $Z_{PE}$  e  $Z_{VC}$  são respectivamente, as constantes de proporcionalidade de cada algoritmo. Utilizando os dados apresentados na Figura 6.17 e a Equação 6.27 determinamos que o tamanho da rede para o qual os dois algoritmos exibem igual tempo computacional é da ordem de  $10^6$ . Por outra parte, cálculos conseguidos considerando outros valores diferentes de  $\gamma$  no TH mostram resultados semelhantes aos apresentados na Figura 6.17. Isto mostra que a relação do tempo computacional com o tamanho da rede é independente do valor de  $\gamma$ .

## 6.7 ANÁLISE ESPECTRAL DA DIFUSÃO COM CONEXÕES DE LONGA DISTÂNCIA

No capítulo 4 foi discutido a caracterização da difusão no modelo Multiplex usando as propriedades espectrais da matriz supra-Laplaciana (ver Equação 4.41). Não obstante, este formalismo foi deduzido considerando um enfoque clássico que considera interações entre vértices adjacentes. Como consequência, no Capítulo 5 se apresentou um novo formalismo que caracteriza um processo de difusão em redes Multiplex com interações de longa distância usando a análise espectral da matriz supra-Laplaciana. Este método, baseado nas transformadas de Mellin(TM) e Laplace(TL), permite considerar diferentes interações que conseguem dinâmicas difusivas onde uma ou várias redes que formam o Multiplex apresentam interações entre vértices adjacentes e não adjacentes. Portanto, utilizando o parâmetro de ajuste  $\alpha$  ou  $\beta$  (ver Equação 5.3) e, a teoria espectral podemos determinar o tempo de relaxamento de um processo difusivo na rede Multiplex formada por redes simples. Por outra parte, de igual forma que no método de LRW podemos recobrar um processo de difusão com interações entre vértices adjacentes quando o parâmetro de ajuste  $\alpha$  na TM ou  $\beta$  na TL tendem ao infinito e, quando os parâmetros de ajuste são zero temos um Multiplex no qual uma ou várias de suas camadas exibem a topologia de uma rede completa.

Por outra parte, dentro do contexto da análise espectral para a rede Multiplex, no Capítulo 4 se definiu a grandeza  $\eta$  como a relação de conectividade da rede Multiplex e as redes que o compõem (ver Equação 4.43). Desta forma, neste contexto há super-difusão quando  $\eta > 1$ . Ou seja, quando o tempo de relaxação do Multiplex é menor em comparação a suas camadas<sup>5</sup>. Nesta seção através do cálculo do segundo menor autovalor da matriz supra-Laplaciana pretende-se mostrar as implicações das conexões de longa distância sobre um processo de difusão em uma rede Multiplex. Neste cenário a super-difusão pode ser influenciada como uma consequência das distintas configurações topológicas conseguidas usando o parâmetro de ajuste  $\alpha$  na TM ou  $\beta$  na TL.

Para comparar as implicações das conexões de longa distância na análise espectral de um processo difusivo, vamos a considerar nesta seção um modelo Multiplex de duas camadas

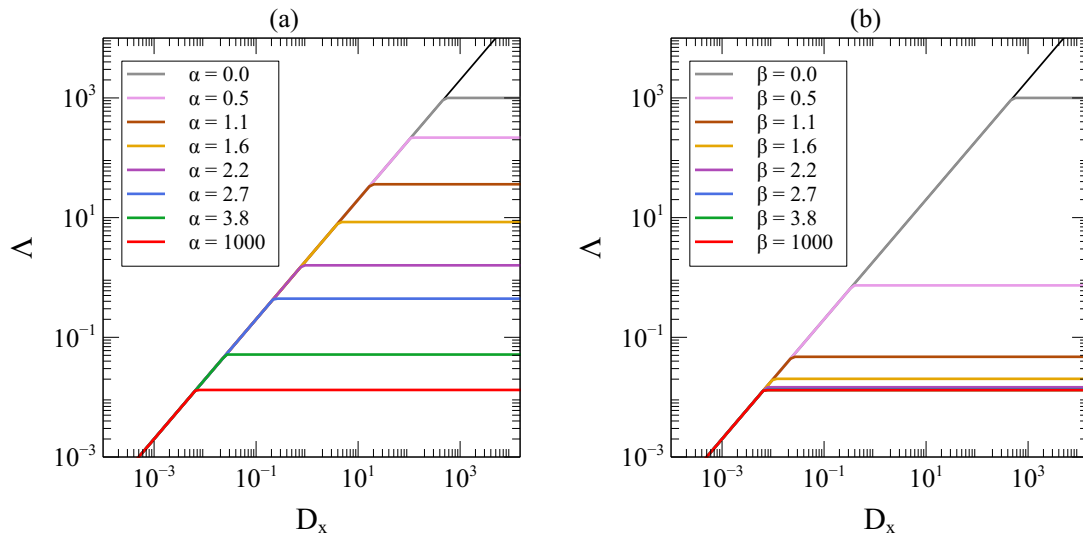
<sup>5</sup>Note que neste contexto não está definida a sub-difusão [58,91].

construído por redes simples, como por exemplo, os modelos Erdős-Rényi (rede aleatória), Watts-Strogatz (rede mundo pequeno) e Barabási-Albert (rede livre de escala). Usando a Equação 5.35 podemos deduzir a matriz supra-Laplaciana por blocos para uma rede Multiplex de duas camadas

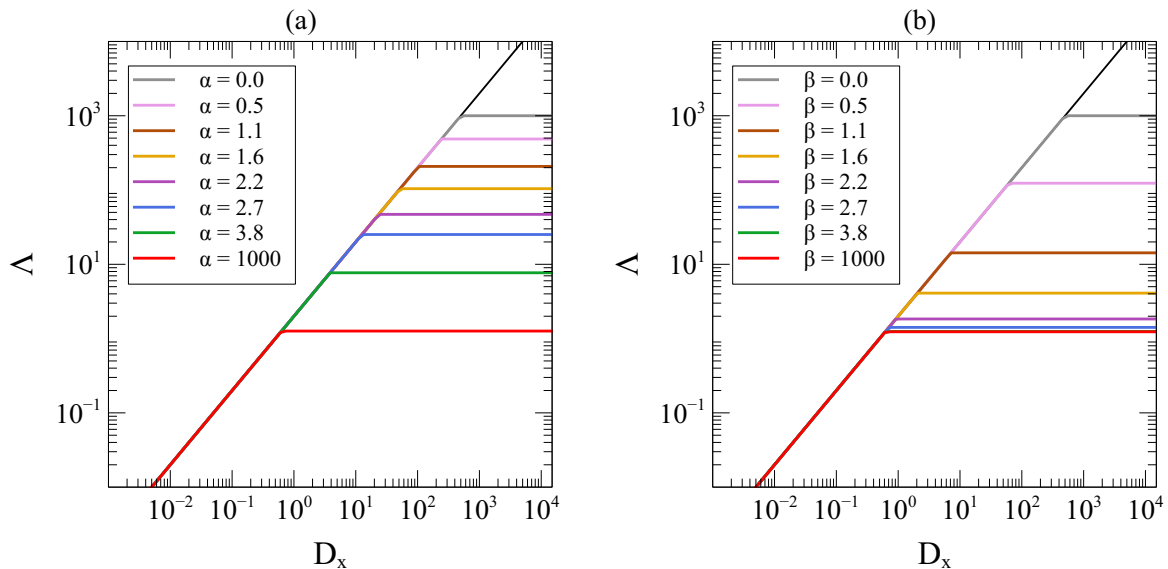
$$\mathcal{L} = \begin{pmatrix} D^1 \tilde{\mathcal{L}}_d^1 & 0 \\ 0 & D^2 \tilde{\mathcal{L}}_d^2 \end{pmatrix} + D_x \begin{pmatrix} \mathbf{I} & -\mathbf{I} \\ -\mathbf{I} & \mathbf{I} \end{pmatrix}, \quad (6.28)$$

onde  $D^1$ ,  $D^2$  e  $D_x$  são respectivamente, os coeficientes de difusão intra-camada e inter-camada. Observe que na Equação 6.28 as matrizes quadradas  $\tilde{\mathcal{L}}_d^1$  e  $\tilde{\mathcal{L}}_d^2$  correspondem com a TM ou TL da matriz Laplaciana das duas redes que compõem o Multiplex (ver Equação 5.32). Para ressaltar as implicações das conexões de longa distância sobre a dinâmica difusiva e sem perda de rigor matemático, consideramos  $D^1 = D^2 = 1$ . Desta forma, a matriz supra-Laplaciana é uma função do parâmetro de ajuste  $\alpha$  ou  $\beta$  e, do coeficiente de difusão inter-camada  $D_x$ . Por outra parte, na Figura 4.2 mostrou-se a relação entre o segundo autovalor de um Multiplex de duas camadas e a constante de difusão inter-camadas  $D_x$ . Desta forma, observou-se que  $\Lambda$  exibe um regime linear quando  $D_x < 1$  (ou seja,  $\Lambda = 2D_x$  se  $D_x < 1$ ) e, quando  $D_x \gg 1$  o segundo autovalor do Multiplex converge abruptamente ao estado de saturação o qual é igual ao segundo autovalor de uma rede formada pela superposição das duas redes que compõem o Multiplex [58, 91], ou seja,  $\lambda_2$  de  $(L^1 + L^2) / 2$ .

Na Figura 6.18 apresenta-se o resultado espectral das conexões de longa distância sobre uma rede Multiplex formada por duas redes idênticas Watts-Strogatz. Nos resultados da Figura 6.18 foi aplicada a TM (painel (a)) e a TL (painel (b)) sobre as duas redes que compõem o Multiplex. Desta forma, cada linha de um cor específico na Figura 6.18 indica o cálculo do segundo autovalor da matriz supra-Laplaciana do Multiplex considerando um determinado valor  $\alpha$  (painel (a)) ou  $\beta$  (painel (b)). A depender do valor de  $\alpha$  ou  $\beta$  as interações de longa distância alteram a topologia do Multiplex. Portanto, na Figura 6.18 o cálculo de  $\Lambda$  corresponde a redes Multiplex que vão desde conexões a primeiros vizinhos (linha vermelha) até redes completas (linha cinza). Note que no caso de uma rede Multiplex formada por duas redes idênticas o estado de saturação converge ao valor da conectividade de suas camadas, ou seja,  $\Lambda_{sat} = \lambda_1 = \lambda_2$ . Por outra parte, quando os valores de  $\alpha$  no painel (a) são iguais aos de  $\beta$  no painel (b) os resultados espectrais não são idênticos. Isto é devido à diferença matemática que apresentam a TM e a TL já que a primeira apresenta um decaimento de potências e a segunda um decaimento exponencial (ver Equação 5.3). Observe que quando  $\alpha$  ou  $\beta$  tendem a zero na Figura 6.18 o regime linear é prolongado para valores de  $D_x$  maiores a um. Portanto, o tempo de relaxação definido como  $\tau \sim 1/\Lambda$  é menor quando há um incremento do número de conexões de longa distância na rede Multiplex. Repare também que a transição ao estado de saturação não é influenciada pela aplicação da TM ou a TL. Portanto, na Figura 6.18 a transição ao estado de saturação ocorre de forma abrupta. Os resultados apresentados sugerem que a aplicação homogênea de conexões de longa distância conseguem prolongar o regime linear e, como consequência obter um processo difusivo com um menor tempo de relaxação.



**Figura 6.18** Relação entre  $\Lambda$  e  $D_x$  para uma rede Multiplex de 2000 nós formada por duas camadas idênticas de redes Watts-Strogatz com conexões de longa distância definidas através dos parâmetros de ajuste  $\alpha$  e  $\beta$ . (a) Resultados da aplicação da TM considerando diferentes valores de  $\alpha$  sobre as duas redes que formam o Multiplex. (b) Resultados da aplicação da TL considerando diferentes valores de  $\beta$  sobre as duas redes que formam o Multiplex. A linha sólida preta é uma guia para identificar o regime linear definido por  $\Lambda = 2D_x$ . Fonte: Autor.



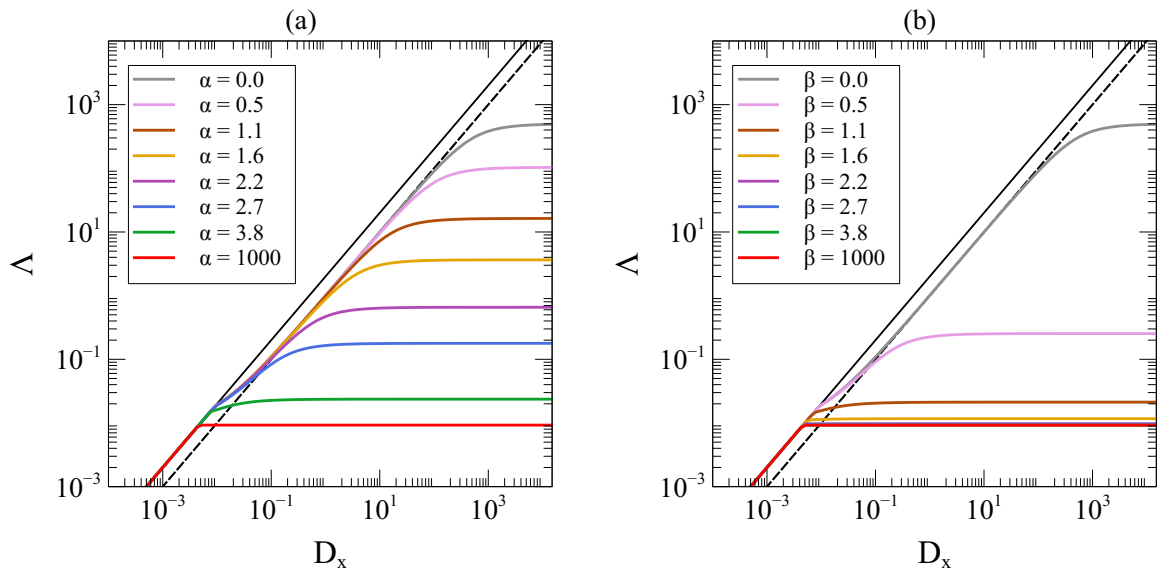
**Figura 6.19** Relação entre  $\Lambda$  e  $D_x$  para uma rede Multiplex de 2000 nós formada por duas camadas idênticas de redes Erdős-Rényi com conexões de longa distância. (a) Resultados da aplicação da TM sobre as duas redes que formam o Multiplex. (b) Resultados da aplicação da TL sobre as duas redes que formam o Multiplex. A linha sólida preta é uma guia para identificar o regime linear definido por  $\Lambda = 2D_x$ . Fonte: Autor.



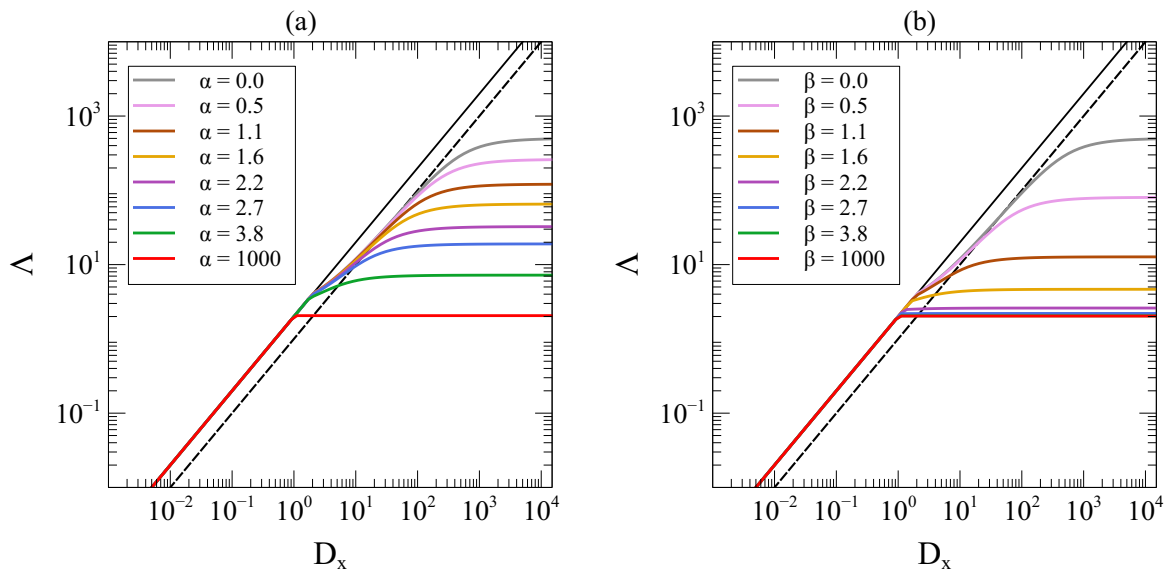
Para indagar os resultados exibidos na Figura 6.18 e sua independência da topologia da rede Multiplex, observe a Figura 6.19. Neste caso considera-se um Multiplex formado por duas redes idênticas Erdős-Rényi. Note que quando os parâmetros de ajuste  $\alpha$  e  $\beta$  tendem a zero nas Figuras 6.18 e 6.19 observa-se uma maior semelhança topológica. Portanto, os resultados espectrais obtidos para  $\alpha = \beta = 0$  são iguais nas duas Figuras 6.18 e 6.19. De forma geral quando comparamos os resultados apresentados nas Figuras 6.18 e 6.19 observamos que há semelhanças no comportamento espectral com conexões de longa distância. Isto sugere que a dinâmica espectral exibida é independente da estrutura inicial do Multiplex e, os resultados dependem da aplicação da TM ou a TL.

Usando as redes Multiplex das Figuras 6.18 e 6.19 considera-se nas Figuras 6.20 e 6.21 o caso onde há conexões de longa distância sobre uma das camadas que compõem o Multiplex. Ou seja, neste caso a rede Multiplex apresentará uma assimetria topológica que consegue alterar a diferença de conectividade entre as duas redes que compõem a rede Multiplex. Portanto, quando  $\alpha = \beta = 0$  as duas camadas do Multiplex, que inicialmente são idênticas, exibiram uma grande diferença topológica e espectral que consegue uma assimetria na dinâmica de difusão do Multiplex. Repare que os resultados apresentados nas Figuras 6.20 e 6.21 sugerem que as diferenças topológicas das redes Multiplex não influenciam o comportamento geral exibido por  $\Lambda$  quando há conexões de longa distância. Ou seja, todos os resultados mostram que as consequências da TM (ou a TL) na dinâmica difusiva são independentes da topologia inicial usada pela rede Multiplex de duas camadas idênticas.

Por outra parte, observe que nas Figuras 6.20 e 6.21 a aplicação das conexões de longa distância conseguem alterar significativamente o regime linear. Assim, o estado linear  $\Lambda = 2D_x$  experimenta, antes de atingir o estado de saturação, uma prolongação e, uma suave transição a outro regime linear onde  $\Lambda = D_x$ . Note que devido a este deslocamento horizontal, apresentado pelo regime linear, é necessário usar um maior valor da constante difusão inter-camadas  $D_x$  para conseguir obter resultados semelhantes aos mostrados pelas Figuras 6.18 e 6.19. Por outro lado, observe que quando  $\alpha$  ou  $\beta$  tendem a zero a transição ao estado de saturação ocorre de uma forma suave. Ou seja, quanto maior é a diferença topológica entre as duas redes que compõem o Multiplex mais suave é a transição ao estado de saturação. Este resultado contrasta com a transição abrupta observada nas Figuras 6.18 e 6.19, onde a conectividade entre as duas redes do Multiplex não apresentam diferença. Repare que os resultados observados nas Figuras 6.20 e 6.21 são uma consequência da grande diferença de conectividade entre as duas redes do Multiplex. Portanto, a camada que apresenta conexões de longa distância atinge mais rápido seu próprio estado de saturação enquanto a outra camada precisara de um tempo maior para atingir este estado e terminar o processo difusivo no Multiplex.



**Figura 6.20** Relação entre  $\Lambda$  e  $D_x$  para uma rede Multiplex de 2000 nós formada por duas redes idênticas Watts-Strogatz com conexões de longa distância sobre uma das camadas. (a) Gráfico espectral que exhibe a aplicação da TM sobre uma das redes que formam o Multiplex. (b) Gráfico espectral da aplicação da TL sobre uma das redes que formam o Multiplex. A linha preta sólida e tracejada são uma guia para ressaltar os regimes lineares  $\Lambda = 2D_x$  e  $\Lambda = D_x$ . Fonte: Autor.

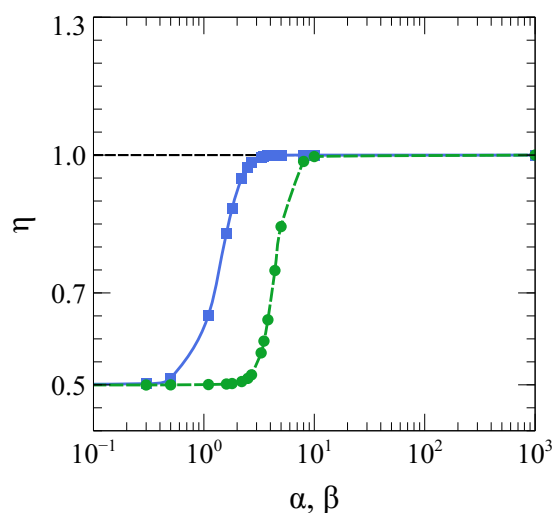


**Figura 6.21** Relação entre  $\Lambda$  e  $D_x$  para uma rede Multiplex de 2000 nós formada por duas redes idênticas Erdős-Rényi com conexões de longa distância sobre uma das camadas. (a) Gráfico espectral que exhibe a aplicação da TM sobre uma das redes que formam o Multiplex. (b) Gráfico espectral da aplicação da TL sobre uma das redes que formam o Multiplex. A linha preta sólida e tracejada são uma guia para ressaltar os regimes lineares  $\Lambda = 2D_x$  e  $\Lambda = D_x$ . Fonte: Autor.

Para complementar os resultados apresentados sobre a dinâmica espectral de conexões de longa distância sobre redes Multiplex com duas camadas idênticas, vamos a considerar a relação entre a conectividade do Multiplex e as redes que o compõem. Desta forma, usando a Equação 4.43 e considerando o estado de saturação temos:

$$\eta = \frac{\Lambda_{sat}}{\max\{\lambda^1, \lambda^2\}}. \quad (6.29)$$

De forma geral, quando um processo de difusão em uma rede Multiplex de duas camadas se acerca ao estado de saturação o valor de  $\Lambda_{sat}$  converge ao segundo autovalor de uma rede formada pela superposição das redes que compõem o Multiplex. No entanto, quando consideramos uma rede Multiplex de duas camadas idênticas temos que  $\Lambda_{sat} = \lambda^1 = \lambda^2$ . Portanto,  $\eta = 1$  e este processo não exibe super-difusão. Note que este resultado continua válido se consideramos conexões de longa distância sobre as duas redes idênticas que compõem a rede Multiplex. Portanto, quando aplicamos de forma homogênea a TM ou a TL sobre uma rede Multiplex de duas camadas idênticas a relação de conectividade  $\eta = 1$  se conserva independentemente do valor da constante de difusão inter-camadas.



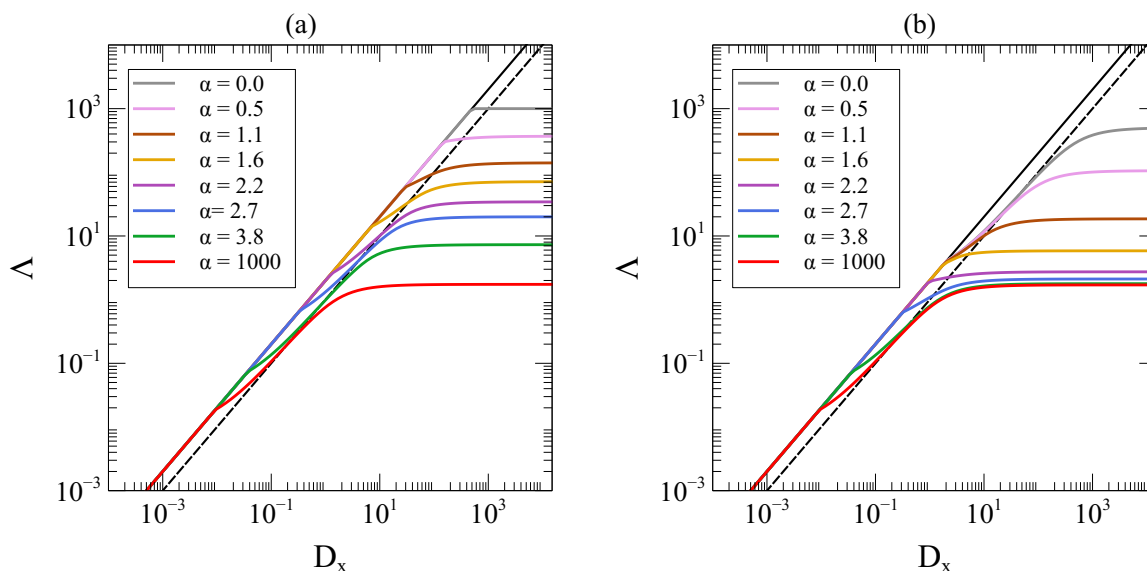
**Figura 6.22** Relação de conectividade considerando a Equação 6.29 para uma rede Multiplex com duas camadas idênticas Watts-Strogatz, quando aplicamos conexões de longa distância sobre uma das redes do Multiplex. A linha sólida azul com quadrados exibe a relação de conectividade  $\eta$  e o parâmetro de ajuste  $\beta$  que corresponde à aplicação da TL. A linha verde tracejada com círculos exibe a relação de conectividade  $\eta$  e o parâmetro de ajuste  $\alpha$  que corresponde à aplicação da TM. Note que a pequena diferença entre estas relações de conectividade são uma consequência das diferenças matemáticas entre a TM e a TL. Fonte: Autor.

Quando consideramos a aplicação de conexões de longa distância sobre uma das redes que compõem um Multiplex de duas camadas idênticas, como nas Figuras 6.20 e 6.21, temos que  $\Lambda_{sat} \neq \lambda^1 \neq \lambda^2$ . No entanto, se consideramos o caso de máxima conectividade quando

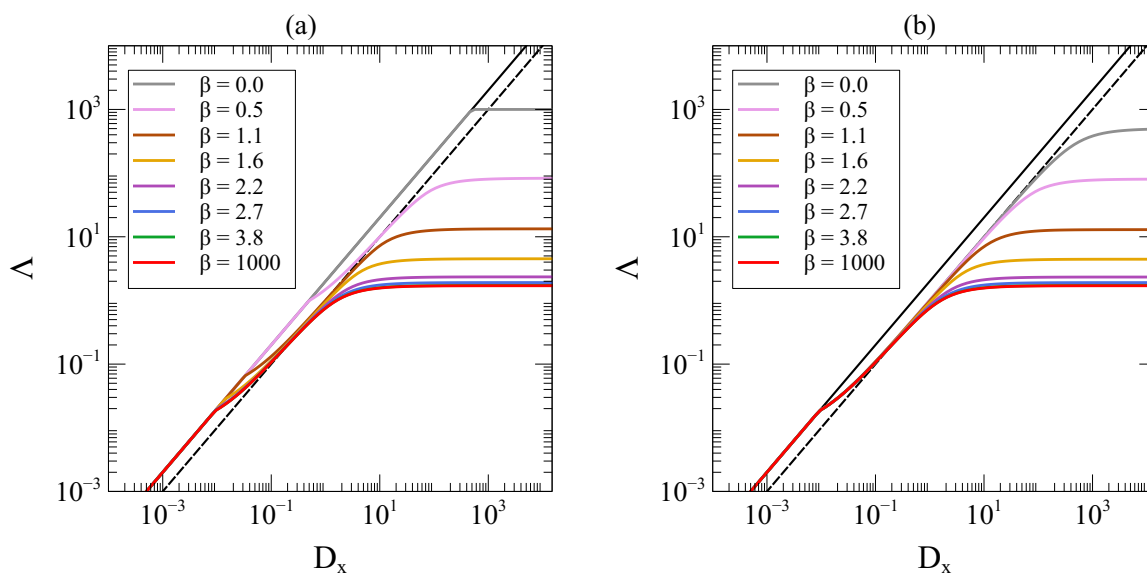
$\alpha$  ou  $\beta$  são iguais a zero observamos que uma das camadas terá uma conectividade significativamente maior, portanto,  $(L^1 + L^2)/2 \simeq \max(L^1, L^2)/2$  e  $\Lambda_{sat}$  converge aproximadamente ao segundo autovalor da rede com a maior conectividade dividido por dois. Ou seja,  $\Lambda_{sat} \simeq (\max\{\lambda^1, \lambda^2\})/2$ . Assim pode-se obter um valor aproximado da relação de conectividade  $\eta$ . Portanto, para os resultados apresentados nas Figuras 6.20 e 6.21 pode-se determinar que a relação de conectividade, definida na Equação 6.29, está limitada assim  $\frac{1}{2} \leq \eta < 1$ . Este resultado pode ser observado na Figura 6.22 que exhibe a relação entre  $\eta$  e os parâmetros de ajuste  $\alpha$  e  $\beta$  quando considerando conexões de longa distância sobre uma rede Multiplex de duas camadas idênticas Watts-Strogatz. Repare que as duas curvas observadas na Figura 6.22 mostram um comportamento semelhante e sua pequena diferença é devido à forma matemática que apresentam a TM e a TL (ver Equação 5.3).

Nas Figuras 6.23 e 6.24 apresentam-se os resultados espectrais da aplicação de conexões de longa distância sobre um Multiplex formado por duas redes diferentes. Ou seja, inicialmente as redes que compõem o Multiplex apresentam uma diferença de conectividade  $\lambda^1 \neq \lambda^2$ . No painel (a) das duas figuras mostra-se o comportamento de  $\Lambda$  quando considera-se a aplicação da TM ou a TL sobre as duas redes que compõem o Multiplex. Observe que a linha vermelha, que representa o caso onde não há conexões de longa distância, exhibe um comportamento semelhante ao mostrado na Figura 6.21 na qual se considero a aplicação da TM e a TL sobre uma das redes de um Multiplex formado por duas redes idênticas. Portanto, isto sugere que uma diferença de conectividade significativa entre as duas redes que compõem o Multiplex consegue um deslocamento horizontal sobre a relação linear entre  $\Lambda$  e  $D_x$ . Ou seja, o comportamento espectral de  $\Lambda$  mostra uma suave transição do regime linear  $\Lambda = 2D_x$  para  $\Lambda = D_x$  quando  $|\lambda^1 - \lambda^2| > 0$ . Note que todo isto é observado antes de se apresentar o estado de saturação no qual  $\Lambda$  é constante. Por outra parte, quando  $\alpha$  ou  $\beta$  tendem a zero o número de conexões de longa distância está crescendo e, no painel (a) das Figuras 6.23 e 6.24, observamos uma perda do regime linear  $\Lambda = D_x$  junto com uma transição ao estado de saturação cada vez mais abrupta. Este resultado é devido a que as conexões de longa distância decrescem a diferença de conectividade entre as duas redes do Multiplex. Portanto, quando  $\alpha = 0$  ou  $\beta = 0$  as duas redes que formam o Multiplex são redes completas e idênticas com igual conectividade. Em outras palavras,  $\lambda^1 = \lambda^2$  quando  $\alpha$  ou  $\beta$  são igual a zero.

Por outro lado, no painel (b) das Figuras 6.23 e 6.24 se considerou a aplicação de conexões de longa distância sobre a rede com a menor conectividade que pertence ao Multiplex. Portanto, neste caso a dinâmica difusiva no Multiplex sem conexões de longa distância é mais rápida na rede com a maior conectividade. Devido à aplicação da TM (ou a TL) sobre uma das redes do Multiplex apresenta-se um incremento da conectividade a medida que o parâmetro  $\alpha$  tende a zero. Isto consegue que a rede com a menor conectividade aumente até igualar e passar a conectividade da rede sem conexões de longa distância. Os resultados neste caso mostram como consequência que quando há uma diferença de conectividade  $\Lambda$  exhibe o regime linear  $\Lambda = D_x$  e, quando  $\lambda^1 \simeq \lambda^2$  temos unicamente uma transição abrupta ao estado de saturação. Note que este resultado é independente do tipo de conexões de longa distância aplicadas e das redes usadas para construir o Multiplex.

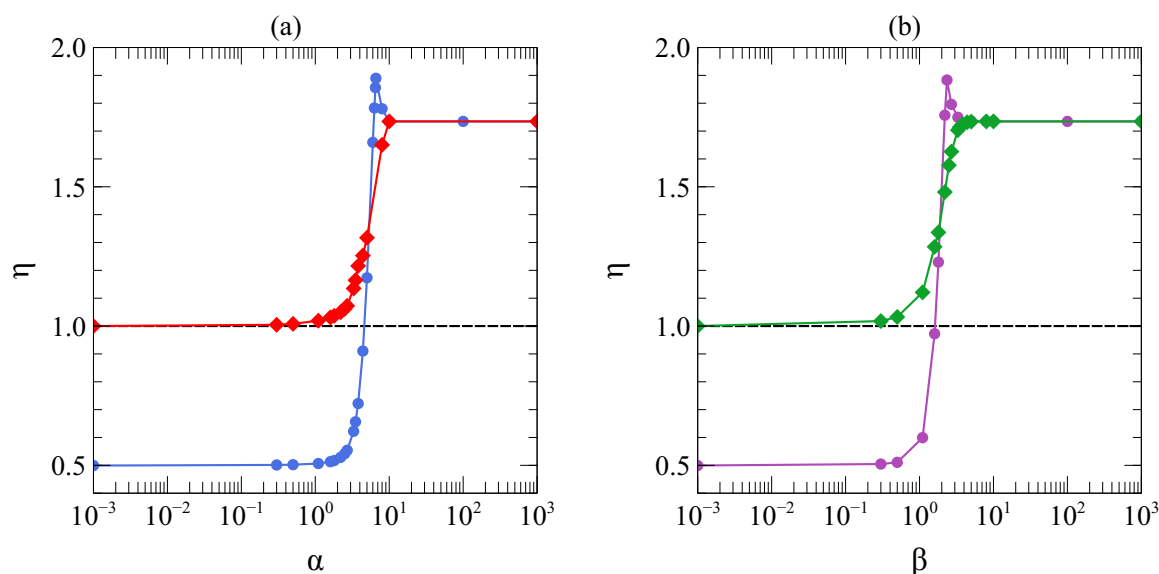


**Figura 6.23** Relação entre  $\Lambda$  e  $D_x$  para uma rede Multiplex de 2000 nós formada pelas redes Barabási-Albert e Watts-Strogatz com a aplicação da TM. (a) Gráfico espectral que exibe a aplicação da TM sobre as duas redes que compõem o Multiplex. (b) Gráfico espectral do Multiplex com a aplicação da TM sobre a rede com a menor conectividade. A linha preta sólida e tracejada são uma guia para ressaltar os regimes lineares  $\Lambda = 2D_x$  e  $\Lambda = D_x$ . Fonte:Autor.



**Figura 6.24** Relação entre  $\Lambda$  e  $D_x$  para uma rede Multiplex de 2000 nós formada pelas redes Erdős-Rényi e Watts-Strogatz com a aplicação da TL. (a) Gráfico espectral que exibe a aplicação da TL sobre as duas redes que compõem o Multiplex. (b) Gráfico espectral do Multiplex com a aplicação da TL sobre a rede com a menor conectividade. A linha preta sólida e tracejada são uma guia para ressaltar os regimes lineares  $\Lambda = 2D_x$  e  $\Lambda = D_x$ . Fonte:Autor.

Usando a Equação 6.29 mostra-se na Figura 6.25 a relação de conectividade entre o Multiplex e suas camadas considerando os resultados apresentados nas Figuras 6.23 e 6.24. Note que quando não há conexões de longa distância o valor de  $\eta$  é maior que um. Isto mostra que inicialmente, sem conexões de longa distância, há super-difusão nas redes Multiplex usadas. Observe também que quando aplicamos conexões de longa distância, sobre as duas redes do Multiplex, consegue-se que o valor de  $\eta$  apresente uma tendência decrescente que converge a um. Isto mostra que a aplicação homogênea da TM ou a TL sobre a rede Multiplex não consegue incrementar a relação de conectividade definida por  $\eta$ . Por outra parte, quando aplicamos a TM ou a TL sobre a rede com a menor conectividade (ver painel (b) das Figuras 6.23 e 6.24) observamos que há um incremento no valor de  $\eta$ . Este pico corresponde ao caso onde a conectividade das duas redes apresentam valores semelhantes, ou seja,  $\lambda^1 \simeq \lambda^2$ . Portanto, este resultado sugere que a difusão no Multiplex é mais rápida quando a diferença de conectividade das duas redes é mínima.



**Figura 6.25** Relação de conectividade para as redes Multiplex definidas nas Figuras 6.23 e 6.24 em função do parâmetro de ajuste  $\alpha$  e  $\beta$ . Painel (a) relação entre  $\eta$  e o parâmetro de ajuste  $\alpha$  da TL. A linha vermelha e azul correspondem aos casos onde aplicamos a TM sobre uma camada e sobre as duas camadas que compõem o Multiplex. (b) relação entre  $\eta$  e o parâmetro de ajuste  $\beta$  da TL. A linha verde e roxo correspondem aos casos onde aplicamos a TL sobre uma camada e sobre as duas camadas que compõem o Multiplex. Repare que a linha azul e vermelha representam respectivamente, os casos onde são aplicadas conexões de longa distância sobre uma das camadas e sobre as duas camadas do Multiplex. A linhas pretas tracejadas nos dois gráficos ajuda a identificar quando há super-difusão. Repare que a máxima super difusão nos dois painéis corresponde com  $\lambda^1 \simeq \lambda^2$ . Fonte: Autor.

# Capítulo 7

## Conclusões

Durante o transcurso desta tese mostrou-se um estudo de difusão em redes considerando interações entre vértices que apresentam uma determinada distância de separação. Este estudo foi abordado de duas perspectivas diferentes, as quais permitem caracterizar a difusão e mostrar que é possível influenciar o comportamento difusivo normal de uma rede simples. Inicialmente através do método clássico de caminhantes aleatórios se investigou as consequências apresentadas por um processo de difusão quando o número de vizinhos dos vértices de uma rede é incrementado de forma regular. Isto permitiu evidenciar, durante a dinâmica difusiva de uma RCC, o surgimento de um regime transiente de sub-difusão nos passos de tempo iniciais (ver Figura 6.4). Desta forma, mostrou-se uma lei de potências entre o valor mínimo atingido de sub-difusão e a densidade de arestas da rede (ver Figura 6.5). No entanto, cálculos realizados mostravam que realizar alterações nas interações dos vértices de uma rede simples, tanto de forma arbitrária como específica, não necessariamente conseguem desencadear o surgimento de transientes que alterem a dinâmica difusiva. Portanto, para conseguir um processo claramente caracterizado por uma difusão anômala (ou seja, sub-difusão ou super-difusão) é necessário uma alteração mais complexa das interações entre os vértices da rede. Isto pode ser conseguido como resultado da conceituação e solução do problema inverso para a RCC, através do qual foi possível conseguir a série de valores do expoente  $\alpha(t)$  que controla a probabilidade dos caminhantes aleatórios para realizar saltos de longa distância. Usando o método de LRW e a solução do problema inverso se conseguiu observar um processo de super-difusão dentro do intervalo  $0 \leq t < t_x$ , ou seja, um processo de super-difusão bem definida até o estado de saturação. Desta forma, mostrou-se que esta dedução analítica, dada pela solução do problema inverso, consegue gerar condições suficientes para que o método de LRW consiga a obtenção de um processo de super-difusão em qualquer tipo de rede simples.

Embora o método de LRW e o problema inverso possam ser aplicados sobre qualquer tipo de rede simples, existe uma limitação computacional que está relacionada com a forma algorítmica dos métodos. Esta complexidade computacional mostrou que é inconveniente conseguir resultados quando usamos redes muito grandes. No caso dos equipamentos utilizados durante este trabalho, este limite superior é encontrado para redes com  $N > 1500$ . A razão para esta limitação é o fato que o tempo computacional requerido mostrou um crescimento em lei de

potência com o tamanho da rede, onde o expoente para um TH foi da ordem de 3.4 (ver Figura 6.17). No entanto, esta limitação do tamanho da rede não apresenta um problema quando consideram-se redes unidimensionais como a RCC, já que o resultado da dinâmica difusiva consegue ser caracterizado de forma satisfatória para  $N \leq 1500$ . Por outro lado, estudos preliminares de redes bidimensionais como o TN mostravam que era necessário incrementar o tamanho da rede para conseguir observar e caracterizar a dinâmica difusiva. Em vista deste cenário foi necessário desenvolver matematicamente e, otimizar computacionalmente a metodologia usada neste trabalho. Desta forma, o uso de redes bidimensionais, como o TH, cuja matriz de adjacência apresenta a propriedade circulante ajudaram a caracterizar a dinâmica difusiva. Para efeito de comparação dos procedimentos computacionais usados e complementar os resultados conseguidos, se realizou também uma estimação do tempo computacional para diferentes tamanhos de redes. Isto permitiu observar que cada um dos métodos computacionais relacionados com a propriedade circulante do TH apresentam uma redução drástica do tempo computacional em comparação com o algoritmo baseado na Equação 6.2 (ver Figura 6.17).

Neste trabalho uma contribuição importante foi a dedução de uma expressão analítica para o cálculo do  $MSD$  em redes bidimensionais (ver Equação 6.22), baseada nas propriedades espectrais da matriz circulante do TH. Os resultados conseguidos através desta nova equação permitiram aplicar os métodos de LRW e do problema inverso em redes da ordem de  $10^4$ . Uma consequência vista quando usamos redes com tamanhos maiores foi observar processos de difusão que apresentavam um maior número de passos de tempo. Isto permitiu, através da derivada numérica, observar com maior precisão o comportamento do parâmetro  $\gamma$  que caracteriza o processo difusivo. Devido à base estrutural topológica que compartilham o TH e TN mostrou-se, através de simulações de caminhantes aleatórios, que a solução do problema inverso para o TH conseguia com grande exatidão gerar um processo de super-difusão bem definida no TN. Isto foi verificado com grande precisão mediante a estimação do erro relativo que considerou diferentes tipos de processos super-difusivos (ver Figura 6.16).

Por outra parte, fazendo uso da transformada de Mellin e Laplace se adaptou um novo formalismo para realizar um análise espectral da matriz supra-Laplaciana no modelo Multiplex. Com este formalismo se conseguiu caracterizar um processo de difusão considerando diferentes valores do parâmetro de ajuste  $\alpha$  na TM ou  $\beta$  na TL. Em outras palavras, se caracterizou um processo difusivo sobre uma rede Multiplex de duas camadas com conexões de longa distância. Os resultados conseguidos destacam a importância da diferença de conectividade das redes que compõem o Multiplex. Desta forma, quando há uma grande diferença de conectividade o regime linear  $\Lambda = 2D_x$ , que caracteriza este processo difusivo, exhibe um deslocamento horizontal a outro regime linear onde  $\Lambda = D_x$ . Se observou que a transição ao estado de saturação é influenciada também por esta diferença de conectividade já que os resultados de redes Multiplex formadas por redes idênticas exibiam uma transição abrupta ao estado de saturação. Por outra parte, usando a grandeza  $\eta$  que define a relação de conectividade entre as redes do Multiplex e suas camadas, mostrou-se as consequências sobre a dinâmica difusiva das conexões de longa distância. Isto permitiu caracterizar a super-difusão no contexto espectral da rede Multiplex. Assim, se observou que as conexões de longa distância sobre a rede Multiplex conseguiam valores máximos de  $\eta$  (ou seja, super-difusão máxima) e, em outros casos uma transição de um estado de super-difusão com  $\eta > 1$  para outro onde  $\eta < 1$ . Tudo isto mostra a relação que há



entre o tempo de relaxamento da rede Multiplex e a topologia das redes que o compõem.

Futuros trabalhos baseados nesta tese podem ser focados ao surgimento de novos comportamentos que caracterizam processos difusivos em redes que apresentam uma maior complexidade. Por outro lado, trabalhos que investiguem as condições necessárias para controlar a transmissão de informação em uma rede podem precisar em seus estudos preliminares dos resultados apresentados nesta tese.



# Referências Bibliográficas

- [1] EULER, L. Solutio problematis ad geometriam situs pertinentis. *Commentarii academiae scientiarum Petropolitanae*, p. 128–140, 1741.
- [2] BIGGS, N.; LLOYD, E. K.; WILSON, R. J. *Graph Theory, 1736-1936*. [S.l.]: Oxford University Press, 1986.
- [3] SACHS, H.; STIEBITZ, M.; WILSON, R. An historical note: Euler’s königsberg letters. *Journal of Graph Theory*, v. 12, p. 133 – 139, 10 2006.
- [4] HIERHOLZER, C.; WIENER, C. Über die Möglichkeit, einen Linienzug ohne Wiederholung und ohne Unterbrechung zu umfahren. *Mathematische Annalen*, Springer, v. 6, n. 1, p. 30–32, 1873.
- [5] LENSTRA, J. K.; KAN, A. H. G. R. Some simple applications of the travelling salesman problem. *Journal of the Operational Research Society*, Taylor and Francis, v. 26, n. 4, p. 717–733, 1975.
- [6] SWART, E. R. The philosophical implications of the four-color problem. *The American Mathematical Monthly*, Taylor and Francis, v. 87, n. 9, p. 697–707, 1980.
- [7] GOMES, M. J. A. N. et al. O problema do carteiro chinês, algoritmos exatos e um ambiente MVI para análise de suas instâncias: sistema XNÊS. *Pesquisa Operacional*, scielo, v. 29, p. 323 – 363, 08 2009. ISSN 0101-7438.
- [8] WASEDA, Y.; MATSUBARA, E.; SHINODA, K. *X-ray diffraction crystallography: introduction, examples and solved problems*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2011.
- [9] ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. et al. *Solid state physics by Neil W. Ashcroft and N. David Mermin*. [S.l.]: New York: Holt, Rinehart and Winston, 1976.
- [10] SENFT, D. C.; EHRlich, G. Long jumps in surface diffusion: One-dimensional migration of isolated adatoms. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 74, p. 294–297, Jan 1995.
- [11] LINDEROTH, T. R. et al. Surface diffusion of Pt on Pt(110): Arrhenius behavior of long jumps. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 78, p. 4978–4981, Jun 1997.

- [12] RIASCOS, A. P.; MATEOS, J. L. Long-range navigation on complex networks using Lévy random walks. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 86, p. 056110, Nov 2012.
- [13] ESTRADA, E. Path Laplacian matrices: Introduction and application to the analysis of consensus in networks. *Linear Algebra and its Applications*, Elsevier BV, v. 436, n. 9, p. 3373–3391, maio 2012.
- [14] ESTRADA, E. et al. Random multi-hopper model: super-fast random walks on graphs. *Journal of Complex Networks*, Oxford University Press (OUP), v. 6, n. 3, p. 382–403, out. 2017.
- [15] SERRANO, A. B.; ALLEN-PERKINS, A.; ANDRADE, R. F. S. Efficient approach to time-dependent super-diffusive lévy random walks on finite 2d-tori using circulant analogues. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier, v. 592, p. 126833, 2022.
- [16] ANDRADE, R. F. S. et al. Measuring distances between complex networks. *Physics Letters A*, Elsevier, v. 372, n. 32, p. 5265–5269, 2008.
- [17] STEEN, M. V. *An Introduction to Graph Theory and Complex Networks*. [S.l.: s.n.], 2010.
- [18] GROSS, J. L.; YELLEN, J.; ZHANG, P. *Handbook of Graph Theory, Second Edition*. [S.l.: s.n.], 2013. ISBN 9781439880180.
- [19] BOLLOBÁS, B. *Modern graph theory*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 1998. v. 184.
- [20] NEWMAN, M.; BARABASI, A.-L.; WATTS, D. J. *The structure and dynamics of networks*. [S.l.]: Princeton University Press, 2006. ISBN 0691113572.
- [21] WEST, D. B. *Introduction to Graph Theory, Second Edition*. [S.l.]: Pearson Education, Inc, 2001. ISBN 8178088304.
- [22] PEMMARAJU, S.; SKIENA, S.; SKIENA, D. T. P. S. *Computational Discrete Mathematics*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2003. ISBN 9780521806862.
- [23] SOLÉ, R. V.; PASTOR-SATORRAS, R. Complex networks in genomics and proteomics. In: *Handbook of Graphs and Networks*. [S.l.]: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2004. p. 145–167.
- [24] WASSERMAN, S.; FAUST, K.; STANLEY. *Social Network Analysis: Methods and applications*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1994. ISBN 9780521387071.
- [25] BERNARD, H. R. et al. Estimating the size of an average personal network and of an event subpopulation: Some empirical results. *Social Science Research*, v. 20, n. 2, p. 109 – 121, 1991.
- [26] COHEN, R. et al. Breakdown of the internet under intentional attack. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 86, n. 16, p. 3682–3685, Apr 2001.

- [27] SPORNS, O. Network analysis, complexity, and brain function. *Complexity*, Wiley, v. 8, n. 1, p. 56–60, 2002.
- [28] SANDER, L.; WARREN, C.; SOKOLOV, I. Epidemics, disorder, and percolation. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier BV, v. 325, n. 1-2, p. 1–8, Jul 2003.
- [29] NEWMAN, M. *Networks: An Introduction*. [S.l.]: Oxford University Press, USAf, 2010. ISBN 9780199206650.
- [30] DIJKSTRA, E. W. et al. A note on two problems in connexion with graphs. *Numerische mathematik*, v. 1, n. 1, p. 269–271, 1959.
- [31] FRANA, P. L.; MISA, T. J. An Interview with Edsger W. Dijkstra. *Communications of the ACM*, Association for Computing Machinery, New York, NY, USA, v. 53, n. 8, p. 41–47, 2010.
- [32] HAÜY, R. J. *Essai d'une théorie sur la structure des cristaux, appliqué e a plusieurs genres de substances cristallisées*. [S.l.]: Chez Gogué & Née de La Rochelle, libraires, Quai des Auguftins, près le pont Saint-Michel, 1784.
- [33] JIMENEZ, M. J. S. *Estudo de transporte e tunelamento quântico em estruturas de grafeno dopadas*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Paraná, Engenharia e Ciências dos Materiais, 2015.
- [34] DUAN, B. et al. A comparative analysis of network robustness against different link attacks. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 448, p. 144–153, 2016.
- [35] PEPYNE, D. L. Topology and cascading line outages in power grids. *Journal of Systems Science and Systems Engineering*, Springer, v. 16, n. 2, p. 202–221, 2007.
- [36] ALLEN-PERKINS, A. et al. Approach to the inverse problem of superdiffusion on finite systems based on time-dependent long-range navigation. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 100, p. 030101, Sep 2019.
- [37] ALLEN-PERKINS, A. et al. Markov chain approach to anomalous diffusion on Newman–Watts networks. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, IOP Publishing, v. 2019, n. 4, p. 043301, apr 2019.
- [38] BEALE, P. D. Exact distribution of energies in the two-dimensional ising model. *Physical review letters*, American Physical Society, v. 76, n. 1, p. 78–81, 1996.
- [39] ALBERT, R.; BARABÁSI, A.-L. Statistical mechanics of complex networks. *Review Modern Physics*, American Physical Society, v. 74, p. 47–97, 2002.
- [40] SEIBOLD, C.; CALLENDER, H. L. Modeling epidemics on a regular tree graph. *Letters in Biomathematics*, Taylor and Francis, v. 3, n. 1, p. 59–74, 2016.
- [41] SUNDARARAJAN, D. *The Discrete Fourier Transform*. [S.l.]: World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2022. ISBN 9789810245214.

- [42] ERDŐS, P.; RÉNYI, A. On random graphs. *Publicationes Mathematicae*, v. 6, n. 290-297, p. 18, 1959.
- [43] ERDŐS, P.; RÉNYI, A. On the evolution of random graphs. *Publ. Math. Inst. Hung. Acad. Sci.*, v. 5, n. 1, p. 17–60, 1960.
- [44] ERDŐS, P.; RÉNYI, A. On the strength of connectedness of a random graph. *Acta Mathematica Academiae Scientiarum Hungarica*, Springer, v. 12, n. 1-2, p. 261–267, 1964.
- [45] WATTS, D. J.; STROGATZ, S. H. Collective dynamics of small-world networks. *nature*, Nature Publishing Group, v. 393, n. 6684, p. 440–442, 1998.
- [46] NEWMAN, M.; WATTS, D. Renormalization group analysis of the small-world network model. *Physics Letters A*, v. 263, n. 4, p. 341 – 346, 1999. ISSN 0375-9601.
- [47] NEWMAN, M. E. J.; WATTS, D. J. Scaling and percolation in the small-world network model. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 60, n. 6, p. 7332–7342, 1999.
- [48] BOLLOBÁS, B.; THOMASON, A. Random graphs of small order. In: *North-Holland Mathematics Studies*. [S.l.]: Elsevier, 1985. v. 118, p. 47–97.
- [49] DOMENICO, M. D. et al. Mathematical formulation of multilayer networks. *Physical Review X*, American Physical Society, v. 3, n. 4, p. 041022, 2013.
- [50] BERLINGERIO, M. et al. Foundations of multidimensional network analysis. p. 485–489, 2011.
- [51] KIVELÄ, M. et al. Multilayer networks. *Journal of complex networks*, Oxford University Press, v. 2, n. 3, p. 203–271, 2014.
- [52] BATTISTON, F.; NICOSIA, V.; LATORA, V. Structural measures for multiplex networks. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 89, n. 3, p. 032804, 2014.
- [53] DONGES, J. F. et al. Investigating the topology of interacting networks. *The European Physical Journal B*, Springer, v. 84, n. 4, p. 635–651, 2011.
- [54] BULDYREV, S. V. et al. Catastrophic cascade of failures in interdependent networks. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 464, n. 7291, p. 1025–1028, 2010.
- [55] GAO, J. et al. Networks formed from interdependent networks. *Nature physics*, Nature Publishing Group, v. 8, n. 1, p. 40–48, 2012.
- [56] CRIADO, R. et al. A mathematical model for networks with structures in the mesoscale. *International Journal of Computer Mathematics*, Taylor & Francis, v. 89, n. 3, p. 291–309, 2012.
- [57] SOLÁ, L. et al. Eigenvector centrality of nodes in multiplex networks. *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, American Institute of Physics, v. 23, n. 3, p. 033131, 2013.

- [58] SERRANO, A. B.; GÓMEZ-GARDEÑES, J.; ANDRADE, R. F. S. Optimizing diffusion in multiplexes by maximizing layer dissimilarity. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 95, n. 5, p. 052312, 2017.
- [59] DONGES, J. F. et al. Investigating the topology of interacting networks. *The European Physical Journal B*, Springer, v. 84, n. 4, p. 635–651, 2011.
- [60] PARSHANI, R.; BULDYREV, S. V.; HAVLIN, S. Interdependent networks: Reducing the coupling strength leads to a change from a first to second order percolation transition. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 105, n. 4, p. 048701, 2010.
- [61] MUIR, D. Bulk flow and diffusion in the airways of the lung. *British Journal of Diseases of the Chest*, v. 60, n. 4, p. 169–176, 1966. ISSN 0007-0971.
- [62] LUIKOV, A. V. *Analytical Heat Diffusion Theory*. [S.l.]: Academic Pres. INC., 1968.
- [63] LEE, S. et al. Ink diffusion in water. *European Journal of Physics*, IOP Publishing, v. 25, n. 2, p. 331–336, feb 2004.
- [64] BROWN, R. XXVII. a brief account of microscopical observations made in the months of june, july and august 1827, on the particles contained in the pollen of plants; and on the general existence of active molecules in organic and inorganic bodies. *The Philosophical Magazine*, Taylor and Francis, v. 4, n. 21, p. 161–173, 1828.
- [65] BROWN, R. XXIV. additional remarks on active molecules. *The Philosophical Magazine*, Taylor and Francis, v. 6, n. 33, p. 161–166, 1829.
- [66] EINSTEIN, A. Über die von der molekularinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen. *Annalen der physik*, v. 4, 1905.
- [67] VITALI, S. et al. Langevin equation in complex media and anomalous diffusion. *Journal of The Royal Society Interface*, The Royal Society, v. 15, n. 145, p. 20180282, 2018.
- [68] SPAGNOLO, B.; BARRERA, P. A Langevin approach to the diffusion equation. In: *Air Pollution Modelling and Simulation*. [S.l.]: Springer, 2002. p. 380–387.
- [69] DEGOND, P.; MAS-GALLIC, S. Existence of solutions and diffusion approximation for a model Fokker-Planck equation. *Transport Theory and Statistical Physics*, Taylor & Francis, v. 16, n. 4-6, p. 589–636, 1987.
- [70] METZLER, R.; BARKAI, E.; KLAFTER, J. Anomalous diffusion and relaxation close to thermal equilibrium: A fractional Fokker-Planck equation approach. *Physical review letters*, American Physical Society, v. 82, n. 18, p. 3563, 1999.
- [71] DAVIS, M.; ETHERIDGE, A. Louis bachelier’s theory of speculation: the origins of modern finance. *Bull. Amer. Math. Soc*, v. 45, p. 657–660, 2008.
- [72] MACDONALD, D. K. C. *Noise and Fluctuations*. [S.l.]: Dover Publications, Inc, 2006. ISBN 9780486450292.

- [73] SALINAS, S. R. *Introdução a Física Estatística vol. 09*. [S.l.]: Edusp, 1997. ISBN 9788531403866.
- [74] BERG, H. C. *Random Walks in Biology*. [S.l.]: Princeton University Press, 1984. ISBN 9781400820023.
- [75] MCCLINTOCK, B. T. et al. A general discrete-time modeling framework for animal movement using multistate random walks. *Ecological Monographs*, Wiley, v. 82, n. 3, p. 335–349, ago. 2012.
- [76] KOUSTAS, Z.; LAMARCHE, J.-F.; SERLETIS, A. Threshold random walks in the US stock market. *Chaos, Solitons and Fractals*, v. 37, n. 1, p. 43–48, 2008.
- [77] TADIĆ, B. Adaptive random walks on the class of web graphs. *The European Physical Journal B*, Springer Science and Business Media LLC, v. 23, n. 2, p. 221–228, 2001.
- [78] FICK, A. Ueber Diffusion. *Annalen der Physik und Chemie*, Wiley, v. 170, n. 1, p. 59–86, 1855.
- [79] ALLEN-PERKINS, A. et al. Relaxation time of the global order parameter on multiplex networks: The role of interlayer coupling in kuramoto oscillators. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 96, p. 042312, 2017.
- [80] BARRAT, A.; BARTHÉLEMY, M.; VESPIGNANI, A. *Dynamical Processes on Complex Networks*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2008. ISBN 9780521879507.
- [81] WU, J.; BERLAND, K. M. Propagators and Time-Dependent Diffusion Coefficients for Anomalous Diffusion. *Biophysical Journal*, v. 95, n. 4, p. 2049–2052, 2008.
- [82] SUN, H. et al. On mean square displacement behaviors of anomalous diffusions with variable and random orders. *Physics Letters A*, v. 374, n. 7, p. 906–910, 2010.
- [83] TOMÉ, T.; OLIVEIRA, M. J. D. *Stochastic Dynamics and Irreversibility*. [S.l.]: Springer, 2014. ISBN 9783319117706.
- [84] BLANCHARD, P.; VOLCHENKOV, D. *Random Walks and Diffusions on Graphs and Databases*. [S.l.: s.n.], 2011. ISBN 9783642195914.
- [85] WASSERMAN, L. *All of Statistics: a concise course in statistical inference*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2013. ISBN 9780387217369.
- [86] NOH, J. D.; RIEGER, H. Random walks on complex networks. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 92, p. 118701, 2004.
- [87] BAGNATO, G. d. G. *Análise estrutural de redes complexas modulares por meio de caminhadas auto-excludentes*. 133 p. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, 2018.
- [88] MASUDA, N.; PORTER, M. A.; LAMBIOTTE, R. Random walks and diffusion on networks. *Physics Reports*, Elsevier BV, v. 716-717, p. 1–58, nov. 2017.
- [89] ALMAAS, E.; KULKARNI, R. V.; STROUD, D. Scaling properties of random walks on small-world networks. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 68, n. 5, nov. 2003.



- [90] GALLOS, L. K. Random walk and trapping processes on scale-free networks. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 70, n. 4, out. 2004.
- [91] GOMEZ, S. et al. Diffusion dynamics on multiplex networks. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 110, n. 2, p. 028701, 2013.
- [92] ALMENDRAL, J. A.; DÍAZ-GUILERA, A. Dynamical and spectral properties of complex networks. *New Journal of Physics*, IOP Publishing, v. 9, n. 6, p. 187–187, jun. 2007.
- [93] BARAHONA, M.; PECORA, L. M. Synchronization in small-world systems. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 89, n. 5, jul. 2002.
- [94] FIEDLER, M. Algebraic connectivity of graphs. *Czechoslovak mathematical journal*, Institute of Mathematics, Academy of Sciences of the Czech Republic, v. 23, n. 2, p. 298–305, 1973.
- [95] ESTRADA, E. et al. Random multi-hopper model: super-fast random walks on graphs. *Journal of Complex Networks*, v. 6, n. 3, p. 382–403, 10 2017.
- [96] DRYSDALE, P.; ROBINSON, P. Lévy random walks in finite systems. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 58, n. 5, p. 5382, 1998.
- [97] LOMHOLT, M. A. et al. Lévy strategies in intermittent search processes are advantageous. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, National Academy of Sciences, v. 105, n. 32, p. 11055–11059, 2008. ISSN 0027-8424.
- [98] HUMPHRIES, N. E. et al. Environmental context explains Lévy and Brownian movement patterns of marine predators. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 465, n. 7301, p. 1066–1069, 2010.
- [99] SONG, C. et al. Modelling the scaling properties of human mobility. *Nature Physics*, Nature Publishing Group, v. 6, n. 10, p. 818–823, 2010.
- [100] Rhee, I. et al. On the Lévy-walk nature of human mobility. *IEEE/ACM Transactions on Networking*, v. 19, n. 3, p. 630–643, 2011.
- [101] TSALLIS, C. *Introduction to Nonextensive Statistical Mechanics: Approaching a Complex World*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2009. ISBN 9780387853581.
- [102] METZLER, R.; KLAFTER, J. The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach. *Physics Reports*, v. 339, n. 1, p. 1 – 77, 2000.
- [103] BAKUNIN, O. G. *Chaotic Flows: Correlation Effects, Transport, and Structures*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2011. ISBN 9783642203497.
- [104] ZHANG, Z.; SHAN, T.; CHEN, G. Random walks on weighted networks. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 87, p. 012112, Jan 2013.
- [105] ESTRADA, E.; VARGAS-ESTRADA, E. How peer pressure shapes consensus, leadership and innovations in social groups. *Scientific reports*, Nature Publishing Group, v. 3, n. 1, p. 1–6, 2013.

- [106] ESTRADA, E. et al. Path Laplacian operators and superdiffusive processes on graphs. I. One-dimensional case. *Linear Algebra and its Applications*, v. 523, p. 307 – 334, 2017.
- [107] ESTRADA, E. et al. Path Laplacian operators and superdiffusive processes on graphs. II. two-dimensional lattice. *Linear Algebra and its Applications*, Elsevier BV, v. 555, p. 373–397, 2018.
- [108] KRONENBURG, M. *Some Generalized Harmonic Number Identities*. 2012.
- [109] YU, C. et al. Single-molecule observation of long jumps in polymer adsorption. *ACS nano*, ACS Publications, v. 7, n. 11, p. 9735–9742, 2013.
- [110] SCHUNACK, M. et al. Long jumps in the surface diffusion of large molecules. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 88, p. 156102, Mar 2002.
- [111] MA, F.; WANG, P. Random walks on a tree with applications. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 102, p. 022305, Aug 2020.
- [112] BROWN, A. I.; WESTRATE, L. M.; KOSLOVER, E. F. Impact of global structure on diffusive exploration of organelle networks. *Scientific reports*, Nature Publishing Group, v. 10, n. 1, p. 1–13, 2020.
- [113] OLIVEIRA, I. M.; CARPI, L. C.; ATMAN, A. The Multiplex Efficiency Index: unveiling the Brazilian air transportation multiplex network-BATMN. *Scientific Reports*, Nature Publishing Group, v. 10, n. 1, p. 1–10, 2020.
- [114] VOLCHENKOV, D.; BLANCHARD, P. Nonlinear diffusion through large complex networks containing regular subgraphs. *Journal of Statistical Physics*, Springer, v. 127, n. 4, p. 677–697, 2007.
- [115] CENCETTI, G.; BATTISTON, F. Diffusive behavior of multiplex networks. *New Journal of Physics*, IOP Publishing, v. 21, n. 3, p. 035006, mar 2019.
- [116] TRPEVSKI, D.; TANG, W. K.; KOCAREV, L. Model for rumor spreading over networks. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 81, n. 5, p. 056102, 2010.
- [117] GUANTES, R.; VEGA, J. L.; MIRET-ARTÉS, S. Chaos and anomalous diffusion of adatoms on solid surfaces. *Physical Review B*, American Physical Society, v. 64, p. 245415, Dec 2001.
- [118] ALA-NISSILA, T.; FERRANDO, R.; YING, S. C. Collective and single particle diffusion on surfaces. *Advances in Physics*, Taylor and Francis, v. 51, n. 3, p. 949–1078, 2002.
- [119] SLOOT, P. M. et al. Stochastic simulation of HIV population dynamics through complex network modelling. *International Journal of Computer Mathematics*, Taylor & Francis, v. 85, n. 8, p. 1175–1187, 2008.
- [120] ESTRADA, E. Path Laplacian matrices: introduction and application to the analysis of consensus in networks. *Linear algebra and its applications*, Elsevier, v. 436, n. 9, p. 3373–3391, 2012.

- [121] CHUNG, K. L. Markov chains. *Springer-Verlag, New York*, Springer, 1967.
- [122] GEYER, C. J. Practical Markov Chain Monte Carlo. *Statistical science*, JSTOR, p. 473–483, 1992.
- [123] ALMAAS, E.; KULKARNI, R. V.; STROUD, D. Characterizing the structure of small-world networks. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 88, p. 098101, Feb 2002.
- [124] BOCCALETTI, S. et al. Complex networks: Structure and dynamics. *Physics reports*, Elsevier, v. 424, n. 4, p. 175–308, 2006.
- [125] SHANKER, O.; HOGG, T. Epidemiology model on shortcut and small world networks. *Modern Physics Letters B - MOD PHYS LETT B*, v. 23, p. 1249–1262, 04 2009.