



CENTRO FEDERAL DE EDUCAÇÃO TECNOLÓGICA DE MINAS GERAIS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL

TEMPOS DE PRIMEIRA PASSAGEM PARA CAMINHADAS ALEATÓRIAS EM REDES COMPLEXAS

MARCELO SOUSA CHAVES

Orientador: Dr. Thiago Gomes de Mattos

Coorientador: Dr. Allbens Atman Picardi Faria

BELO HORIZONTE
NOVEMBRO DE 2020

MARCELO SOUSA CHAVES

TEMPOS DE PRIMEIRA PASSAGEM PARA CAMINHADAS ALEATÓRIAS EM REDES COMPLEXAS

Tese apresentada ao Programa de Pós-graduação em Modelagem Matemática e Computacional do Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais, como requisito parcial para a obtenção do título de Doutor em Modelagem Matemática e Computacional.

Área de concentração: Modelagem Matemática e Computacional

Linha de pesquisa: Métodos Matemáticos Aplicados

Orientador: Dr. Thiago Gomes de Mattos

Coorientador: Dr. Allbens Atman Picardi Faria

CENTRO FEDERAL DE EDUCAÇÃO TECNOLÓGICA DE MINAS GERAIS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL
BELO HORIZONTE
NOVEMBRO DE 2020

Chaves, Marcelo Sousa
C512t Tempo de primeira passagem para caminhadas aleatórias em redes complexas / Marcelo Sousa Chaves. – 2020.
95 f.

Tese de doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional.
Orientador: Thiago Gomes de Mattos.
Coorientador: Allbens Atman Picardi Faria.
Tese (doutorado) – Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais.

1. Passeios aleatórios (Matemática) – Teses. 2. Teoria das redes – Teses. 3. Análise de sistemas – Teses. I. Mattos, Thiago Gomes de. II. Faria, Allbens Atman Picardi. III. Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais. IV. Título.

CDD 519.6



SERVIÇO PÚBLICO FEDERAL
MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
CENTRO FEDERAL DE EDUCAÇÃO TECNOLÓGICA DE MINAS GERAIS
COORDENAÇÃO DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL

**“TEMPOS DE PRIMEIRA PASSAGEM PARA CAMINHADAS
ALEATÓRIAS EM REDES COMPLEXAS”.**

Tese de Doutorado apresentada por **Marcelo Sousa Chaves**, em 26 de novembro de 2020, ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional do CEFET-MG, e aprovada pela banca examinadora constituída pelos professores:

Prof. Dr. Thiago Gomes de Mattos (Orientador)
Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais

Prof. Dr. Aribens Atman Picardi Faria (Coorientador)
Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais

Prof. Dr. Alcides Volpato Carneiro de Castro e Silva
Universidade Federal de Ouro Preto

Prof. Dr. Marcelo Martins de Oliveira
Universidade Federal de São João del-Rei

Prof. Dr. José Luiz Acebal Fernandes
Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais

Prof. Dr. Arthur Rodrigo Bosco de Magalhães
Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais

Visto e permitida à impressão,

Prof. Dr. Thiago de Souza Rodrigues
Coordenador do Programa de Pós-Graduação Stricto Sensu em
Modelagem Matemática e Computacional

Agradecimentos

Agradeço a Deus pelo conforto espiritual durante esta etapa da minha formação acadêmica, e por colocar professores, funcionários e colegas tão comprometidos com a educação.

Às instituições de fomento à pesquisa: CAPES, CNPq, FAPEMIG, CEFET-MG, que investiram no financiamento do trabalho.

Eu sou grato ao corpo docente do Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional (PPGMMC). E imensamente grato ao prof. Allbens Atman Picardi Faria, que prontamente me guiou desde a entrada no mestrado. Nesta etapa, tive o privilégio de trabalhar com a prof^a. Ester Naves Machado Borges e o prof. Márcio Matias Afonso. E quis o destino, que o Allbens fosse novamente o protagonista para a entrada no doutorado, propondo trabalhar em conjunto com o prof. Thiago Gomes de Mattos, que aceitou ser meu orientador sem me conhecer. Agradeço a confiança depositada em mim, aos ensinamentos passados, a paciência e resiliência para alcançarmos resultados satisfatórios. Sempre estive convicto que os bons frutos desta pesquisa advêm do enorme conhecimento destes pesquisadores.

Durante estes anos, os colegas do PPGMMC foram fonte de inspiração e conhecimento para seguir a jornada. As discussões e troca de saberes na sala de estudos e no Laboratório de Sistemas Complexos (Vegas) ficarão para sempre na memória. Agradeço e muito, pelas dicas de programação do Alexandre Frias, Fernando Ducha e Gustavo Martins.

Agradeço aos meus pais pelo carinho e apoio incondicional para continuação dos meus estudos. À minha filha, Sofia, que ainda tão pequenina foi uma grande fonte de inspiração para que eu pudesse superar os momentos difíceis. Aos críticos que apontaram as minhas falhas, contribuindo para a minha evolução acadêmica e pessoal.

Resumo

A análise topológica de redes é um importante campo de estudo em Teoria das Redes, com aplicações em vários campos da Ciência. Neste estudo, nós alteramos a topologia de uma rede quadrada através de reconexões em suas arestas e obtivemos diferentes tipos de redes: aleatória conservativa, aleatória não conservativa e livre de escala. Sob determinadas condições, as redes aleatórias e livre de escala apresentaram propriedades de mundo pequeno. Aplicamos as ferramentas da análise de Primeira Passagem para investigar as propriedades e características das caminhadas aleatórias nessas redes. Nas topologias investigadas, analisamos o Tempo de Primeira Passagem (TPP) de um significativo número de caminhantes aleatórios não interagentes, variando-se os sítios de partida e de chegada. Para caracterizar estes processos, aplicamos o conceito da simultaneidade de Primeira Passagem, através do chamado Índice de Uniformidade (IU), que é uma medida da probabilidade de que dois caminhantes independentes cheguem juntos ao sítio alvo. O IU permite avaliar se o tempo médio de primeira passagem (TMPP) é uma boa medida para o processo, e permite identificar redes com características de mundo pequeno. A análise da ocupação dos sítios durante uma caminhada aleatória nos permitiu diferenciar os diferentes tipos de redes, em particular identificar as propriedades de mundo pequeno, um tema que ainda é controverso na literatura.

Palavras-chave: Fenômenos de primeira passagem. Redes complexas. Caminhadas aleatórias.

Abstract

The topological analysis of networks is an important field of study in Network Theory, with applications in various fields of science. In this study, we modified the topology of a square network, through the reconnections of its edges and obtained different types of networks: conservative random, nonconservative random and scale-free. Under certain conditions, the random and free-scale networks showed small world properties. We applied First Passage analysis tools to investigate the properties and characteristics of random walks in these networks. In the topologies investigated, we analyzed the First Passage Time (FPT) of a significant number of non-interacting random walkers, varying the departure and arrival sites. To characterize these processes, we applied the concept of first passage simultaneity, through the so-called Uniformity Index (UI), which is a measure of the probability that two independent walkers will arrive at the target site together. The UI allows to evaluate whether the average first passage time (TMPP) is a good measure for the process, and allows to identify networks with small world characteristics. The analysis of the sites occupation during a random walk allowed us to differentiate the different types of networks, in particular identify the small world properties, a topic that is still controversial in the literature.

Keywords: First-passage phenomena. Complex networks. Random walk.

Lista de Figuras

Figura 1 – Processo de salto por um caminhante aleatório ao longo de um eixo . . .	6
Figura 2 – Representação das pontes de Königsberg	9
Figura 3 – Transição entre um anel regular e uma rede aleatória	12
Figura 4 – Distribuições de links em topologias de rede	17
Figura 5 – Exemplo de comunidades em uma rede	18
Figura 6 – Trajetória de um caminhante aleatório na rede	20
Figura 7 – Rede regular quadrada com condições periódicas de contorno	22
Figura 8 – Rede regular quadrada com condições de contorno mistas	22
Figura 9 – Reconexões de arestas na rede aleatória conservativa	24
Figura 9 – Reconexões de arestas na rede aleatória conservativa	25
Figura 10 – Rede aleatória conservativa	25
Figura 11 – Níveis médios cliques na rede aleatória conservativa	26
Figura 12 – Reconexões de arestas na rede aleatória não conservativa	27
Figura 12 – Reconexões de arestas na rede aleatória não conservativa	28
Figura 13 – Rede aleatória não conservativa	28
Figura 14 – Evolução da distribuição de <i>links</i> de uma rede aleatória não conservativa	29
Figura 15 – Níveis médios cliques na rede aleatória não conservativa	30
Figura 16 – Rede aleatória de mundo pequeno	31
Figura 17 – Evolução da distribuição de <i>links</i> da rede aleatória de mundo pequeno .	32
Figura 18 – Níveis médios de cliques na rede aleatória de mundo pequeno	33
Figura 19 – Evolução da distribuição de cliques de um anel regular	34
Figura 20 – Mudança topológica de uma rede quadrada para livre de escala	36
Figura 21 – Evolução da distribuição de ligações na rede livre de escala	37
Figura 22 – Níveis médios de cliques na rede livre de escala	38
Figura 23 – Evolução da distribuição de cliques na rede livre de escala	39
Figura 24 – Trajetórias de dois caminheiros brownianos	40
Figura 25 – Formatos da $\Psi(\tau)$	41
Figura 26 – Formatos da $P(\omega)$	43
Figura 27 – Rede regular quadrada com condições de contorno mistas	45
Figura 28 – $\Psi(\tau)$ na rede regular quadrada com condições de contorno mistas . . .	46
Figura 29 – $P(\omega)$ na rede regular quadrada com condições de contorno mistas . . .	47
Figura 30 – $\Psi(\tau_R)$ na rede regular quadrada com condições mistas	48
Figura 31 – $P(\omega_R)$ na rede regular quadrada	49
Figura 32 – Posições dos sítios investigados na rede aleatória conservativa	50
Figura 33 – $\Psi(\tau)$ na rede aleatória conservativa com sítio de partida afastado do sítio de chegada	51

Figura 34 – $\Psi(\tau)$ na rede aleatória conservativa com sítio de partida próximo ao sítio de chegada	51
Figura 35 – $P(\omega)$ na rede aleatória conservativa com sítio de partida afastado do sítio de chegada	52
Figura 36 – $P(\omega)$ na rede aleatória conservativa com sítio de partida próximo ao sítio de chegada	52
Figura 37 – $\Psi(\tau_R)$ na rede aleatória conservativa com sítio de partida em uma quina	54
Figura 38 – $\Psi(\tau_R)$ na rede aleatória conservativa com sítio de partida na região central	54
Figura 39 – $P(\omega_R)$ na rede aleatória conservativa com sítio de partida em uma quina	55
Figura 40 – $P(\omega_R)$ na rede aleatória conservativa com sítio de partida na região central	55
Figura 41 – Sítios de partida e sítio alvo na rede aleatória não conservativa	56
Figura 42 – $\Psi(\tau)$ na rede aleatória não conservativa com sítio de partida afastado do sítio de chegada	57
Figura 43 – $\Psi(\tau)$ na rede aleatória não conservativa com sítio de partida próximo ao sítio de chegada	57
Figura 44 – $P(\omega)$ na rede aleatória não conservativa com sítio de partida afastado do sítio de chegada	58
Figura 45 – $P(\omega)$ na rede aleatória não conservativa com sítio de partida próximo ao sítio de chegada	58
Figura 46 – $\Psi(\tau_R)$ na rede aleatória não conservativa com sítio de partida em uma quina	59
Figura 47 – $\Psi(\tau_R)$ na rede aleatória não conservativa com sítio de partida na região central	59
Figura 48 – $P(\omega_R)$ na rede aleatória não conservativa com sítio de partida em uma quina	60
Figura 49 – $P(\omega_R)$ na rede aleatória não conservativa com sítio de partida na região central	60
Figura 50 – Anel regular com 20 sítios e 8 arestas por sítio	61
Figura 51 – $\Psi(\tau)$ e $P(\omega)$ da rede aleatória de mundo pequeno com sítio de partida fixo.	62
Figura 52 – $\Psi(\tau)$ e $P(\omega)$ na rede aleatória de mundo pequeno com sítio de partida variável.	63
Figura 52 – $\Psi(\tau)$ e $P(\omega)$ na rede aleatória de mundo pequeno com sítio de partida variável.	64
Figura 52 – $\Psi(\tau)$ e $P(\omega)$ na rede aleatória de mundo pequeno com sítio de partida variável.	65
Figura 53 – Rede livre de escala	66
Figura 54 – $\Psi(\tau)$ e $P(\omega)$ na rede livre de escala	67
Figura 54 – $\Psi(\tau)$ e $P(\omega)$ na rede livre de escala	68
Figura 55 – Inversão da $P(\omega)$ na rede livre de escala	69

Figura 56 – Distribuição de visitas de uma rede quadrada	71
Figura 57 – Distribuição de visitas de uma rede aleatória conservativa	72
Figura 58 – Distribuição de visitas de uma rede aleatória não conservativa	73
Figura 59 – Distribuição de visitas de uma rede aleatória de mundo pequeno	74
Figura 60 – Distribuição de visitas de uma rede livre de escala variando-se o número de passos	75
Figura 61 – Distribuição de visitas de uma rede livre de escala durante evolução topológica	77

Lista de Tabelas

Tabela 1 – Número de visitas aos <i>hubs</i> de uma rede livre de escala	76
--	----

Lista de Algoritmos

Algoritmo 1 – <i>cria_aresta</i>	86
Algoritmo 2 – <i>remove_aresta</i>	86
Algoritmo 3 – Algoritmo para rede quadrada (Q_0)	87
Algoritmo 4 – Algoritmo para rede aleatória conservativa (C_0)	87
Algoritmo 5 – Algoritmo para rede aleatória não conservativa (nC_0)	88
Algoritmo 6 – Algoritmo para rede aleatória de mundo pequeno (RMP)	89
Algoritmo 7 – Algoritmo para rede livre de escala (L_0)	90
Algoritmo 8 – Algoritmo para obter os TPP (τ)	91
Algoritmo 9 – Algoritmo para combinar os TPP (τ) e obter o IU (ω)	92

Lista de Abreviaturas e Siglas

$\Psi(\tau)$	Distribuição dos Tempos de Primeira Passagem
$\Psi(\tau_R)$	Distribuição dos Tempos de Primeiro Retorno
$P(\omega)$	Distribuição do Índice de Uniformidade de Primeira Passagem
$P(\omega_R)$	Distribuição do Índice de Uniformidade de Primeiro Retorno
FPP	Fenômenos de Primeira Passagem
IU	Índice de Uniformidade
NEM	<i>Narrow Escape Model</i>
PP	Primeira Passagem
RW	<i>Random Walk</i>
TPP	Tempo de Primeira Passagem
TPR	Tempo do Primeiro Retorno
TMPP	Tempo Médio de Primeira Passagem
TMPR	Tempo Médio do Primeiro Retorno

Lista de Símbolos

τ	Variável aleatória do tempo de primeira passagem
ω	Índice de uniformidade

Sumário

1 – Introdução	1
1.1 Objetivos	3
1.2 Motivação	3
1.3 Organização do trabalho	3
2 – Conceitos Básicos	5
2.1 Caminhada Aleatória	5
2.2 Um Histórico sobre Redes	9
2.2.1 A Origem da Teoria dos Grafos	9
2.2.2 Rede Aleatória	10
2.2.3 O Fenômeno de Redes de Mundo Pequeno	11
2.2.3.1 O Modelo de Watts e Strogatz	11
2.2.3.2 O Modelo de Barabási e Albert	13
2.3 Terminologia e Métricas de Redes	14
2.4 Fenômenos de Primeira Passagem	18
2.4.1 Primeira Passagem	19
3 – Metodologia	21
3.1 Morfologia das Redes Implementadas	21
3.1.1 Rede Regular Quadrada	21
3.1.2 Rede Aleatória Conservativa	24
3.1.3 Rede Aleatória não Conservativa	27
3.1.4 Rede Aleatória de Mundo Pequeno	31
3.1.5 Transição Topológica de uma Rede Regular Quadrada para uma Rede Livre de Escala	35
3.2 Ferramentas Estatísticas	40
4 – Resultados	45
4.1 Rede Regular Quadrada	45
4.1.1 Condições de Contorno Mistas	45
4.1.2 Condição Periódica de Contorno e Condição de Contorno Refletores	48
4.2 Rede Aleatória Conservativa	50
4.2.1 TPP com Fronteira Refletores e com Fronteira Periódica	50
4.2.2 TPR com Fronteira Refletores e com Fronteira Periódica	54
4.3 Rede Aleatória Não Conservativa	56
4.3.1 TPP com Fronteira Refletores e com Fronteira Periódica	56

4.3.2	TPR com Fronteira Refletora e com Fronteira Periódica	59
4.4	Rede Aleatória de Mundo Pequeno	61
4.4.1	TPP	61
4.5	Rede Livre de Escala	66
4.6	Análise da Ocupação de Sítios	71
5	– Conclusão	78
5.1	Trabalhos Futuros	80
5.2	Considerações Finais	80
	Referências	81
	 Apêndices	 85
	APÊNDICE A – Algoritmos	86
	 Anexos	 93
	ANEXO A – Teoremas	94

1 Introdução

Os Fenômenos de Primeira Passagem (FPP) estão relacionados a diversos processos estocásticos nos quais uma variável aleatória de interesse atinge um determinado valor pela primeira vez. Trata-se de um tópico bastante ativo [1, 2], que proporciona aplicações em diversas áreas de pesquisa tais como, Física [3], Química [4, 5], Biologia [6], Computação [7], Neurologia [8], Finanças [9], Ciências dos Materiais [10] e Ecologia [11].

Uma das aplicações em Ecologia trata da dinâmica de perseguição a um alvo (fixo ou móvel). O processo de busca pode ser modelado por uma caminhada aleatória que é interrompida com a captura da presa, instante conhecido como tempo de primeira passagem (TPP). Mejía-Monasterio e colaboradores [11] investigaram alguns aspectos da busca por um alvo fixo e observaram a importância de se considerar os efeitos das flutuações estatísticas entre amostras independentes.

Em dinâmica neuronal, o modelo *integrate-and-fire* [8] é amplamente utilizado para a análise do comportamento de sistemas neurais. Neste modelo, o potencial da membrana de um neurônio é descrito em termos das entradas sinápticas, consideradas estocásticas, e da corrente injetada que ele recebe. O neurônio é acionado apenas quando o nível de tensão flutuante atinge pela primeira vez um valor específico.

No mercado financeiro [12], o preço de uma ação varia diariamente de forma imprevisível. Nesse contexto, surgem algumas questões quando o preço dessa ação cai, como, por exemplo: quanto tempo será necessário esperar até que a ação retorne ao valor de interesse? Enquanto se espera o retorno do valor da ação, quanto mais pode cair o seu preço? Note que o preço muda de forma aleatória com sua valorização e desvalorização diária, sendo muitas vezes modelado por uma caminhada aleatória.

As características do mercado de ações e das caminhadas aleatórias têm uma exploração em termos da probabilidade de eventos de primeira passagem [9]. Um aspecto importante dos FPP é a condição para a qual um processo de caminhada aleatória termina. Pode-se estabelecer, por exemplo, um valor limite de desvalorização da ação para autorizar a sua venda. E, a partir daí, investigar o tempo necessário para que a ação atinja o limite de desvalorização estabelecido ou retorne ao valor de interesse.

O caráter não determinístico inerente aos FPP dificulta a obtenção de uma forma eficiente de se caracterizar os modelos, tornando-se fundamental o uso de ferramentas de análise estatística para validação dos modelos. Assim, a distribuição espacial de probabilidades do caminhante aleatório atingir uma determinada posição no espaço torna-se uma grandeza de extrema relevância para análise.

A teoria das redes complexas é uma outra importante área de pesquisa que tem atraído bastante atenção nas últimas décadas. As redes complexas são extremamente importantes por serem capazes de representar diversos sistemas reais. Uma rede complexa é um grafo com características topológicas não triviais ausentes em redes regulares e grafos aleatórios. Tais características incluem estrutura de comunidade, alto coeficiente de *cluster*, excentricidade de sítios e comprimento do caminho característico. As descobertas no final do Séc. XX acerca da conectividade de redes [13, 14] provocaram um aumento na produção de trabalhos científicos em teoria dos grafos [15, 16]. As heterogeneidades topológicas em redes livres de escala são de fundamental interesse para interpretar a influência na dinâmica.

A descoberta de novas topologias de redes deu início a uma intensa investigação dos FPP em redes complexas [17, 18, 19]. Anteriormente, relevantes contribuições sobre os FPP em uma rede regular quadrada foram publicadas por Montroll [20]. Segundo Redner [1, p. 168], “Redes criteriosamente construídas podem oferecer descrições simples destes sistemas complexos e suas propriedades de primeira passagem são frequentemente resolvidas pela renormalização exata de sua equação principal.”

As redes podem ser analisadas de diversas maneiras, como por exemplo, a análise de características estruturais como tamanho, densidade, topologia e propriedades estatísticas, que são apresentadas na seção 2.3. No entanto, há uma carência de ferramentas estatísticas que analisem as redes através do fluxo de informações que transitam por elas.

Dada a carência e a importância científica de identificar características topológicas dos diferentes tipos de rede, esta tese se desenvolveu na confluência destas duas importantes áreas da ciência, a teoria das redes e os FPP, e trata essencialmente de um estudo estatístico dos TPP para caminhadas aleatórias em diferentes topologias de redes.

O fluxo de informação modelado através de caminhadas aleatórias permite investigar as propriedades de uma rede por meio da sua navegabilidade. Esta percepção teve como inspiração o trabalho de Mattos e colaboradores [21], que trata dos TPP em domínios bidimensionais limitados, expondo resultados dependentes do formato destes domínios, dentre outros fatores. No presente estudo, verifica-se que os TPP são influenciados pela topologia da rede, pela posição dos sítios investigados e pelas condições de fronteira.

Para identificar as diferentes topologias de redes, os TPP são combinados entre si produzindo o Índice de Uniformidade (IU). Os diferentes formatos da distribuição de uniformidade permitem identificar algumas características topológicas das redes.

Os modelos de rede investigados são os seguintes: quadrada, aleatória conservativa (vide seção 3.1.2), aleatória não conservativa (vide seção 3.1.3), aleatória de mundo pequeno e livre de escala. Também são investigadas as mudanças topológicas em alguns modelos de rede.

1.1 Objetivos

O objetivo deste trabalho é investigar as diferentes características topológicas de redes complexas, propondo uma análise topológica por meio da navegabilidade. Para esta investigação são realizadas caminhadas aleatórias nos sítios das redes, que são analisadas pelas ferramentas da análise de primeira passagem.

Um dos objetivos específicos é desenvolver uma técnica estatística, baseada na análise de primeira passagem, capaz de identificar as características de navegabilidade em diferentes tipos de redes.

Outro objetivo é desenvolver algoritmos que alterem a conectividade dos nós de uma rede regular transformando-a em outras topologias de rede.

1.2 Motivação

Conforme mencionando previamente, as propriedades de primeira passagem possuem inúmeras aplicações em diversas áreas da ciência. Dado o grande sucesso do uso de redes complexas como modelos para diversos sistemas reais, há um enorme potencial de pesquisa via propriedades de primeira passagem. A principal motivação para o desenvolvimento deste estudo é a possibilidade de classificar uma rede quanto à navegabilidade através dos seus sítios, isto é, as informações que transitam pelos sítios de uma rede podem fornecer as características sobre sua topologia. De fato, trata-se de um estudo inovador visto que o esforço realizado pela comunidade científica tem focado majoritariamente em avaliar as estruturas das redes.

1.3 Organização do trabalho

Este trabalho está organizado em 5 capítulos. O presente capítulo apresenta uma introdução ao trabalho, inserindo o leitor no tema central: FPP em Redes Complexas. São apresentados também a definição do problema, os objetivos a serem alcançados e a relevância deste projeto na atualidade.

O capítulo 2 aborda um caminhante aleatório em uma e duas dimensões, apresenta um breve histórico da Teoria das Redes e uma revisão bibliográfica dos FPP.

No capítulo 3 são apresentadas as topologias das redes implementadas, as respectivas distribuições de *links* e de cliques, bem como as técnicas empregadas para implementar mudanças topológicas. Além disso, discute-se as ferramentas estatísticas empregadas para a análise dos TPP em redes.

No capítulo 4 são apresentados os resultados das caminhadas aleatórias nas redes com as topologias implementadas, considerando diferentes condições de fronteira e

diferentes posições de partida e chegada.

Finalizando, no capítulo 5 apresentamos as conclusões e as perspectivas para os trabalhos futuros.

2 Conceitos Básicos

Este capítulo apresenta uma revisão sobre Caminhadas Aleatórias, um breve histórico sobre as principais redes, e uma introdução aos Fenômenos de Primeira Passagem.

2.1 Caminhada Aleatória

Em muitos fenômenos da natureza, algumas quantidades variam com o tempo de forma muito irregular. Em 1827, o botânico Robert Brown observou através de um microscópio, o movimento irregular de grãos de pólen suspensos em água provocado pela colisão dos grãos com as moléculas de água.

Esse movimento, o qual ficou conhecido como movimento browniano [1, 22], pode ser modelado de forma simplificada por um *random walk* (RW), ou seja, uma caminhada aleatória. O termo *random walk* surgiu de uma carta enviada ao jornal Inglês *Nature* por Karl Pearson em 1905 [23]. Em sua carta, ele pergunta para os leitores se alguém sabe qual é a probabilidade de um homem que caminha aleatoriamente, estar a uma distância entre r e $r + \delta$, após n passos do seu ponto de partida.

Em 1905, Albert Einstein tratou matematicamente o movimento browniano com base na equação de propagação de calor em uma dimensão. Esta equação já havia sido resolvida por Joseph Fourier em 1822 e aplicada a problemas de difusão em sólidos por Fick em 1855 [24]. As previsões de Einstein foram confirmadas experimentalmente pelo físico Jean Perrin em 1908. Poucos anos depois, Norbert Wiener apresentou um modelo probabilístico para o movimento das partículas, conhecido como processo de Wiener [25].

Outras abordagens para o movimento browniano foram dadas, tais como a força flutuante proposta por Paul Langevin [26], a equação de Fokker-Planck [27] e a abordagem analítica de Mark Kac [28].

Iremos apresentar uma solução para um RW discreto em d dimensões. Sejam $X_1, X_2, \dots$ variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas¹ (i.i.d.), definidas no espaço de probabilidade $(\Omega, \mathcal{F}, P)$ com,

$$\Omega = \{(\omega_1, \omega_2, \dots) : \omega_i \in \mathcal{S}\}$$

$$\mathcal{F} = \mathcal{S} \times \mathcal{S} \times \dots$$

$$P = \mu \times \mu \times \dots \quad \mu \text{ é distribuição de } X_i$$

$$X_n(\omega) = \omega_n,$$

¹ Uma sequência de variáveis aleatórias é i.i.d. se cada variável aleatória tiver a mesma distribuição de probabilidade das outras e todas forem mutuamente independentes.

e que assumem valores X_i na rede inteira Z^d com probabilidade

$$P(X_i = e_j) = \frac{1}{2d},$$

para cada um dos d vetores unitários e_j que geram o espaço da rede Z^d . Um RW simples que parte de x em Z^d é um processo estocástico S_n , em que

$$S_n = x + X_1 + \dots + X_n, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

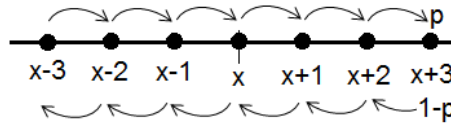


Figura 1 – Processo de salto por um caminhante aleatório ao longo de um eixo, Fonte: [22].

Considerando a vizinhança de Von Neumann [29], cada sítio da rede unidimensional (Z^1) tem dois vizinhos, um à esquerda e outro à direita, conforme é apresentado na Figura 1. Na rede regular quadrada (Z^2), cada sítio possui quatro arestas que o liga aos quatro primeiros sítios vizinhos. Similarmente, em três dimensões (Z^3), cada sítio possui seis vizinhos.

Neste estudo, um RW simples na rede é um caminho aleatório definido em seus sítios. O caminhante parte de um dado sítio da rede e a cada passo de tempo salta para um sítio vizinho, que é escolhido aleatoriamente e com mesma probabilidade. Uma vez que o próximo salto independe do histórico do passeio aleatório, trata-se de um processo Markoviano.

Inicialmente, vamos discutir algumas características básicas da distribuição de probabilidade de um RW simples em uma dimensão. Seja $P(x, N)$ a probabilidade de que o caminhante se encontre no sítio x depois do N -ésimo passo de tempo. A evolução da probabilidade de ocupação pode ser descrita pela seguinte equação de recorrência

$$P(x, N + 1) = pP(x - 1, N) + qP(x + 1, N). \quad (1)$$

A Equação 1 indica que a probabilidade do caminhante estar no sítio x no tempo $N + 1$ é dada por p vezes a probabilidade dele estar em $x - 1$, mais q vezes a probabilidade dele estar em $x + 1$. No caso particular em que $p = q = 1/2$ a caminhada aleatória é simétrica.

A literatura [1, 22] apresenta a distribuição binominal como solução da Equação 1,

$$P(x, N) = \frac{N!}{\left(\frac{N+x}{2}\right)! \left(\frac{N-x}{2}\right)!} p^{\frac{N+x}{2}} q^{\frac{N-x}{2}}. \quad (2)$$

Aplicando o Teorema Central do Limite quando $N \rightarrow \infty$, a solução tende a uma distribuição Gaussiana:

$$\frac{P(x, N)}{N \rightarrow \infty} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi Npq}} e^{-(x-Np)^2/2Npq}. \quad (3)$$

Como a distribuição de probabilidade de um RW simples em uma dimensão aproxima-se de uma distribuição Gaussiana para tempos longos, o caminhante visita o sítio de partida infinitas vezes. O retorno ao ponto de partida foi abordado por Pólya [30], sendo classificado como RW recorrente. Em contrapartida, se o caminhante nunca retorna ao ponto de partida, o RW é dito transiente. O Teorema de Pólya afirma que um RW simples é recorrente em uma e em duas dimensões, e transiente para três ou mais dimensões.

Para que o caminhante aleatório em uma dimensão retorne ao ponto de partida é necessário que o número de passos dados para a esquerda seja igual aos dados para a direita, fato que somente ocorre com números pares de passos. Então, temos que $P_1(m) = P_1(S_m = 0) = 1$ se e só se $m = 2n$, que permite reescrevermos a Equação 2 como

$$P_1(0, 2n) = \frac{(2n)!}{n!n!} \left(\frac{1}{2}\right)^n \left(\frac{1}{2}\right)^n. \quad (4)$$

Aplicando-se a aproximação de Stirling, $k! \sim k^{k+1/2} e^{-k} \sqrt{2\pi}$, para $k \rightarrow \infty$, tem-se

$$P_1(0, 2n) \sim \frac{(2n)^{2n+1/2} e^{-2n} \sqrt{2\pi}}{n^{2n+1} e^{-2n} (2\pi) 2^{2n}} = \frac{2^{2n+1/2} n^{2n+1/2}}{n^{2n+1} 2^{2n} \sqrt{2\pi}} = \frac{1}{\sqrt{n\pi}}. \quad (5)$$

Seja V o número de visitas do caminhante aleatório ao ponto de partida, incluindo a visita no tempo zero, com m passos pares em um tempo finito ($\tau_n < \infty$),

$$V = \sum_{m=0}^{\infty} 1_{(S_m=0)} = \sum_{n=0}^{\infty} 1_{(\tau_n < \infty)}.$$

Uma vez que V é uma variável aleatória discreta, segue que o valor esperado de V é dado por

$$E[V] = \sum_{m=0}^{\infty} P(S_m = 0) = \sum_{m=0}^{\infty} P(\tau_m < \infty). \quad (6)$$

Seja τ_1 o tempo do primeiro retorno ao ponto de partida, para qualquer RW são equivalentes, [25]:

$$i) P(\tau_1 < \infty) = 1$$

$$ii) P(S_m = 0 \text{ i.o.}) = 1$$

$$iii) \sum_{m=0}^{\infty} P(S_m = 0) = \infty.$$

Verificaremos as proposições (i, ii, iii) apresentadas acima, em (a) e (b) a seguir:

a) Verificando que (i) $\Rightarrow$ (ii)

$$P(\tau_1 < \infty) = 1 \Rightarrow P(\tau_n < \infty) = 1 \quad \forall n \in \mathbb{N}$$

$$P(S_m = 0 \text{ i.o.}) = P(\exists(a_1, a_2, \dots, a_k, \dots) : a_i \in \mathbb{N} : S_{ai} = 0)$$

Como $P(\tau_n < \infty) = P(\exists(a_1, a_2, \dots, a_n) : a_i \in \mathbb{N} : S_{ai} = 0)$ temos que

$$P(S_m = 0 \text{ i.o.}) = \lim_{n \rightarrow \infty} P(\tau_n < \infty) = 1.$$

b) Verificando que (ii) $\Rightarrow$ (iii)

$$P(S_m = 0 \text{ i.o.}) = 1 \Rightarrow P(\tau_n < \infty) = 1 \quad \forall n \in \mathbb{N}$$

$$\text{Como } \sum_{m=0}^{\infty} P(S_m = 0) = \sum_{n=0}^{\infty} P(\tau_n < \infty) = \sum_{m=0}^{\infty} 1 = \infty.$$

Portanto, uma vez que $P(\tau_1 < \infty) = 1$, então $P(\tau_n < \infty) = 1 \quad \forall n$ e $P(S_m = 0) = 1 \quad \forall m$. E o valor esperado dado pela Equação (6) pode ser reescrito como

$$\begin{aligned} E[V] &= \sum_{m=0}^{\infty} P(S_m = 0) = \sum_{n=0}^{\infty} P(\tau_n < \infty) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} P(\tau_1 < \infty)^n = \frac{1}{1 - P(\tau_1 < \infty)}. \end{aligned} \quad (7)$$

Sobre o fato de $P(\tau_n < \infty) = P(\tau_1 < \infty)^n$ na Equação 7, uma abordagem detalhada é apresentada no anexo A.

A Equação 5 mostra que $P_1(\tau_{2n}) \sim \frac{1}{\sqrt{n\pi}}$ quando $n \rightarrow \infty$, para o retorno ao ponto de partida de um RW simples em uma dimensão, que garante $P(\tau_1 < \infty)$. Substituindo este resultado na Equação 7 e fazendo $n \rightarrow \infty$, tem-se que o valor esperado é igual a um, garantido que o caminhante retorne à origem com um grande número de passos.

O Teorema de Pólya afirma que um RW simples é recorrente em duas dimensões, isso implica $S_m = 0$. Seja $0 \leq m \leq n$, a condição $S_m = 0$ ocorrerá se o caminhante der m passos para cima, m passos para baixo, $n - m$ passos para a direita e $n - m$ passos para a esquerda, que leva à equação

$$\begin{aligned} P_2(0, 2n) &= \left(\frac{1}{4}\right)^n \left(\frac{1}{4}\right)^n \sum_{m=0}^n \frac{(2n)!}{m!m!(n-m)!(n-m)!} \\ &= 4^{-2n} \sum_{m=0}^n \frac{(2n)!}{n!n!} \frac{n!}{m!(n-m)!} \frac{n!}{m!(n-m)!} \\ &= 4^{-2n} \binom{2n}{n} \sum_{m=0}^n \binom{n}{m} \binom{n}{n-m} \\ &= 4^{-2n} \binom{2n}{n} \binom{2n}{n} \\ &= 4^{-2n} \binom{2n}{n}^2 = P_1(0, 2n)^2 = \frac{1}{n\pi}. \end{aligned} \quad (8)$$

No desenvolvimento da equação aplicamos a identidade de Vandermonde $\sum_{k=0}^r \binom{m}{k} \binom{n}{r-k} = \binom{m+n}{r}$, $m, n, r \in \mathbb{N}^*$, especificamente, o caso particular em que $m = n = r$, tornando-se

$$\sum_{k=0}^n \binom{n}{k} \binom{n}{n-k} = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k}^2 = \binom{n+n}{n} = \binom{2n}{n}.$$

A Equação 8 estabelece a probabilidade de retorno ao ponto de partida de um RW em duas dimensões, e substituindo este resultado no cálculo do valor esperado, Equação 7, pode se concluir que quando o número de passos $n \rightarrow \infty$, é esperado que o caminhante retorne à origem.

Este projeto se concentra no estudo de redes em domínios bidimensionais, e portanto não será apresentada a demonstração do Teorema de Polya para o caso transiente, mas a consulta à demonstração pode ser feita na referência [31].

2.2 Um Histórico sobre Redes

2.2.1 A Origem da Teoria dos Grafos

Em 1736, Euler propôs uma rigorosa demonstração matemática para o problema conhecido como “as sete pontes de Königsberg”, criando o ramo da matemática que viria a ser conhecido como teoria dos grafos. A próspera cidade de Königsberg na antiga Prússia, situada às margens do rio Prególia, e tendo a sua economia fortemente dependente do tráfego intenso de navios e do comércio de café, possuía sete pontes sobre o rio. Cinco delas ligavam a ilha de Kneiphof a outras regiões da cidade e as outras duas atravessavam os braços do rio, conforme mostrado na Figura 2.

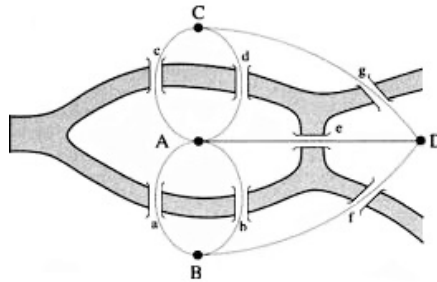


Figura 2 – Representação das pontes de Königsberg: ilha de Kneiphof (A) e a faixa de terra (D) entre as duas vertentes do Pregel, Fonte: [32].

Alguns moradores de Königsberg entretinha-se com o seguinte problema: seria possível atravessar as sete pontes sem repetir nenhuma? Euler demonstrou que tal caminho não existia com as sete pontes. Na solução do problema, Euler representou as faixas de terra por quatro nós, e as pontes por sete *links* que ligavam as porções de terra, criando-se então o primeiro grafo. Ele observou que os nós com um número ímpar de *links* deveriam ser o ponto inicial ou final do percurso. Como o grafo de Königsberg tinha mais de dois nós com um número ímpar de *links* não era possível encontrar esse caminho. Foi tamanho o interesse por esse problema que, em 1875, uma nova ponte foi construída entre os pontos

B e C (vide Figura 2). Com a nova ponte, somente os nós A e D permaneceram com um número ímpar de *links*, tornando possível encontrar o tão desejado caminho.

O resultado de Euler exibe a importância de se conhecer as propriedades do grafo. A adição de apenas um *link* mudou o layout do grafo permitindo atravessar as sete pontes sem passar pela mesma ponte duas vezes.

2.2.2 Rede Aleatória

No séc. XX, os matemáticos húngaros, Paul Erdős e Alfred Rényi, publicaram vários trabalhos sobre a teoria dos grafos, introduzindo o conceito de grafos aleatórios. Exemplificando a formação de uma rede social, propuseram que se cada pessoa de uma festa conhecesse um outro convidado durante a festa, todos os presentes estariam conectados ao final. No decorrer de uma festa, pessoas desconhecidas formam pequenos grupos de amizade, e se deslocam pelo salão construindo novos laços de amizade. Destes laços emerge uma rede de conhecidos com significativo número dos convidados. Em um tempo suficiente, supondo que cada participante tenha em média uma ligação, surgirá um enorme aglomerado, ou seja, um *cluster*. Deste ponto em diante é possível a partir de qualquer convidado chegar a um outro, através dos laços de amizade entre os convidados da festa.

Anterior a descoberta de Erdős-Rényi a teoria dos grafos lidava apenas com estruturas regulares. No entanto, sistemas complexos como o retículo endoplasmático das células eucariontes ou a Internet são representados por grafos não regulares. E foi a partir do modelo de Erdős-Rényi, que a complexidade inerente às redes reais passaram a ser melhor apresentadas por grafos aleatórios.

O modelo de grafo aleatório proposto em 1960 por Erdős-Rényi [33] assume que partimos de N vértices e conectamos cada par de vértices com probabilidade p . A probabilidade de que um vértice tenha k arestas segue uma distribuição de Poisson. O histograma com o formato dessa distribuição foi derivado e testado em 1982, pelo matemático Béla Bollobás, um dos alunos de Erdős. A distribuição de Poisson possui um pico acentuado, indicando que a maioria dos nós têm número de *links* próximo à média. Em ambos os lados do pico, a distribuição diminui rapidamente, tornando-se raros os desvios a partir da média. Dessa maneira, apesar das ligações aleatórias entre os nós, quase todos eles terão o mesmo número de ligações.

O conceito de aleatoriedade adotado por Erdős-Rényi tem como característica predominante a média. Como se a maioria das pessoas tivessem aproximadamente o mesmo número de conhecidos, ou que a maioria das empresas negocia-se com aproximadamente o mesmo número de clientes. Eles equipararam complexidade a aleatoriedade. Toda rede real que fosse considerada suficientemente complexa era descrita como randômica [32].

2.2.3 O Fenômeno de Redes de Mundo Pequeno

Frigyes Karinthy foi um poeta e escritor húngaro, muito famoso por escrever *Igy Irtok Ti*. Mas foi em 1929 que escreveu uma narrativa intitulada *Láncszemek*, ficção que conectava uma pessoa a qualquer outra da terra por no máximo 5 conexões. Esta deve ser a referência mais próxima dos seis graus de separação descobertos por Stanley Milgram em 1967 [32].

O psicólogo Stanley Milgram, professor em Harvard, profissional reconhecido da psicologia experimental interessou-se pelo estudo da estrutura das redes sociais. Em um dos seus trabalhos [34], ele verificou a distância entre duas pessoas quaisquer nos Estados Unidos. O termo distância refere-se ao número de conhecidos necessários para conectar duas pessoas quaisquer selecionadas ao acaso.

Para a realização do experimento foram enviadas o total de 160 cartas aos moradores de Wichita em Kansas e Omaha em Nebraska, escolhidos aleatoriamente. Estas cartas continham as instruções que os destinatários deveriam seguir até que os destinatários finais fossem atingidos em Sharon ou Boston. Somente 42 cartas chegaram ao destinatário final. Elas permitiram que Milgram determina-se 5,5 como sendo o número médio de pessoas intermediárias. Bem próximo às 5 conexões da narrativa de Karinthy. Há relatos que Milgram nunca usou o termo Seis Graus de Separação, que deixou o seu experimento mundialmente conhecido.

Apesar do grande número de pessoas na sociedade, o elevado número de ligações entre elas faz com que o número de pessoas intermediárias, entre duas quaisquer, seja em média seis, o que revela como o mundo é pequeno. O termo Mundo Pequeno familiarizou-se entre pesquisadores, porque várias outras redes reais também detêm esta característica, como por exemplo, a rede de citações de trabalhos científicos, a *World Wide Web* e a rede neural do verme *Caenorhabditis elegans*.

O modelo de rede proposto por Watts e Strogatz [35], pioneiro em tratar o Fenômeno de Mundo Pequeno em um grafo, apresenta distribuição de grau que segue uma lei de Poisson. A partir do mapeamento da *Web*, realizado pelo grupo de pesquisa do físico Albert-László Barabási, foi possível perceber que redes reais apresentam o Fenômeno de Mundo Pequeno e distribuição de graus que segue uma lei de potência. O modelo de rede proposto por Barabási-Albert [14] é conhecido como rede livre de escala. A seguir, discutimos alguns aspectos destes dois modelos de redes de mundo pequeno.

2.2.3.1 O Modelo de Watts e Strogatz

Duncan Watts e seu orientador de doutorado, Steven Strogatz, estavam interessados em grupos que agiam em sincronismo, como por exemplo, um público batendo palmas, vagalumes brilhando e grilos sincronizando os seus cri-cris (ruído imitativo do canto dos grilos).

Em 1990, Watts tentava interpretar como os grilos cantavam em sincronicidade, porém a observação de alguns animais capturados não foi suficiente, pois era necessário analisar o grupo de grilos em seu habitat natural. Em uma conversa casual com seu pai, Watts se deparou com o conceito dos seis graus de separação, então o estudo do sincronismo foi substituído pelo estudo das redes.

Watts partiu da simples observação de que muito provavelmente dois de seus amigos também se conheciam. A rede social formada não poderia ser randômica como acreditavam Erdős e Rényi. Porque neste modelo os nós se ligam aleatoriamente, e então, a probabilidade que os dois amigos se conhecessem seria a mesma que quaisquer outros desconhecidos da sociedade. Entretanto, muitas pessoas têm círculos de amigos que todos se conhecem.

A Rede de Mundo Pequeno (RMP) nomeada em analogia ao fenômeno de mundo pequeno, proposta por Watts e Strogatz [35], enfatiza um modelo que transita entre uma rede regular e uma rede aleatória, sendo altamente clusterizada e com a presença de caminhos curtos como em grafos aleatórios.

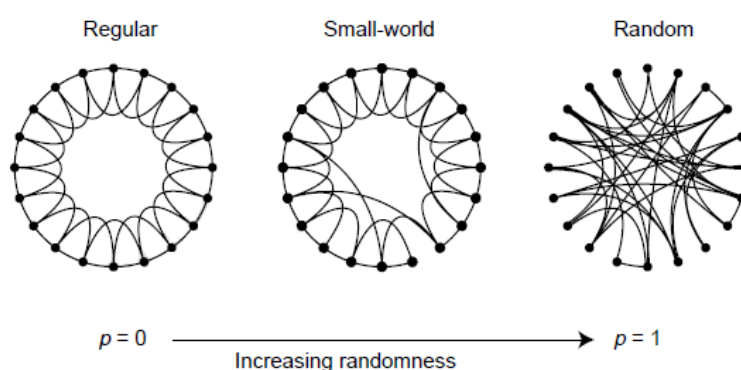


Figura 3 – Tipos de rede: regular, mundo pequeno e aleatória. Transição entre um anel regular e uma rede aleatória, sem alterar o número de vértices ou arestas do grafo. Fonte: [35].

O procedimento de construção da RMP, proposto por Watts e Strogatz, inicia-se com uma rede em um anel com n vértices e k arestas por vértice que ligam os 2 vértices mais próximos e os vizinhos destes, formando uma rede unidimensional conforme ilustrada na Figura 3. Cada aresta é reconectada a um vértice escolhido aleatoriamente com probabilidade p ($0 < p \leq 1$). Este processo aproxima sítios que eram muito afastados e faz com que um sítio fique em média a seis cliques de qualquer outro sítio da rede, o que reproduz o fenômeno de mundo pequeno [14].

Além da fronteira das redes sociais, Watts e Strogatz descobriram que o mapa de conexão neural do verme *Caenorhabditis elegans* revela um alto grau de clusterização, e este mesmo padrão foi observado na rede elétrica do oeste americano. Estas observações deixam claro que em varias redes, alguns grupos são densamente conectados e estão

ligados por eventuais *links* fracamente conectados. O modelo de Watts-Strogatz foi pioneiro em concatenar clusterização e aleatoriedade em um mesmo grafo.

2.2.3.2 O Modelo de Barabási e Albert

A clusterização descoberta por Watts e Strogatz rompia com o universo randômico de Erdős-Rényi. Mas os pesquisadores ainda não haviam interpretado o fato de que, em vários sistemas complexos, alguns nós tinham um elevado número de ligações, enquanto que outros possuíam um baixo número de ligações. Os nós com inúmeras ligações são chamados de nós conectores ou *hubs*.

O grupo de pesquisa do físico Albert-László Barabási investigava o papel dos conectores durante um trabalho de mapeamento da *Web*. A visibilidade de uma página da *Web* depende do número de *links* de entrada que ela possui, quanto maior esse número mais visível ela se torna. O grupo possuía um robô para mapear a *Web*. Em uma amostra com 203 milhões de páginas, 90% delas tinham dez ou menos *links* que as referenciavam. Enquanto, que cerca de três páginas eram referenciadas por outras 1 milhão de páginas.

O pequeno mapa da *Web* derrubou a teoria de que ela é um espaço democrático onde todos são vistos com a mesma probabilidade. Na verdade, ele mostrou que a *Web* é dominada por poucos hubs extremamente conectados. Surpreendentemente, o histograma da conectividade do nó seguia uma lei de potência, contrariando as inúmeras leis da natureza que seguiam uma distribuição de Poisson.

Para interpretar a formação dos *hubs*, Barabási e Albert abandonaram as premissas do número fixo de nós e da conexão aleatória entre os nós. Por sua vez, passaram a incorporar crescimento da rede e conexão preferencial entre os nós. Eles perceberam que as redes reais crescem ao longo da sua existência e que novos nós se conectam aos nós mais conectados da rede formando os *hubs*.

A construção da rede Barabási-Albert [14] inicia-se com alguns poucos vértices e com algumas ligações entre eles. A cada passo de tempo novos vértices são adicionados à rede, sendo conectados aos já existentes. O caráter de conexão preferencial é introduzido no modelo, ao considerar que a probabilidade Π de que cada novo vértice conecte-se a um vértice i da rede, dependa da conectividade K_i desse vértice, da seguinte forma $\Pi(K_i) = K_i / \sum_j K_j$. A probabilidade $P(k)$ de que um vértice da rede se conecte a k outros vértices decai com uma lei de potência $P(k) \sim k^{-\gamma}$, com expoente $\gamma_{\text{modelo}} = 2,9 \pm 0,1$.

À medida que a rede cresce, os vértices que adquirem mais conexões que os outros aumentam a sua taxa de conectividade. Os primeiros vértices da rede são os mais prováveis a terem o maior número de ligações, devido o caráter de conexão preferencial. Os vértices mais conectados fazem mais ligações, este fenômeno é conhecido como “o rico fica cada vez mais rico, e o pobre fica cada vez mais pobre”.

A descoberta dos *hubs* desencadeou inúmeras pesquisas em diversas áreas. O grupo de pesquisa de Barabási além da *Web* também investigou a rede de atores de Hollywood e a rede de energia elétrica do oeste dos Estados Unidos [32], ambas distribuições seguiam uma lei de potência, com expoente γ entre 2 e 3. A ausência de um número de *links* característico nestas redes impôs o abandono da ideia de escala e por conseguinte ficaram conhecidas como redes sem escala ou redes livres de escala.

2.3 Terminologia e Métricas de Redes

Nesta seção são apresentados os conceitos básicos sobre as redes e algumas métricas que permitem analisá-las.

Uma rede consiste de um conjunto de sítios conectados por arestas. Dizemos que um sítio j é vizinho de um sítio i se há uma aresta que os conecta.

Uma aresta não direcionada estabelece uma conexão simétrica entre os sítios, isto é, se um sítio j se conecta ao sítio i por uma aresta não direcionada, então o sítio i também reconhece o sítio j como seu vizinho. Uma rede construída com arestas não direcionadas é chamada de rede não direcionada.

Uma aresta direcionada estabelece uma conexão assimétrica de um sítio para outro, isto é, se um sítio j se conecta ao sítio i por uma aresta direcionada, a conexão não é recíproca do sítio i para o sítio j .

A seguir são definidas as seguintes propriedades estruturais de uma rede: tamanho, grau e densidade.

O tamanho de uma rede é determinado pelo seu número de sítios e de arestas.

O grau de um sítio é o número de arestas que estão conectadas a ele. Em uma rede regular todos os sítios têm o mesmo grau. Em uma rede não regular, o sítio com maior grau é chamado de *hub*.

A densidade d de uma rede é a fração entre 0 e 1, que relaciona o número de arestas a presentes, com o número de arestas possíveis. Para uma rede R não direcionada, com a arestas e s sítios a densidade $d(R)$ é dada por $d(R) = \frac{2a}{s(s-1)}$, e para uma rede direcionada é dada por $d(R) = \frac{a}{s(s-1)}$. As redes definidas como densas são aquelas em que há grande quantidade de arestas, e redes esparsas são aquelas que possuem pequenas quantidades de arestas.

O número de cliques entre dois sítios da rede, se refere ao menor número de arestas que separam estes sítios, ou seja, o caminho de menor comprimento, também chamado de distância geodésica em um grafo. Se a rede é não direcionada o número de cliques é o mesmo, independentemente, se o sítio é de partida ou de chegada. Pode-se denotar o caminho de menor comprimento entre o sítio i e o sítio j como $d(i \rightarrow j)$, e obviamente,

$$d(i \rightarrow i) = 0.$$

A partir do conceito de caminho de menor comprimento, pode-se definir importantes métricas para caracterizar as propriedades topológicas de redes [36], como por exemplo: comprimento do caminho característico, excentricidade, diâmetro e raio.

O comprimento do caminho característico (L) pode ser expresso por

$$L = \frac{\sum_{ij} d(i \rightarrow j)}{s(s-1)}$$

em que s é o número de sítios. Esta fórmula é válida para redes não direcionadas e também para direcionadas. Ela calcula o comprimento médio dos caminhos mais curtos para todos os pares de sítios da rede, fornecendo uma distância esperada entre dois nós escolhidos aleatoriamente. Esta métrica caracteriza o quão grande ou pequeno é o mundo representado pela rede.

A excentricidade ε é definida para cada sítio, e fornece o número de cliques entre um sítio e qualquer outro sítio mais distante da rede, podendo ser expressa por

$$\varepsilon(i) = \max_j d(i \rightarrow j).$$

O diâmetro D fornece a excentricidade máxima da rede, identificando o par de sítios que estão separados pelo maior número de cliques, podendo ser expresso por

$$D = \max_i \varepsilon(i).$$

O raio R fornece a excentricidade mínima da rede, identificando o menor número de cliques necessários para alcançar todos os nós da rede a partir de um mesmo sítio de partida, podendo ser expresso por

$$R = \min_i \varepsilon(i).$$

A excentricidade de sítios pode ser usada para detectar quais sítios são mais centrais na rede. Dependendo da questão de interesse, informações específicas podem ser obtidas utilizando-se as medidas estatísticas baseadas na centralidade de sítios: centralidade de grau, centralidade de intermediação, centralidade de proximidade, centralidade do vetor próprio e *PageRank*, que são apresentadas a seguir.

A centralidade de grau CD ou *degree centrality* é o grau do sítio normalizado, isto é, o grau do sítio dividido grau máximo possível ($n - 1$), expresso por

$$CD(i) = \frac{\text{grau}(i)}{(n-1)}.$$

A centralidade de intermediação (CI) ou *betweenness centrality* de um sítio é a probabilidade de o caminho mais curto entre dois sítios quaisquer da rede passar por esse

sítio, podendo se expresso por

$$CI(i) = \frac{1}{(n-1)(n-2)} \sum_{j \neq i, k \neq i, j \neq k} \frac{N_{cc}(j \xrightarrow{i} K)}{N_{cc}(j \rightarrow K)}$$

em que $N_{cc}(j \rightarrow K)$ é o número de caminhos mais curtos do sítio j para o sítio k , e $N_{cc}(j \xrightarrow{i} K)$ é o número de caminhos mais curtos do sítio j para o sítio k que passam pelo sítio i .

A centralidade de proximidade (CP) ou *closeness centrality* expressa por

$$CP(i) = \left(\frac{\sum_j d(i \rightarrow j)}{n-1} \right)^{-1}$$

representa o inverso do número médio de cliques do sítio i para todos os outros sítios. Se a $CP(i) = 1$ significa que qualquer sítio da rede pode ser alcançado a partir do sítio i com apenas um clique.

Uma matriz de adjacência $A_{n \times n}$ é uma das formas de se representar uma rede de n sítios. As entradas a_{ij} da matriz guardam a relação de adjacência dos respectivos sítios S_i e S_j , se há uma ligação entre os sítios $a_{ij} = 1$ ou $a_{ij} = 0$ caso contrário.

A centralidade do vetor próprio (CV) ou *eigenvector centrality* mede a importância de cada sítio considerando cada uma das suas arestas de entrada. Esta medida não depende apenas do número de arestas incidentes sobre o sítio, mas também a qualidade dessas ligações, podendo ser expresso por

$$CV(i) = v_i \text{ (} i\text{-ésimo elemento do vetor próprio dominante } v \text{ da matriz de adjacência da rede).}$$

O vetor próprio v é geralmente escolhido como um vetor unitário não negativo ($v_i \geq 0, |v| = 1$).

PageRank (PR) mede a probabilidade assintótica de um caminhante aleatório na rede estar no sítio i , assumindo que o caminhante se mova para um sítio vizinho escolhido aleatoriamente com probabilidade α , ou salte para qualquer sítio da rede com probabilidade $1 - \alpha$, em cada passo de tempo, podendo ser expresso por

$$PR(i) = v_i \text{ (} i\text{-ésimo elemento do vetor próprio dominante } v \text{ da seguinte matriz de probabilidade de transição)}$$

$$T = \alpha AD^{-1} + (1 - \alpha) \frac{J}{n}$$

em que A é a matriz de adjacência da rede, D^{-1} é a matriz diagonal cuja i -ésima componente diagonal é $1/\text{grau}(i)$, J é uma matriz unitária $n \times n$, e α é o parâmetro de amortecimento, geralmente é utilizado $\alpha = 0,85$.

O coeficiente de *cluster* ou *clustering coefficient* de um sítio i , em uma rede não direcionada, calcula a probabilidade de seus vizinhos serem vizinhos uns dos outros, podendo ser expresso por

$$C(i) = \frac{|\{\{j,k\} \mid d(i,j) = d(i,k) = d(j,k) = 1\}|}{\text{grau}(i)(\text{grau}(i) - 1)/2}.$$

em que o denominador é o número total de possíveis pares de sítios da vizinhança do sítio i , enquanto o numerador é o número de pares de sítios realmente conectados entre eles. Para medir o nível de *clustering* em toda a rede, o seguinte coeficiente médio de *clustering* é frequentemente utilizado

$$C = \frac{\sum_i C(i)}{n}.$$

A distribuição de *links* ou distribuição de grau é obtida a partir do grau de todos os sítios da rede, ela fornece informações sobre como a rede está estruturada. A distribuição de *links* de uma rede é uma distribuição de probabilidade

$$P(k) = \frac{|\{i \mid grau(i) = k\}|}{n},$$

isto é, a probabilidade de um sítio ter grau k .

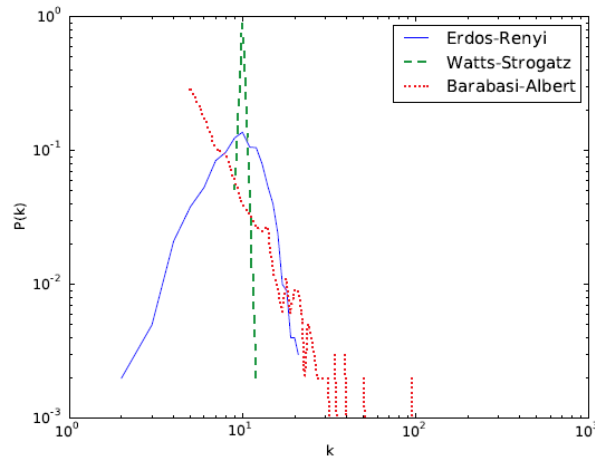


Figura 4 – Distribuições de links dos modelos de rede propostos por: Erdős-Rényi, Watts-Strogatz e Barabasi-Albert, Fonte [36].

A Figura 4 exibe as distribuições de *links*, na escala *log-log*, para os seguintes modelos de rede: rede aleatória proposta por Erdős-Rényi [33], rede de mundo pequeno proposta por Watts-Strogatz [35], e rede livre de escala proposta por Barabasi-Albert [14]. O modelo de rede aleatória apresenta uma distribuição de *links* em forma de sino um pouco inclinado. O modelo de mundo pequeno apresenta uma distribuição com um pico próximo ao número médio de *links*. O modelo de rede livre de escala apresenta uma distribuição de *links* que segue uma lei de potência, que se parece com uma reta com inclinação negativa. As significativas diferenças nas distribuições de *links* permitem identificar como a rede está estruturada.

Uma comunidade é um conjunto de nós que são conectados mais densamente um ao outro do que ao restante da rede. Muitas redes apresentam esta propriedade, e a Figura 5 exibe uma rede com a presença de três comunidades.

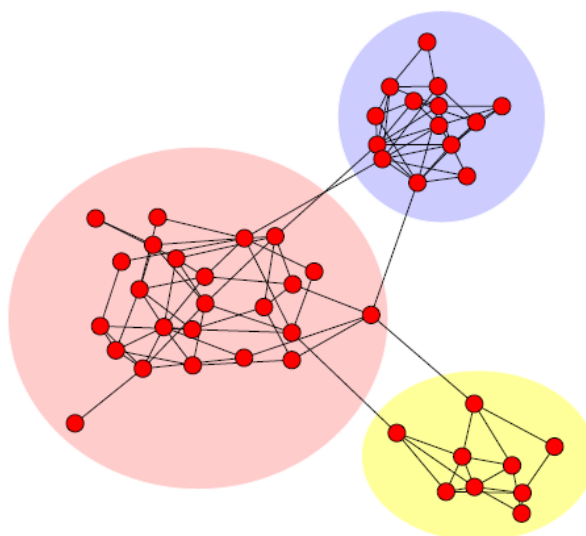


Figura 5 – Exemplo de comunidades em uma rede, Fonte [36].

2.4 Fenômenos de Primeira Passagem

Os FPP estão relacionados a diversos processos estocásticos, nos quais se tem interesse em situações em que uma variável aleatória de interesse atinja determinado valor pela primeira vez. Trata-se de uma área de pesquisa com vasto espectro de aplicações.

Vários fenômenos naturais podem ser descritos em termos de partículas executando movimentos aleatórios. Em muitos deles, o movimento é causado primordialmente por flutuações térmicas, podendo ser modelado por caminhadas aleatórias.

O caráter não determinístico da caminhada aleatória torna a distribuição espacial de probabilidades uma grandeza de fundamental interesse para análise. A probabilidade de primeira passagem, isto é, a probabilidade de que um caminhante aleatório atinja um determinado ponto do espaço pela primeira vez no tempo t , pode ser obtida diretamente da probabilidade de ocupação.

Mattos e colaboradores [21] apresentam um estudo estatístico dos TPP, por fronteiras absorventes e refletoras, de um RW fora da rede em domínios bidimensionais de diferentes geometrias. Os autores analisam questões fundamentais dos FPP, como a probabilidade de sobrevivência da partícula difusiva, o tempo necessário para absorção pela fronteira, e a importância da distância entre a posição inicial e a fronteira absorvente.

Por exemplo, no mercado financeiro o preço de uma ação varia diariamente de forma irregular, o que nos permite uma exploração natural em termos da probabilidade de primeira passagem. Um aspecto importante dos FPP é a condição para a qual o processo de caminhada aleatória termine. Os operadores de mercado estabelecem os pontos de compra e venda de ações num gráfico e enviam as ordens de compra ou venda para a

corretora.

Alguns aspectos do processo de caminhada aleatória na árvore de Cayley foram investigados por Agliari e Cassi em [37]. Uma árvore é uma rede conectada e não direcionada que não contém *loops* fechados e todos os vértices são alcançáveis entre si por algum caminho através da rede. A árvore de Cayley [38] tem dimensão infinita, e cada vértice não folha do gráfico tem um número constante de ramos. O estudo de Agliari e Cassi [37] trata de redes finitas não homogêneas, nas quais o sítio de partida para uma caminhada aleatória pode levar a diferentes limites termodinâmicos, gerando a não homogeneidade nas quantidades de primeira passagem relacionadas. A análise destes fatos contribuem para a interpretação do fenômeno da difusão em sistemas reais não homogêneos. Neste estudo, os autores investigaram a Árvore de Cayley Estendida, que possui uma estrutura completamente ordenada e exibe somente uma auto-similaridade aproximada. Os resultados apontam que a não homogeneidade topológica de redes finitas, podem desempenhar um papel crucial no comportamento das caminhadas aleatórias.

A estreita relação entre a probabilidade de retorno à origem e a distribuição de tempos de primeira passagem é tratada por Hwang e colaboradores [39]. Neste trabalho, os autores mostram que esta estreita relação exibe comportamentos como funções do tempo em redes livres de escala, que não estão presentes em redes regulares ou fractais. A rede fractal é aquela em que a separação média entre dois nós escala com o tamanho do sistema segundo uma lei de potência. Uma rede fractal mantém suas características quando repartida em partes menores, isto é, em sub-redes. Os autores também analisam o papel da dimensão espectral na classificação do comportamento de caminhadas aleatórias em redes regulares e em redes desordenadas. Os resultados apontam que a distribuição global de tempos de primeira passagem, exibem diferentes comportamentos devido a dependência com a dimensão espectral e do expoente de grau. Se a estrutura da rede é um fractal a dimensão espectral (d_e) varia no intervalo $1 < d_e \leq 2$, e se mantém fixa em $d_e = 2$ para redes não fractais, o cálculo desta medida pode ser consultado na referência [40].

2.4.1 Primeira Passagem

A Primeira Passagem (PP) de uma partícula aleatória que realiza o Movimento Browniano nos sítios de uma rede, ocorre quando a partícula atinge um sítio absorvente pela primeira vez. A Figura 6 exibe a trajetória de um caminhante aleatório, que é liberado do sítio de partida, realiza uma caminhada aleatória pelos sítios de uma rede quadrada, e atinge o alvo no sítio de chegada. No exemplo, o caminhante deslocou 11 passos, ou seja, o TPP é igual a 11, na seção 3.2 esta medida recebe um tratamento estatístico.

No chamado *narrow escape model* (NEM), uma partícula browniana difunde no interior de um domínio finito e limitado, exceto por uma estreita abertura. O instante em que a partícula atinge a abertura pela primeira vez é o TPP dessa dinâmica. Em biologia

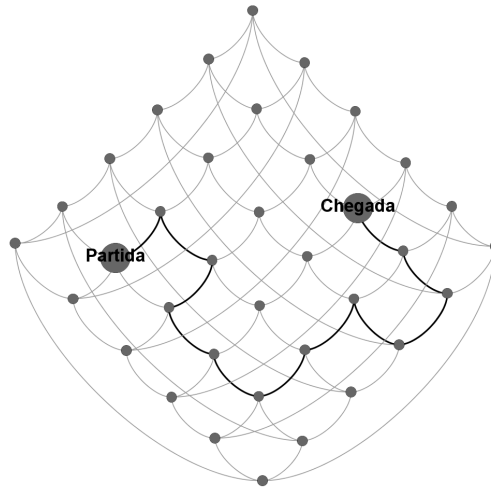


Figura 6 – Amostra da trajetória de um caminhante aleatório pelos sítios de uma rede regular quadrada com condições periódicas de fronteira.

celular o TMPP do NEM pode ser usado em diversas aplicações, como por exemplo, na exportação nuclear de moléculas de RNA mensageiras através de poros nucleares [41]. Estes são complexos de proteínas que atravessam a membrana nuclear das células de eucariontes.

As relevantes aplicações do TMPP motivaram a investigação em diferentes topologias de redes e a expressão exata para o TMPP entre dois sítios de uma rede foram obtidas nos trabalhos [17, 42].

A partir da distribuição estacionária dos Tempos de Primeiro Retorno pode-se obter o Tempo Médio de Primeiro Retorno (TMPR), ou seja, o tempo esperado para um caminhante aleatório retornar para o seu ponto de origem pela primeira vez. Em se tratando de redes, tal ponto está localizado em um dos vértices ou em uma das arestas da rede. A fórmula de Kac [43], trata a relação entre a distribuição do tempo de retorno e a distribuição do tempo de primeira chegada. Esta relação foi utilizada por Jing e colaboradores em [44], para definir que o TMPR para um vértice ou uma aresta, e coincide com o inverso da probabilidade de encontrar o caminhante neste vértice ou aresta no estágio final de equilíbrio do processo aleatório, sendo expresso por

$$\langle T \rangle = \frac{1}{P},$$

nesta expressão P é a distribuição estacionária nos vértices ou arestas e $\langle T \rangle$ é o TMPR.

3 Metodologia

Diversos problemas do mundo real podem ser suficientemente bem modelados por redes reais. O conhecimento da morfologia destas redes reais é um aspecto crucial para construção das redes de simulação.

Inicialmente apresentamos as redes implementadas neste estudo: regular quadrada, aleatória conservativa, aleatória não conservativa, aleatória de mundo pequeno e livre de escala. Em seguida, abordamos às ferramentas estatísticas utilizadas para investigar os TPP e para caracterizar as redes investigadas.

3.1 Morfologia das Redes Implementadas

Esta seção detalha as topologias das redes investigadas e os processos para a mudança de topologia. As arestas de uma rede são permutadas, ou seja, reconectadas com critérios específicos para modificar a topologia da rede. O número de nós e de arestas não se alteram durante o processo de reestruturação da rede. Neste estudo, as arestas são não direcionadas, isso permite que o caminhante aleatório dê o próximo passo em qualquer direção.

No Anexo [A](#) se encontram os algoritmos que foram implementados para realizem a mudança topológica nas redes investigadas.

3.1.1 Rede Regular Quadrada

Na implementação da rede regular quadrada, Algoritmo A3, consideramos a vizinhança de Von Neumann (quatro primeiros vizinhos de cada nó). Nesta morfologia todos os nós possuem o mesmo número de vizinhos e a rede é estática, ou seja, a vizinhança não varia ao longo da construção da rede. A dinâmica de uma caminhada aleatória nesta morfologia permite ao caminhante aleatório saltar do nó em que se encontra para um dos quatro nós vizinhos com a mesma probabilidade.

Implementar uma rede quadrada com condições periódicas de contorno, conforme ilustra a Figura [7](#), permite minimizar os efeitos de tamanho finito da rede. A figura [7](#) possui 36 sítios, note que há uma aresta conectando o sítio de uma extremidade ao seu simétrico na outra extremidade do contorno. Com isso, tanto os sítios internos quanto os sítios do contorno possuem 4 arestas cada um. Portanto, o termo condições periódicas de contorno se refere ao fato de que a rede quadrada forma uma malha contínua de sítios com quatro vizinhos.

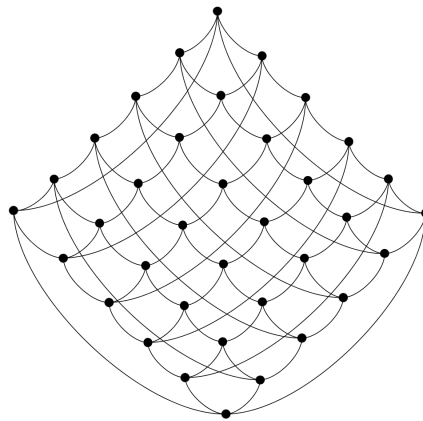


Figura 7 – Rede regular quadrada com condições periódicas de contorno. Os sítios das bordas se conectam, simetricamente, com os sítios das bordas opostas.

Para diferentes aplicações implementamos redes com fronteiras totalmente refletoras e redes com fronteiras mistas. Nesta última, os sítios das extremidades são refletores ou absorventes conforme exibe a Figura 8. Um sítio refletor não pode ser ocupado por um caminhante aleatório, que retorna ao sítio do passo anterior caso atinja o sítio refletor. Quando o caminhante atinge um sítio absorvente a caminhada aleatória finaliza e computa-se o TPP daquele caminhante.

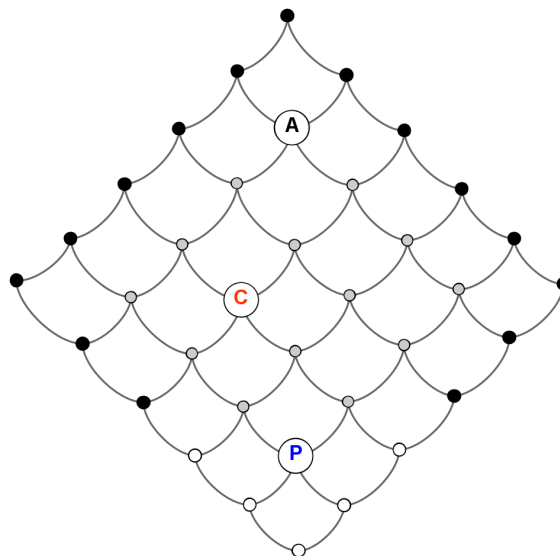


Figura 8 – Rede regular quadrada com condições de contorno mistas. Nas bordas os sítios pretos representam a condição refletora e os sítios não preenchidos representam a condição absorvente. Note a posição dos sítios em relação à fronteira absorvente: **P** (próximo), **C** (região central da rede) e **A** (muito afastado).

Na Figura 8 há uma quina com 5 sítios não preenchidos que representam uma

fronteira de sítios absorventes, e portanto, na primeira visita de um caminhante à qualquer um deles a caminhada é interrompida. Os demais 15 sítios da fronteira, preenchidos na cor preta, são refletores e repelem o caminhante. Os 16 sítios internos são considerados sítios de passagem. Note que, a pequena abertura no contorno é um exemplo do NEM [21] em uma rede limitada por sítios refletores.

Neste estudo, utilizamos um algoritmo de busca em largura [45] para medir o número de cliques entre um determinado sítio e qualquer outro sítio da rede. O que permite mapear o número de cliques de toda a rede identificando os principais casos discutidos neste estudo: os sítios que estão próximos, os sítios que estão afastados e os sítios que estão separados por um número médio de cliques.

Ao longo do texto as expressões sítio próximo à fronteira absorvente, sítio na região central da rede e sítio muito afastado da fronteira absorvente, respectivamente, referem-se às posições P, C e A que estão representadas na Figura 8. Não são as posições exatas de partida de um caminhante aleatório, trata-se de uma referência para a região na qual partirá o caminhante.

3.1.2 Rede Aleatória Conservativa

A rede aleatória conservativa (Algoritmo A4) foi implementada a partir de uma rede regular quadrada com N sítios e $2N$ ligações. As conexões regulares da rede quadrada são permutadas aleatoriamente, fazendo-se $x \times 2N$ permutações, em que a taxa de reconexão $x \in \mathbb{R}$. Ao final de todas as permutações cada sítio da rede permanece com exatamente quatro ligações. Por conservar o número de ligações da rede original é nomeada rede aleatória conservativa.

Para realizar as permutações o algoritmo sorteia aleatoriamente dois sítios, S_1 e S_2 , caso não estejam conectados e não sejam vizinhos na rede original estabelece-se uma ligação entre eles, $S_1 - S_2$. Em seguida, sorteia-se aleatoriamente um vizinho de S_1 e um vizinho de S_2 , isto é, S_{11} e S_{21} respectivamente, desde que não exista ligação entre eles e não sejam vizinhos na rede original. As conexões existentes $S_1 - S_{11}$ e $S_2 - S_{21}$ são desligadas e em seguida a nova conexão $S_{11} - S_{21}$ restabelece a cardinalidade quatro da vizinhança dos sítios. A Figura 9 exibe um exemplo do procedimento descrito, que é repetido até atingir $x \times 2N$ permutações.

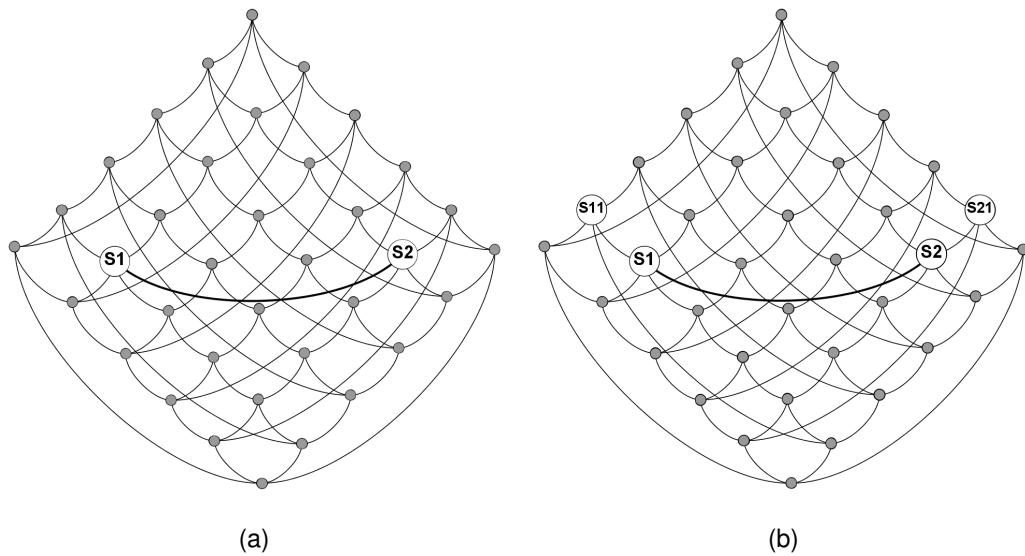


Figura 9 – Religando arestas para obter uma rede aleatória conservativa. (a) Uma nova aresta conecta os sítios S_1 e S_2 . (b) São escolhidos os sítios S_{11} e S_{21} para se desconectarem de seus respectivos vizinhos, S_1 e S_2 .

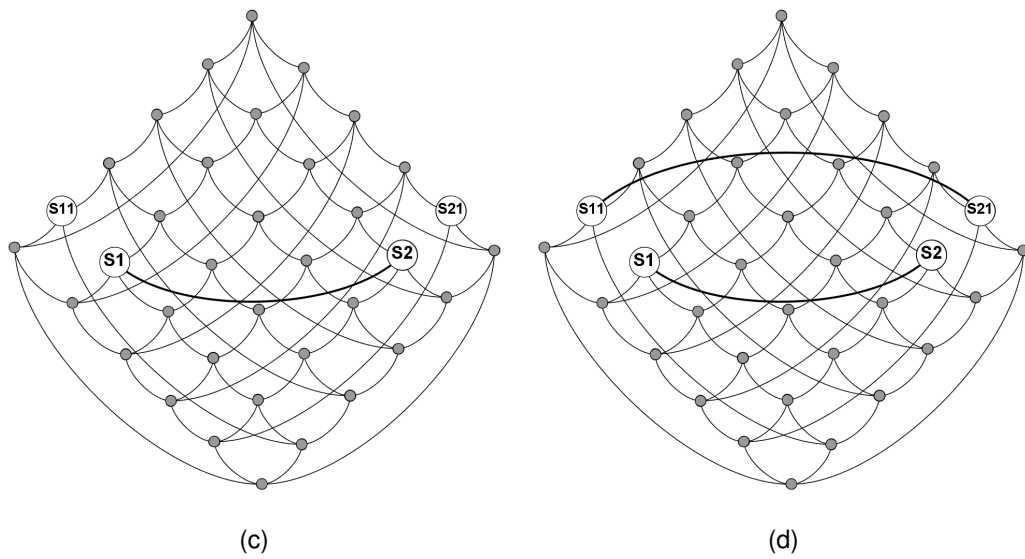


Figura 9 – Religando arestas para obter uma rede aleatória conservativa. (c) As arestas que conectavam $S_1 - S_{11}$ e $S_2 - S_{21}$, são removidas para restabelecer as 4 ligações nos sítios S_1 e S_2 . (d) Uma nova aresta conecta os sítios S_{11} e S_{21} e restabelece as 4 ligações por sítio.



Figura 10 – Rede aleatória conservativa obtida através de reconexões das arestas de uma rede quadrada.

A Figura 10 exibe uma rede aleatória com 4 arestas por sítio, sendo um total de 72 arestas que conectam os 36 sítios. Esta rede aleatória foi obtida a partir de uma rede quadrada, na qual aplicamos as regras estabelecidas para permutação de arestas. O número de ligações por sítio se mantém, mas a estrutura regular inicial é totalmente desmontada.

As reconexões de arestas criam atalhos que, em geral, provocam a redução no número de cliques entre dois sítios afastados na estrutura de rede regular. Para medir a redução do número de cliques utilizamos um algoritmo de busca em largura [45], e apresentamos na Figura 11 os níveis médios de cliques para 6 instantes da rede: 0, 10, 100, 1.000, 10.000 e 20.000 reconexões. Nesta implementação a rede possui 10.000 sítios e 20.000 arestas.

Com 20.000 reconexões menos de 10 cliques separam um sítio dos demais, o que caracteriza a formação de mundo pequeno, conforme discutido na seção 2.2.3. Portanto, a técnica apresentada nesta seção é uma alternativa aos modelos RMP e livre de escala - (seção 2.2.3), para se construir uma rede de mundo pequeno. Abordaremos novamente os modelos RMP e livre de escala, respectivamente, nas seções 3.1.4 e 3.1.5.

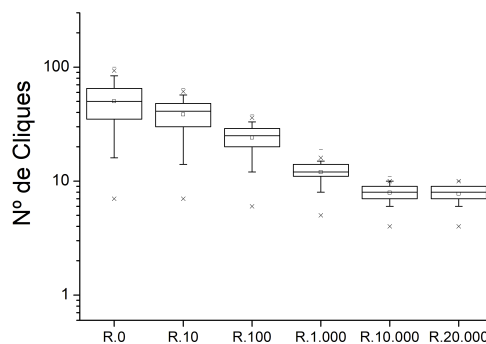


Figura 11 – Níveis médios do número de cliques entre um determinado sítio aos demais da rede, durante a mudança topológica de uma rede quadrada com 10.000 sítios para uma rede aleatória conservativa com 4 ligações por sítio, sendo exibidos 6 instantes da rede.

3.1.3 Rede Aleatória não Conservativa

A rede aleatória não conservativa (Algoritmo A5) também foi implementada a partir de uma rede regular quadrada com N sítios e $2N$ ligações. As conexões regulares da rede quadrada são permutadas aleatoriamente, fazendo-se $x \times 2N$ permutações, em que a taxa de reconexão $x \in \mathbb{R}$. Ao final de todas as permutações cada sítio da rede terá uma quantidade aleatória de vizinhos. Por não conservar o número de ligações da rede original é nomeada rede aleatória não conservativa.

Para realizar as permutações o algoritmo sorteia aleatoriamente dois sítios, S_1 e S_2 , caso não estejam conectados e não sejam vizinhos da rede original estabelece-se uma ligação entre eles, $S_1 - S_2$. Em seguida, sorteia-se aleatoriamente um sítio que é vizinho de S_1 ou de S_2 da rede original, isto é, S_{11} ou S_{21} respectivamente, para se desligar uma das ligações originais $S_1 - S_{11}$ ou $S_2 - S_{21}$. Uma ligação só é desligada se os sítios que ela conecta não ficarem desconectados do restante da rede. A Figura 12 exibe um exemplo do procedimento descrito, que é repetido até atingir $x \times 2N$ permutações.

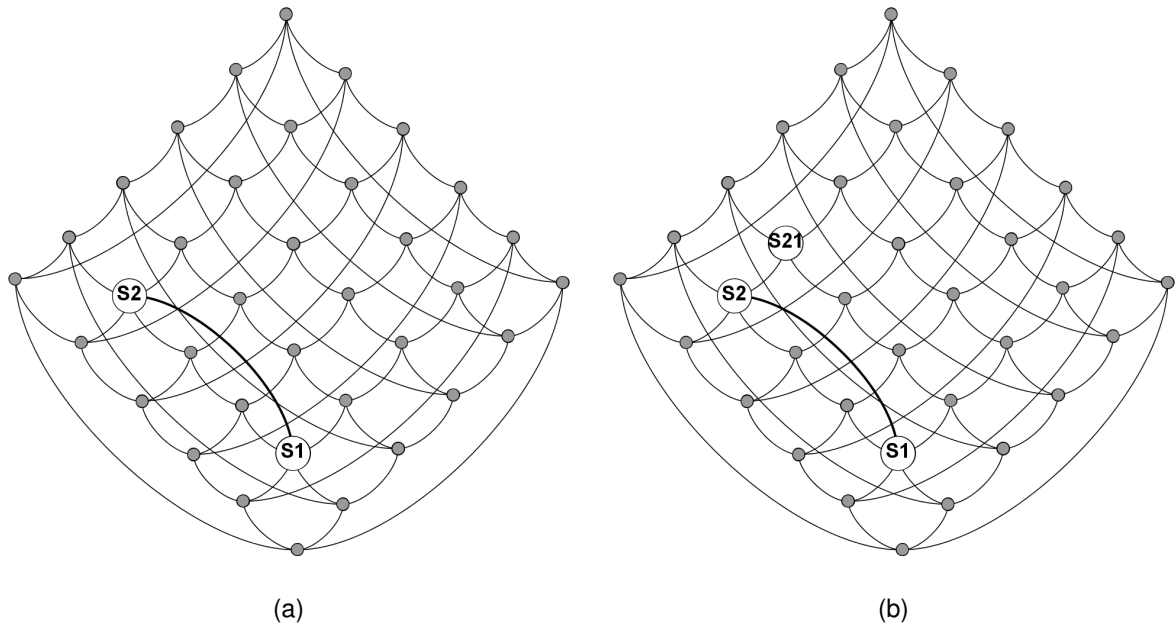


Figura 12 – Rede aleatória não conservativa. (a) Uma nova aresta conecta os sítios S_1 e S_2 .
(b) O sítio S_{21} é escolhido para ser desconectado do seu vizinho S_2 .

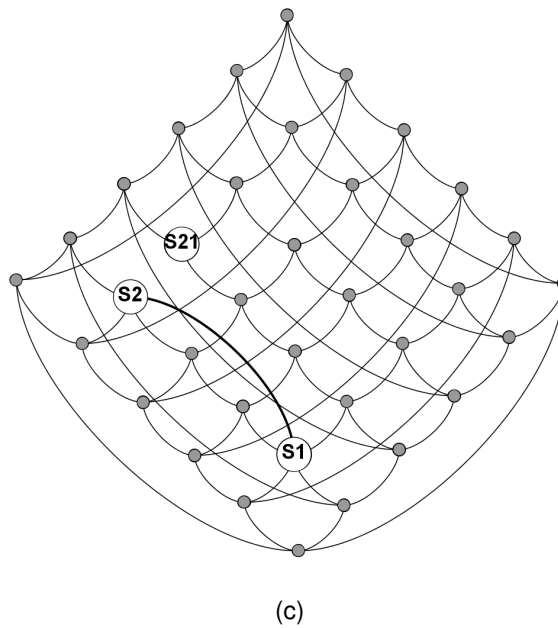


Figura 12 – Rede aleatória não conservativa. (c) A aresta que conectava $S_2 - S_{21}$ foi removida para se manter o número original de arestas da rede. O sítio S_1 passa a ter 5 conexões, S_2 mantém 4 conexões e o sítio S_{21} perde uma aresta e passa a ter 3 conexões.

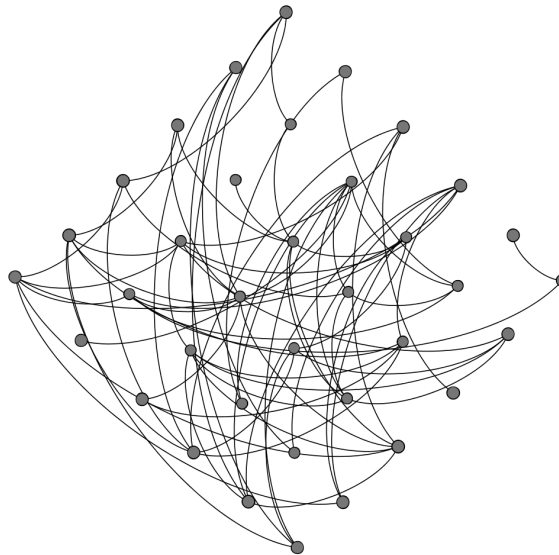


Figura 13 – Rede aleatória não conservativa obtida através de reconexões aleatórias das arestas de uma rede quadrada.

A Figura 13 exibe uma rede aleatória com 36 sítios e 72 arestas. Esta rede foi obtida a partir de uma rede quadrada, na qual aplicamos as regras estabelecidas para permutação de arestas, que permitiram realizar 70 reconexões. Neste processo de mudança topológica o

número de ligações por sítio passa a ser uma variável aleatória, e neste trabalho nomeamos de rede aleatória não conservativa.

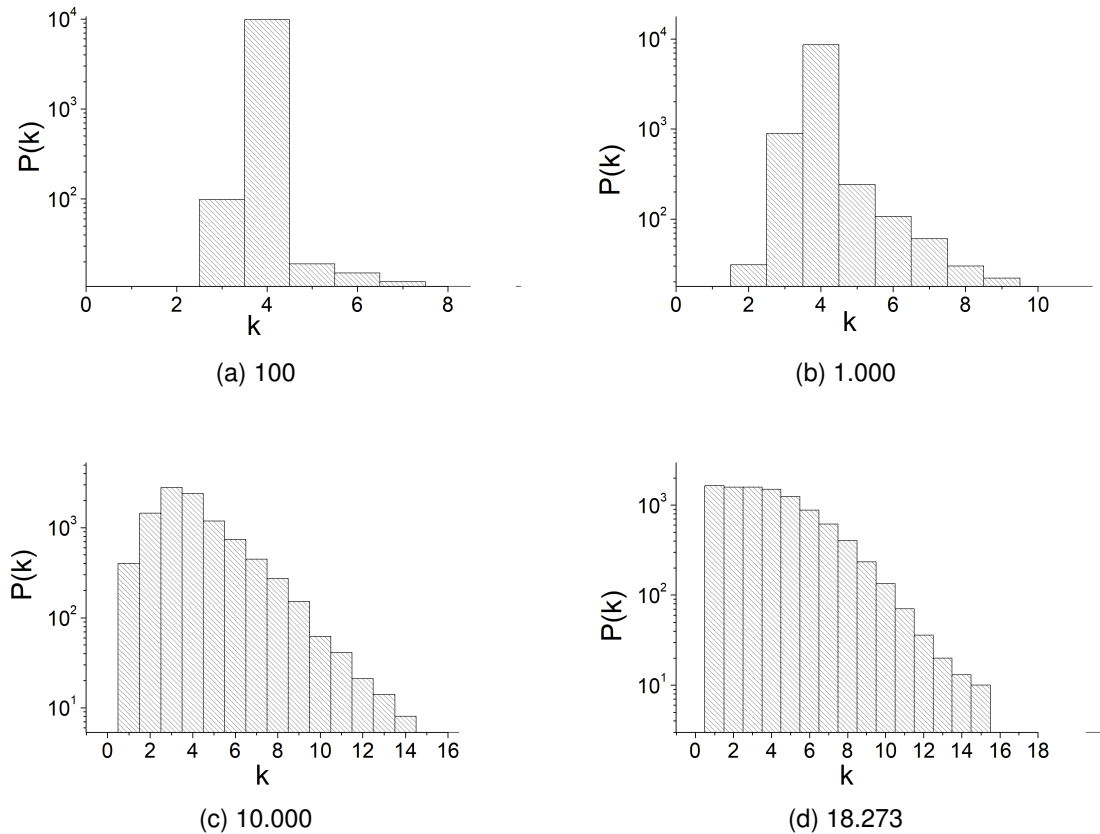


Figura 14 – Evolução da distribuição de *links* de uma rede aleatória não conservativa. A partir de uma rede regular quadrada com 10.000 sítios foram feitas 100, 1.000, 10.000 e 18.273 reconexões entre suas arestas, e as respectivas distribuições de *links* são mostradas nas figuras (a), (b), (c) e (d).

A Figura 14 exibe a evolução da distribuição dos *links* de uma rede regular quadrada com 10.000 sítios, que foi submetida a 100, 1.000, 10.000 e 18.273 reconexões de arestas. Tipicamente, o Algoritmo A5 reconecta um pouco mais que 90% das arestas, pois as restrições de reconexão impostas, geralmente, impedem que todas as arestas sejam reconectadas. Por este motivo, o número máximo de reconexões de arestas foi 18.273.

Após a realização de 1.000 reconexões, o número de arestas predominantes por sítio continua sendo quatro assim como da rede regular quadrada, Figura 14b. Com 18.273 arestas reconectadas os sítios com poucas ligações são predominantes, enquanto que os sítios com mais ligações estão gradativamente em menor número.

A Figura 15 exibe os níveis médios de cliques para 6 instantes da rede: 0, 10, 100, 1.000, 10.000 e 18.273 reconexões. Nota-se a formação de mundo pequeno a partir de 10.000 reconexões de arestas, assim como ocorreu na rede aleatória conservativa,

seção 3.1.2. Então, a rede aleatória não conservativa discutida nesta seção também é uma alternativa aos modelos RMP e livre de escala para se construir uma rede de mundo pequeno. Nas próximas seções mais detalhes sobre os modelos RMP e livre de escala serão abordados.

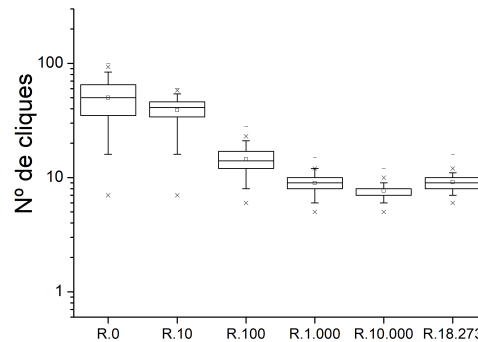


Figura 15 – Níveis médios do número de cliques entre um determinado sítio aos demais da rede, durante a mudança topológica de uma rede quadrada com 10.000 sítios para uma rede aleatória não conservativa, sendo exibidos 6 instantes da rede.

Note que os modelos de rede aleatória conservativa e aleatória não conservativa apresentam características de mundo pequeno, mas a forma como as arestas conectam os sítios moldam a topologia de cada uma destas redes. Identificar o fenômeno de mundo pequeno e a topologia da rede através de caminhadas aleatórias pelos sítios da rede é um dos objetivos deste trabalho.

3.1.4 Rede Aleatória de Mundo Pequeno

Para a implementação da rede aleatória de mundo pequeno (RMP) (Algoritmo A6) considerou-se o algoritmo de Watts-Strogatz [35], apresentado na seção 2.2.3.1. Para se controlar o número de permutações das arestas, com probabilidade um, todas as tentativas de reconexão são realizadas. Um esquema do procedimento de reconexão é apresentado na Figura 16.

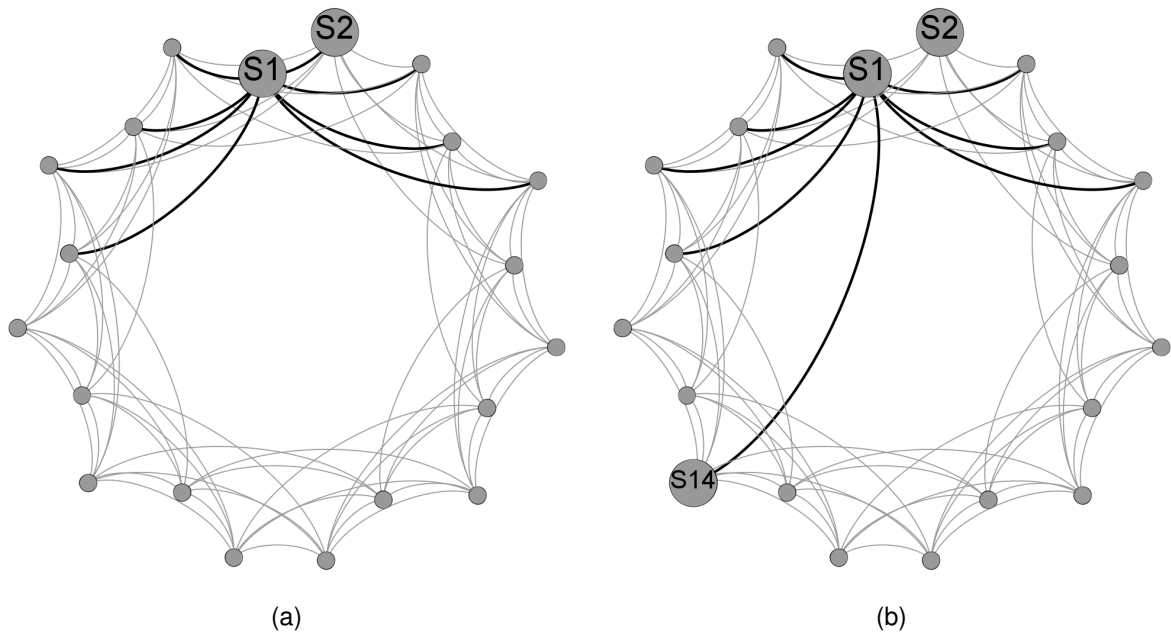


Figura 16 – Rede aleatória de mundo pequeno. Em (a) 8 arestas não direcionadas partem de cada um dos 20 sítios do anel regular. O sítio S_1 tem suas arestas em destaque, e em sentido horário, seu primeiro vizinho é o sítio S_2 . Em (b) a aresta $S_1 - S_2$ é desconectada do sítio S_2 e se conecta ao sítio S_{14} , escolhido aleatoriamente. Este procedimento é repetido em sentido horário, em que todos os sítios são considerados e as arestas dos seus primeiros vizinhos são reconectadas. Após esta primeira volta no anel, este procedimento é repetido para os segundos vizinhos de cada sítio, e se repete assim por diante até que $k/2$ voltas sejam dadas.

A Figura 17 exibe a evolução da distribuição de *links* de um anel regular com 10.000 sítios, inicialmente com 8 arestas por sítio, que foram reconectadas e transformaram o anel em uma rede aleatória de mundo pequeno. À medida que se aumenta o número de reconexões nesta rede, a distribuição dos *links* se aproxima de uma distribuição de Poisson.

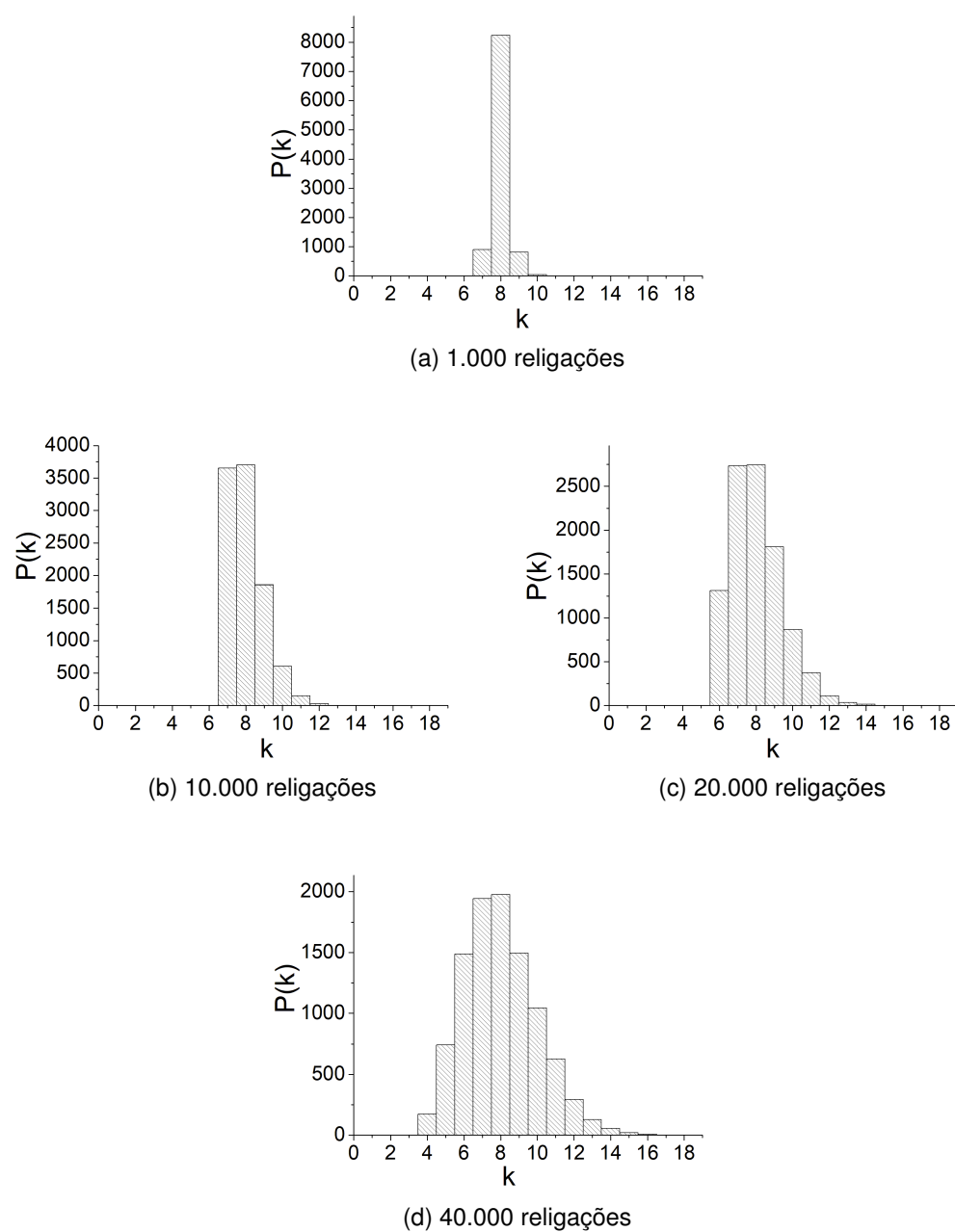


Figura 17 – Evolução da distribuição de *links* de uma rede aleatória de mundo pequeno.

Na Seção 3.1.1 apresentamos uma forma de mapear o número de cliques entre um dado sítio e todos os outros sítios de uma rede, utilizando um algoritmo de busca em largura [45]. A partir desse mapeamento podemos determinar: os sítios que estão próximos, os sítios que estão afastados e os sítios que estão separados por um número médio de cliques.

A Figura 18 exibe os diferentes níveis médios do número de cliques entre um determinado sítio aos demais sítios da rede. Foram considerados 6 instantes da rede, com os seguintes números de reconexões de arestas: 0, 10, 100, 1.000, 10.000 e 20.000.

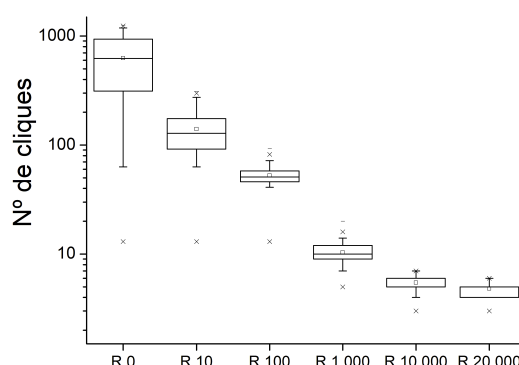
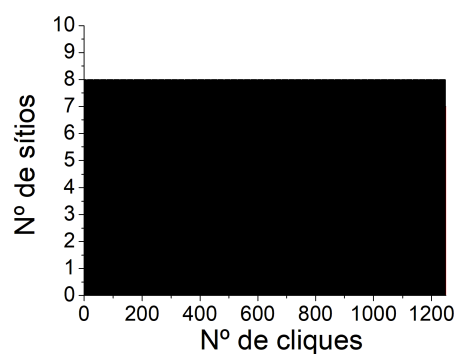


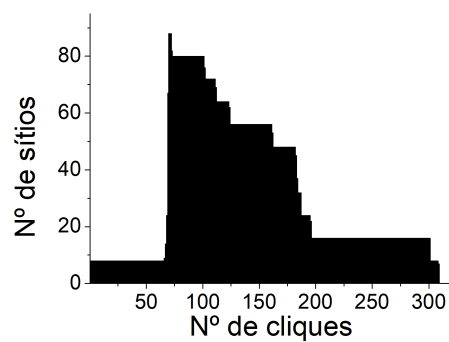
Figura 18 – Níveis médios do número de cliques entre um determinado sítio aos demais da rede, durante a mudança topológica de um anel regular com 10.000 sítios para uma rede aleatória de mundo pequeno, sendo exibidos 6 instantes da rede.

A Figura 19 exibe as distribuições de cliques para cada um dos instantes da rede que foram exibidos na Figura 18. A Figura 19a exibe a distribuição de cliques para um anel sem nenhuma religação de aresta, e pode-se notar que os sítios mais afastados do sítio observado estão separados por mais de 1200 cliques. A distribuição é homogênea com ocorrência de 8 sítios por clique. Na Figura 19a não é possível visualizar que 7 sítios estão a 1250 cliques do sítio observado. A paridade do número de sítios do anel faz com que o número de sítios com caminhos mais curtos até o sítio mais distante seja ímpar.

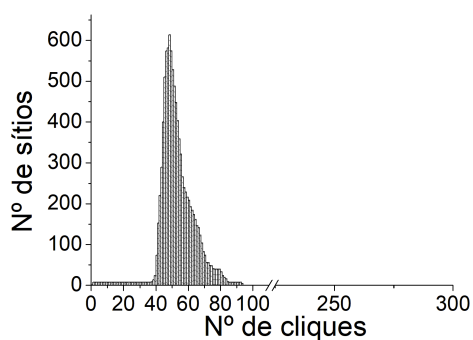
Com apenas 10 reconexões, o número de cliques do sítio observado para qualquer outro sítio da rede caiu para aproximadamente 300, Figura 19b. Conforme predito por Watts-Strogatz [35] com metade das arestas reconectadas, no caso em análise são 20.000 arestas, o número de cliques entre quaisquer 2 sítios é no máximo 6, este fato é conhecido como 6 graus de separação, e que pode ser observado nas Figuras 18 e 19f.



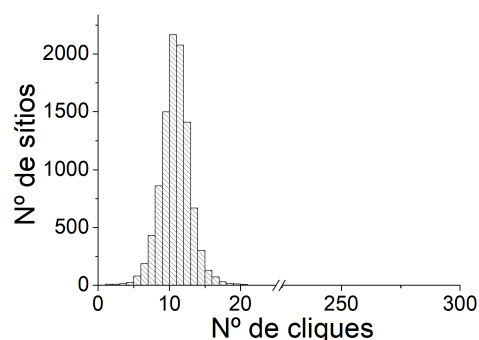
(a) 0 reconexões



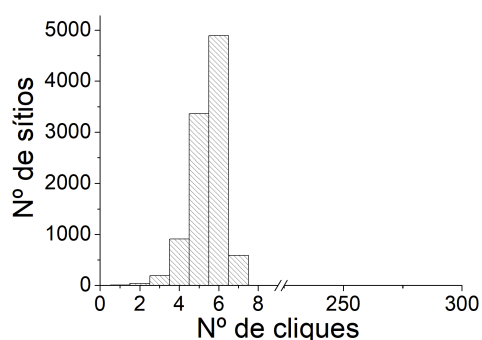
(b) 10 reconexões



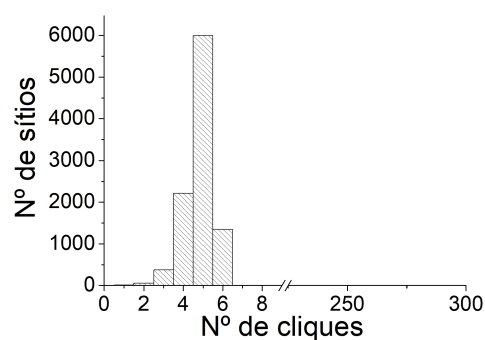
(c) 100 reconexões



(d) 1.000 reconexões



(e) 10.000 reconexões



(f) 20.000 reconexões

Figura 19 – Evolução da distribuição de cliques de um sítio a todos os outros, em um anel regular com 10.000 sítios, com oito arestas por sítio, submetido a 10, 100, 1.000, 10.000 e 20.000 reconexões entre suas arestas.

3.1.5 Transição Topológica de uma Rede Regular Quadrada para uma Rede Livre de Escala

Nas subseções 3.1.1 e 2.2.3.2 foram apresentadas, respectivamente, a rede quadrada e a rede livre de escala. No estudo de redes os efeitos de mudanças topológicas são importantes para determinar a robustez da rede, o número de *hubs*, caminhos mínimos entre outras características. Nesta subseção, será descrito um método para reconectar as arestas não direcionadas de uma rede quadrada com condições periódicas de contorno e se obter uma rede livre de escala, Algoritmo A7. Ao longo do procedimento de reconexões o número total de arestas da rede quadrada é mantido. Duas importantes considerações sobre a topologia inicial da rede quadrada: qualquer um dos sítios pode perder suas ligações originais e qualquer um dos sítios pode ganhar novas ligações.

Para proceder a mudança topológica na rede quadrada empregou-se o caráter de conexão preferencial [14] fazendo com que a probabilidade de um sítio fazer novas ligações dependa do seu número de conexões. Isso implica que a probabilidade Π de um vértice j conectar-se a um vértice i da rede dependa da conectividade K_i desse vértice da seguinte forma: $\Pi(K_i) = K_i / \sum_j k_j$.

Para romper com a regularidade das quatro conexões por sítio da rede quadrada e empregar a conexão preferencial, dois sítios não vizinhos são sorteados aleatoriamente para serem conectados. Ambos passam a ter cinco arestas aumentando a probabilidade de que recebam novas arestas de qualquer um dos outros sítios da rede, enquanto os demais sítios permanecem com quatro arestas. Em seguida, um sítio diferente destes dois iniciais é escolhido aleatoriamente para ter uma de suas arestas removidas, fazendo com que a rede retorne ao número original de arestas.

Enquanto não se atinge o limite de reconexões permitidas, ou seja, considerando as regras descritas a seguir, todos os sítios são percorridos várias vezes em ordem sequencial e de acordo com sua conectividade K_i podem ganhar uma nova ligação para um sítio escolhido aleatoriamente. Esta nova ligação não pode ser duplicada e não pode ser uma ligação da rede original. Novamente, para não alterarmos o número de arestas, para cada nova ligação temos que remover uma aresta original da rede. Estas remoções de arestas seguem algumas restrições: não é permitido que nenhum sítio fique sem nenhuma aresta e não é permitido que nenhum sítio perca mais do que suas 4 ligações da rede original.

A Figura 20 exibe uma rede livre de escala obtida a partir dos procedimentos anteriormente descritos. Devido ao caráter da conexão preferencial os sítios S_1 e S_2 sorteados no primeiro passo do algoritmo têm maior probabilidade de receberem mais conexões. Note que o sítio S_1 tem o maior número de ligações da rede, isto é, ele é o *hub* da rede.

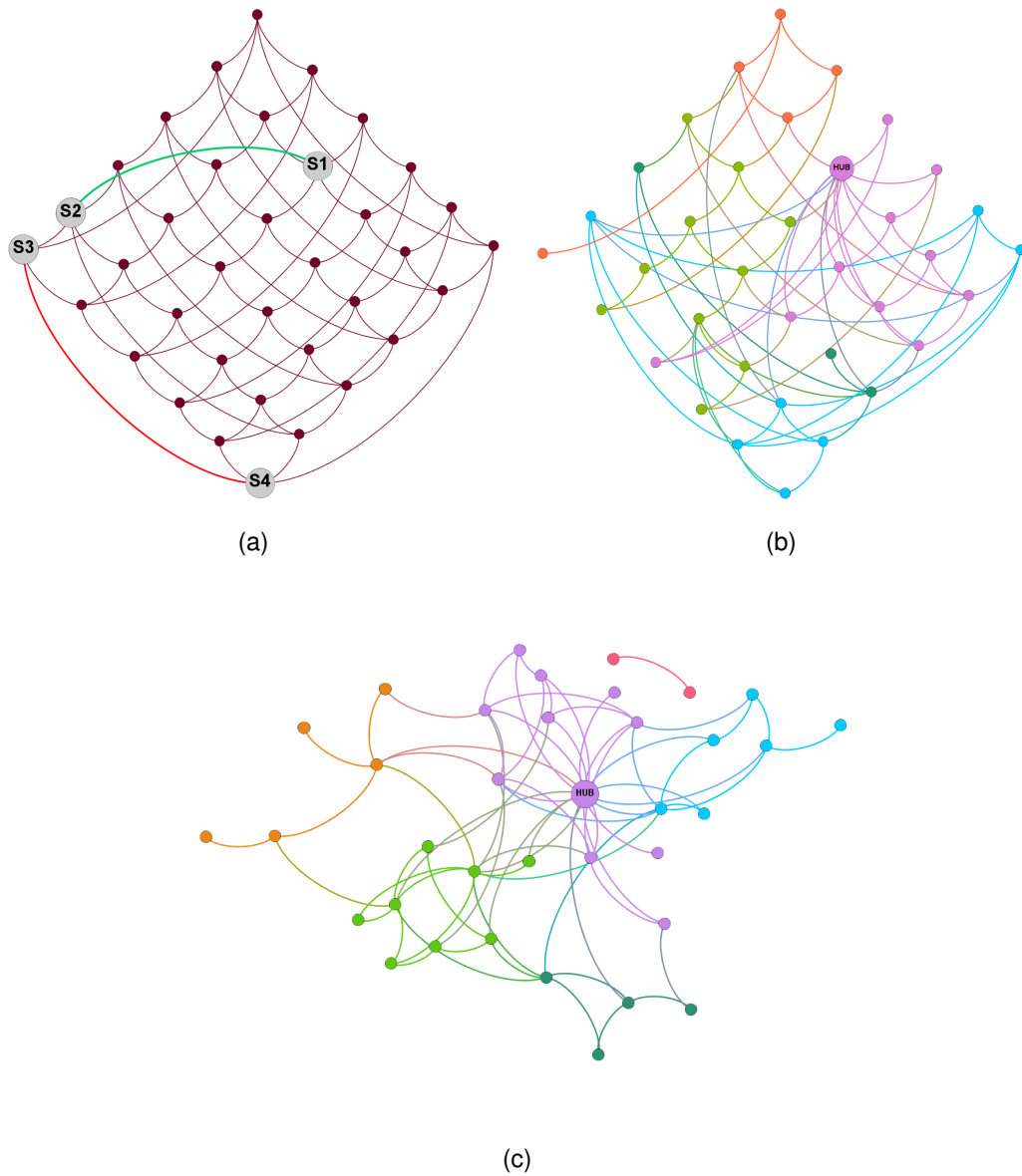


Figura 20 – Mudança topológica de uma rede quadrada para rede livre de escala. Nesta representação a rede possui 72 arestas que conectam os 36 sítios. Em (a) uma nova aresta verde conecta os sítios S_1 e S_2 . A aresta em vermelho que conecta $S_3 - S_4$ será removida para se manter o número original de arestas. Em (b) após 20 reconexões um dos sítios se torna o *hub* da rede. Em (c) após 66 reconexões o sítio *hub* se mantém, e a rede é reorganizada para uma melhor visualização.

A Figura 21 exibe a evolução da distribuição de *links* de uma rede regular quadrada, com 10.000 sítios e com condições periódicas de contorno à medida que se aumenta o número de reconexões de arestas. Em cada gráfico o eixo vertical e o eixo horizontal estão em escala logarítmica para destacar o comportamento do tipo lei de potência identificado quando os dados seguem uma reta. A distribuição de *links* que é constante na rede quadrada passa a seguir uma lei de potência nessa nova topologia de rede, conforme Figura 21d. Tipicamente, o Algoritmo A7 reconecta um pouco mais que 90% das arestas, pois as restrições de reconexão impostas, geralmente, impedem que todas as arestas sejam reconectadas. Por este motivo o número máximo de reconexões de arestas foi 18.577.

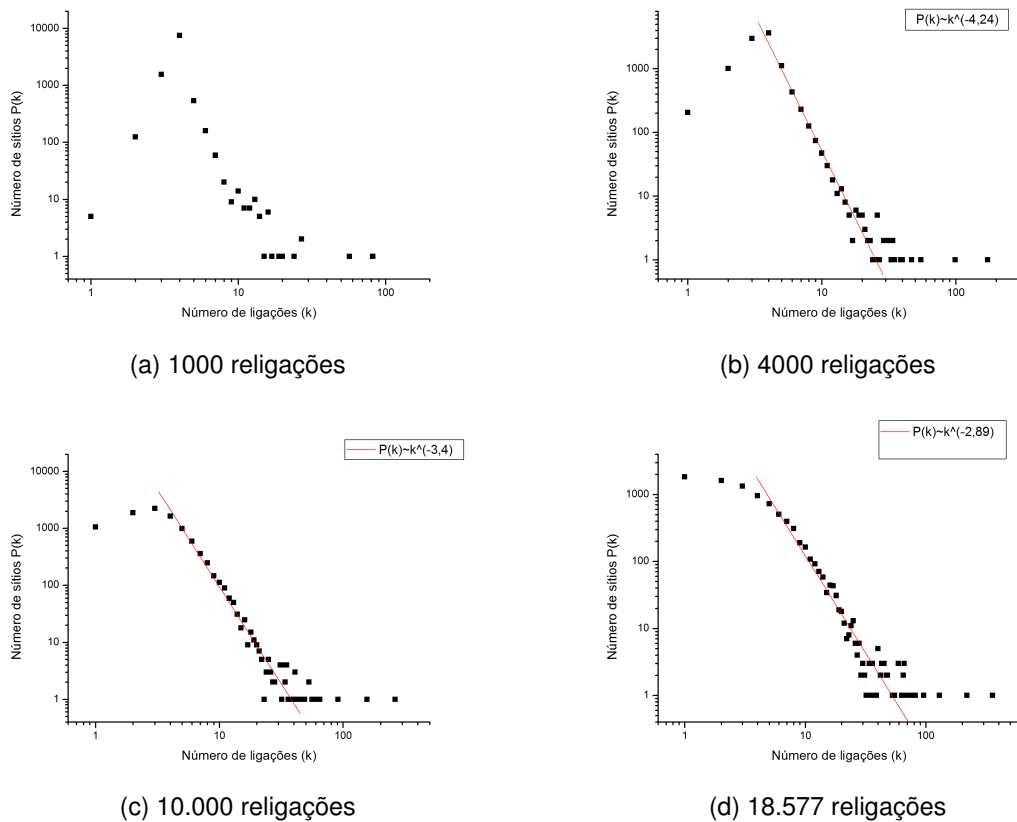


Figura 21 – Evolução da distribuição de ligações por sítio a partir de ligações preferenciais em uma rede regular quadrada.

A distribuição de *links* da rede livre de escala obtida com o número máximo de reconexões possíveis conforme a Figura 21d, segue uma lei de potência $P(k) \sim k^{-\gamma}$, com coeficiente $\gamma = 2,89 \pm 0,01$, em concordância com o valor predito pelo modelo de Barabási-Albert [14].

Na Seção 3.1.1 apresentamos uma forma de mapear o número de cliques entre um dado sítio e os outros sítios da rede, utilizando um algoritmo de busca em largura [45]. Na Figura 22 são exibidos os diferentes níveis médios do número de cliques entre

um determinado sítio aos demais sítios da rede. Foram considerados 6 instantes da rede durante a mudança topológica de quadrada para livre de escala, com os seguintes número de reconexões de arestas: 0, 10, 100, 1.000, 10.000 e 18.577.

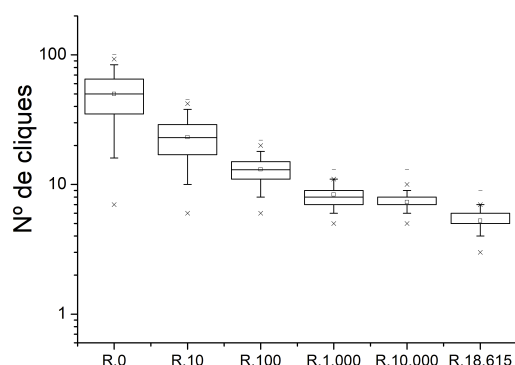


Figura 22 – Níveis médios do número de cliques entre um determinado sítio aos demais da rede, durante a mudança topológica de uma rede quadrada com 10.000 sítios, para uma rede livre de escala, sendo exibidos 6 instantes da rede.

A Figura 23 exibe as distribuições de cliques para cada um dos instantes da rede, que foram exibidos na Figura 22. A Figura 23a exibe a distribuição de cliques de uma rede quadrada com 10.000 sítios sem nenhuma religação de aresta. O sítio mais afastado do sítio observado está a 100 cliques, enquanto os 4 sítios mais próximos estão a apenas 1 clique. No pico da distribuição, 198 sítios da rede estão a 50 cliques do sítio observado.

O aumento no número de reconexões de arestas, em geral, diminui o número de cliques que separam um sítio de qualquer outro da rede. Com apenas 10 arestas reconectadas, o número de cliques do sítio observado para qualquer outro da rede caiu para menos da metade do número de cliques da rede original, conforme Figura 23b. Com o número máximo de arestas reconectadas, no máximo 9 cliques separam um sítio de qualquer outro da rede, como pode ser observado na Figura 23f. O formato da distribuição indica que a rede livre de escala tem características de mundo pequeno, isto é, seus sítios estão em média a 6 graus de separação.

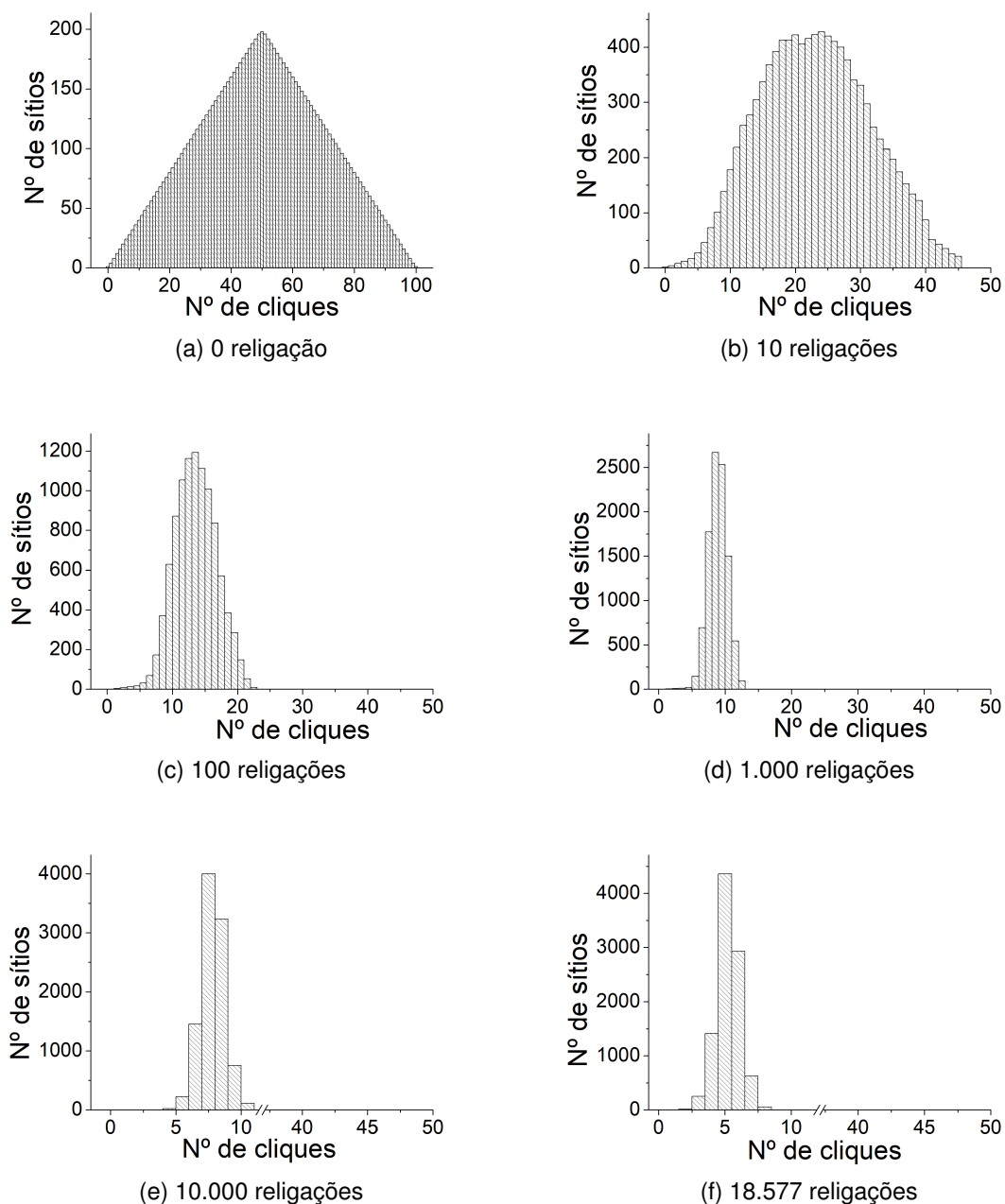


Figura 23 – Evolução da distribuição de cliques de um sítio a todos os outros, em uma rede quadrada com 10.000 sítios submetida a 10, 100, 1.000, 10.000 e 18.577 relações preferenciais entre suas arestas.

3.2 Ferramentas Estatísticas

Esta seção apresenta algumas ferramentas estatísticas comumente utilizadas para estudar os FPP e a interpretação destas no âmbito das caminhadas aleatórias em redes. A aplicação destas ferramentas permitem avaliar se uma caminhada aleatória para um dado sítio de partida e um dado sítio de chegada é um processo homogêneo ou heterogêneo, conforme será mostrado a seguir. Além disso, a navegabilidade pelos sítios da rede fornece importantes características que permitem classificar a sua topologia.

Na seção 2.4 foram introduzidas algumas grandezas relevantes para o estudo dos FPP, sendo o TPP a principal delas. Para medir o TPP de um caminhante aleatório computa-se o número de passos dados do sítio de partida até o sítio alvo (sítio absorvente).

Considere a variável estocástica τ representando o TPP de um caminhante aleatório por um sítio alvo da rede. A partir da simulação de n caminhadas independentes e não interagentes, todas partindo do mesmo sítio obtêm-se uma lista dos n TPP ($\tau_1, \tau_2, \tau_3, \dots, \tau_n$), procedimento implementado no Algoritmo A8. E a partir desta lista obtêm-se a distribuição dos TPP representada por $\Psi(\tau)$.

Em domínios bidimensionais limitados a forma genérica da distribuição $\Psi(\tau)$ é Gaussiana inversa generalizada [21] assumindo a forma

$$\Psi(\tau) \sim \exp\left(-\frac{a}{\tau}\right) \frac{1}{\tau^{1+\mu}} \exp\left(-\frac{\tau}{b}\right). \quad (9)$$

Na equação 9, a e b são constantes que dependem do formato do domínio, do ponto de partida dentro do domínio e das condições de fronteira. O termo μ é chamado expoente de persistência.

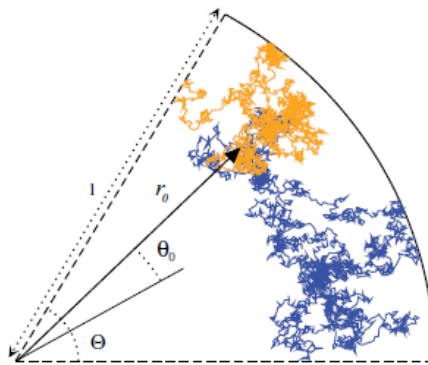


Figura 24 – Trajetórias de dois caminhantes brownianos partindo da mesma posição inicial (r_0, θ_0) , em um domínio no formato de pizza de raio ($r = 1$) e com ângulo de abertura Θ . As linhas tracejadas são fronteiras absorventes, enquanto que a linha sólida é uma fronteira refletora. Fonte: [21].

A Figura 25 exibe três distribuições $\Psi(\tau)$, que correspondem a três diferentes pontos de partida dentro de um domínio no formato de pizza, conforme ilustra a Figura 24. Os

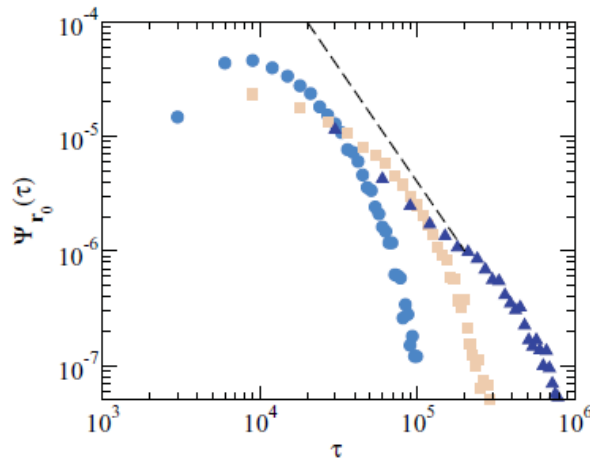


Figura 25 – Distribuições $\Psi(\tau)$ obtidas para três pontos de partidas distintos, em um domínio no formato de pizza com abertura $\Theta = \pi/2$ e $(r_0 = 0.76, \theta_0 = -0.38)$ (triângulos/azul escuro), $(r_0 = 0.76, \theta_0 = -0.23)$ (quadrados/bege) e $(r_0 = 0.76, \theta_0 = 0)$ (círculos/azul claro). Fonte: [21].

autores destacam que para pequenos e grandes valores de τ as distribuições divergem significativamente do nível intermediário devido ao comportamento exponencial. Entretanto, em tempos intermediários as distribuições exibem decaimento mais lento, e em certos intervalos seguem uma lei de potência.

A distribuição $\Psi(\tau)$ nos modelos de rede investigados, em geral, apresentam comportamento exponencial no nível intermediário mesmo para as diferentes condições impostas, como por exemplo, fronteiras refletoras e arestas reconectadas, vide Capítulo 4.

De posse do conjunto dos n TPP $(\tau_1, \tau_2, \tau_3, \dots, \tau_n)$, uma medida estatística imediata é o tempo médio de primeira passagem (TMPP),

$$\langle \tau \rangle = \frac{\sum_{i=1}^{i=n} \tau_i}{n}. \quad (10)$$

O tempo de primeiro retorno (TPR) ocorre quando o caminhante aleatório retorna ao sítio de partida pela primeira vez. Em alguns modelos de rede investigamos o tempo médio de primeiro retorno (TMPP) dado pela Equação 10, a partir dos n TPR $(\tau_1, \tau_2, \tau_3, \dots, \tau_n)$ e representamos a distribuição dos TPR por $\Psi(\tau_R)$.

A análise de caminhadas aleatórias utilizando o TMPP ou o TMPPR requer a devida atenção quanto às posições de partida e de chegada do caminhante e da geometria do domínio. No estudo [21], Mattos e colaboradores discutem alguns casos em que o TMPP não fornece uma medida robusta para caracterizar os processos Brownianos. Os autores estudaram as estatísticas de primeira passagem por fronteiras absorventes de partículas executando caminhadas aleatórias em domínios bidimensionais limitados com diferentes formatos. Para avaliar a capacidade do TMPP caracterizar o processo, os autores aplicaram o conceito de simultaneidade de eventos de PP e concluíram que nem sempre o TMPP

é suficiente para caracterizar um evento de primeira passagem. Como será mostrado, o conceito de simultaneidade de eventos de primeira passagem permite caracterizar a topologia de uma rede.

A simultaneidade de PP não avalia apenas uma trajetória independentemente, mas combinações de duas realizações independentes, tornando possível mensurar flutuações entres amostras dos TPP.

O procedimento consiste em liberar dois caminhantes não-interagentes de um mesmo sítio da rede e computar os respectivos TPP, τ_1 e τ_2 , ao atingirem um sítio absorvente. Para medir a probabilidade de que ambos os caminhantes atinjam, simultaneamente, um sítio absorvente nós utilizamos o Índice de Uniformidade (IU) [21], definido pela variável aleatória

$$\omega \equiv \frac{\tau_i}{\tau_i + \tau_j}, \quad (11)$$

com $0 \leq \omega \leq 1$.

A variável ω fornece uma medida da probabilidade de que dois eventos de primeira passagem independentes ocorram em tempos similares. Na Equação 11, quanto mais próximos estiverem os valores de τ_i e τ_j , mais próximo de $1/2$ estará o IU (ω). Neste caso, o processo de caminhada aleatória é considerado uniforme por ter um baixo desvio padrão. E portanto, o TMPP é uma boa medida que caracteriza o processo, uma vez que os dois caminhantes chegam em tempos similares. Entretanto, se os valores de τ_i e τ_j são muito distantes, o IU (ω) fica próximo de 0 ou 1, indicando um comportamento altamente não-uniforme. Neste caso, o TMPP não é uma boa medida para o evento de primeira passagem, pois o processo tem um alto desvio padrão.

Uma forma de se obter o IU (ω) para significativa quantidade de amostras é combinar os n TPP dois a dois, exceto entre si mesmos. O Algoritmo A9 apresenta um método de combinação que produz uma lista com $(n^2 - n)$ valores de ω . E a partir dela, obtém-se a distribuição de uniformidade representada por $P(\omega)$. A integral $\int_a^b P(\omega)d\omega$ fornece a probabilidade da simultaneidade de primeira passagem.

Tipicamente são três os formatos que se obtém para a curva correspondente à distribuição $P(\omega)$, os quais estão ilustrados na Figura 26 [21]: a curva em azul claro possui um formato de sino com um máximo em $\omega = 1/2$. Ela corresponde ao caso em que o mais provável é que dois caminhantes aleatórios independentes, partindo de uma mesma posição atinjam a posição alvo pela primeira vez em tempos similares. A curva em azul escuro, por outro lado possui um formato de “M”, com um mínimo em $\omega = 1/2$ e dois máximos próximos de $\omega = 0$ e $\omega = 1$. Ela corresponde ao caso em que o mais provável é que dois caminhantes atinjam a posição alvo pela primeira vez em tempos distintos. A curva bege possui um formato achatado e indica equilíbrio.

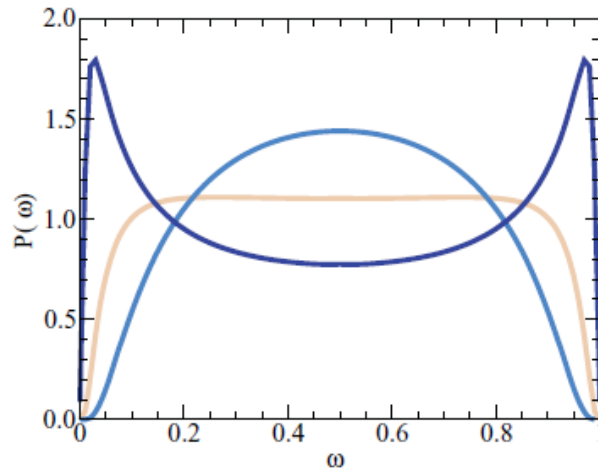


Figura 26 – Distribuições $P(\omega)$ obtidas para os três distintos pontos de partida do caminhante aleatório discutidos na Figura 25: $(r_0 = 0.76, \theta_0 = -0.38)$ (azul escuro), $(r_0 = 0.76, \theta_0 = -0.23)$ (bege) e $(r_0 = 0.76, \theta_0 = 0)$ (azul claro) Fonte: [21].

O IU tem se mostrado uma ferramenta bastante útil no estudo de TPP em dinâmicas difusivas [2, 11, 21, 46]. Isso se deve principalmente ao fato de que o formato da $P(\omega)$ depende fortemente de características topológicas do domínio onde se dá a dinâmica (e.g., formato, dimensionalidade, condições de fronteira e posição inicial). Dessa forma, percebe-se que $P(\omega)$ é uma ferramenta robusta para diagnosticar e caracterizar a topologia de redes complexas.

Neste estudo, utilizamos o UI (ω) para avaliar as caminhadas aleatórias nas diferentes topologias de redes e diversas posições dos sítios de partida e de chegada. Para cada topologia investigada foi obtida a respectiva distribuição $P(\omega)$. A partir de significativa quantidade de simulações nestas redes confirmamos que, de fato, o formato de $P(\omega)$ depende da topologia da rede, das condições de fronteira, da posição dos sítios de partida e de chegada, e do número de reconexões de arestas.

Nos modelos de redes investigados os três formatos característicos da distribuição $P(\omega)$ foram identificados. Em geometrias regulares, como a rede quadrada e o anel de sítios, as três formas são presentes e dependem estreitamente das posições do sítio de partida e do sítio de chegada. Quando eles estão muito afastados, em número de cliques, $P(\omega)$ é unimodal, se estão muito próximos $P(\omega)$ é bimodal, e quando estão a um número intermediário de cliques $P(\omega)$ é achatada.

A partir das simulações apurou-se que somente as redes regulares apresentam $P(\omega)$ unimodal. Assim, pode-se descrever uma forma de verificar se uma rede apresenta regularidade em suas conexões, por meio da navegabilidade nos sítios. Primeiramente, deve-se mapear o número de cliques entre o sítio alvo e todos os sítios da rede. Em seguida, computar os TPP de n caminhadas aleatórias que se iniciam no sítio mais afastado do

sítio alvo, e obviamente terminam no sítio alvo. Combinando-se os TPP de acordo com a Equação 11, obtém-se os ω , sendo então possível obter e analisar a distribuição $P(\omega)$.

No início deste capítulo, mencionamos a redução do número cliques entre os sítios de uma rede regular à medida que suas arestas são reconectadas. As reconexões encurtam os caminhos entre os sítios, e a partir de determinado número de reconexões a rede exhibe características de mundo pequeno. As simulações apontam que a distribuição $P(\omega)$, referente a sítios afastados, não apresenta a forma de sino, ou seja, não é mais unimodal. Identificamos que $P(\omega)$ se aproxima de uma distribuição uniforme à medida que a rede se torna de mundo pequeno.

Na subseção 2.2.3 foram introduzidas duas redes com características de mundo pequeno: a rede aleatória de mundo pequeno e a rede livre de escala. Em ambas as topologias, a $P(\omega)$ para sítios afastados se aproxima de uma distribuição uniforme. Para diferenciar estas topologias de rede, propomos uma análise da ocupação dos sítios durante uma caminhada aleatória.

A análise da ocupação dos sítios consiste em computar o número de visitas, em cada sítio da rede, durante uma caminhada aleatória. O caminhante é liberado de um sítio qualquer e realiza uma caminhada de n passos, sem a presença de sítio absorvente na rede. A partir do número de visitas de cada sítio obtém-se a distribuição de visitas da rede.

As simulações apontam que para redes de mundo pequeno, sem a presença de *hubs*, a distribuição de visitas tende a uma gaussiana. Ao passo que a rede livre de escala apresenta distribuição de visitas que segue uma lei de potência. Isto ocorre pelo fato dos *hubs* receberem um elevado número de visitas, uma vez que eles são os sítios mais conectados da rede.

4 Resultados

Neste capítulo são apresentados os resultados das simulações de caminhadas aleatórias pelos sítios das redes com as topologias discutidas na seção 3.1: regular quadrada, aleatória conservativa, aleatória não conservativa, aleatória de mundo pequeno e livre de escala. Diferentes posições dos sítios de partida e de chegada foram investigadas, para identificar as topologias em que o TMPP é uma boa medida para o processo de caminhada aleatória. As análises são feitas a partir das distribuições $\Psi(\tau)$ e $P(\omega)$, conforme discutido na seção 3.2, e a partir da distribuição de visitas que permite diferenciar redes aleatórias de mundo pequeno das redes livre de escala. Nas simulações com a presença de fronteiras refletoras, quando o caminhante aleatório atinge um sítio refletor ele retorna ao sítio do passo anterior e uma unidade de tempo é acrescida à trajetória.

4.1 Rede Regular Quadrada

4.1.1 Condições de Contorno Mistas

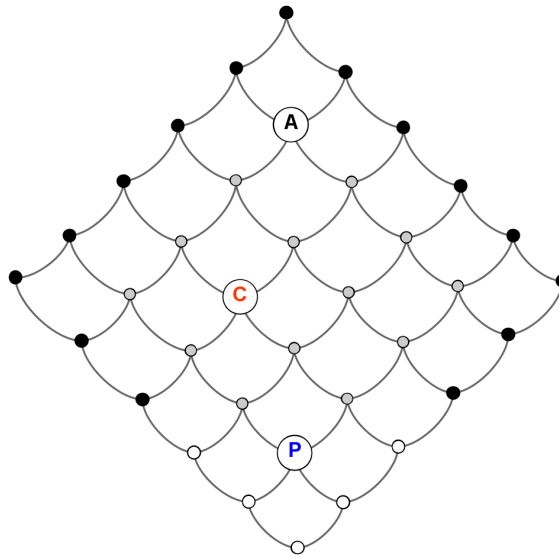


Figura 27 – Rede regular quadrada com 36 sítios e condição de contorno mista: pontos pretos correspondem a sítios da fronteira refletora, pontos brancos correspondem a sítios da fronteira absorvente, pontos cinzas representam os sítios do *bulk* da rede e linhas representam conexões entre os sítios. Três sítios estão destacados, cada um representando uma região distinta, no que se refere à distância em relação à fronteira absorvente: **P** (próximo), **C** (região central da rede) e **A** (muito afastado).

Implementou-se uma rede regular quadrada com 10.000 sítios e foram impostas condições de contorno mistas. As bordas da rede possuem um total de 396 sítios, dos quais 18 são absorventes e os outros 378 são refletores. Uma representação esquemática é apresentada na Figura 27, com 36 sítios.

Nessa topologia de rede foram realizadas 10^4 caminhadas aleatórias que finalizam quando o caminhante atinge um dos sítios da fronteira absorvente pela primeira vez, momento em que se contabiliza o TPP. Investigamos três posições distintas da rede para as quais o caminhante inicia a sua trajetória, que estão ilustradas na Figura 27. Um dos sítios de partida considerado está muito afastado da fronteira absorvente (A), outro está na região central da rede (C), e por fim, um outro que está próximo à fronteira absorvente (P).

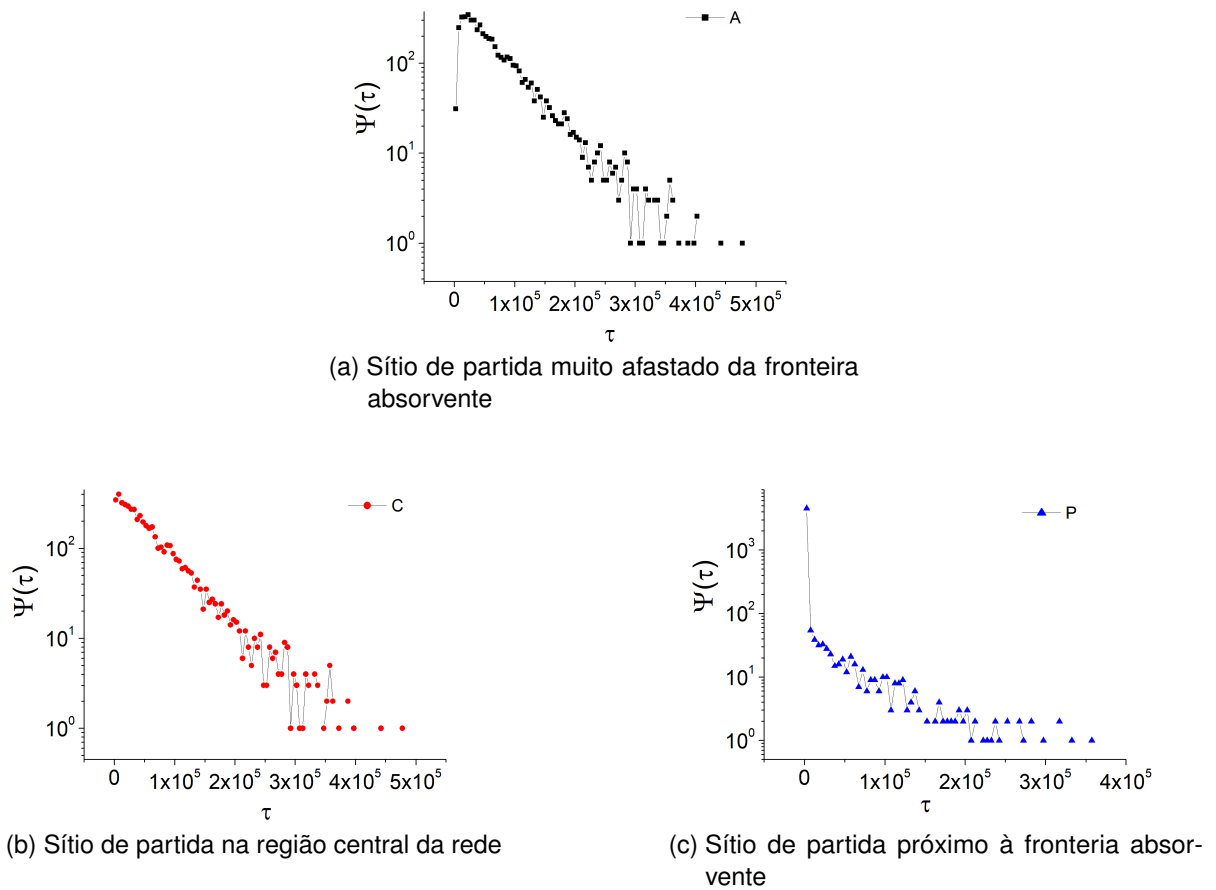


Figura 28 – $\Psi(\tau)$ para 10^4 caminhadas aleatórias na rede regular quadrada com condições de contorno mistas. O caminhante é liberado de três sítios de partida distintos, A, C e P, conforme mostrado esquematicamente na Figura 27.

A Figura 28 exibe $\Psi(\tau)$ para as três posições iniciais do caminhante aleatório consideradas na rede. O eixo vertical de cada gráfico está em escala logarítmica e o eixo horizontal em escala linear para destacar o comportamento exponencial identificado quando os dados seguem uma reta. Quando o caminhante é liberado de um sítio muito afastado da fronteira absorvente a frequência de tempos curtos para atingi-la é muito menor, Figura

28a, se comparada à frequência de tempos curtos do caminhante que é liberado de um sítio próximo à fronteira absorvente, Figura 28c. Mesmo quando o caminhante é liberado de um sítio próximo à fronteira absorvente há amostras que o TPP é muito demorado.

Na rede da Figura 27, as condições de contorno impostas e a pequena abertura na “quina”, assemelha-se ao modelo NEM apresentado na seção 2.4.1, no qual uma partícula browniana difunde no interior de um domínio limitado por fronteiras refletoras, exceto por uma estreita abertura. Mattos e colaboradores [21] investigaram as estatísticas de PP do NEM para domínios bidimensionais, e obtiveram três formatos da $P(\omega)$ de acordo com a posição inicial do caminhante no domínio.

Na Figura 29 apresentamos as distribuições $P(\omega)$ para cada uma das três posições iniciais A, C e P, conforme ilustrado esquematicamente na Figura 27. O formato das curvas $P(\omega)$ obtidas para a rede se assemelham aos resultados obtidos fora da rede em [21].

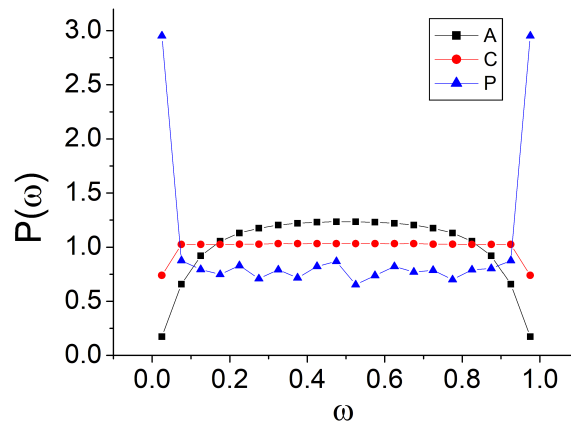


Figura 29 – $P(\omega)$ na rede regular quadrada com condições de contorno mistas. O caminhante é liberado em três sítios de partida distintos: (A) muito afastado da fronteira absorvente, (C) região central da rede e (P) próximo à fronteira absorvente.

Cada curva da Figura 29 exibe a $P(\omega)$ de 10^4 caminhadas aleatórias, para cada uma das posições de partida investigadas. A curva A apresenta um formato de sino, com um máximo em $\omega = 0,5$, indicando que o TMPP realmente caracteriza o comportamento de primeira passagem. Em contrapartida, a curva P apresenta um formato em U, com dois máximos próximos de 0 e 1, indicando que o TMPP não é uma boa medida para o comportamento de primeira passagem. A curva C é suave, sem um formato que possa caracterizar o comportamento de primeira passagem.

A geometria regular da rede quadrada propicia que a distribuição $P(\omega)$ seja unimodal para caminhadas aleatórias entre sítios afastados. A isotropia das arestas favorece que o número de passos dados pelo caminhante aleatório em cada caminhada se aproxime de um valor característico, pois os possíveis caminhos entre o sítio de partida e o sítio de

chegada têm aproximadamente o mesmo número que cliques devido a forma com que as arestas estão conectadas.

4.1.2 Condição Periódica de Contorno e Condição de Contorno Refletora

O TPR foi investigado em uma rede quadrada com 10.000 sítios, para duas posições de partida do caminhante e duas condições de contorno. Em uma das simulações foi imposta a condição periódica de contorno e investigados: os TPR de um sítio próximo à borda (P) e de um sítio da região central da rede (C). Na outra simulação, os mesmos sítios de partida foram mantidos com todos os 396 sítios das bordas refletores. Para analisar a estatística de primeiro retorno nestas duas topologias foram realizadas 10^4 caminhadas aleatórias. A Figura 30 exibe os resultados obtidos para $\Psi(\tau_R)$.

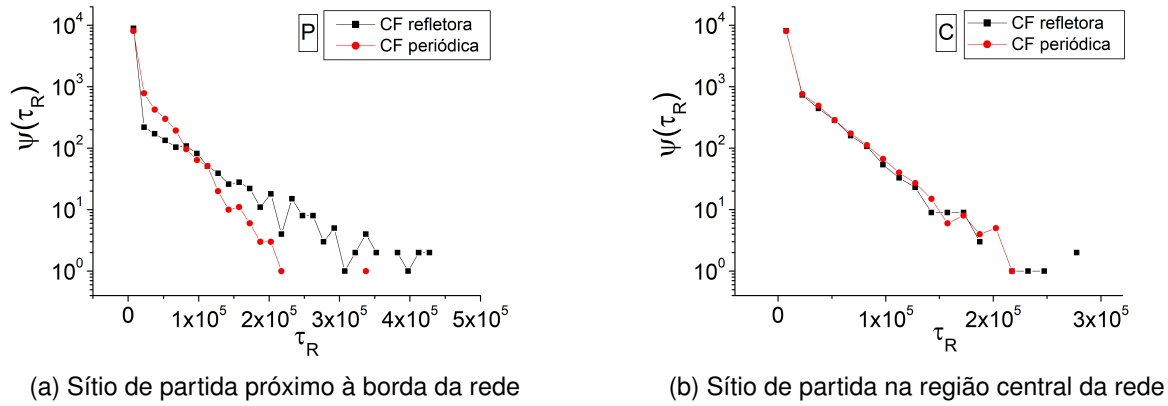
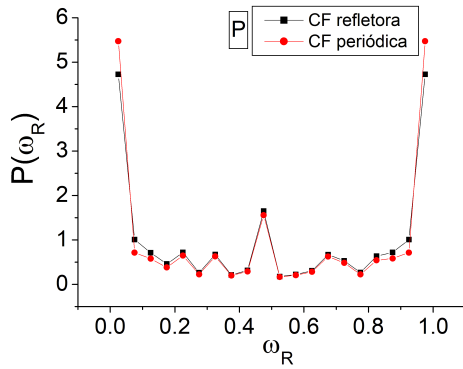


Figura 30 – $\Psi(\tau_R)$ na rede regular quadrada com condição periódica de contorno e com condição refletora.

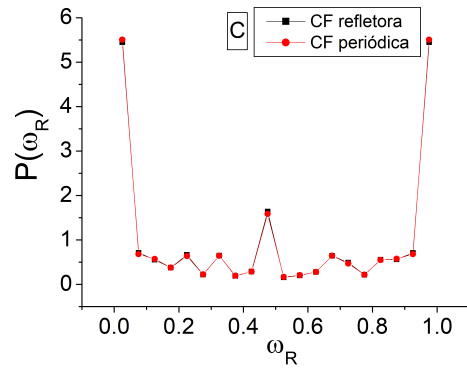
Comparando-se as $\Psi(\tau_R)$ das Figuras 30a e 30b, nota-se uma significativa influência da fronteira de sítios refletores quando o caminhante é liberado próximo à borda desta fronteira refletora, curva com quadrados pretos na Figura 30a. Esta curva apresenta TPR mais longos se comparada à $\Psi(\tau_R)$ da rede com condição periódica de contorno, curva com pontos vermelhos na Figura 30a.

Na Figura 30b observa-se um comportamento exponencial da $\Psi(\tau_R)$ em ambas as condições de fronteira simuladas. Enquanto na Figura 30a o comportamento exponencial é bem definido para a rede com condição de fronteira periódica.

A Figura 31 exibe as $P(\omega_R)$ na rede regular quadrada. As distribuições apresentam um formato tri-modal para ambas posições de partida e ambas condições de fronteira investigadas na Figura 30. Nas respectivas $\Psi(\tau_R)$ são observadas uma elevada frequência de TPR curtos que proporcionam repetidas combinações do ω próximas de 0,5, que se reflete no formato tri-modal. A elevada frequência de TPR curtos é um dos reflexos do



(a) Sítio de partida próximo à borda da rede



(b) Sítio de partida na região central da rede

Figura 31 – $P(\omega_R)$ na rede regular quadrada com condição periódica de contorno e com condição refletora.

espaço discretizado, pois o caminhante retorna pela primeira vez ao sítio de partida com um número par de passos na rede com condição periódica de fronteira. Na presença da fronteira refletora o TPR pode ser ímpar, pois cada vez que o caminhante atinge um sítio refletor uma unidade de tempo é acrescida à sua trajetória. Por isso, nota-se significativa diferença nas $\Psi(\tau_R)$ da Figura 30a.

No caso em que o sítio de partida está na região central da rede as $P(\omega_R)$ colapsaram indicando que o TPR independe da condição de fronteira, conforme a Figura 31b. Os efeitos da fronteira refletora são perceptíveis no caso em que o sítio de partida está próximo à borda desta fronteira, conforme a curva com quadrados pretos na Figura 31a.

4.2 Rede Aleatória Conservativa

4.2.1 TPP com Fronteira Refletora e com Fronteira Periódica

A rede aleatória conservativa foi obtida a partir de reconexões das arestas de uma rede quadrada com 10.000 sítios, seguindo a metodologia apresentada na seção 3.1.2. Foram simuladas redes com 10, 100, 1.000, 10.000 e 20.000 reconexões de arestas. O TPP foi medido para cada uma destas quantidades de reconexões para a condição de fronteira refletora e para a condição de fronteira periódica.

Para verificar a influência da posição do sítio de partida em relação ao sítio alvo, o caminhante foi liberado ora de um sítio afastado, ora de um sítio próximo. Uma representação esquemática, com 36 sítios, é apresentada na Figura 32.

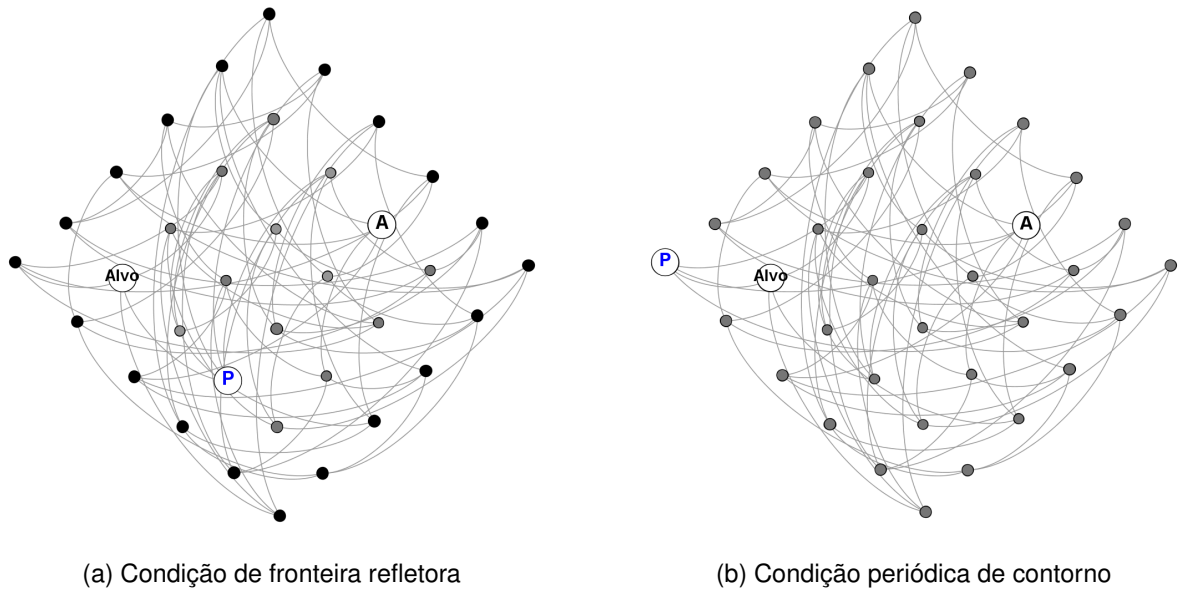


Figura 32 – Sítios de partida e sítio alvo na rede aleatória conservativa. Em destaque, os sítios de partida **P** (próximo) e **A** (Afastado) em relação ao sítio de chegada, **Alvo**. Em (a) os sítios pretos da borda são refletores e em (b) não há sítio refletor.

Nesta topologia de rede foram simuladas 10.000 caminhadas aleatórias, que finalizam quando caminhante atinge o sítio alvo, momento que computa-se o TPP. E a partir destes tempos obtém-se as distribuições $\Psi(\tau)$ e $P(\omega)$, que são apresentadas a seguir. Além da posição dos sítios são consideradas a fronteira refletora e a fronteira periódica.

As Figuras 33 e 34 exibem as $\Psi(\tau)$, respectivamente, para um sítio de partida afastado do sítio de chegada e para um sítio de partida próximo ao sítio de chegada. Para ambos os sítios de partida a presença da fronteira refletora ocasiona TPP mais longos se comparados aos TPP na presença da fronteira periódica. Isso se deve ao fato de que o

caminhante aleatório não pode mudar de uma borda para a borda oposta devido a presença dos sítios refletora. Nestas condições de confinamento são necessários mais passos para o caminhante atingir o sítio de chegada.

Em geral, o aumento no número de reconexões reduz o TPP em ambas as condições de fronteira, mas fica evidente que as reconexões causam uma significativa redução do TPP na presença da fronteira refletora.

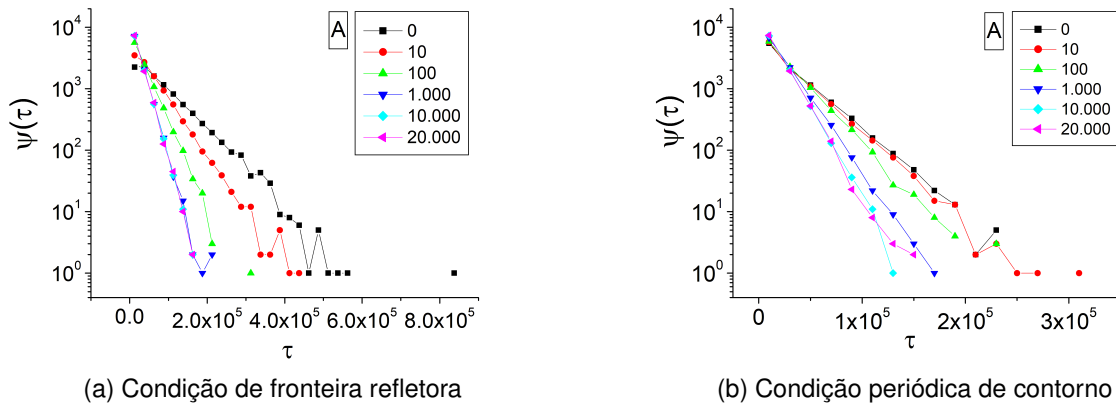


Figura 33 – $\Psi(\tau)$ na rede aleatória conservativa com o sítio de partida próximo à uma quina da rede e sítio de chegada na quina oposta.

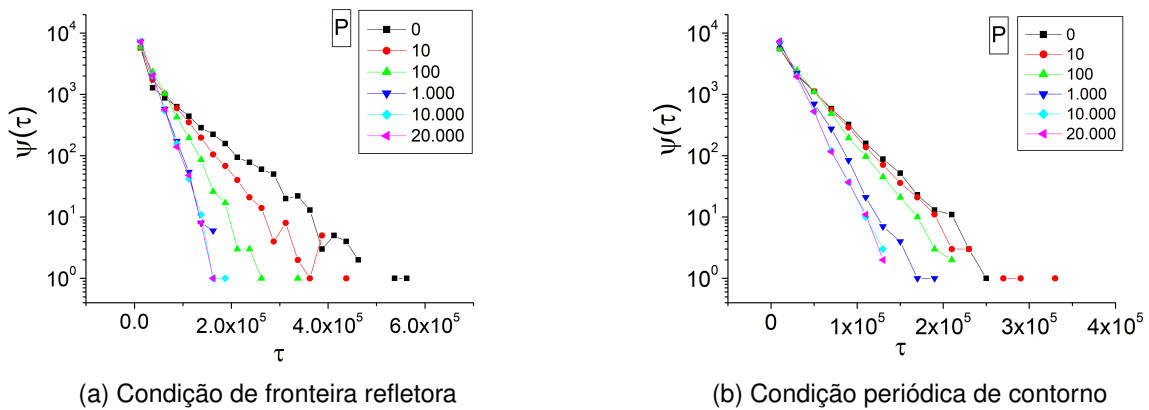


Figura 34 – $\Psi(\tau)$ na rede aleatória conservativa com o sítio de partida próximo ao sítio de chegada em uma quina da rede. Note as diferentes escalas do eixo τ .

As Figuras 35 e 36 exibem as $P(\omega)$, respectivamente, para um sítio de partida afastado do sítio de chegada e para um sítio de partida próximo ao sítio de chegada.

A $P(\omega)$ para um sítio de partida afastado do sítio de chegada, na rede quadrada sem reconexão de arestas e com fronteiras refletoras, apresenta um formato de sino com um pico em $\omega = 0,5$, conforme a curva com quadrados pretos na Figura 35a. O formato da

distribuição indica ser muito provável, que dois caminhantes aleatórios independentes, que partem do mesmo sítio cheguem simultaneamente ao sítio alvo. À medida que as arestas são reconectadas o formato da $P(\omega)$ fica mais suave, que indica a redução da probabilidade da simultaneidade de primeira passagem. Note que as curvas ficam mais uniformes com aproximadamente 1.000 reconexões de arestas.

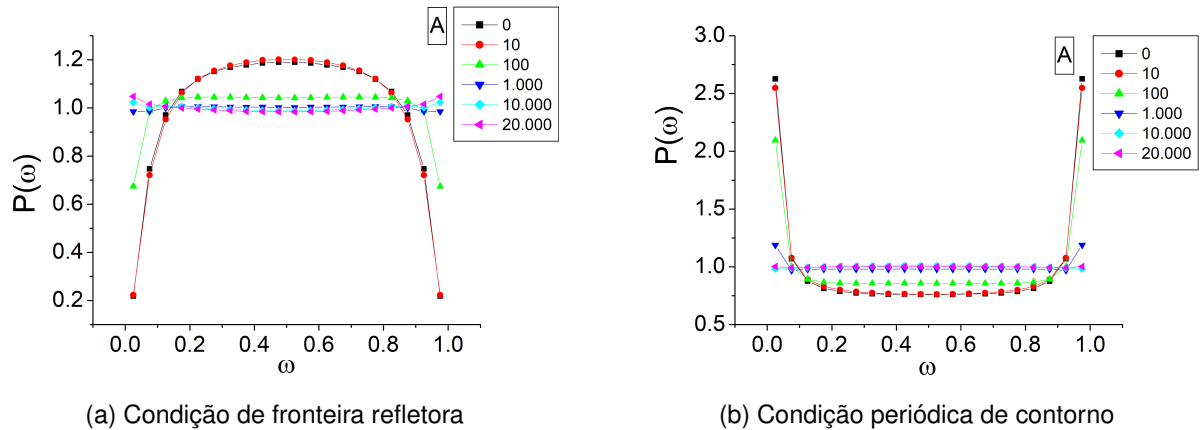


Figura 35 – $P(\omega)$ na rede aleatória conservativa com o sítio de partida próximo a uma quina da rede e com o sítio de chegada na quina oposta.

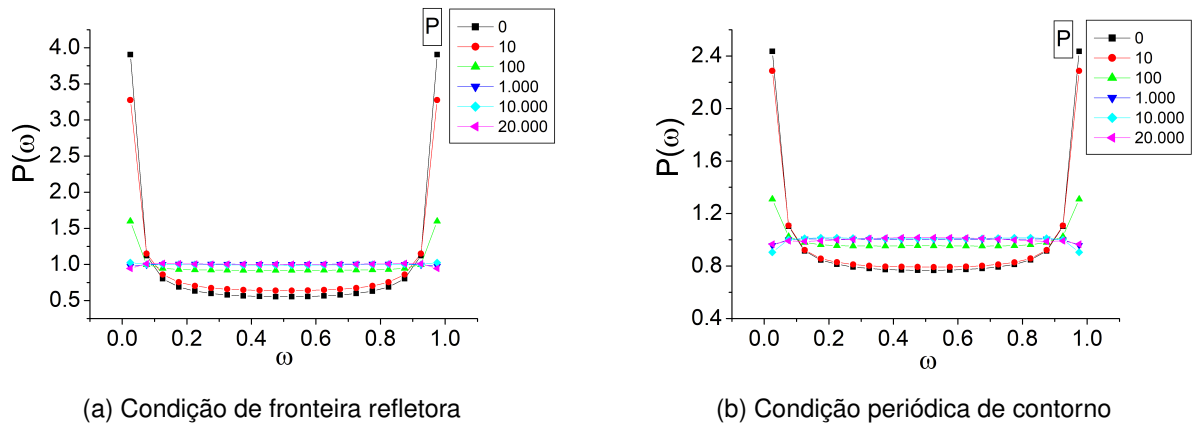


Figura 36 – $P(\omega)$ na rede aleatória conservativa com o sítio de partida próximo ao sítio de chegada em uma quina da rede.

As $P(\omega)$ para um sítio de partida afastado do sítio de chegada, na presença da fronteira periódica, são exibidas na Figura 35b. De 0 a até aproximadamente 100 reconexões de arestas as distribuições são bimodais, apresentando um formato de “U” com mínimo em $\omega = 0,5$ e com dois máximos próximos de $\omega = 0$ e $\omega = 1$. Este formato indica que é mais provável que dois caminhantes aleatórios, que partem de um mesmo sítio afastado do sítio alvo cheguem em tempos distintos. Analogamente, este comportamento é observado para

o caso do sítio de partida próximo ao sítio de chegada em ambas as condições de fronteira, conforme as Figuras 36a e 36b.

Nas Figuras 35b, 36a e 36b pode se notar que o aumento do número de reconexões reduz os picos da $P(\omega)$ e as curvas ficam mais uniformes, o que indica que o tempo gasto pelos caminhantes já não são tão discrepantes. No entanto, essa aproximação nos valores dos TPP não é suficiente para apresentar um pico em $\omega = 0,5$, que é quando o processo fica bem caracterizado e pode-se afirmar que ocorre a simultaneidade de primeira passagem de dois caminhantes independentes.

A distribuição $P(\omega)$ também permite analisar a mudança topológica que ocorre na rede. A $P(\omega)$ da rede quadrada tem um formato de sino, que sofre alterações quando a rede tem sua estrutura regular alterada. As reconexões de arestas desmancham a simetria da rede quadrada ao reduzirem a distância entre os sítios e implementam características de mundo pequeno. Nas Figuras 35 e 36, a $P(\omega)$ tende a uma distribuição uniforme à medida que a rede adquire características de mundo pequeno.

4.2.2 TPR com Fronteira Refletora e com Fronteira Periódica

O primeiro retorno do caminhante aleatório em uma rede aleatória conservativa, com 10.000 sítios e 20.000 arestas, foi obtido para um sítio próximo à borda da rede e para um sítio da região central. Partido-se de uma rede quadrada realizamos 10, 100, 1.000, 10.000 e 20.000 reconexões de arestas. Em cada simulação foram realizadas 10^4 caminhadas aleatórias que finalizam quando o caminhante retorna ao sítio de partida.

As Figuras 37 e 38 exibem as $\Psi(\tau_R)$ na rede aleatória conservativa, respectivamente, para um sítio próximo à uma quina da rede e para um sítio na região central da rede. A presença da fronteira refletora ocasiona TPR mais longos para o sítio próximo à uma quina da rede.

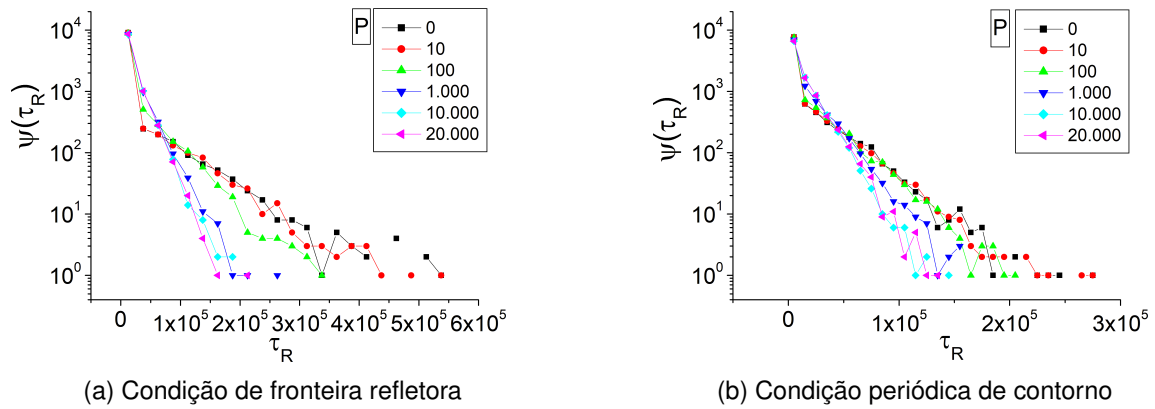


Figura 37 – $\Psi(\tau_R)$ na rede aleatória conservativa com o sítio de partida próximo à uma quina da rede.

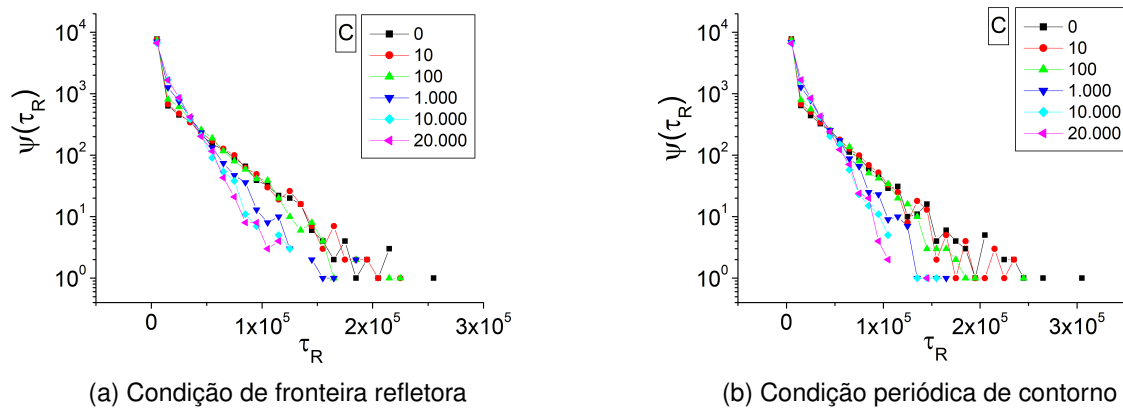


Figura 38 – $\Psi(\tau_R)$ na rede aleatória conservativa com o sítio de partida na região central da rede.

Nas Figuras 39 e 40 apresentamos as $P(\omega_R)$ na rede aleatória conservativa, respectivamente, para um sítio próximo a uma quina da rede e para um sítio na região central da rede. Na seção 4.1.2 discutimos o primeiro retorno para uma rede quadrada sem nenhuma reconexão de aresta. Nesta seção, obtemos as $P(\omega_R)$ à medida que a rede quadrada se torna aleatória conservativa por meio de reconexões de suas arestas.

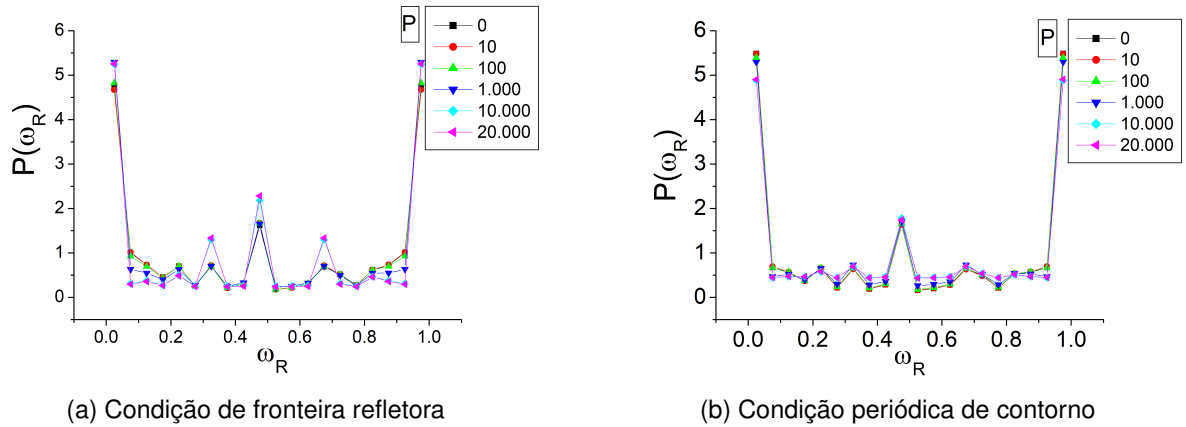


Figura 39 – $P(\omega_R)$ na rede aleatória conservativa com o sítio de partida próximo a uma quina da rede.

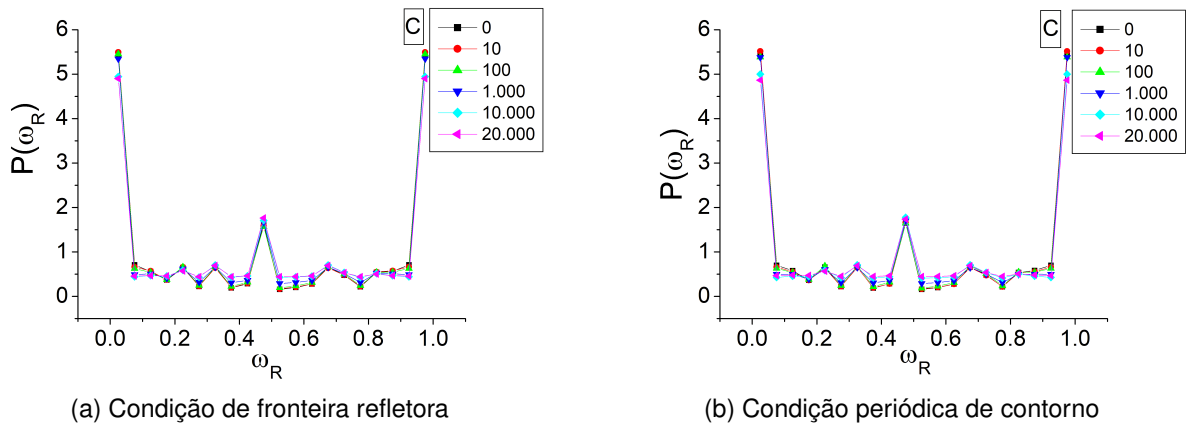


Figura 40 – $P(\omega_R)$ na rede aleatória conservativa com o sítio de partida na região central da rede.

Nas $\Psi(\tau_R)$ os TPR curtos são muito frequentes, o que proporciona repetidas combinações de ω próximas de 0,5, que são observadas em todas as simulações, além dos pequenos picos simétricos observados a partir do centro da distribuição $P(\omega_R)$, por exemplo, em $\omega = 1/3$ e $\omega = 2/3$.

4.3 Rede Aleatória Não Conservativa

4.3.1 TPP com Fronteira Refletora e com Fronteira Periódica

A rede aleatória não conservativa foi obtida a partir de reconexões das arestas de uma rede quadrada com 10.000 sítios, seguindo a metodologia apresentada na seção 3.1.3. Foram simuladas redes com 10, 100, 1.000, 10.000 e 18.273 reconexões de arestas. O TPP foi medido para cada uma destas quantidades de reconexões, na presença da fronteira refletora e também para a fronteira periódica.

Para verificar a influência da posição do sítio de partida em relação ao sítio alvo, o caminhante foi liberado ora de um sítio afastado, ora de um sítio próximo. Nestas topologias de redes foram simuladas 10^4 caminhadas aleatórias, que finalizam quando o caminhante atinge o sítio alvo, e então se computa o TPP. Uma representação esquemática com 36 sítios é apresentada na Figura 41.

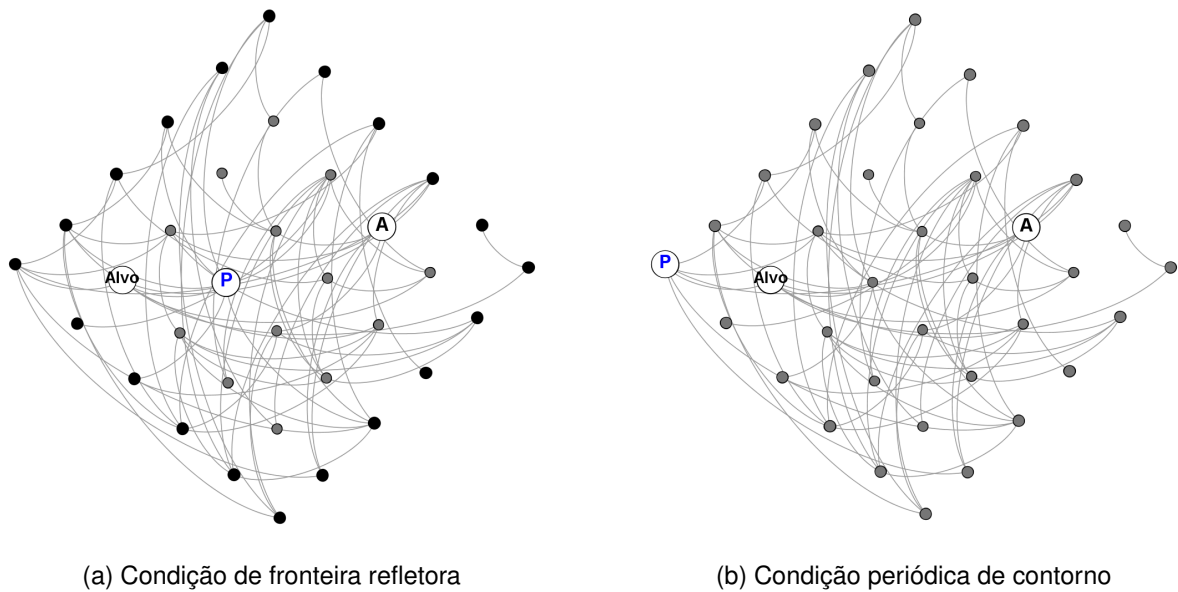


Figura 41 – Sítios de partida e sítio alvo na rede aleatória não conservativa. Em destaque, os sítios de partida **P** (próximo) e **A** (Afastado) em relação ao sítio **Alvo**. Em (a) os sítios pretos da borda são refletores.

As Figuras 42 e 43 exibem as $\Psi(\tau)$ na rede aleatória não conservativa, respectivamente, para um sítio de partida afastado do sítio de chegada e para um sítio de partida próximo ao sítio de chegada.

Para ambas posições do sítio de partida, ao se realizar até aproximadamente 10.000 reconexões, os TPP tendem a ser cada vez mais curtos. Note que até esse número de reconexões, a presença da fronteira refletora ocasiona TPP mais longos se comparados aos TPP para a fronteira periódica. Com 18.273 reconexões a presença da fronteira refletora

não altera significativamente o TPP. Além disso, em ambas as topologias e posições de partida do caminhante esse aumento de reconexões provocou a ocorrência de TPP longos.

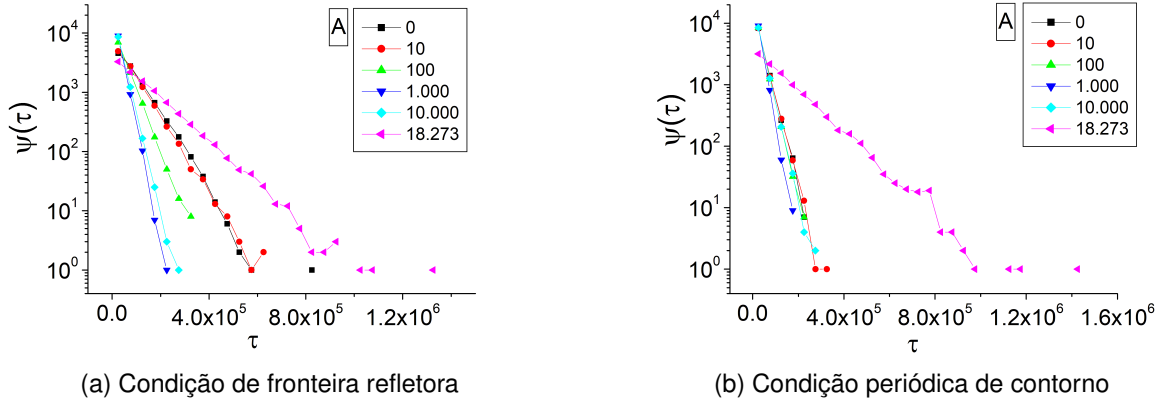


Figura 42 – $\Psi(\tau)$ na rede aleatória não conservativa com o sítio de partida próximo à uma quina da rede e sítio de chegada na quina oposta.

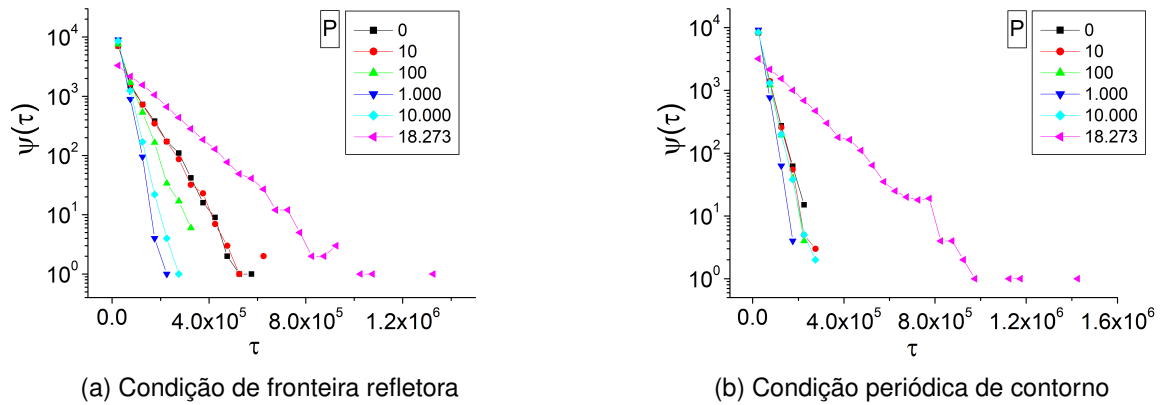


Figura 43 – $\Psi(\tau)$ na rede aleatória não conservativa com o sítio de partida próximo ao sítio de chegada em uma quina da rede.

Em geral, aumentar o número de reconexões encurtam os caminhos entre os sítios, mas como nessa topologia não há conservação do número de ligações por sítio, ao se reconectar 18.237 arestas foram criados *clusters* com poucas conexões com outros *clusters*. Dessa forma, o caminhante demora mais tempo em alguns *clusters*, uma vez que há poucas arestas que conectam os diferentes *clusters*.

As Figuras 44 e 45 exibem as $P(\omega)$ na rede aleatória não conservativa, respectivamente, para um sítio de partida afastado do sítio de chegada e para um sítio de partida próximo ao sítio de chegada.

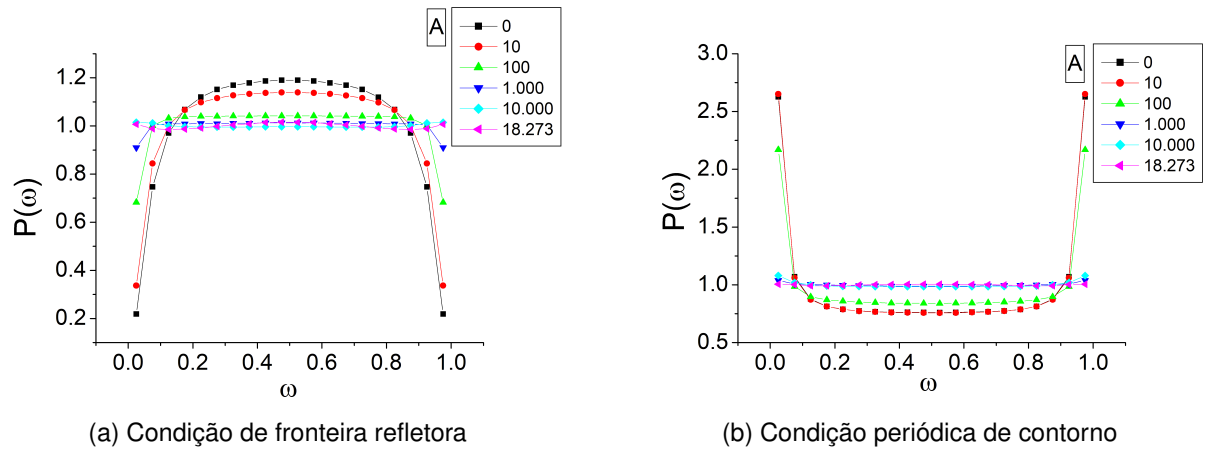


Figura 44 – $P(\omega)$ na rede aleatória não conservativa com o sítio de partida próximo à uma quina da rede e sítio de chegada na quina oposta.

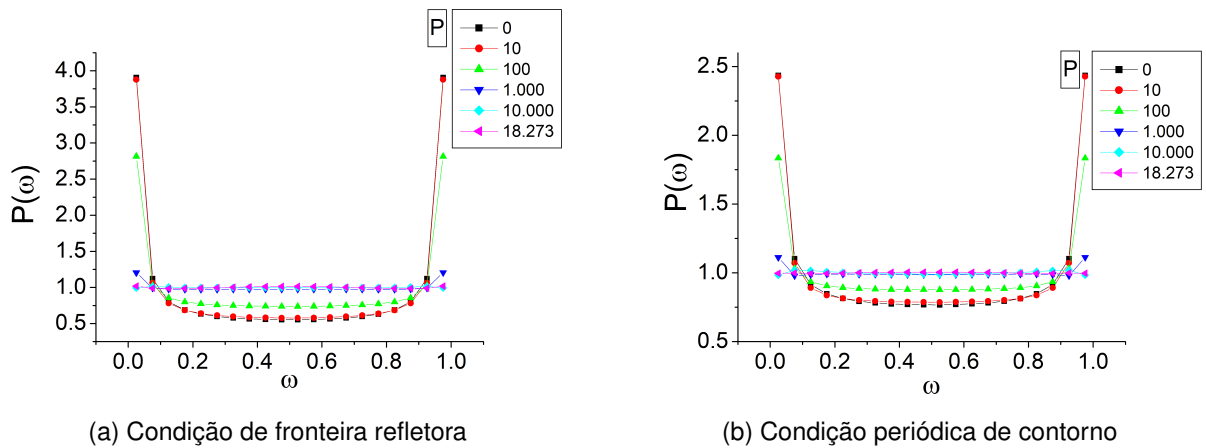


Figura 45 – $P(\omega)$ na rede aleatória não conservativa com o sítio de partida próximo ao sítio de chegada em uma quina da rede.

Na Figura 44a, a $P(\omega)$ para nenhuma reconexão e fronteira refletora, apresenta um formato de sino, com um pico em $\omega = 0,5$. Enquanto na Figura 44b, a $P(\omega)$ para nenhuma reconexão e fronteira periódica apresenta um formato de U, com mínimo em $\omega = 0,5$ e dois máximos próximos de $\omega = 0$ e $\omega = 1$.

A $P(\omega)$ em formato de U também é observada ao se considerar o sítio de partida próximo ao sítio de chegada, independentemente da presença ou ausência de sítios refletores, conforme a Figura 45.

A mudança topológica da rede quadrada para a rede aleatória não conservativa reduz o número de cliques entre sítios, e a nova topologia adquire características de mundo pequeno. Nas Figuras 44 e 45 o formato quase uniforme das $P(\omega)$ indica que a rede está se tornando de mundo pequeno.

4.3.2 TPR com Fronteira Refletora e com Fronteira Periódica

O primeiro retorno do caminhante aleatório em uma rede aleatória não conservativa, com 10.000 sítios e 20.000 arestas, foi obtido para um sítio próximo à borda da rede e para um sítio da região central. A partir de uma rede quadrada realizamos 10, 100, 1.000, 10.000 e 18.273 reconexões de arestas. Em cada simulação foram realizadas 10^4 caminhadas aleatórias que finalizam quando o caminhante retorna ao sítio de partida pela primeira vez.

As Figuras 46 e 47 exibem as $\Psi(\tau_R)$ na rede aleatória não conservativa, respectivamente, para o caminhante liberado de um sítio próximo a uma quina da rede e para um sítio na região central da rede. A presença da fronteira refletora ocasiona TPR mais longos para o sítio próximo a uma quina da rede.

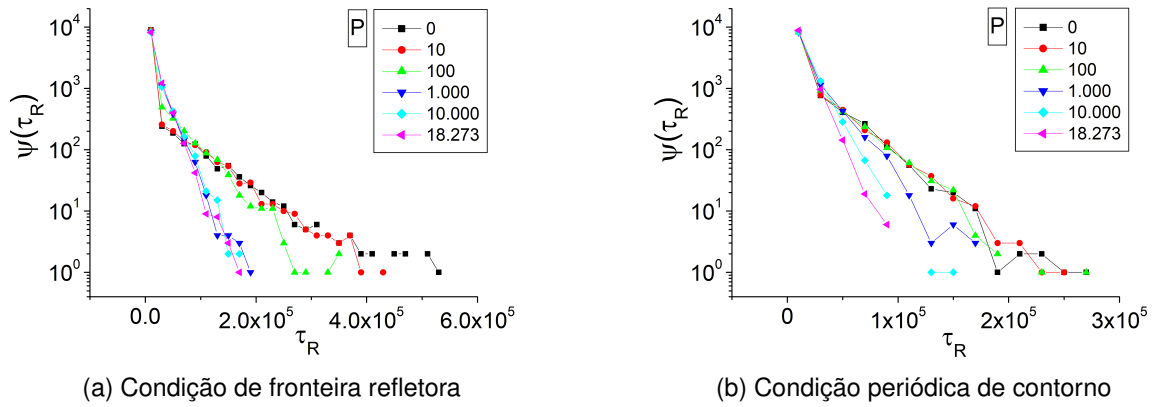


Figura 46 – $\Psi(\tau_R)$ na rede aleatória não conservativa com o sítio de partida próximo a uma quina da rede.

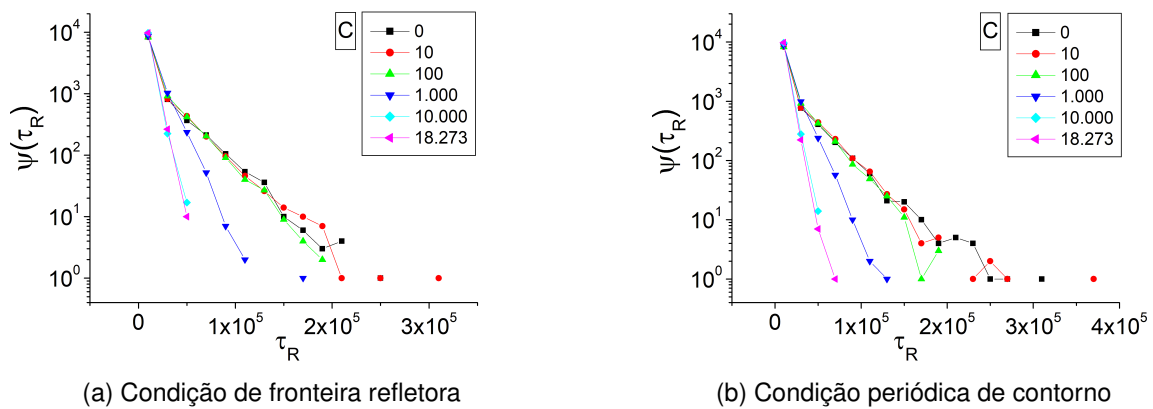


Figura 47 – $\Psi(\tau_R)$ na rede aleatória não conservativa com o sítio de partida na região central da rede.

Na seção 4.2.2 discutimos o primeiro retorno em uma rede aleatória conservativa. Nesta seção, obtemos as $P(\omega_R)$ à medida que a rede quadrada se torna aleatória não conservativa, por meio de reconexões de suas arestas.

As Figuras 48 e 49 exibem as $P(\omega_R)$ na rede aleatória não conservativa, respectivamente, para um sítio próximo à uma quina da rede e para um sítio na região central da rede. As $P(\omega_R)$ apresentam a forma tri-modal semelhantes as $P(\omega_R)$ da rede aleatória conservativa, discutida na seção 4.2.2. O comportamento tri-modal aparece tanto para o sítio na região central da rede, como para o sítio próximo à borda da rede, na presença ou ausência de sítios refletoras.

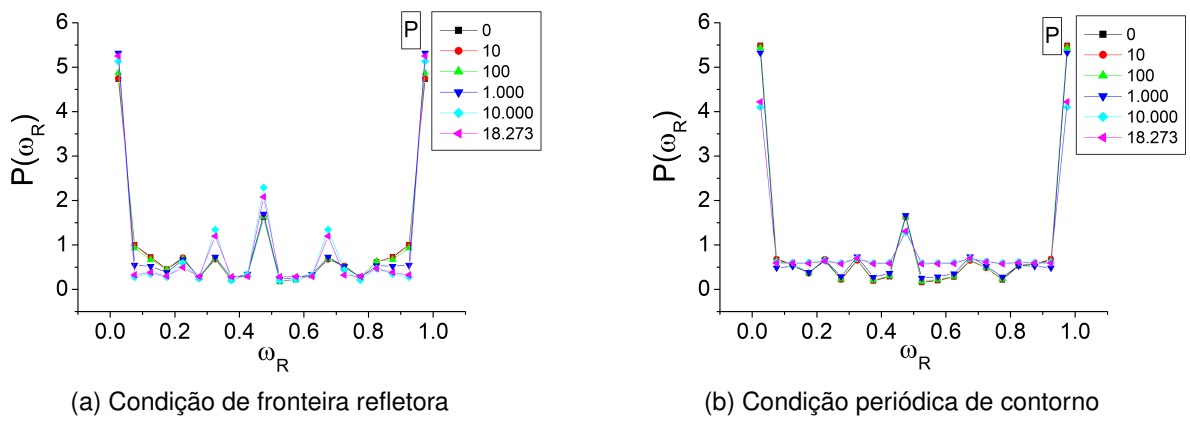


Figura 48 – $P(\omega_R)$ na rede aleatória não conservativa com o sítio de partida próximo à uma quina da rede.

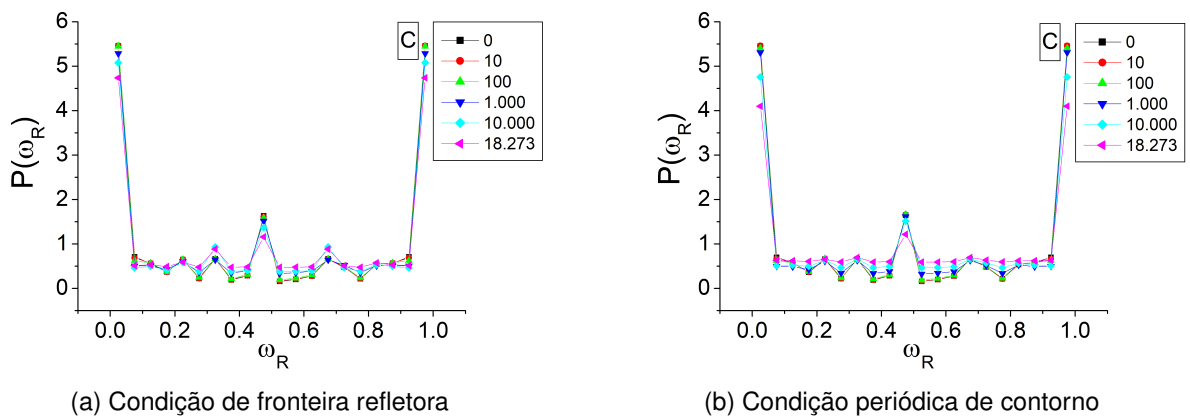


Figura 49 – $P(\omega_R)$ na rede aleatória não conservativa com o sítio de partida na região central da rede.

4.4 Rede Aleatória de Mundo Pequeno

4.4.1 TPP

A rede aleatória de mundo pequeno foi implementada com 10.000 sítios e com 8 arestas não direcionadas por sítio, totalizando 40.000 arestas em toda a rede. Foram simuladas redes com 10, 100, 1.000, 10.000, 20.000 e 40.000 reconexões de arestas, seguindo a metodologia apresentada na seção 3.1.4. O TPP foi medido para cada uma destas quantidades de reconexões sem a presença de sítios refletor.

Inicialmente, para verificar os efeitos das reconexões de arestas no anel regular, o caminhante foi liberado de um sítio de partida com o maior número de cliques ao sítio de chegada. Estes sítios foram mantidos à medida que as arestas eram reconectadas. Nestas condições foram simuladas 10^4 caminhadas aleatórias, que finalizam quando o caminhante atinge o sítio alvo. Uma representação esquemática com 20 sítios é apresentada na Figura 50.

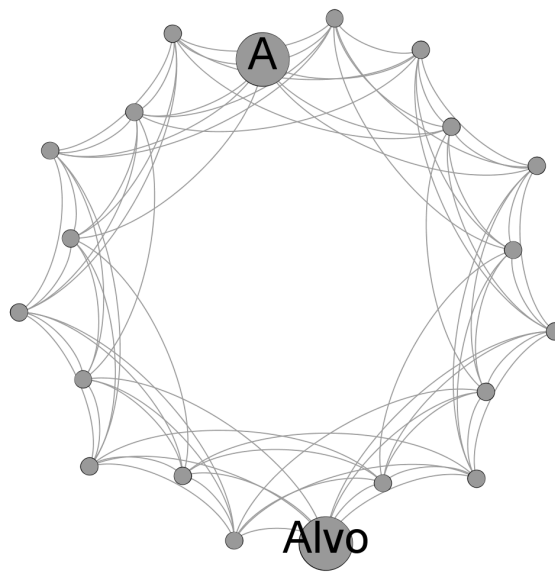


Figura 50 – Anel regular com 20 sítios e 8 arestas por sítio. Em destaque, o sítio de chegada **Alvo**, que é o mais afastado da rede em relação ao sítio de partida **A**.

A Figura 51 exibe $\Psi(\tau)$ e $P(\omega)$ da mudança topológica do anel de sítios para a rede aleatória de mundo pequeno, para o caso em que o sítio de partida está inicialmente afastado do sítio alvo, conforme representado na Figura 50. Com apenas 10 reconexões o maior TPP reduziu para menos da metade do maior TPP da rede sem nenhuma reconexão. Isto se reflete na $P(\omega)$, uma vez que as curvas colapsaram a partir de 10 reconexões de arestas. As significativas mudanças no formato destas distribuições são causadas pela grande redução do número de cliques entre o sítio de partida e de chegada.

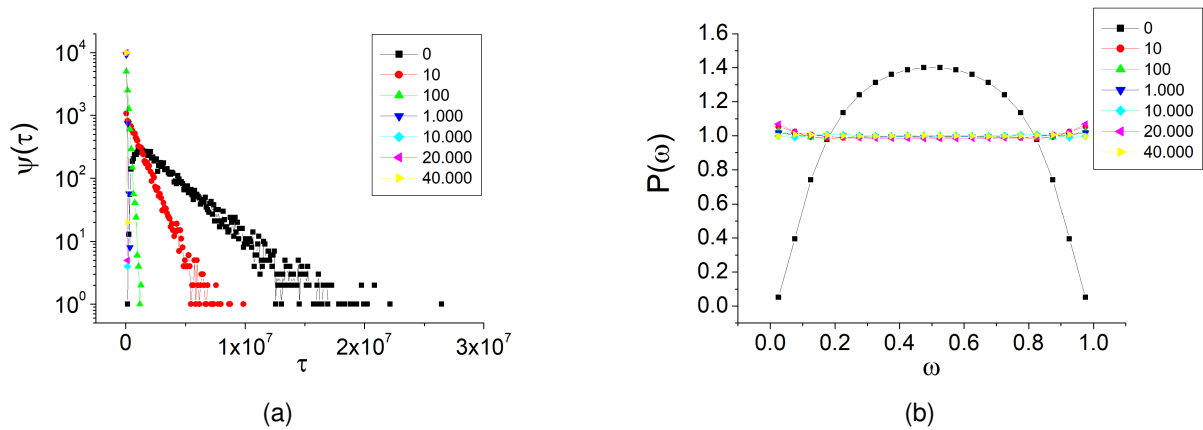


Figura 51 – $\Psi(\tau)$ e $P(\omega)$ na rede aleatória de mundo pequeno. O sítio alvo é o sítio da rede que está mais afastado do sítio de partida.

As reconexões de arestas em redes com estruturas inicialmente regulares criam atalhos entre regiões que eram separadas por vários cliques, conforme discutimos nas seções anteriores. Mas na mudança do anel regular para uma rede aleatória de mundo pequeno esses atalhos encurtam essas regiões rapidamente com algumas poucas reconexões. Por isso, a análise do IU como vinha sendo feita, isto é, aumentando o número de reconexões e mantendo os sítios de partida e de chegada dificulta a análise da simultaneidade de PP.

Para extrair mais informações da rede com o IU podemos calculá-lo sempre para os dois sítios mais afastados da rede, quando realizadas 10, 100, 1.000, 10.000, 20.000 e 40.000 reconexões de arestas. Para isso mapeamos o número de cliques entre os sítios da rede com o algoritmo de busca em largura [45] identificando os sítios que estão afastados, próximos e intermediários.

A Figura 52 exibe as $\Psi(\tau)$ e $P(\omega)$ da rede aleatória de mundo pequeno, nestas simulações o sítio alvo foi mantido e variou-se o sítio de partida do caminhante aleatório. O TPP foi obtido para três quantidades de cliques entre o sítio de partida e o sítio alvo: densidade alta (sítios afastados), densidade baixa (sítios próximos) e densidade mediana (sítios intermediários). Após 100 reconexões, as $P(\omega)$ dos afastados e dos intermediários se tornam mais uniformes e com 1.000 reconexões estas curvas colapsaram.

Essa última abordagem aplicada nesta topologia se estende para outras topologias, tornando-se de fundamental relevância por evitar que escolhas apenas visuais dos sítios levem a conclusões precipitadas, pois a aleatoriedade das reconexões causam significativas mudanças na topologia.

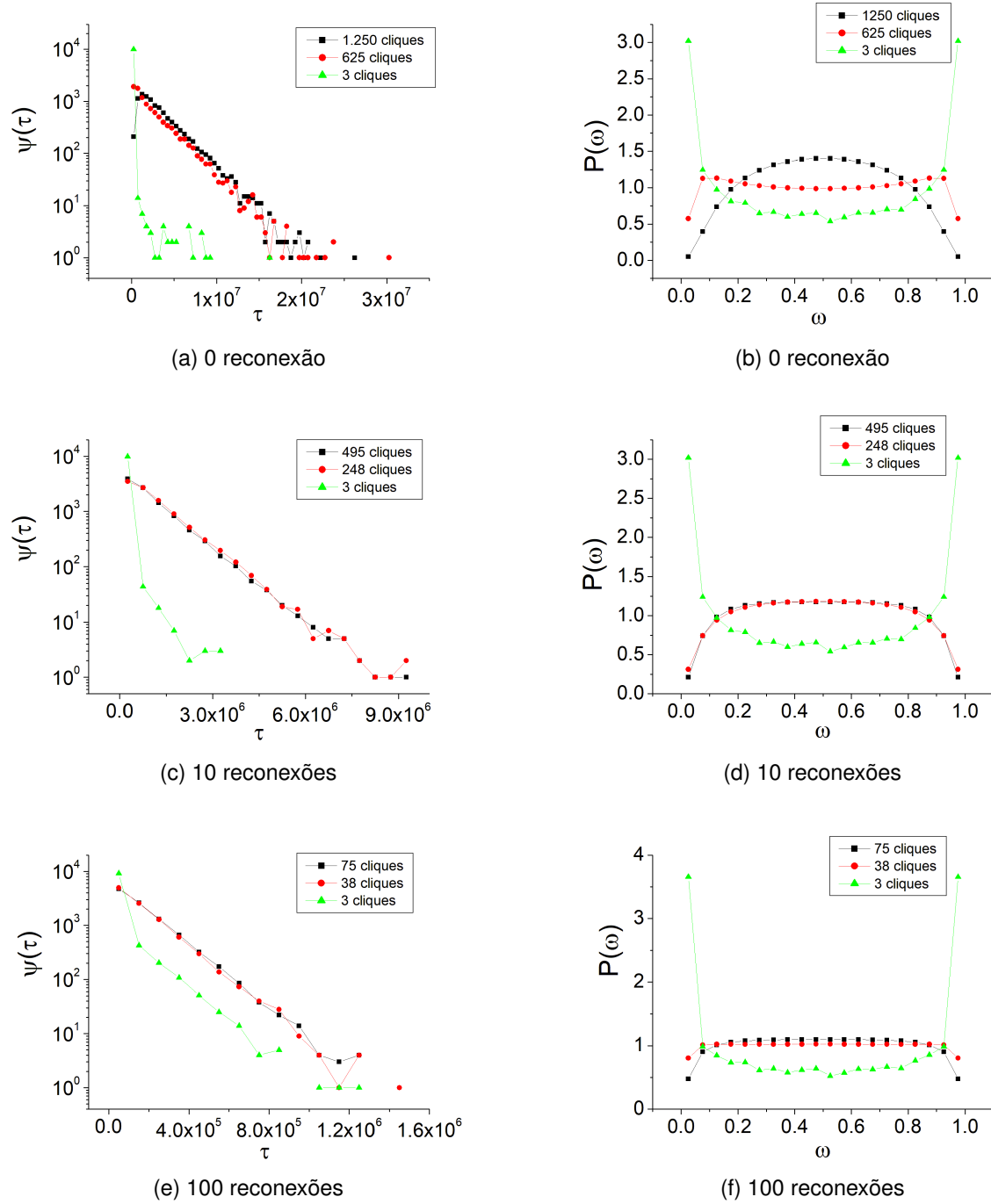
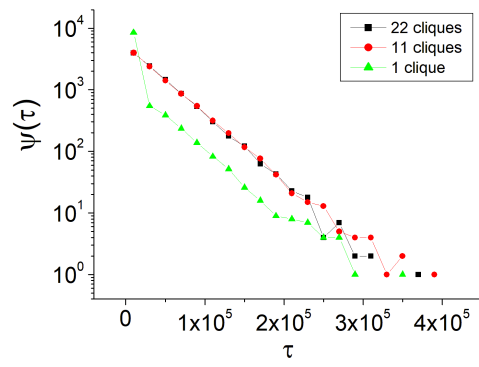
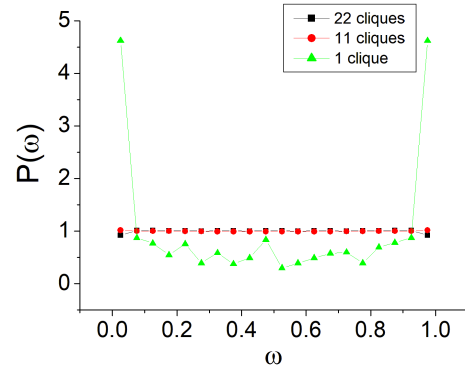


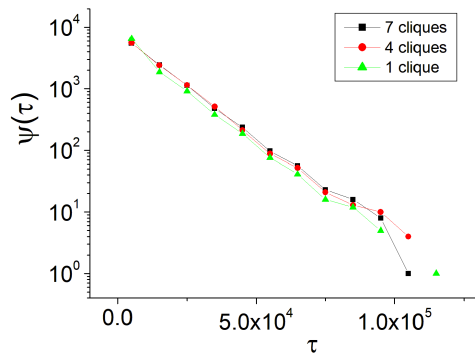
Figura 52 – $\Psi(\tau)$ e $P(\omega)$ na rede aleatória de mundo pequeno. A partir de um anel regular com 10.000 sítios e 8 arestas não direcionadas por sítio, foram realizadas 10, 100, 1.000, 10.000, 20.000 e 40.000 reconexões de arestas.



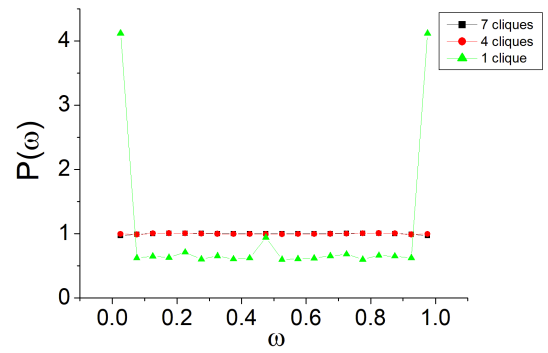
(g) 1.000 reconexões



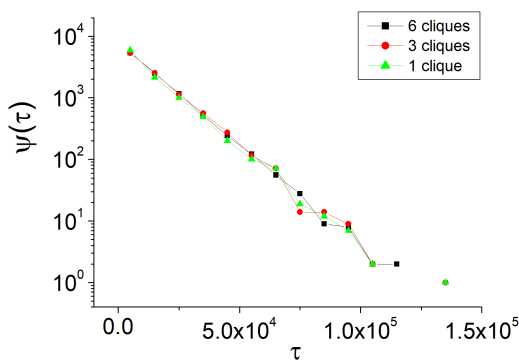
(h) 1.000 reconexões



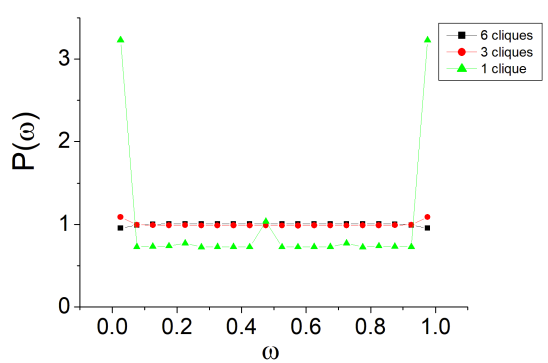
(i) 10.000 reconexões



(j) 10.000 reconexões



(k) 20.000 reconexões



(l) 20.000 reconexões

Figura 52 – $\Psi(\tau)$ e $P(\omega)$ na rede aleatória de mundo pequeno. A partir de um anel regular com 10.000 sítios e 8 arestas não direcionadas por sítio, foram realizadas 10, 100, 1.000, 10.000, 20.000 e 40.000 reconexões de arestas.

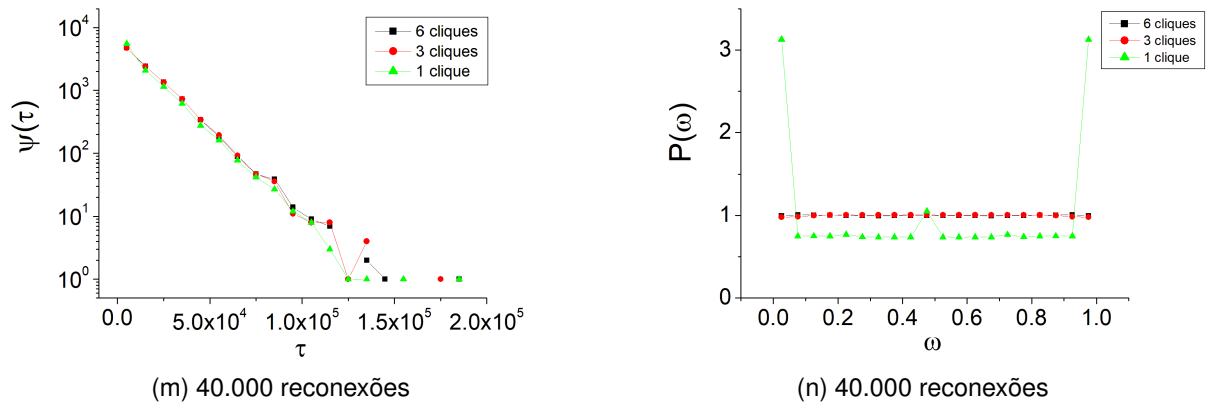


Figura 52 – $\Psi(\tau)$ e $P(\omega)$ na rede aleatória de mundo pequeno. A partir de um anel regular com 10.000 sítios e 8 arestas não direcionadas por sítio, foram realizadas 10, 100, 1.000, 10.000, 20.000 e 40.000 reconexões de arestas.

As $P(\omega)$ apresentadas na Figura 52 caracterizam a mudança topológica do anel regular para a rede aleatória de mundo pequeno. À medida que arestas são reconectadas o formato de sino da $P(\omega)$ se altera para um formato quase uniforme, quando se observa os sítios mais afastados. Já para sítios próximos o formato de U se mantém, mas as oscilações no centro da distribuição diminuem à medida que a rede se transforma em aleatória de mundo pequeno.

A partir de 10.000 reconexões de arestas a $P(\omega)$ de sítios afastados, bem como, a $P(\omega)$ de sítios próximos apresentam formato quase uniforme se comparadas as $P(\omega)$ desta rede com menos reconexões. Além disso, em certos intervalos da distribuição estas curvas ficam quase paralelas.

4.5 Rede Livre de Escala

A rede livre de escala foi obtida a partir de reconexões preferenciais das arestas de uma rede quadrada com 10.000 sítios, seguindo a metodologia apresentada na seção 3.1.5. Foram simuladas redes com 10, 100, 1.000, 10.000 e 18.577 reconexões de arestas. O algoritmo permitiu reconectar até 18.577 arestas das 20.000 arestas originais da rede quadrada. As regras de reconexões definidas impedem que os sítios fiquem sem nenhuma aresta, por isso, não é possível reconectar todas as arestas da rede original. O TPP foi medido para cada uma destas quantidades de reconexões sem a presença de sítios refletores.

Para verificar a influência da posição do sítio de partida em relação ao sítio alvo, o caminhante foi liberado ora de um sítio afastado, ora de um sítio próximo. Nestas topologias de redes foram simuladas 10^4 caminhadas aleatórias, que finalizam quando o caminhante atinge o sítio alvo e então se computa o TPP. Uma representação esquemática com 36 sítios é apresentada na Figura 53.

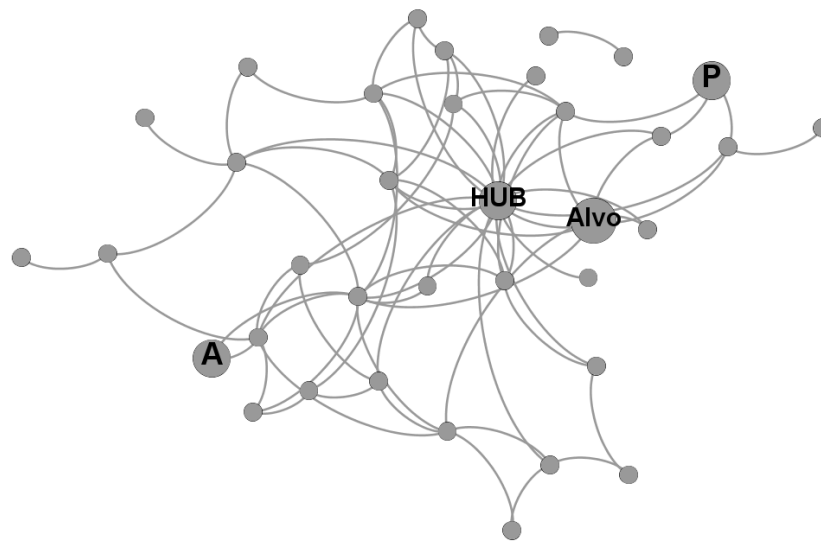


Figura 53 – Rede livre de escala com 36 sítios obtida a partir de 66 reconexões preferenciais entre as arestas de uma rede quadrada. Sítios em destaque: **Alvo** (sítio de chegada), **P** (sítio de partida próximo ao sítio alvo), **A** (sítio de partida afastado do sítio alvo) e **Hub** (sítio mais conectado).

A Figura 54 exibe as $\Psi(\tau)$ e $P(\omega)$ na rede livre de escala. Para cada quantidade de arestas reconectadas são analisadas duas situações na rede gerada, em uma delas o sítio de partida está afastado ao máximo do sítio de chegada, e na outra o sítio de partida está próximo do sítio de chegada.

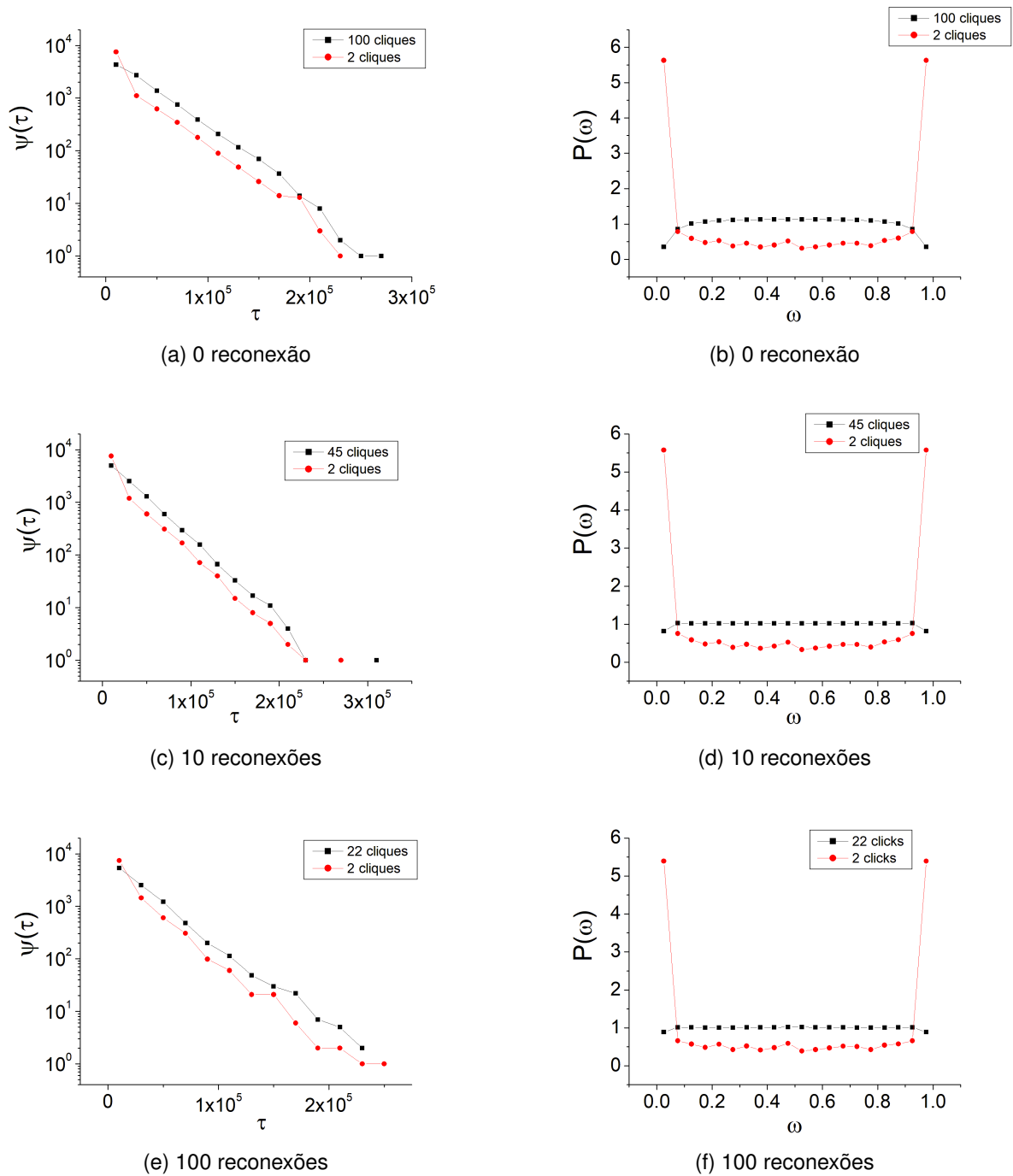


Figura 54 – $\Psi(\tau)$ e $P(\omega)$ na rede livre de escala. A partir de uma rede quadrada com 10.000 sítios foram realizadas reconexões preferenciais em suas arestas mudando-a para uma topologia livre de escala. O TPP foi medido para cada um destes instantes da transformação da rede fixando-se o sítio de chegada e variando-se o sítio de partida. Foram investigadas duas quantidades de cliques que separam os sítios de partida e chegada: número máximo de cliques e poucos cliques de separação.

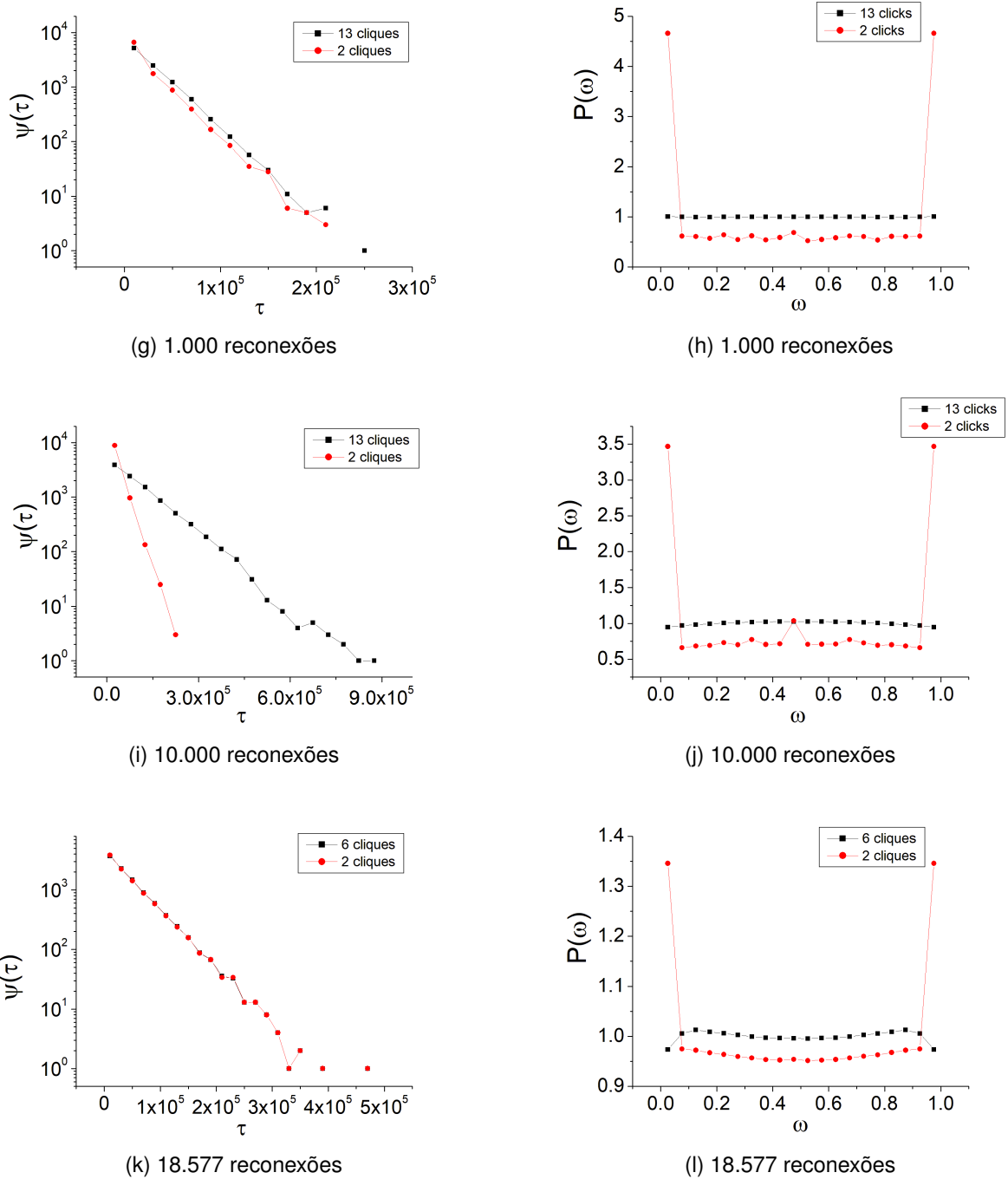


Figura 54 – $\Psi(\tau)$ e $P(\omega)$ na rede livre de escala. A partir de uma rede quadrada com 10.000 sítios foram realizadas reconexões preferenciais em suas arestas mudando-a para uma topologia livre de escala. O TPP foi medido para cada um destes instantes da transformação da rede fixando-se o sítio de chegada e variando-se o sítio de partida. Foram investigadas duas quantidades de cliques que separam os sítios de partida e chegada: número máximo de cliques e poucos cliques de separação.

Na Figura 54 as $\Psi(\tau)$ das redes de 10 a até 1.000 reconexões de arestas mostram que a ocorrência de TPP longos se tornam cada vez menores à medida que as arestas são reconectadas. Mas o aumento para 10.000 e 18.577 reconexões causaram significativas mudanças nas respectivas $\Psi(\tau)$. Isto mostra novamente o cuidado ao analisar o TPP em redes com distribuição de *links* não homogênea.

As $P(\omega)$ para sítios que estão afastados se tornam suaves com formato quase uniforme, indicado que a rede está se tornando mundo pequeno. Já para sítios próximos, as $P(\omega)$ têm formato de U e as oscilações no centro da distribuição diminuem à medida que a rede se torna mundo pequeno. Além disso, os valores máximos encontrados na forma em U diminuem com as reconexões.

Em outra simulação da mudança topológica de rede quadrada para livre de escala nós mapeamos pares de sítios afastados que se tornaram próximos após a reconexão de todas as arestas possíveis. Nós fixamos um destes pares e simulamos 10^4 caminhadas aleatórias para cada mudança na quantidade de reconexões obtendo as $\Psi(\tau)$ e $P(\omega)$, exibidas na Figura 55. Na rede ainda quadrada os sítios investigados estavam separados por 96 cliques. O aumento do número de reconexões diminuiu o número de cliques entre os dois sítios, e ao atingir o máximo de reconexões eles ficaram a 3 cliques de separação.

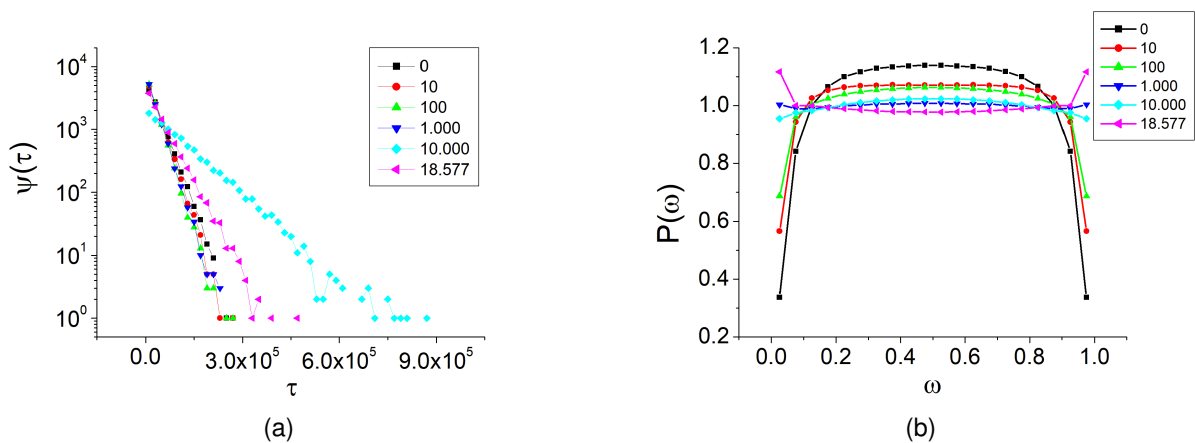


Figura 55 – $\Psi(\tau)$ e $P(\omega)$ na rede livre de escala, para um sítio de partida e um sítio alvo fixos. Eles são os mais afastados na rede ainda sem reconexão e se tornaram próximos após várias reconexões de arestas formando os pares: [0 reconexão; 96 cliques], [10; 19], [100; 12], [1.000; 10], [10.000; 6] e [18.577; 3].

As simulações com 10.000 e 18.577 reconexões de arestas apresentam TPP mais longos mesmo com a redução no número de cliques entre os dois sítios, como se pode observar nas $\Psi(\tau)$. Este fato refletiu na mudança do formato da $P(\omega)$ que se parecia com um sino e inverteu suas extremidades próximas de $\omega = 0$ e $\omega = 1$ para cima. Essa evolução do IU indica que se dois caminhantes aleatórios partem de um mesmo sítio eles tendem a chegar em tempos cada vez mais distintos ao sítio alvo, à medida que as reconexões

aproximam os sítios de partida e chegada na rede livre de escala.

Na próxima seção será discutida a influência dos *hubs* nas caminhadas aleatórias, sendo fundamental para interpretar o aumento dos TPP e a mudança de formato das $\Psi(\tau)$ na rede livre de escala.

4.6 Análise da Ocupação de Sítios

Durante uma caminhada aleatória os sítios da rede são visitados um número aleatório de vezes. Para determinar o número de visitas de cada sítio implementamos uma rotina na qual cada sítio tem o seu contador de visitas, o qual tem uma unidade acrescida toda vez em que o caminhante passa pelo sítio. A distribuição de visitas de uma caminhada nos fornece informações sobre a topologia da rede. Nos modelos de redes investigados neste trabalho foram realizadas caminhadas aleatórias com 10^4 , 10^5 , 10^6 e 10^7 passos, nas quais o caminhante parte de um sítio aleatório para identificarmos o formato da distribuição de visitas.

A Figura 56 exibe as distribuições de visitas de uma rede quadrada com 10.000 sítios e condições periódicas de contorno. Em todas as distribuições a maioria dos sítios têm número de visitas próximo à media. Com o aumento do número de passos do caminhante aleatório o formato da distribuição tende a uma gaussiana.

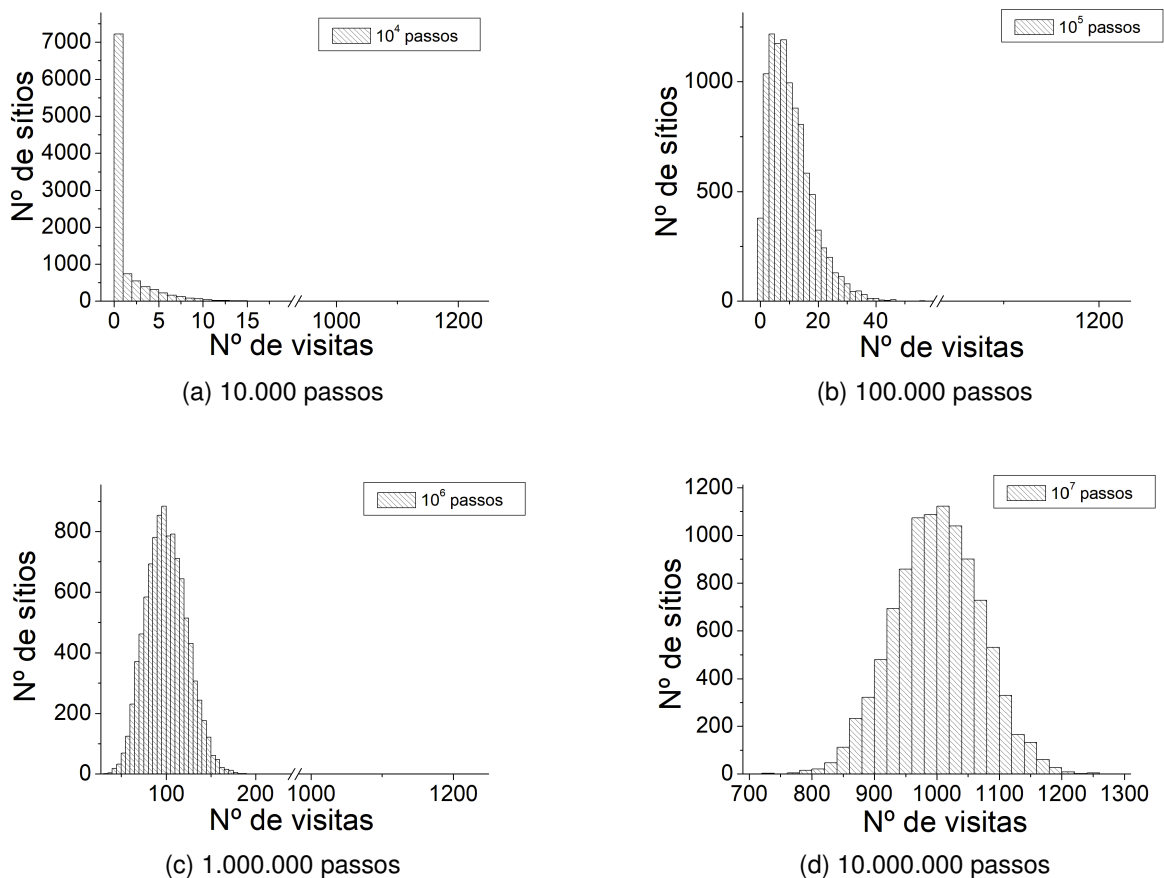


Figura 56 – Distribuições de visitas de uma rede quadrada com 10.000 sítios e condições periódicas de contorno. Um caminhante aleatório é liberado de um sítio e realiza uma caminhada pelos sítios da rede, que é interrompida ao atingir um determinado número de passos.

As distribuições de visitas de uma rede aleatória conservativa com 10.000 sítios, obtida pela reconexão de todas as arestas de uma rede quadrada são apresentadas na Figura 57. Com o aumento do número de passos do caminhante aleatório o formato da distribuição tende a uma gaussiana e indica que apesar da aleatoriedade das reconexões a maioria dos sítios têm número de visitas próximo à média. Ao final de todas as reconexões a permanência de 4 arestas por sítio contribui para a manutenção de um número médio de visitas.

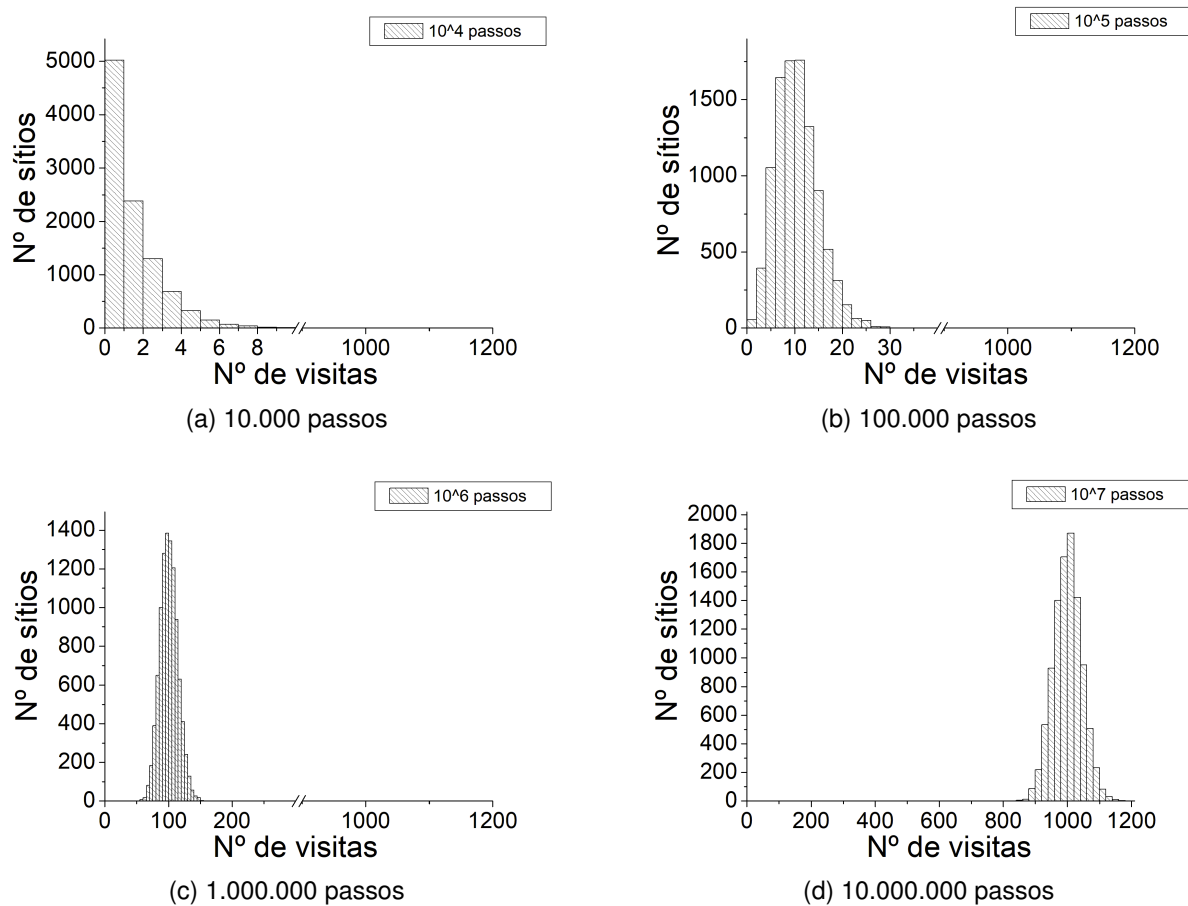


Figura 57 – Distribuições de visitas de uma rede aleatória conservativa. Um caminhante aleatório é liberado de um sítio e realiza uma caminhada pelos sítios da rede, que é interrompida ao atingir um determinado número de passos.

A Figura 58 exibe as distribuições de visitas de uma rede aleatória não conservativa com 10.000 sítios, obtida pela reconexão de 18.273 arestas das 20.000 arestas de uma rede quadrada. Nesta topologia, alguns poucos sítios são visitados muitas vezes e se afastam da média de visitas. A aleatoriedade do número de ligações por sítio contribui para esta mudança na distribuição, se comparada às distribuições de visitas da rede quadrada e da rede aleatória conservativa que possuem todos os sítios com 4 ligações.

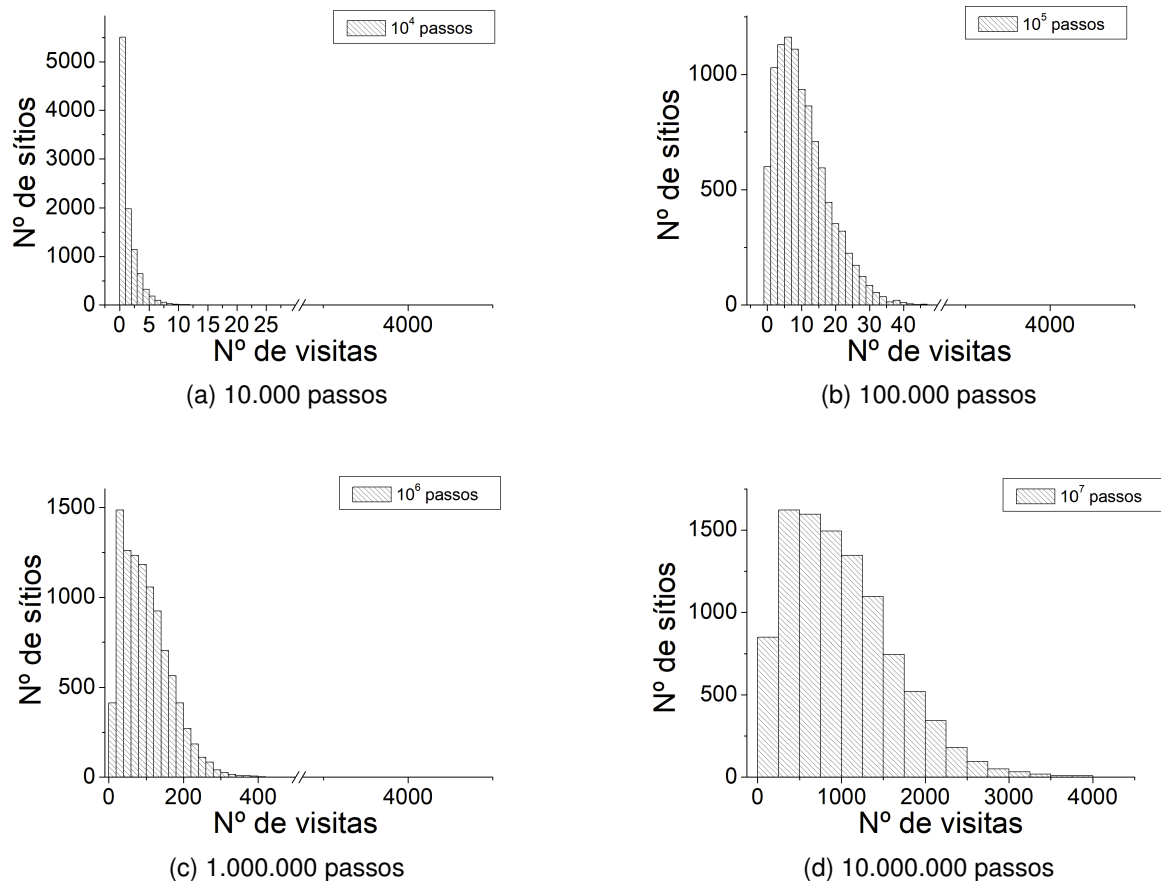


Figura 58 – Distribuições de visitas de uma rede aleatória não conservativa. Um caminhante aleatório é liberado de um sítio e realiza uma caminhada pelos sítios da rede, que é interrompida ao atingir um determinado número de passos.

As distribuições de visitas de uma rede aleatória de mundo pequeno com 10.000 sítios, obtida pela reconexão de 20.000 arestas de um anel regular com 8 arestas por sítio, são apresentadas na Figura 59. O formato da distribuição indica que apesar da aleatoriedade das reconexões não manter 8 arestas por sítio a maioria dos sítios têm número de visitas próximo à média.

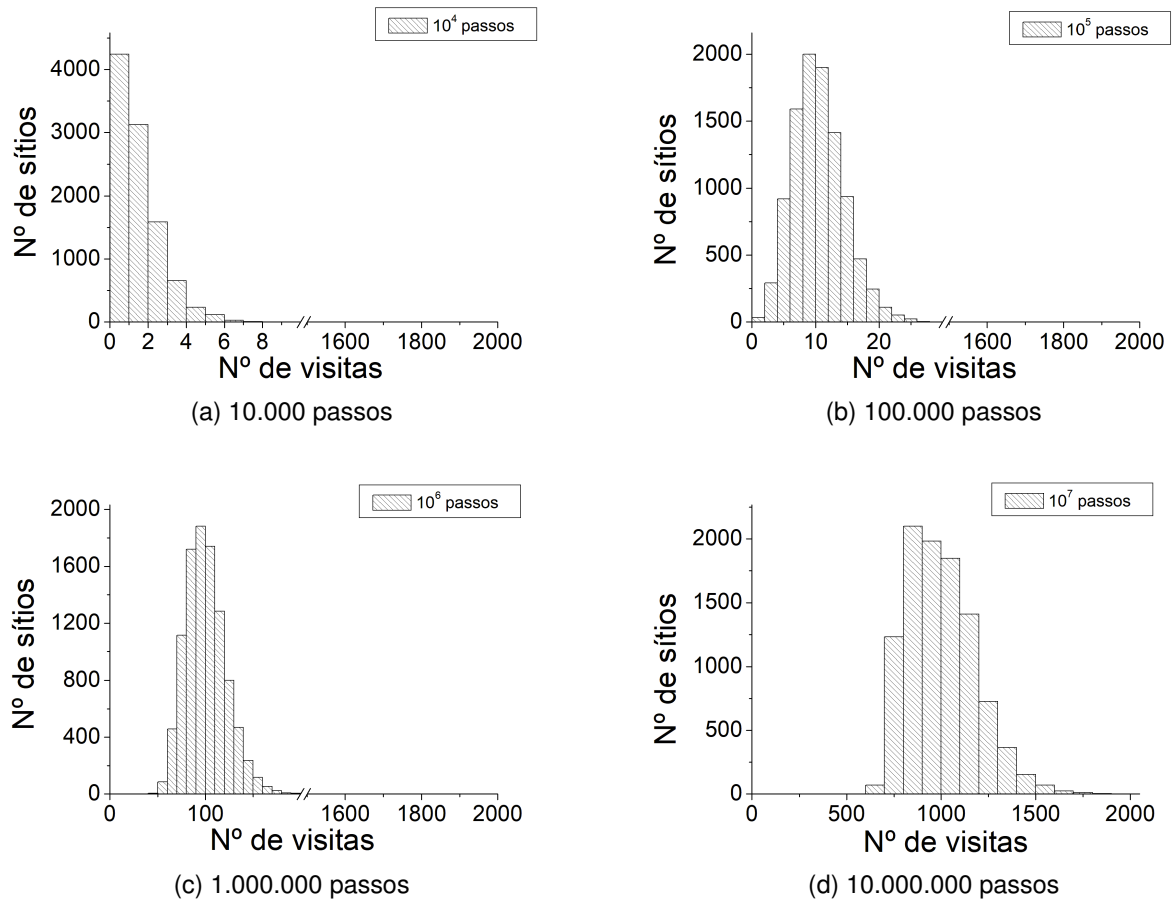


Figura 59 – Distribuições de visitas de uma rede aleatória de mundo pequeno. Um caminhante aleatório é liberado de um sítio e realiza uma caminhada pelos sítios da rede, que é interrompida ao atingir um determinado número de passos.

A Figura 60 exibe as distribuições de visitas de uma rede livre de escala com 10.000 sítios, obtida pela reconexão de 18.577 arestas das 20.000 arestas de uma rede quadrada. Os dados foram obtidos a partir de caminhadas aleatórias com 10^4 , 10^5 , 10^6 e 10^7 passos. Nesta topologia, o aumento do número de passos não convergiu para um número médio de visitas. De fato, ocorre um significativo aumento do número de visitas em alguns poucos sítios da rede. A presença dos *hubs*, que são sítios com muitas ligações proporcionam esta mudança no formato da distribuição.

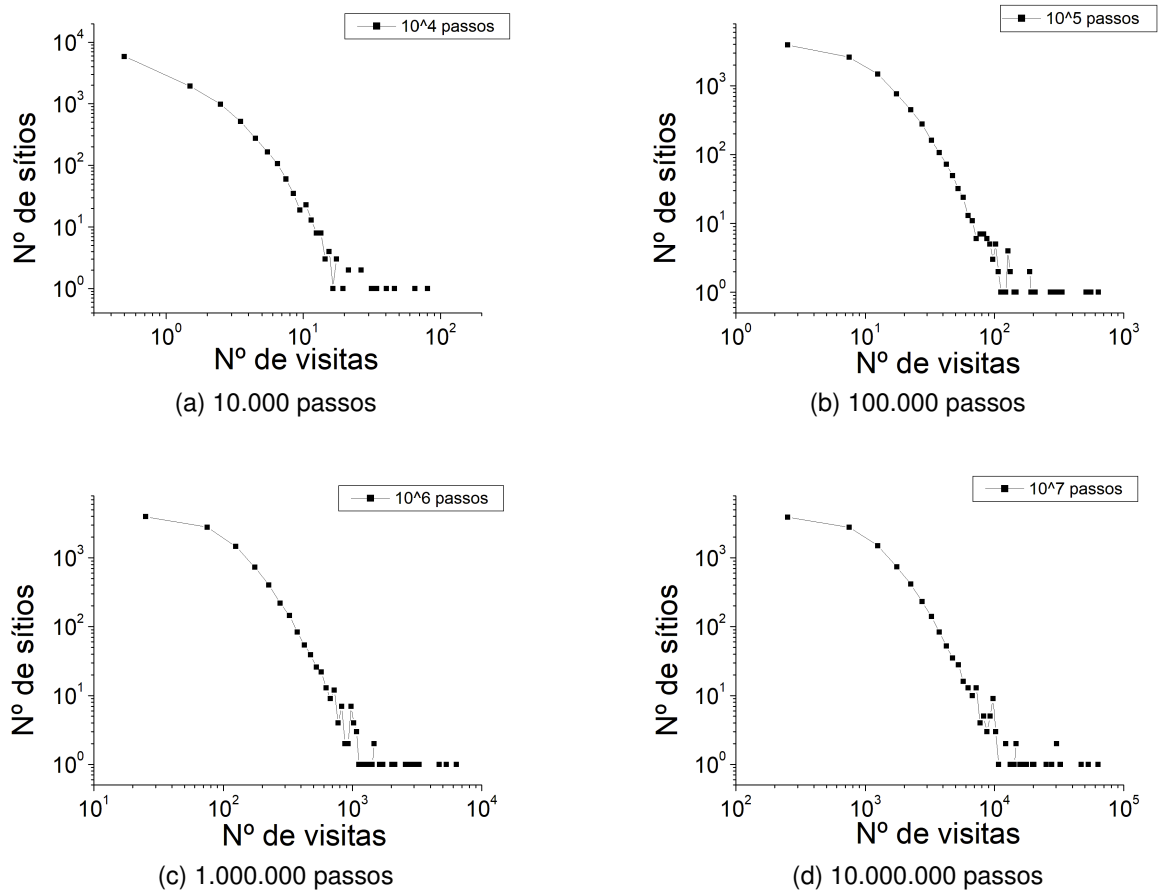


Figura 60 – Distribuições de visitas de uma rede livre de escala. Um caminhante aleatório é liberado de um sítio e realiza uma caminhada pelos sítios da rede, que é interrompida ao atingir um determinado número de passos.

Para uma melhor compreensão do papel dos *hubs* na mudança do formato da distribuição de visitas, nós simulamos caminhadas aleatórias com 10^6 passos, para cada instante da mudança topológica de uma rede quadrada com 10.000 sítios para uma rede livre de escala.

Na tabela 1 são apresentados os 5 primeiros sítios mais visitados com seus respectivos rótulos e número de ligações, em cada momento dessa evolução topológica da rede livre de escala, isto é, com 10, 100, 1.000, 10.000 e 18.577 reconexões de arestas de uma

rede quadrada.

A partir de 100 reconexões, os sítios mais visitados têm o maior número de ligações. Além disso, o sítio de rótulo 4476 assume o papel de *hub* da rede. O segundo e o terceiro sítio mais conectado, respectivamente, 9164 e 5933, assumem estas posições de destaque a partir de 100 reconexões.

A tabela 1 mostra que à medida que a rede se torna livre de escala os sítios com mais ligações são os mais visitados. Esta é uma informação útil para avaliar se uma rede está se tornando, mais ou menos, livre de escala durante a sua existência.

Tabela 1 – Número de visitas aos *hubs* de uma rede livre de escala

(a) 10 reconexões			(b) 100 reconexões		
Nº do sítio	Nº de visitas	Nº de <i>links</i>	Nº do sítio	Nº de visitas	Nº de <i>links</i>
6553	210	4	4476	466	20
6655	201	4	9164	443	18
6654	200	4	5933	312	13
6552	198	4	4985	281	10
9164	196	8	1378	263	12
(c) 1.000 reconexões			(d) 10.000 reconexões		
Nº do sítio	Nº de visitas	Nº de <i>links</i>	Nº do sítio	Nº de visitas	Nº de <i>links</i>
4476	1538	58	4476	4678	190
9164	1339	55	9164	3797	152
5933	1126	42	5933	3230	127
4985	720	27	843	2404	98
6803	684	29	4985	2253	91
(e) 18.577 reconexões					
Nº do sítio	Nº de visitas	Nº de <i>links</i>			
4476	6351	252			
9164	5320	212			
5933	4696	186			
843	3254	128			
7025	3149	118			

A Figura 61 exibe as distribuições de visitas para 100, 1.000, 10.000 e 18.577 reconexões de arestas, que são discutidas na Tabela 1. Para até 1.000 reconexões a maior parte dos sítios recebem 100 visitas em média. À medida que a rede se torna livre de escala a sua distribuição de visitas não apresenta um valor característico. A partir de 10.000 reconexões poucos sítios recebem muitas visitas e muitos sítios recebem poucas visitas.

Nas Figuras 61c e 61d observa-se uma lei de potência na região intermediária da distribuição. Este comportamento em lei de potência foi observado apenas na topologia livre de escala. A análise da distribuição de visitas da rede contribuiu para identificar uma das suas características topológicas, por meio da navegabilidade em seus sítios.

A rede livre de escala e a rede aleatória de mundo pequeno possuem características de mundo pequeno, que podem ser identificadas pelo IU. Contudo, somente o IU não é capaz de diferenciar estas duas topologias, mas a análise da distribuição de visitas permite diferenciar estas topologias.

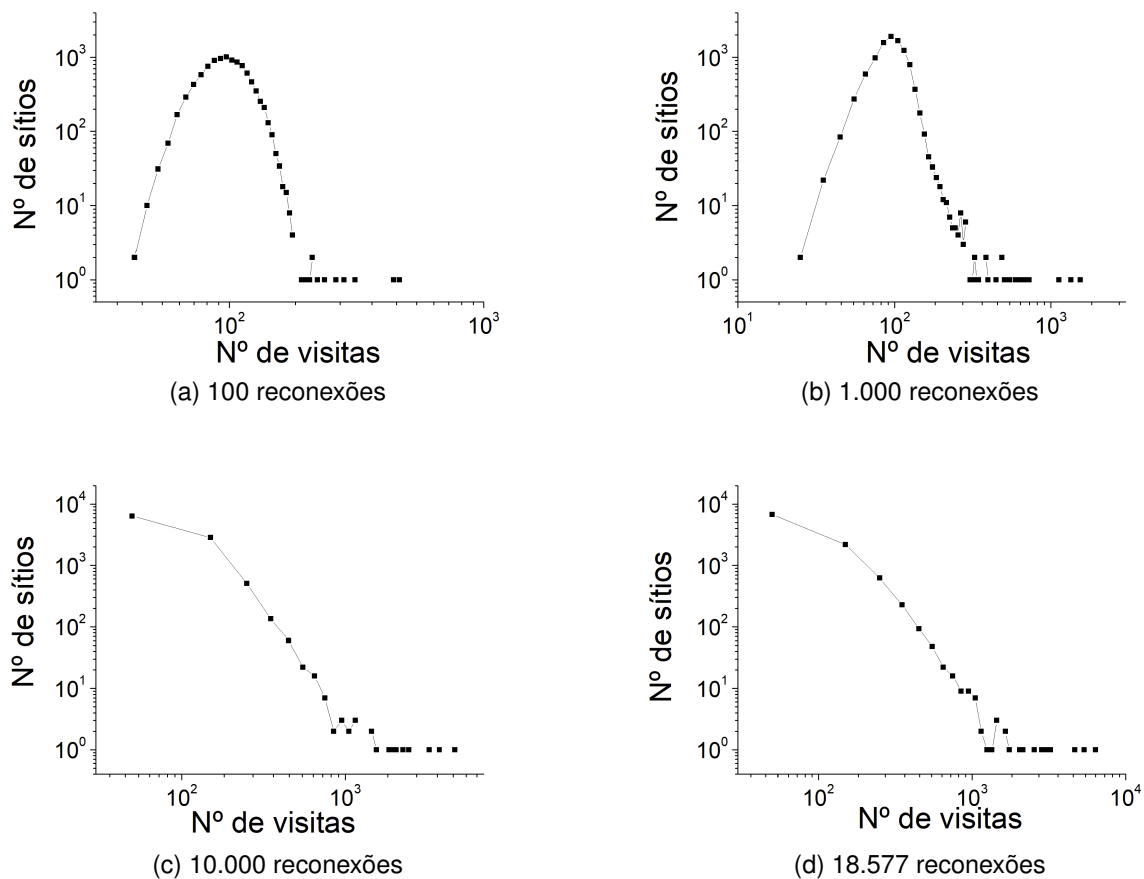


Figura 61 – Distribuições de visitas de uma rede livre de escala. Um caminhante aleatório é liberado de um sítio e realiza uma caminhada pelos sítios da rede, que é interrompida ao atingir 10^6 passos.

5 Conclusão

Este trabalho propôs uma metodologia para a análise topológica de redes por meio da navegabilidade nos sítios. O fluxo de informações é simulado por caminhadas aleatórias, com sítios de partida e de chegada adequadamente escolhidos. As ferramentas estatísticas dos FPP são adaptadas e aplicadas para a análise dos TPP nos sítios das redes. A metodologia permite identificar redes regulares e redes de mundo pequeno como a aleatória e a livre de escala.

Neste estudo foram analisadas as redes: quadrada, aleatória conservativa, aleatória não conservativa, aleatória de mundo pequeno e livre de escala. Apresentamos técnicas para reconexões de arestas que permitem a mudança topológica das redes. A partir de uma rede quadrada obteve-se as redes: aleatória conservativa, aleatória não conservativa, e livre de escala. E a partir de um anel de sítios obteve-se a rede aleatória de mundo pequeno. As ferramentas estatísticas propostas são capazes de identificar as mudanças topológicas que ocorrem devido às reconexões de arestas.

Em todas as topologias investigadas os TPP dependem consideravelmente da posição dos sítios de partida e de chegada. O número de cliques entre estes sítios influenciam o comportamento do IU. Este índice mensura a simultaneidade de primeira passagem de dois caminhantes aleatórios não interagentes, que partem de um mesmo sítio e atingem um sítio alvo.

Com significativo número de caminhadas aleatórias, os TPP são combinados obtendo-se o IU e a respectiva distribuição $P(\omega)$ que apresenta três formatos característicos: sino, U, e quase uniforme. O formato de sino apresenta um pico em $\omega = 0,5$, indicando que a maior parte dos caminhantes chegam em tempos similares ao sítio alvo, e assim o TMPP é uma boa medida para o processo. Este formato ocorre nos casos em que o sítio de partida está afastado do sítio de chegada. O formato em U apresenta um mínimo em $\omega = 0,5$ e dois máximos próximos de $\omega = 0$ e $\omega = 1$, indicando que a maioria dos caminhantes chegam em tempos distintos ao sítio alvo, e assim o TMPP não é uma boa medida para o processo. Este formato ocorre nos casos em que o sítio de partida está próximo do sítio de chegada. O formato que se aproxima de uma distribuição uniforme, não apresenta valor modal, indicado que os caminhantes chegam quase em mesmo número em diferentes tempos. Este formato ocorre nos casos em que o sítio de partida está a número médio de cliques do sítio de chegada.

Nas redes (quadrada, aleatória conservativa e não conservativa) foram investigados os efeitos causados por mudanças nas condições de contorno. Os sítios refletos na fronteira da rede causam significativas alterações nos TPP, principalmente quando o sítio

de chegada está a muitos cliques do sítio de partida.

Tanto na rede quadrada como no anel de sítios, a $P(\omega)$ para um sítio de partida afastado do sítio de chegada apresenta um formato de sino, enquanto que para um sítio de partida próximo ao sítio de chegada a $P(\omega)$ apresenta formato de U. Ao reconectar as arestas destas redes obtivemos a rede aleatória conservativa a partir da rede quadrada e a rede aleatória de mundo pequeno a partir do anel de sítios, a mudança topológica altera o formato da $P(\omega)$. No caso em que o sítio de partida está afastado do sítio de chegada algumas poucas reconexões de arestas fazem com que a $P(\omega)$ fique mais suave. Já para o caso em que os sítios investigados são próximos a $P(\omega)$ mantém o formato de U, mas com o centro da distribuição mais suave.

Nas topologias investigadas neste estudo, o aumento do número de reconexões de arestas ocasiona a redução do TPP, isto é, o caminhante gasta menos tempo para sair do sítio de partida e chegar no sítio alvo. As reconexões reduzem o número de cliques entre os sítios e a rede adquire características de mundo pequeno. Esta mudança topológica pode ser observada através da $P(\omega)$ que se assemelha a uma distribuição uniforme à medida que as arestas são reconectadas. Para esta análise a $P(\omega)$ deve ser obtida para um sítio de partida afastado do sítio de chegada.

A análise da $P(\omega)$ permite identificar se uma rede é de mundo pequeno, contudo, não diferencia se ela é uma rede aleatória ou uma rede livre de escala. Para diferenciar estas topologias nos propomos a análise da ocupação dos sítios durante uma caminhada aleatória. O procedimento consiste em liberar o caminhante aleatório e contabilizar o número de visitas que ele faz em cada sítio da rede. Foram observados dois formatos característicos da distribuição de ocupação dos sítios: unimodal e lei de potência.

A distribuição de ocupação unimodal indica que a maioria dos sítios recebem um número de visitas próximo à média. Este formato foi observado em redes que mantêm um número fixo de arestas por sítio, como a quadrada e a aleatória conservativa, e em redes que mantêm a maioria dos sítios com o número de arestas próximo à média, como a aleatória de mundo pequeno.

O outro formato da distribuição de ocupação apresenta uma lei de potência na região intermediária da distribuição, indicando que muitos sítios são pouco visitados e poucos sítios são muito visitados. Este formato foi observado para a rede livre de escala, que não apresenta um número médio de arestas por sítios, uma vez que sua distribuição de *links* é uma lei de potência.

O objetivo geral de contribuir para a análise topológica por meio da navegabilidade nos sítios de uma rede foi alcançado, considerando as topologias apresentadas no Capítulo 3 e a relevância dos resultados apresentados no Capítulo 4. O objetivo específico de diferenciar uma rede aleatória de uma rede livre de escala através de caminhadas aleatórias

nos sítios foi alcançado. O objetivo de desenvolver algoritmos que alterem a topologia da rede através das reconexões de arestas também foi alcançado.

5.1 Trabalhos Futuros

Como trabalhos futuros, sugere-se dar continuidade nesta pesquisa nas seguintes direções:

- No presente estudo, o caminhante aleatório atinge um alvo fixo e interrompe a sua caminhada. Pode-se investigar alvos móveis nas topologias de redes deste estudo. Sendo questões de interesse para processos químicos com reagentes, e processos de busca como em modelos presa-predador;
- Aplicar as ferramentas apresentadas para investigar o espalhamento de *memes* em redes sociais, tais como *Twitter* e *Facebook*;
- Aplicar o IU em redes metabólicas, investigando por exemplo os genes relacionados ao câncer de mama.
- Analisar redes de transporte como aéreo e rodoviário aplicando o UI, para identificar pontos de congestionamento e propor reconexões de rotas que melhorem o deslocamento dos usuários.

5.2 Considerações Finais

Esta tese oferece como contribuição científica uma nova técnica para a análise topológica de modelos de rede. O diferencial desta nova abordagem está na análise estatística das informações que transitam pela rede, diferenciando-se da análise estrutural da rede. Como fruto da pesquisa realizada nesta tese, os seguintes trabalhos foram publicados:

- CHAVES, M. S.; MATTOS, T. G.; ATMAN, A. P. F. Characterizing network topology using first-passage analysis. *Physical Review E*, American Physical Society (APS), v. 101, n. 4, apr 2020;
- CHAVES, M. S.; FARIA, A. A. P. ; MATTOS, T. G. Um Estudo do Tempo de Primeira Passagem em Redes. In: XXI Encontro Nacional de Modelagem Computacional, 2018, Búzios - RJ. XXI Encontro Nacional de Modelagem Computacional e IX Encontro de Ciência e Tecnologia de Materiais. Rio de Janeiro: Essentia Editora. v. 1.

E o seguinte trabalho foi apresentado:

- CHAVES, M. S.; FARIA, A. A. P. ; MATTOS, T. G. Fenômenos de Primeira Passagem em Redes. Apresentação de trabalho no XXXVII Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional (CNMAC 2017). São José dos Campos - São Paulo.

Referências

- 1 REDNER, S. **A Guide to First-Passage Processes**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2007. ISBN 0521036917. Citado 4 vezes nas páginas 1, 2, 5 e 6.
- 2 METZLER, R.; OSHANIN, G.; REDNER, S. (Ed.). **First-passage phenomena and their applications**. [S.l.]: World Scientific Publishing Company, 2014. ISBN 9814590282. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 43.
- 3 KRÜSEMANN, H.; GODEC, A.; METZLER, R. First-passage statistics for aging diffusion in systems with annealed and quenched disorder. **Physical Review E**, American Physical Society (APS), v. 89, n. 4, apr 2014. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103%2Fphysreve.89.040101>>. Citado na página 1.
- 4 LOVERDO, C. et al. Enhanced reaction kinetics in biological cells. **Nature Physics**, Springer Nature, v. 4, n. 2, p. 134–137, jan 2008. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038%2Fnpphys830>>. Citado na página 1.
- 5 LOVERDO, C. et al. Reaction kinetics in active media. **Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment**, IOP Publishing, v. 2009, n. 02, p. P02045, feb 2009. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088%2F1742-5468%2F2009%2F02%2FP02045>>. Citado na página 1.
- 6 CHOU, T.; D'ORSOGNA, M. R. First passage problems in biology. In: **First-Passage Phenomena and Their Applications**. [S.l.]: World Scientific Publishing Company, 2014. cap. 13, p. 306–345. Citado na página 1.
- 7 AFZAL, H. et al. Performance analysis of radio spectrum for cognitive radio wireless networks using discrete time markov chain. **Journal of Systems and Software**, Elsevier BV, v. 151, p. 1–7, may 2019. Citado na página 1.
- 8 BURKITT, A. N. A review of the integrate-and-fire neuron model: I. homogeneous synaptic input. **Biological Cybernetics**, Springer Nature, v. 95, n. 1, p. 1–19, apr 2006. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007%2Fs00422-006-0068-6>>. Citado na página 1.
- 9 CHOE, G. H.; JANG, H. J.; NA, Y. H. Pricing contingent convertible bonds: An analytical approach based on two-dimensional stochastic processes. **Statistics & Probability Letters**, Elsevier BV, v. 148, p. 43–53, may 2019. Citado na página 1.
- 10 DEFRENNE, Y. et al. The dual phase moisture conductivity of fibrous materials using random walk techniques in x-ray microcomputed tomographic structures. **Chemical Engineering Science**, Elsevier BV, v. 195, p. 565–577, feb 2019. Citado na página 1.
- 11 MEJÍA-MONASTERIO, C.; OSHANIN, G.; SCHEHR, G. First passages for a search by a swarm of independent random searchers. **Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment**, IOP Publishing, v. 2011, n. 06, p. P06022, jun 2011. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/1742-5468/2011/06/P06022>>. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 43.
- 12 STEFAN, F.; ATMAN, A. Is there any connection between the network morphology and the fluctuations of the stock market index? **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, Elsevier BV, v. 419, p. 630–641, feb 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016%2Fj.physa.2014.10.026>>. Citado na página 1.

- 13 ERDŐS, P.; RÉNYI, A. On random graphs i. **Publ. Math. Debrecen**, v. 6, p. 290–297, 1959. Citado na página 2.
- 14 BARABÁSI, A.-L.; ALBERT, R. Emergence of scaling in random networks. **Science**, American Association for the Advancement of Science (AAAS), v. 286, n. 5439, p. 509–512, oct 1999. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1126/science.286.5439.509>>. Citado 7 vezes nas páginas 2, 11, 12, 13, 17, 35 e 37.
- 15 CARPI, L. C. et al. Assessing diversity in multiplex networks. **Scientific Reports**, Springer Nature, v. 9, n. 1, mar 2019. Citado na página 2.
- 16 OLIVEIRA, I. M. de; CARPI, L.; ATMAN, A. P. F. The multiplex efficiency index: unveiling the brazil-ian air transportation multiplex network - batmn. **Under review**, 2019. Citado na página 2.
- 17 NOH, J. D.; RIEGER, H. Random walks on complex networks. **Physical Review Letters**, American Physical Society (APS), v. 92, n. 11, mar 2004. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.92.118701>>. Citado 2 vezes nas páginas 2 e 20.
- 18 SAMUKHIN, A. N.; DOROGOVTSSEV, S. N.; MENDES, J. F. F. Laplacian spectra of, and random walks on, complex networks: Are scale-free architectures really important? **Physical Review E**, American Physical Society (APS), v. 77, n. 3, mar 2008. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.77.036115>>. Citado na página 2.
- 19 TEJEDOR, V.; BÉNICHOU, O.; VOITURIEZ, R. Global mean first-passage times of random walks on complex networks. **Physical Review E**, American Physical Society (APS), v. 80, n. 6, dec 2009. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.80.065104>>. Citado na página 2.
- 20 MONTROLL, E. W.; WEISS, G. H. Random walks on lattices. II. **Journal of Mathematical Physics**, AIP Publishing, v. 6, n. 2, p. 167–181, feb 1965. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1063/1.1704269>>. Citado na página 2.
- 21 MATTOS, T. G. et al. First passages in bounded domains: When is the mean first passage time meaningful? **Physical Review E**, American Physical Society (APS), v. 86, n. 3, sep 2012. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.86.031143>>. Citado 8 vezes nas páginas 2, 18, 23, 40, 41, 42, 43 e 47.
- 22 SALINAS, S. R. D. A. **Introdução à Física Estatística**. 2. ed. [S.l.]: EDUSP, 2005. ISBN 8531403863. Citado 2 vezes nas páginas 5 e 6.
- 23 PEARSON, K. The problem of the random walk. **Nature**, Springer Nature, v. 72, n. 1865, p. 294–294, jul 1905. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1038/072294b0>>. Citado na página 5.
- 24 LOVRIC, M. (Ed.). **International Encyclopedia of Statistical Science**. [S.l.]: Springer, 2010. ISBN 9783642048975. Citado na página 5.
- 25 DURRETT, R. **Probability: Theory and Examples**. 4. ed. [S.l.]: Cambridge University Press, 2010. ISBN 0521765390. Citado 3 vezes nas páginas 5, 7 e 94.
- 26 KAMPEN, N. V. **Stochastic Processes in Physics and Chemistry**. 3rd ed. ed. [S.l.]: Elsevier, 2007. (North-Holland personal library). ISBN 9780444529657, 0444529659. Citado na página 5.

- 27 MÉNDEZ, V.; CAMPOS, D.; BARTUMEUS, F. **Stochastic Foundations in Movement Ecology**. [S.l.]: Springer Series in Synergetics, 2014. Citado na página 5.
- 28 KAC, M. Random walk and the theory of brownian motion. **The American Mathematical Monthly**, v. 54, n. 7, p. 369–391, 1947. Citado na página 5.
- 29 TOFFOLI, N. M. T. **Cellular Automata Machines**. [S.l.]: MIT Press Ltd, 1987. ISBN 026252631X. Citado na página 6.
- 30 PÓLYA, G. Über eine aufgabe der wahrscheinlichkeitsrechnung betreffend die irrfahrt im straßennetz. **Mathematische Annalen**, v. 84, p. 149–160, 1921. Disponível em: <<http://eudml.org/doc/158886>>. Citado na página 7.
- 31 DOYLE, P. G.; SNELL, J. L. **Random Walks and Electrical Networks**. [S.l.]: Mathematical Assn of Amer, 1984. (Carus Mathematical Monographs, 22). ISBN 978-0883850244. Citado na página 9.
- 32 BARABÁSI, A.-L. **Linked: how everything is connected to everything else and what it means for business, science, and everyday life**. [S.l.]: Plume Books, 2002. Citado 4 vezes nas páginas 9, 10, 11 e 14.
- 33 ERDÖS, P.; RÉNYI, A. On the evolution of random graphs. **Publ. Math. Inst. Hungar. Acad. Sci**, Citeseer, v. 5, p. 17–61, 1960. Citado 2 vezes nas páginas 10 e 17.
- 34 MILGRAM, S. The small world problem. **Psychology Today**, v. 2, p. 61–67, 1967. Citado na página 11.
- 35 WATTS, D. J.; STROGATZ, S. H. Collective dynamics of ‘small-world’ networks. **Nature**, Springer Nature, v. 393, n. 6684, p. 440–442, jun 1998. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1038/30918>>. Citado 6 vezes nas páginas 11, 12, 17, 31, 33 e 89.
- 36 SAYAMA, H. **Introduction to the Modeling and Analysis of Complex Systems**. [S.l.]: Open SUNY Textbooks, 2015. ISBN 978-1-942341-06-2. Citado 3 vezes nas páginas 15, 17 e 18.
- 37 AGLIARI, E.; CASSI, D. First-passage phenomena on finite inhomogeneous networks. In: **First-Passage Phenomena and Their Applications**. [S.l.]: World Scientific Publishing Company, 2014. cap. 5, p. 96–121. Citado na página 19.
- 38 OSTILLI, M. Cayley trees and bethe lattices: A concise analysis for mathematicians and physicists. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, Elsevier BV, v. 391, n. 12, p. 3417–3423, jun 2012. Citado na página 19.
- 39 HWANG, S.; LEE, D.-S.; KAHNG, B. Effective spectral dimension in scale-free networks. In: **First-Passage Phenomena and Their Applications**. [S.l.]: World Scientific Publishing Company, 2014. p. 122–144. Citado na página 19.
- 40 HWANG, S. et al. Spectral dimensions of hierarchical scale-free networks with weighted shortcuts. **Physical Review E**, American Physical Society (APS), v. 82, n. 5, nov 2010. Citado na página 19.
- 41 PILLAY, S. et al. An asymptotic analysis of the mean first passage time for narrow escape problems: part i: two-dimensional domains. **Multiscale Modeling and Simulation**, v. 8, n. 3, p. 803–835, 2010. Disponível em: <<https://doi.org/10.1137/090752511>>. Citado na página 20.

- 42 ZHANG, Z. et al. Mean first-passage time for random walks on undirected networks. **The European Physical Journal B**, Springer Science and Business Media LLC, v. 84, n. 4, p. 691–697, nov 2011. Citado na página 20.
- 43 ALDOUS, D.; FILL, J. A. **Reversible Markov Chains and Random Walks on Graphs**. 2002. Unfinished monograph, recompiled 2014, available at <<http://www.stat.berkeley.edu/~aldous/RWG/book.html>>. Citado na página 20.
- 44 JING, X.-L. et al. Mean first return time for random walks on weighted networks. **Int. J. Mod. Phys. C**, World Scientific Pub Co Pte Lt, v. 26, n. 06, p. 1550068, jun 2015. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1142/S0129183115500680>>. Citado na página 20.
- 45 ZIVIANI, N. **Projeto de Algoritmos**. 3ª. ed. [S.l.]: Cengage Learning, 2011. ISBN 978-85-221-1050-6. Citado 5 vezes nas páginas 23, 26, 33, 37 e 62.
- 46 METZLER, R. Brownian motion and beyond: first-passage, power spectrum, non-gaussianity, and anomalous diffusion. **Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment**, IOP Publishing, v. 2019, n. 11, p. 114003, nov 2019. Citado na página 43.

Apêndices

APÊNDICE A – Algoritmos

Neste apêndice são apresentados os algoritmos para os modelos de rede estudados. Os sítios são representados por S_i e uma aresta que liga S_i ao S_j é representada por $S_i - S_j$.

No Algoritmo 1, uma aresta é criada se ela não existe no estado atual da rede e caso ela não pertença à rede original. No Algoritmo 2, uma aresta é removida se ela existe no estado atual da rede e caso ela pertença à rede original.

Algoritmo 1: *cria_aresta*

Input: S_i e S_j
Output: aresta $S_i - S_j$
1 **if** $S_i \neq S_j$ & $\nexists S_i - S_j$ & $S_i - S_j \notin Q_0$ **then**
2 | cria aresta $S_i - S_j$
3 **end**

Algoritmo 2: *remove_aresta*

Input: S_i e S_j
Output: desconecta a aresta $S_i - S_j$
1 **if** $S_i \neq S_j$ & $\exists S_i - S_j$ & $S_i - S_j \in Q_0$ **then**
2 | remove aresta $S_i - S_j$
3 **end**

O Algoritmo 3 gera uma rede quadrada (Q_0) com N sítios e $2 \times N$ arestas, cada sítio possui 4 arestas. A largura da rede é representada por L .

O Algoritmo 4 gera uma rede aleatória conservativa (C_0) a partir de Q_0 . Em sua inicialização o vetor $A_0[i]$ armazena o número de arestas originais para cada sítio de Q_0 , à medida que as arestas originais de cada sítio são removidas a posição correspondente do vetor é atualizada. Se dada posição do vetor tem valor zero, o sítio correspondente não pode perder mais nenhuma aresta. Na linha 7, este critério é usado para validar os sítios u e v , que têm suas arestas removidas nas linhas 14 e 15. Após a validação dos sítios u e v , um vizinho de cada é escolhido para criar novas arestas nas linhas 11 e 12.

O Algoritmo 5 gera uma rede aleatória não conservativa (nC_0) a partir de Q_0 . Para manter os sítios conexos, as arestas são religadas nos sítios do vetor de reconectados (R), e os sítios são anexados caso não estejam no vetor, conforme a linha 36. Para uma aresta ser desconectada os correspondentes sítios devem ter mais de uma aresta. Além disso, deve existir um caminho entre cada um destes sítios e R . Este teste é realizado nas linhas 26-29 impedindo que a rede fique desconexa.

Algoritmo 3: Algoritmo para rede quadrada (Q_0)**Input:** Número de sítios N ($N = L \times L$)**Output:** rede quadrada com N sítios e $2 \times N$ arestas

```

1  $L = \sqrt{N}$ 
2 for  $i = 0$  até  $N$  do
3   if  $(i + 1) \bmod (L) = 0$  then
4     cria_aresta( $i, i - L + 1$ )
5   end
6   else
7     cria_aresta( $i, (i + 1) \bmod (N)$ )
8   end
9   if  $i \bmod (L) = 0$  then
10    cria_aresta( $i, i + L - 1$ )
11  end
12  else
13    cria_aresta( $i, (i + N - 1) \bmod (N)$ )
14  end
15  cria_aresta ( $i, (i + L) \bmod (N)$ )
16  cria_aresta ( $i, (i + N - L) \bmod (N)$ )
17 end

```

Algoritmo 4: Algoritmo para rede aleatória conservativa (C_0)**Input:** número n de arestas a permutar, rede quadrada (Q_0) com N sítios**Output:** rede aleatória conservativa

```

1  $t \leftarrow 0$  ( $t$  total de arestas religadas)
2  $A_0[i] \leftarrow 4$  ( $A_0$  número de arestas originais em cada sítio de  $Q_0$ )
3 while  $t < n$  do
4   do
5      $u \leftarrow \text{n}^\circ \text{ aleatório}(1, \dots, N)$ 
6      $v \leftarrow \text{n}^\circ \text{ aleatório}(1, \dots, N)$ 
7   while  $u = v \parallel \exists S_u - S_v \parallel \exists S_u - S_v \text{ em } Q_0 \parallel A_0[u] \leq 0 \parallel A_0[v] \leq 0$ ;
8      $x \leftarrow S_i \text{ vizinho de } u$  (da  $Q_0$ )
9      $z \leftarrow S_i \text{ vizinho de } v$  (da  $Q_0$ )
10    if  $x \neq z \ \& \ \nexists S_x - S_z \ \& \ \nexists S_x - S_z \text{ em } Q_0$  then
11      cria_aresta( $x, z$ )
12      cria_aresta( $u, v$ )
13       $t \leftarrow t + 2$ 
14      remove_aresta( $u, x$ )
15      remove_aresta( $v, z$ )
16       $A_0[u] = A_0[u] - 1$ ;
17       $A_0[v] = A_0[v] - 1$ ;
18       $A_0[x] = A_0[x] - 1$ ;
19       $A_0[z] = A_0[z] - 1$ ;
20    end
21 end

```

Algoritmo 5: Algoritmo para rede aleatória não conservativa (nC_0)**Input:** número n de arestas a permutar, rede quadrada (Q_0) com N sítios**Output:** rede aleatória não conservativa

```

1  $t \leftarrow 0$            ( $t$  total de arestas religadas)
2  $A_0[i] \leftarrow 4$     ( $A_0$  número de arestas originais em cada sítio de  $Q_0$ )
3  $R$                    (vetor de reconectados)
4 while  $t < 1$  do
5   do
6      $S_1 \leftarrow \text{n}^\circ \text{ aleatório}(1, \dots, N)$ 
7      $S_2 \leftarrow \text{n}^\circ \text{ aleatório}(1, \dots, N)$ 
8     while  $S_1 = S_2 \ \& \ \exists S_1 - S_2 \ \& \ \exists S_1 - S_2 \text{ em } Q_0$ ;
9      $u \leftarrow \text{sítio aleatório } (S_1 \text{ ou } S_2)$ 
10     $v \leftarrow S_i \text{ vizinho de } u \text{ (da } Q_0)$ 
11    remove_aresta( $u, v$ )
12     $A_0[u] = A_0[u] - 1$ ;
13     $A_0[v] = A_0[v] - 1$ ;
14    cria_aresta( $S_1, S_2$ )
15     $R \leftarrow S_1$ ;
16     $R \leftarrow S_2$ ;
17     $t \leftarrow t + 1$ 
18 end
19 while  $t < n$  do
20   do
21      $u \leftarrow \text{n}^\circ \text{ aleatório}(1, \dots, N)$ 
22      $v \leftarrow S_i \text{ vizinho de } u \text{ (da } Q_0)$ 
23      $x \leftarrow \text{sítio aleatório} \in R$ 
24     while ( $u = x \ || \ \exists S_u - S_x \ || \ \exists S_u - S_x \text{ em } Q_0 \ || \ A_0[u] \leq 0 \ || \ A_0[v] \leq 0 \ || \ \text{n}^\circ \text{ de}$ 
        arestas de  $u < 2 \ || \ \text{n}^\circ \text{ de arestas de } v < 2$ );
25     remove_aresta( $u, v$ )
26     if  $\nexists$  um caminho entre  $S_u$  e  $S_1 \ \& \ \nexists$  um caminho entre  $S_v$  e  $S_1$  then
27       cria_aresta( $u, v$ ) ; /* a aresta é religada */
28       goto naoReliga;
29     end
30     else
31        $A_0[u] = A_0[u] - 1$ ;
32        $A_0[v] = A_0[v] - 1$ ;
33       cria_aresta( $u, x$ )
34        $t \leftarrow t + 1$ 
35       if  $u \notin R$  then
36          $R \leftarrow u$ 
37       end
38     end
39     naoReliga;
40 end

```

O Algoritmo 6 gera uma rede aleatória de mundo pequeno (RMP) a partir de um anel de sítios. Neste caso, utilizou-se o procedimento descrito no artigo [35], com probabilidade um, todas as tentativas de reconexão são realizadas.

Algoritmo 6: Algoritmo para rede aleatória de mundo pequeno (*RMP*)

Input: número n de arestas a permutar, $\text{anel}(A)$ com (N) sítios, número de arestas por sítio (K)

Output: rede aleatória de mundo pequeno

```

1  $t \leftarrow 0$            ( $t$  total de arestas religadas)
2 Passo 1: criar  $A$ :
3 for  $i = 0$  até  $i < N$  do
4   for  $j=1$  até  $j \leq K/2$  do
5      $aux = i + j$ ;
6     if  $aux \geq N$  then
7        $aux = aux - N$ ;
8     end
9     cria_aresta ( $i, aux$ )
10  end
11 end
12 Passo 2: reconectar as arestas de  $A$ :
13 for  $k = 1$  até  $k \leq K/2$  do
14   for  $i=0$  até  $N$  do
15      $u \leftarrow i$ ;
16      $v \leftarrow i + k$ ;
17     if  $v \geq N$  then
18        $v = v - N$ ;
19     end
20     if  $n^\circ$  de arestas  $v < 2$  then
21       goto naoDesconecta;
22     end
23     do
24        $x \leftarrow n^\circ$  aleatório( $1, \dots, N$ )
25       while ( $\exists S_x - S_u \parallel \exists S_x - S_u$  em  $A$ );
26       remove_aresta( $u, v$ )
27       cria_aresta( $u, x$ )
28        $t \leftarrow t + 1$ 
29       if  $t = n$  then
30          $i = N$ ;
31          $k = K$ ;
32       end
33       naoDesconecta;
34   end
35 end

```

O Algoritmo 7 gera uma rede livre de escala (L_0) a partir de Q_0 . Neste algoritmo, a probabilidade de um sítio fazer novas ligações depende do seu número arestas, mas aquelas que foram conectadas após a criação de Q_0 . O vetor $links[i]$ armazena o número

de novas arestas de cada sítio. A estrutura **for** da linha 9 dá oportunidade a todos os sítios de receberem uma nova aresta. Na linha 11, a probabilidade (p) de um sítio se conectar a outro é comparada a um número aleatório r . Este procedimento garante que os sítios mais conectados tenham maior probabilidade de receberem mais arestas que os demais.

Algoritmo 7: Algoritmo para rede livre de escala (L_0)

Input: número n de arestas a permutar, rede quadrada (Q_0) com N sítios
Output: rede livre de escala

- 1 **Passo 1:** Conectar S_1 e S_2 não conectados entre si;
- 2 $links[i]$ (vetor com número de novas ligações)
- 3 $links[S_1] = links[S_1] + 1$
- 4 $links[S_2] = links[S_2] + 1$
- 5 $t \leftarrow 1$ (t total de arestas religadas)
- 6 **Passo 2:** Remover uma aresta, exceto a criada no passo 1;
- 7 **while** $t < n$ **do**
- 8 $r \sim U(0,1)$
- 9 **for** $i=0$ até $i < N$ **do**
- 10 $p = links[S_i]/t$ (p probabilidade de conectar a outro sítio)
- 11 **if** ($p > r$) **then**
- 12 $u \leftarrow$ nº aleatório($1, \dots, N$)
- 13 **cria_aresta** (u, i)
- 14 $t \leftarrow t + 1$
- 15 $links[S_i] = links[S_i] + 1$
- 16 $links[S_u] = links[S_u] + 1$
- 17 $aux = 0$
- 18 **while** $aux = 0$ **do**
- 19 $v \leftarrow$ nº aleatório($1, \dots, N$)
- 20 $x \leftarrow S_i$ vizinho de v (da Q_0)
- 21 **if** Número de arestas de $v > 1$ e de $x > 1$ **then**
- 22 **remove_aresta** (v, x) (da Q_0)
- 23 $aux = 1$
- 24 **end**
- 25 **end**
- 26 **end**
- 27 **end**
- 28 **end**

O Algoritmo 8 gera uma amostra do TPP obtido a partir de uma caminhada aleatória pelos sítios da rede com sítio de partida e sítio alvo fixos. A estrutura $adj[i]$ guarda os vizinhos do sítio i no vetor $adj[i].neighborhood[j]$ e também a condição de cada sítio: refletora $adj[i].on_off == 0$ ou absorvente $adj[site].on_off == 2$. Na linha 6, o caminhante salta do sítio atual para um sítio vizinho, que é escolhido aleatoriamente na linha 5. Nas linhas 8-10 o caminhante retorna para o sítio anterior caso tenha atingido um sítio refletor, com isso uma unidade de tempo é acrescida à trajetória. Nas linhas 11-13 a caminhada é interrompida caso o caminhante atinja um sítio absorvente.

Algoritmo 8: Algoritmo para obter os TPP (τ)

Input: n° aleatório &r, &site
Output: TPP (τ)

- 1 **Passo 1:** Determinar o sítio de partida e o sítio alvo
- 2 $\tau=0$;
- 3 **for** $i=0$ até $i < time$ **do**
- 4 $aux = site$;
- 5 $j = r \times degree(site)$;
- 6 $site = adj[site].neighborhood[j]$;
- 7 $\tau=\tau+1$;
- 8 **if** $adj[site].on_off = 0$ **then**
- 9 $site = aux$;
- 10 **end**
- 11 **if** $adj[site].on_off = 2$ **then**
- 12 $i = time$;
- 13 **end**
- 14 **end**
- 15 **return** τ ;

O Algoritmo 9 gera um conjunto de valores para a variável aleatória ω . Isso é feito a partir da combinação de pares de τ através da Equação 11.

Algoritmo 9: Algoritmo para combinar os TPP (τ) e obter o IU (ω)

Input: $\tau[n]$ (vetor com n TPP(τ))
Output: sequência de ω

- 1 **Passo 1:** Combinar os τ começando pela 1ª posição do vetor
- 2 **for** $i=0$ **até** $i < n$ **do**
- 3 **for** $j=i+1$ **até** $j < n$ **do**
- 4 $\omega = \tau[i]/(\tau[i] + \tau[j]);$
- 5 **end**
- 6 **end**
- 7 **Passo 2:** Combinar os τ começando pela última posição do vetor
- 8 **for** $i=n-1$ **até** $i \geq 0$ **do**
- 9 **for** $j=i-1$ **até** $j \geq 0$ **do**
- 10 $\omega = \tau[i]/(\tau[i] + \tau[j]);$
- 11 **end**
- 12 **end**

Anexos

ANEXO A – Teoremas

Os resultados obtidos neste anexo são válidos para variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas (i.i.d.), que assumem alguns valores do espaço mensurável $(\mathcal{S}, \mathcal{S})$. Convenientemente, e sem perda de generalidade, utilizaremos o espaço de probabilidade

$$\Omega = \{(\omega_1, \omega_2, \dots) : \omega_i \in \mathcal{S}\}$$

$$\mathcal{F} = \mathcal{S} \times \mathcal{S} \times \dots$$

$$P = \mu \times \mu \times \dots \quad \mu \text{ é distribuição de } X_i$$

$$X_n(\omega) = \omega_n$$

Teorema 1

Considere $X_1, X_2, \dots$ i.i.d., $\mathcal{F}_n = \sigma(X_1, \dots, X_n)$ e N sendo o tempo de parada com $P(N < \infty) > 0$. Condicionando-se $\{N < \infty\}$, $\{X_{N+n}, n \geq 1\}$ é independente de $\mathcal{F}_N$ e tem a mesma distribuição da sequência original.

Prova. Segundo [25]: o Teorema é suficiente para mostrar que se $A \in \mathcal{F}_N$ e $B_j \in \mathcal{S}$ para $1 \leq j \leq k$ então

$$P(A, N < \infty, X_{N+j} \in B_j, 1 \leq j \leq k) = P(A \cap \{N < \infty\}) \prod_{j=1}^k \mu(B_j)$$

onde $\mu(B) = P(X_i \in B)$. Utilizando-se o método dividir e conquistar, o valor de N é substituído por n reduzindo para o caso de tempo fixo.

$$\begin{aligned} P(A, N = n, X_{N+j} \in B_j, 1 \leq j \leq k) &= P(A, N = n, X_{n+j} \in B_j, 1 \leq j \leq k) \\ &= P(A \cap \{N = n\}) \prod_{j=1}^k \mu(B_j) \end{aligned}$$

uma vez que $A \cap \{N = n\} \in \mathcal{F}_n$ e que σ -campo é independente de $X_{n+1}, \dots, X_{n+k}$. Na soma agregada sobre n tem-se o resultado desejado.

Agora vamos supor $\Omega = S^N$ e definir a transformação $\theta : \Omega \rightarrow \Omega$ como

$$(\theta\omega)(n) = \omega(n+1) \quad n = 1, 2, \dots$$

Note que a primeira coordenada é desprezada e as outras coordenadas são deslocadas para à esquerda. Seja $\theta^1 = \theta$ e para $k \geq 2$ definimos $\theta^k = \theta \circ \theta^{k-1}$. Dessa forma, $(\theta^k\omega)(n) = \omega(n+k)$, $n = 1, 2, \dots$. Estendendo-se esta definição de tempo de parada, temos

$$\theta^N\omega = \begin{cases} \theta^n\omega & \text{em } \{N = n\} \\ \Delta & \text{em } \{N = \infty\} \end{cases}$$

Onde Δ é um ponto extra adicionado a Ω , muito conveniente para a definição a seguir, que analisa o tempo τ de retorno à origem. Suponha $S = R^d$ e $\tau(\omega) = \inf \{n : \omega_1 + \dots + \omega_n = 0\}$, onde $\inf \emptyset = \infty$, e estabeleça $\tau(\Delta) = \infty$. Considerando-se $\tau_2(\omega) = \tau(\omega) + \tau(\theta^\tau \omega)$ então em $\{\tau < \infty\}$

$$\begin{aligned}\tau(\theta^\tau \omega) &= \inf \{n : (\theta^\tau \omega)_1 + \dots + (\theta^\tau \omega)_n = 0\} \\ &= \inf \{n : \omega_{\tau+1} + \dots + \omega_{\tau+n} = 0\} \\ \tau(\omega) + \tau(\theta^\tau \omega) &= \inf \{m > \tau : \omega_1 + \dots + \omega_m = 0\}\end{aligned}$$

Então τ_2 é o tempo da segunda passagem à origem, e pela convenção $\theta^\infty \omega = \Delta$ e $\tau(\Delta) = \infty$ é verdadeiro para todo ω . Para generalizar este último cálculo, nós consideramos que se

$$\tau_n(\omega) = \tau_{n-1}(\omega) + \tau(\theta^{\tau_{n-1}} \omega)$$

então τ_n é o tempo das n visitas à origem.

Se tivermos algum tempo de parada T , podemos definir essa iteração por $T_0 = 0$ e

$$\tau_n(\omega) = \tau_{n-1}(\omega) + \tau(\theta^{\tau_{n-1}} \omega)$$

para $n \geq 1$.

Assumindo-se $P = \mu \times \mu \times \dots$ então

$$P(T_n < \infty) = P(T < \infty)^n$$

Na prova por indução, temos que o resultado é trivial quando $n = 1$, e supomos que também será válido para $n - 1$. Aplicando-se o teorema 1 para $N = T_{n-1}$, tem-se que a condição em $T_{n-1} < \infty, T(\theta^{T_{n-1}}) < \infty$ tem a mesma probabilidade quando $T < \infty$, então

$$\begin{aligned}P(T_n < \infty) &= P(T_{n-1} < \infty, T(\theta^{T_{n-1}}) < \infty) \\ &= P(T_{n-1} < \infty)P(T < \infty) = P(T < \infty)^n\end{aligned}$$

pela hipótese de indução.