Carlos Handrey Araujo Ferraz

Dinâmica de Redes Booleanas Aleatórias na Presença de um Agente Danificador.

Fortaleza

06 de Março de 2007

Livros Grátis

http://www.livrosgratis.com.br

Milhares de livros grátis para download.

Carlos Handrey Araujo Ferraz

Dinâmica de Redes Booleanas Aleatórias na Presença de um Agente Danificador.

Tese de Doutorado submetida à Coordenação do Curso de Pós-Graduação em Física, da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para a obtenção do grau de Doutor em Física

Orientador:
Hans J. Herrmann

UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARA - DEPARTAMENTO DE FÍSICA

Fortaleza

06 de Março de 2007

Carlos Handrey Araujo Ferraz

Dinâmica de Redes Booleanas Aleatórias na Presença de um Agente Danificador.

Tese de Doutorado submetida à Coordenação do Curso de Pós-Graduação em Física, da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para a obtenção do grau de Doutor em Física

Aprovada em 06 de Março de 2007

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Hans J. Herrmann (Orientador)
Universidade Federal do Ceará

Prof. Dr. José Soares de Andrade Junior
Universidade Federal do Ceará

Prof. Dr. André Auto Moreira
Universidade Federal do Ceará

Prof. Dr. Paulo Murilo Castro de Oliveira
Universidade Federal Fluminense

Prof. Dr. Umberto Lailo Fulco
Universidade Federal do Rio Grande do Norte

Ao Nosso Criador.

Agradecimentos

- A meu orientador Prof. Dr. Hans J. Herrmann, pelos seus ensinamentos valiosos e amizade dispensados ao longo desse trabalho, todo o meu respeito e admiração.
- A meus pais Ernando e Vilma, por tudo que eles me proporcionaram na vida.
- Ao Prof. Dr. Josué Mendes Filho, por tudo que fez pela minha vida acadêmica.
- Ao Prof. Dr. José Soares de Andrade Junior, Coordenador da pós-graduação em Física, por ter acreditado em mim nos momentos mais difíceis.
- Ao Prof. Dr. André Auto Moreira, pela ajuda dispensada ao longo desse trabalho.
- Aos Profs. Samyr Jácome Bezerra da Silva e Marília Baquil da Silva, pela ajuda e discussões valiosas em linguagens de programação.
- A todos os Professores do grupo de fluido dinâmica, em especial aos Profs. Ascânio Araújo Dias e José Filho.
- Aos amigos Mairton Cavalcante, George Frederic (Bush), Adelmo Santiago Sabino, Tayroni Alves, Mário Henrique Pacheco, Luiz Gonzaga e Makárius Oliveira Tahim pelo apoio e incentivo.
- A todos os professores desse departamento que de alguma forma contribuiram para meu desenvolvimento intelectual.
- A Funcap, pelo suporte financeiro.
- E a todos os funcionários do departamento de Física em especial a Rejane, Creusa e Elias.

Resumo

Nós realizamos simulações de computador em autômatos de Kauffman em diversos grafos tais como redes quadradas regulares e agregados de percolação invasiva afim de investigar transições de fase, entropia total, distribuição radial do dano total médio (expoente dinâmico z) e velocidade de propagação do dano quando se introduz um agente danificador no sistema, apelidado o "homem estranho". A despeito do aumento na eficiência de danificação, nós não observamos qualquer mudança apreciável no limiar de transição para o caos tanto para o caso de rede quadrada como para o caso de mundo pequeno quando o homem estranho é adicionado em comparação a quando pequenos danos iniciais são inseridos ao sistema.

A velocidade de propagação da nuvem de dano até tocar as bordas do sistemas tanto para o caso de rede quadrada como para o caso de mundo pequeno obedece uma lei de potência, com um expoente crítico de velocidade α que depende fortemente do tipo de rede. Particularmente, nós temos estudado o espalhamento do dano quando algumas conexões são removidas na rede quadrada e quando se considera agregados especiais de percolação invasiva (agregados de alta saturação de borda, HBSC). A velocidade de propagação nestes sistemas é bastante sensível ao grau de diluição na rede quadrada e ao grau de saturação de borda em agregados de percolação invasiva.

Finalmente, esperamos que estes e outros cálculos mais elaborados sejam de ajuda para que se possam entender problemas mais gerais relacionados a propagação de defeitos simples em sistemas complexos bem descritos por autômatos celulares.

Abstract

We have performed computer simulations of Kauffman's automata on several graphs such as the regular square lattice and invasion percolation clusters in order to investigate phase transitions, total entropy, radial distributions of the mean total damage (dynamical exponent z) and propagation speeds of the damage when one adds a damaging agent in the system, nicknamed "strange man". Despite the increase in the damaging efficiency, we have not observed any appreciable change at the transition threshold to chaos neither for the short-range nor for the small-world case on the square lattices when the strange man is added in comparison to when small initial damages are inserted in the system.

The propagation speed of the damage cloud until touching the border of the system in both the short-range case as the small-world case obeys a power law with a critical exponent α that strongly depends on the lattice. Particularly, we have ckecked the damage spreading when some connections are removed on the square lattice and when one considers special invasion percolation clusters (high boundary-saturation clusters, HSBC). It is seen that the propagation speed in these systems is quite sensible to the degree of dilution on the square lattice and to the degree of boundary saturation on invasion percolation clusters.

Finally, we expect that these and other more elaborated calculations will be helpful to understand more general problems concerning the propagation of simple defects in complex systems that are well described by cellular automata.

Sumário

Agradecimentos . . . . . p. ii

Resumo . . . . . p. iii

Abstract . . . . . p. iv

Sumário . . . . . p. iv

Lista de Figuras p. vii

Lista de Figuras . . . . . p. x

Lista de Tabelas p. xi

Lista de Tabelas . . . . . p. xi

INTRODUÇÃO p. 1

1 AUTÔMATOS CELULARES p. 5

1.1 Introdução . . . . . p. 5

1.2 Regras Autômatas . . . . . p. 6

1.3 Caracterização Global do Comportamento de Autômatos Celulares . . p. 8

1.4 Classes de Autômatos Celulares . . . . . p. 12

2 REDES BOOLEANAS ALEATÓRIAS p. 14

2.1 Introdução . . . . . p. 14

2.2 Descrição do Modelo N-K . . . . . p. 15

2.3 Transição de Fase no Modelo N-K . . . . . p. 18

2.4 Comportamento Cíclico no Modelo N-K . . . . . p. 22

3 O MODELO WS p. 24

3.1 Introdução . . . . . p. 24

3.2 O algoritmo . . . . . p. 25

3.3 Propriedades Geométricas . . . . . p. 26

3.3.1 Distância Média Característica . . . . . p. 26

3.3.2 O Coeficiente de Aglomeração . . . . . p. 27

4 PERCOLAÇÃO INVASIVA p. 29

4.1 Introdução . . . . . p. 29

4.2 O Algoritmo . . . . . p. 30

4.3 Propriedades Fundamentais de Percolação Invasiva . . . . . p. 30

4.3.1 O Perfil de Aceitação . . . . . p. 30

4.3.2 A Dimensão Fractal . . . . . p. 32

5 REDE QUADRADA p. 33

5.1 Introdução . . . . . p. 33

5.2 O Algoritmo . . . . . p. 34

5.3 Transição de fase . . . . . p. 35

5.4 Dimensões Fractais . . . . . p. 38

5.5 Teoria de Escala Dinâmica . . . . . p. 40

6 APROXIMAÇÃO DE MUNDO PEQUENO p. 42

6.1 Introdução . . . . . p. 42

6.2 Resultados e discussão . . . . . p. 43

7 DINÂMICA DE REDES NA PRESENÇA DE UM DANIFICADOR p. 48

7.1 Introdução . . . . . p. 48

7.2 Resultados e discussão . . . . . p. 50

8 DINÂMICA EM UM AGREGADO DE PERCOLAÇÃO INVASIVA p. 60

8.1 Introdução . . . . . p. 60

8.2 Resultados e discussão . . . . . p. 61

CONCLUSÃO p. 69

Apêndice . . . . . p. 70

Apêndice A – Programa Multispin Coding para Rede Quadrada p. 71

Apêndice B – Leis de Escala p. 77

Apêndice C – Dimensão Fractal p. 79

Referências p. 81

Lista de Figuras

1.1 Evolução temporal de autômatos celulares unidimensionais com $k = 2$ e $r = 2$, obedecendo 12 diferentes regras autômatas a partir de estados iniciais desorganizados, onde cada sítio tem um propabilidade de 1/2 para receber valores 1 ou 0. Cada linha horizontal representa um passo de tempo na evolução do autômato. (Fonte: Wolfram (23).) . . . . . p. 12

2.1 Diagrama de fase para o modelo Kauffman em uma rede uniforme de conexões de longo alcance. A área sombreada representa a região congelada, enquanto a região acima da curva representa a região caótica. A linha crítica separando as duas fase é dada pela Eq. 2.6. . . . . p. 21

2.2 Representação esquemática do espaço de estados do modelo Kauffman, dividido em ciclos e em suas respectivas bacias de atração. Cada ponto representa um estado possível do sistema, os estados sobre os círculos representam o regime cíclico da dinâmica do sistema (atrator), enquanto os ramos enraizados nos círculos representam seu regime transiente. . . p. 22

3.1 Procedimento de religação do modelo WS, interpolando entre uma cadeia regular e uma rede uniforme sem alterar a conectividade média dos sítios. Partindo de uma cadeia regular de sítios ($q = 0$), conexões de longo alcance são introduzidos fazendo aumentar o valor da probabilidade de religação q, de tal forma que quando $q = 1$ todas as conexões são religadas aleatoriamente.(Fonte: Watts and Strogatz (9).) . . . . . p. 25

3.2 Distância média característica $L(N, q)$ e coeficiente de aglomeração $C(q)$ para o modelo WS. Os dados são médias sobre 20 realizações aleatórias do procedimento de religação, para redes com 10^3 sítios e uma conectividade média de $K = 10$ por sítio, e estão normalizados por seus respectivos valores para rede regular ($q = 0$). A queda nos valores de $L(N, q)$ corresponde ao começo do comportamento de mundo pequeno.(Fonte: Watts and Strogatz (9).) . . . . . p. 28

5.1 Gráfico de ψ *versus* p para o caso de rede quadrada ($q = 0$). Tamanhos de rede L=256; $\circ$, L=384; $\triangle$ and L=512; $\Diamond$. . . . . p. 35

5.2 Gráfico log-log (base e) de $\psi L^{-\beta/\nu}$ *versus* $(p-p_c)L^{-1/\nu}$ para o caso de rede quadrada ($q = 0$).Tamanhos de rede L=256; $\circ$, L=384; $\triangle$ and L=512; $\Diamond$. p. 37

5.3 Gráfico log-log do tempo de toque T_t *versus* L; $\bullet$, dano vs L; $\circ$ para o caso de rede quadrada ($q = 0$). . . . . p. 39

6.1 Procedimento de religação na aproximação de mundo pequeno. Nesta figura, ligações de longo alcance que estão além da região de rede representada não são mostradas. . . . . p. 43

6.2 Gráfico de ψ *versus* p para o caso de rede quadrada ($q = 0,05$). Tamanhos de rede L=256; $\circ$, L=384; $\triangle$ and L=512; $\Diamond$. . . . . p. 44

6.3 Gráfico de ψ *versus* p para o caso de rede quadrada ($q = 0,10$). Tamanhos de rede L=256; $\circ$, L=384; $\triangle$ and L=512; $\Diamond$. . . . . p. 45

6.4 Gráfico log-log de $\psi L^{-\beta/\nu}$ *versus* $(p-p_c)L^{-1/\nu}$ na aproximação de mundo pequeno ($q = 0,05$).Tamanhos de rede L=256; $\circ$, L=384; $\triangle$ and L=512; $\Diamond$. . . . . p. 46

6.5 Gráfico log-log de $\psi L^{-\beta/\nu}$ *versus* $(p-p_c)L^{-1/\nu}$ na aproximação de mundo pequeno ($q = 0,10$).Tamanhos de rede L=256; $\circ$, L=384; $\triangle$ and L=512; $\Diamond$. . . . . p. 46

6.6 Gráfico log-log do tempo de toque T_t *versus* L; $\bullet$, dano vs L; $\circ$ na aproximação de mundo pequeno ($q = 0,05$). . . . . p. 47

6.7 Gráfico log-log do tempo de toque T_t *versus* L; $\bullet$, dano vs L; $\circ$ na aproximação de mundo pequeno ($q = 0,10$). . . . . p. 47

7.1 Gráfico mostrando a evolução temporal da entropia total S na aproximação de rede quadrada ($q = 0$) com 16 sítios para cinco valores do parâmetro p, para uma dada realização do modelo Kauffman, em um *ensemble* com 1000 configurações iniciais escolhidas aleatoriamente. . . p. 51

7.2 Gráfico mostrando a evolução temporal da entropia total S em uma rede quadrada com 16 sítios quando são inseridos ligações de longo alcance (casos $q \neq 0$) para um campo de magnetização de $p = 0,28$, para uma dada realização do modelo Kauffman, em um *ensemble* com 1000 configurações iniciais escolhidas aleatoriamente. . . . . p. 52

7.3 Gráfico mostrando a evolução temporal da entropia total S em uma rede quadrada com 16 sítios quando é inserido o homem estranho no sistema (linhas contínuas: vermelha ($p = 0,15$) e preta ($p = 0,28$)) em comparação ao caso análogo com ausência do homem estranho na rede (linhas descontínuas: vermelha ($p = 0,15$) e preta ($p = 0,28$)), para uma dada realização do modelo Kauffman, em um *ensemble* com 1000 configurações iniciais escolhidas aleatoriamente. . . . . p. 53

7.4 Evolução temporal da distância de Hamming em uma rede 80×80 para cinco valores diferentes de ϖ em $p = 0,30$. . . . . p. 53

7.5 Evolução temporal da distância de Hamming em uma rede 80×80 para cinco valores diferentes de ϖ em $p = 0,40$. . . . . p. 54

7.6 Transição de fase em uma rede 500×500 para três valores da probabilidade p_{link}. O ponto crítico em $p_{link} = 1,00$; $\circ$, é 0.31, enquanto em $p_{link} = 0,90$; $\square$, é $0,37$ e em $p_{link} = 0,80$; $\triangle$, há ausência de transição de fase. . . . . p. 54

7.7 Velocidade de propagação do dano na aproximação de rede quadrada ($q = 0$), para redes de tamanhos $L = 100$; $\circ$, 300; $\triangle$, 700;$\bigtriangledown$, junto com uma extrapolação desses dados ($L \to \infty$); $+$. . . . . p. 55

7.8 Velocidade de propagação do dano na aproximação de mundo pequeno ($q \neq 0$), para redes de tamanhos $L = 100$; $\circ$, 200; $\triangle$, e 300; $\Diamond$. . . . . p. 56

7.9 Gráfico log-log de v *versus* $(p - p_c)$ para os dados extrapolados da Fig. 7.7 na aproximação de rede quadrada ($q = 0$). . . . . p. 56

7.10 Gráfico log-log de v/L *versus* $p - p_c$ dos dados da Fig. 7.8 na aproximação de mundo pequeno ($q = 0,05$). Tamanhos de rede $L = 100$; $\circ$, 200; $\triangle$, e 300; $\Diamond$. . . . . p. 57

7.11 Gráfico semi-log do dano total médio M_T *versus* a distância r do homem estranho em uma rede quadrada 200×200 para três valores do parâmetro p acima do ponto crítico, a saber, $p = 0.32$; $\circ$, 0.35; $+$, e 0.45; $\bullet$. . . . p. 58

7.12 Gráfico log-log do comprimento característico inverso δ *versus* $(p - p_c)$ em uma rede 200×200. A inclinação da reta fornece o valor para o expoente dinâmico z. . . . . p. 59

8.1 Estrutura de HBSC confinado em uma rede quadrada 200×200 para uma saturação de borda $\Sigma_s = 0,10$, visto após 100 interações de rede. Os sítios azuis representam sítios pertencentes ao HBSC, enquanto os sítios verdes representam sítios danificados pelo homem estranho localizado no sítio semente do agregado. . . . . p. 62

8.2 Estrutura de HBSC confinado em uma rede quadrada 200×200 para uma saturação de borda $\Sigma_s = 0,40$, visto após 100 interações de rede. Os sítios azuis representam sítios pertencentes ao HBSC, enquanto os sítios verdes representam sítios danificados pelo homem estranho localizado no sítio semente do agregado. . . . . p. 63

8.3 Transição de fase em um HBSC confinado em uma rede 100×100 para três valores de saturação de borda Σ_s na versão *quenched*: $\Sigma_s = 0,70$; $\circ$, $\Sigma_s = 0,80$; $\square$ e $\Sigma_s = 0,90$; $\triangle$. Em $\Sigma_s = 0,90$, é também mostrado nosso resultado na versão *annealed*; $\Diamond$. . . . . p. 64

8.4 Gráfico log-log de ψ *versus* $(p - p_c)$ para um HBSC construido dentro de uma rede 100×100 para ambas as versões *quenched*; $\circ$, e *annealed*; $\triangle$. p. 65

8.5 Velocidade de propagação v do dano no HBSC com uma saturação de borda de $\Sigma_s = 0,90$ construido dentro de uma rede 100×100 em ambas as versões *quenched*; $\triangle$, e *annealed*; $\circ$. . . . . p. 65

8.6 Gráfico log-log de v *versus* $(p - p_c)$ para os dados da Fig. 8.5 para ambas as versões *quenched*; $\circ$, e *annealed*; $\triangle$ em um HBSC dentro de uma rede 100×100 com $\Sigma_s = 0,90$. . . . . p. 66

8.7 Gráfico semi-log do dano total médio M_T *versus* a distância r do homem estranho em um HBSC dentro de uma rede 100×100 para três valores do parâmetro p acima do ponto crítico do agregado na versão *quenched*, a saber, $p = 0,37$; $\bullet$, $0,41$; $+$, e $0,45$; $\circ$. . . . . p. 67

8.8 Gráfico log-log do comprimento característico inverso δ *versus* $(p - p_c)$ em um HBSC dentro de uma rede 100×100 para ambas as versões *quenched*;$\circ$, e *annealed*; $\triangle$. A inclinação da reta fornece o valor para o expoente dinâmico z. . . . . p. 67

Lista de Tabelas

1.1 Exemplo de um conjunto de regras locais para a evolução temporal de um autômato celular com $k = 2$ e $r = 1$. . . . . p. 7

2.1 Exemplo de duas funções Booleanas com três variáveis de controle para um dado sítio i. A primeira delas é uma função tipicamente aleatória, enquanto a segunda é uma função canalizada pelo seu primeiro argumento. Quando $\sigma_{j1(i)} = 0$, o resultado da função é sempre 1, de outra forma pode ser 1 ou 0. . . . . p. 15

2.2 Exemplo de aplicação de um campo de magnetização p para uma rede de conectividade $K = 4$, como sendo a probabilidade da função Booleana de um dado sítio i dar como resultado 1. Três diferentes configurações de vizinhança de um dado sítio i são mostradas. . . . . p. 16

5.1 Tabela mostrando os valores do ponto crítico p_c e os respectivos expoentes críticos tanto para a rede quadrada ($q = 0$) como para a aproximação de mundo pequeno ($q \neq 0$). As estimativas de erro apresentadas são desvios padrões simples dos dados. . . . . p. 38

8.1 Tabela mostrando os valores para os expoentes críticos α e β nas aproximações de rede quadrada ($q = 0$), de mundo pequeno ($q \neq 0$) e em HBSC na versão *quenched* do modelo, onde são também mostrados os valores do expoente dinâmico z nas arquiteturas de rede quadrada e de HBSC nesta versão do modelo. . . . . p. 68

INTRODUÇÃO

Autômatos celulares foram originalmente introduzidos por J. von Neumann e S. Ulam por volta de 1950 como uma possível idealização de sistemas biológicos, sobretudo com a particular proposta de modelar processos de auto-reprodução, inato nos seres vivos. A partir de então, o estudo de autômatos celulares têm interessado os físicos devido a suas muitas aplicações (1, 2) e a suas contribuições a física teórica (3). De fato, problemas envolvendo autômatos celulares estão intimamente relacionados a modelos clássicos da mecânica estatística (processos de percolação, spins de vidro, modelo de Ising), enfim, qualquer sistema físico envolvendo muitos elementos (sítios) com iterações locais são muito bem modelados como autômatos celulares. Qualquer sistema físico satisfazendo equações diferencias podem ser aproximados como uma rede de células autômatas introduzindo variáveis discretas e diferenças finitas ao sistema. Em outras palavras, autômatos celulares podem ser vistos como uma alternativa para equações de movimento (4), embora ainda não se tenha uma forma clara de conectar uma descrição a outra. Uma variedade de fenômenos surpreendentes como estabilidade, criticalidade, fractalidade e caos, podem ser discutidos dentro da técnica de autômatos. Isso porque, eles podem exibir um comportamento complicado, análogo ao apresentado por sistema físicos descritos por equações diferenciais, mas em virtude de sua construção mais simples são potencialmente mais propensos a uma análise mais detalhada e completa do processo físico em estudo.

Em particular, nós estamos interessados em estudar como pequenas falhas (danos) produzidas em uma estrutura complexa de autômatos se propagam ao longo de todo o sistema. Por exemplo, uma interpretação biológica pode ser dada ao problema se considerarmos mutações em genes biológicos. Uma mutação poderia ser considerada uma mudança em qualquer particular ponto do material genético, o qual pode afetar toda a evolução temporal do sistema. A diferença entre o material genético com mutação e seu análogo sem a ocorrência de mutação é descrito pela distância de Hamming para o sistema. Outros autores (5–7) têm feito simulações númericas encontrando transições de fase bem como comportamento fractal em várias estruturas, inserindo pequenos danos iniciais e em seguida deixando o sistema evoluir no tempo. Mas o que aconteceria se introduzirmos um agente que pudesse danificar o sistema todo o tempo, introduzindo um ruido ao

longo do desenvolvimento temporal do sistema. Nós chamaremos tal agente de "homem estranho"porque as regras que regulam seu estado são aleatoriamente atualizadas durante todo o processo de evolução do sistema, ou seja, este agente pode ser considerado uma célula autômata probabilística entre outras células autômatas determinísticas. Nós demos este apelido a ele em analogia a um modelo social onde cada indivíduo de uma classe ou sociedade segue as regras as quais definem seu papel perante essa classe ou sociedade muito bem, com a singular exceção de um único indivíduo. O nosso objetivo primordial nesse trabalho é, fazendo uso desse modelo, saber se é possível identificar um indivíduo com livre arbítrio entre outros indivíduos desprovidos dessa qualidade tão iminentimente humana.

Nós realizamos simulações numéricas com o intuito de investigar transições de fase, entropia, distribuição radial do dano total médio e velocidade de propagação do dano ao longo de diferentes tipos de redes de autômatos celulares quando introduzimos o homem estranho no sistema. Nós temos lidado com diversas estruturas de autômatos, tais como redes quadradas (interações de curto alcance), aglomerados de percolação invasiva (8) e também redes com a topologia de mundo pequeno (9)(interações de longo alcance) fazendo uso de um dos mais importantes e fisicamente significativos modelos de autômatos celulares, a saber o modelo Kauffman. O modelo Kauffman ou mais geralmente redes Booleanas aleatórias têm ganhado um renovado interesse por conta de suas recentes aplicações em sincronização (10), estabilidade (11), controle do caos (12) e topologias livre de escala (13, 14).

Os primeiros modelos envolvendo redes Booleanas foram desenvolvidos especificamente por seu interesse biológico graças aos trabalhos de S. Kauffman (15) que em 1969 introduziu o assim chamado modelo N-K (onde cada um dos N elementos do sistema podem interagir a princípio com quaisquer outros K elementos desse sistema), no contexto de expressão genética e adaptação ao meio. A partir deste trabalho inicial, têm-se encontrado um vasto campo de aplicações para redes Booleanas, desde problemas biológicos específicos como diferenciação celular (16), evolução (17) e redes neurais (18), a problemas de grande interesse para a física como o estudo do caos (19, 20) e do comportamento de materiais desordenados (21, 22). De certo modo, o modelo de redes Booleanas introduzido por Kauffman pode ser considerado como um protótipo de sistema dinâmico genérico, apresentando tanto comportamento ordenado como caótico, bem como muitas outras estruturas típicas de sistemas dinâmicos. No limite termodinâmico $N \to \infty$, podem existir transições de fase caracterizadas por uma linha separando a região ordenada da região caótica do espaço de estados. Os estudos do comportamento do sistema em

ambas regiões caótica e ordenada, assim como em pontos próximos do ponto crítico da transição, tem sido de grande interesse.

Em nossas simulações, a despeito do aumento na eficiência de danificação devido à introdução do homem estranho ao sistema, nós não temos encontrado qualquer mudança apreciável no ponto crítico da transição de fase tanto para a aproximação de rede quadrada como para aproximação de mundo pequeno em comparação a quando pequenos danos iniciais são inseridos nesses sistemas. Todavia, a velocidade de propagação da nuvem de dano até tocar as bordas do sistema em ambas as aproximações é substancialmente aumentada e obedece uma lei de potência. Em especial, para a aproximação de rede quadrada, nós temos usado uma técnica de extrapolação para o infinito como forma de reduzir os efeitos do tamanho finito das redes. Em adição a isso, nós temos também estudado a propagação do dano em redes quadradas quando algumas de suas conexões são removidas e quando consideramos aglomerados especiais de percolação invasiva com alta saturação de bordas (HBSC, sigla da palavra inglesa *high boundary-saturation cluster*). Nesse trabalho de tese, nós temos observado que a velocidade de propagação do dano em tais redes é bastante sensível com respeito à diluição da rede. Em particular, a nuvem de dano permanece confinada em torno do homem estranho quando apenas poucas conexões são removidas da rede (tipicamente menos de 20%).

O presente trabalho foi dividido em oito capítulos da seguinte forma:

- No capítulo 1 desse trabalho, nós definimos autômatos celulares e discutimos algumas de suas características mais gerais, como a descrição global da evolução de autômatos, bem como a classificação dada por S. Wolfram (23) para o comportamento geral de diferentes tipos de regras autômatas.

- O capítulo 2 é devotado ao estudo do modelo N-K, ou modelo Kauffman, discutindo suas aplicações e propriedades gerais tais como a existência de transições de fase no modelo, tanto em redes regulares (conexão de primeiros vizinhos) como em redes uniformes (conexão aleatória entre sítios), e descrevendo o comportamento cíclico apresentado na versão *quenched* do modelo.

- No capítulo 3, nós apresentamos o modelo SW ou modelo do mundo pequeno, discutindo algumas de suas principais aplicações de interesse para a ciência e descrevendo um algoritmo para a implementação desse tipo de topologia, bem como estudando algumas de suas principais propriedades geométricas.

- No capítulo 4, nós apresentamos o processo de percolação invasiva, estudando al-

gumas de suas principais aplicações de interesse para a física e descrevendo um algoritmo para a geração e crescimento de um agregado de percolação pelo método de invasão sem aprisionamento, bem como algumas propriedades fundamentais destes agregados.

- No capítulo 5, nós demos particular atenção ao modelo Kauffman implementado numa rede quadrada, estudando e fazendo simulações númericas do processo de propagação do dano quando um pequeno número de sítios centrais são danificados. Neste capítulo, nós fizemos um cálculo do ponto crítico p_c e dos expoentes críticos e dimensões fractais nesse tipo de topologia e comparamos com outros resultados encontrados na literatura.

- No capítulo 6, nós estudamos o modelo Kauffman na topologia de mundo pequeno, fazendo simulações para calcular expoentes críticos e dimensões fractais nesse tipo de topologia e em seguida comparando com os resultados obtidos para rede quadrada.

- No capítulo 7, nós analisamos o impacto gerado na evolução temporal da entropia do sistema, primeiro quando ligações de longo alcance são adicionadas à rede quadrada (aproximação de mundo pequeno) e em seguida quando o homem estranho é inserido na rede. Em seguida, investigamos transições de fase quando o homem estranho é adicionado ao sistema, estudando também o impacto do processo de remoção de conexões (diluição) na rede quadrada. Depois calculamos as velocidades de propagação do dano v tanto na aproximação de rede quadrada como na aproximação de mundo pequeno, calculando seus respectivos expoentes críticos de velocidade. Finalmente, calculamos a distribuição radial do dano total médio M_T na rede quadrada e a partir dele o seu expoente dinâmico (z).

- No capítulo 8, nós estudamos transições de fase e processos dinâmicos como velocidade de propagação do dano v e distribuição radial do dano total médio M_T em agregados especiais de percolação invasiva (HBSC), introduzindo o homem estranho ao sistema, tanto na versão *quenched* como na versão *annealed* do modelo Kauffman.

- Finalmente, apresentamos nossas conclusões e resultados principais, bem como nossas pespectivas para o futuro.

1 AUTÔMATOS CELULARES

1.1 Introdução

Autômatos celulares são idealizações matemáticas de sistemas físicos em que as variáveis de tempo e espaço são discretas, e quantidades físicas tomam um conjunto finito de valores também discretos. Um autômato celular consiste de uma rede regular de extensão variada, com uma variável discreta em cada sítio (célula). O estado de um autômato celular é completamente especificado pelos valores das variáveis em cada sítio. Sua evolução se dá em intervalos discretos de tempo, com o valor de cada variável sendo afetada pelos valores das variáveis em sítios de sua vizinhança num passo de tempo anterior. Esta vizinhança é tipicamente o próprio sítio e todos os outros imediatamente adjacentes, também chamados primeiros vizinhos. As variáveis em cada sítio são simultaneamente atualizadas, em função dos valores das variáveis do seus vizinhos (*inputs*) no passo de tempo anterior, e de acordo com um conjunto de regras locais (funções Booleanas).

A despeito da simpliscidade em sua construção e funcionamento, diferentes tipos de autômatos são capazes de exibir um comportamento complexo. Neste capítulo, nós iremos discutir a natureza destes comportamentos, sua caracterização e a classificação para autômatos unidimensionais finitos, ou seja, formados por uma fileira de N sítios onde uma condição de contorno pode ser definida para o sistema (na forma de um anel de sítios). De acordo com Wolfram (23) um grande número de autômatos celulares são classificados em quatro classes básicas. Onde para cada classe, autômatos celulares exibem comportamento qualitativamente similar. Isto implicaria numa universalidade no comportamento qualitativo de autômatos celulares. Sistemas físicos e biológicos complexos poderiam, portanto, fazer parte da mesma classe de universalidade, podendo assim serem simulados como modelos matemáticos dados por autômatos celulares. Por exemplo, no nível microscópico, os sítios poderiam representar pontos em uma rede cristalina, com seus valores dados por algum observável quantizado (tal como componentes de spin) ou serem associados a diferentes tipos de átomos ou unidades. O modelo de Ising e outros

sistemas de redes de spin, tornados não determinísticos pela perturbação nas regras locais em temperaturas finitas, são autômatos celulares simples. A estrutura espacial de fluidos turbulentos podem ser modelados usando autômatos celulares pela aproximação do campo de velocidades $\vec{v}$ como uma rede de células vizinhas. Muitos sistemas biológicos têm sido modelados por autômatos celulares (24–26). O desenvolvimento de estruturas e padrões no crescimento de organismos vivos frequentemente parecem ser governados por regras locais simples, sendo portanto potencialmente bem descritos por automatos celulares. Um exemplo famoso é o caso da distribuição de pigmento na concha da espécie *Conus textile*, que exibe um padrão semelhante a uma regra autômata.

Neste capítulo, nós nos preocupamos em discutir algumas das características gerais de autômatos celulares, comentando sobre a descrição global da evolução de autômatos, bem como a classificação dada por Wolfram para o comportamento de diferentes tipos de regras autômatas.

1.2 Regras Autômatas

Em um autômato celular de uma dimensão, sendo $\sigma_i(t)$ o valor do sítio i no passo de tempo t onde cada valor de sítio é especificado por um inteiro entre 0 e $k-1$. A evolução do sistema é dada por:

$$\sigma_i(t) = \boldsymbol{F}(\sigma_{i-r}(t-1), \cdots, \sigma_i(t-1), \cdots, \sigma_{i+r}(t-1)), \tag{1.1}$$

onde $\boldsymbol{F}$ é uma função arbitrária que específica a regra do autômato celular, e o parâmetro r determina a região de atuação da regra para cada sítio, isto é, o valor de um dado sítio depende dos últimos valores de uma vizinhança de até $2r+1$ sítios. Após t passos de tempo, uma região de até $1+2rt$ sítios podem, portanto, ser afetado por um dado valor inicial de sítio. Na prática, contudo, para a maioria das regras $\boldsymbol{F}$, o valor de um dado sítio após muitos passos de tempo depende de um número menor de sítios iniciais, e a velocidade de propagação das características autômatas, dadas pela regra $\boldsymbol{F}$, propagam-se em uma velocidade menor para passos de tempo muito grandes.

Uma forma especial para a Eq. 1.1 é

$$\sigma_i(t) = \boldsymbol{f}(\sum_{j=-r}^{j=r} \alpha_j \sigma_{i+j}(t-1)), \tag{1.2}$$

onde os α_j são constantes inteiras, e a função $\boldsymbol{f}$ leva um argumento inteiro. Regras

padrão corrente	111	110	101	100	011	010	001	000
novo estado para o sítio central	0	1	0	1	1	0	1	0

Tabela 1.1: Exemplo de um conjunto de regras locais para a evolução temporal de um autômato celular com $k = 2$ e $r = 1$.

especificadas de acordo com a Eq. 1.1 podem ser reproduzidas diretamente tomando $\alpha_j = k^{r-j}$.Uma classe especial de autômatos celulares são automatos celulares totalísticos, em que o valor de um sítio depende somente da soma dos valores de seus vizinhos (possivelmente de seu próprio valor) no passo de tempo anterior. O "jogo da vida" (27, 28) é um exemplo famoso de um autômato celular totalístico de duas dimensões. Regras totalísticas são obtidas tomando $\alpha_j = 1$ na Eq. 1.2

A forma da função $\boldsymbol{F}$ no mapeamento dado pela Eq. 1.1 pode ser especificada por um "número de regra" (29)

$$\boldsymbol{R_F} = \sum_{\{\sigma_{i-r},\sigma_{i+r}\}} \boldsymbol{F}(\sigma_{i-r}, \ldots, \sigma_{i+r}) k^{\sum_{j=-r}^{r} \sigma_{r-j} k^{r-j}}. \tag{1.3}$$

A função $\boldsymbol{f}$ na Eq. 1.2 pode também ser especificada por um número código

$$\boldsymbol{C_f} = \sum_{n=0}^{(2r+1)(k-1)} k^n \boldsymbol{f}(n). \tag{1.4}$$

Um total de $k^{k^{(2r+1)}}$ regras autômatas são possíveis da forma dada pela Eq. 1.1. Para um autômato unidimensional tendo $k = 2$ e $r = 1$, sua regra local é descrita por um número binário de oito dígitos como exemplificado na tabela 1.1. Nesta tabela, os oito possíveis estados de vizinhança para um dado sítio central são dados na linha superior, enquanto a linha inferior especifica a regra para a evolução no tempo do autômato celular dando o valor que será tomado pelo sítio central no próximo passo de tempo. A evolução deste autômato celular é obtida pela aplicação sucessiva desta regra '01011010' ou pela Eq. 1.3 (regra 90) para cada sítio em cada passo de tempo. Regras locais para autômatos celulares podem ser consideradas como funções Booleanas das variáveis dos sítios de vizinhança. Para o exemplo da tabela 1.1, o valor de um particular sítio é dado simplesmente pela soma módulo 2 dos valores de seus dois sítios vizinhos num passo de tempo anterior. O equivalente Booleano para esta regra é portanto

$$\sigma_i(t) = \sigma_{i-1}(t-1) \oplus \sigma_{i+1}(t-1), \tag{1.5}$$

onde $\oplus$ denota uma soma módulo-2 ou disjunção exclusiva. A representação em funções Booleanas para regras autômatas é conveniente para implementações práticas em compu-

tadores digitais, uma vez que os valores de uma sequência de sítios são bem representados por bits em uma palavra de computador (tipicamente 64 bits). Cópias desta palavra deslocada tanto para direita quando para esquerda são feitas, desta forma regras autômatas podem ser aplicadas em paralelo para todos os bits na palavra usando comandos lógicos simples (AND, OR e XOR).

1.3 Caracterização Global do Comportamento de Autômatos Celulares

Podemos considerar autômatos celulares como sistemas dinâmicos (30, 31), onde em muitos casos apresentam uma evolução temporal irreversível. Regras autômatas podem transformar diferentes configurações iniciais em um única configuração final. Uma particular configuração tem únicos descendentes mas não necessariamente tem únicos predecessores. Assim, trajetórias descritas no espaço das configurações na evolução temporal de um dado autômato celular com diferentes configurações podem convergir, mas nunca divergir. Um exemplo trivial é um autômato governado pela regra 0, sob a qual todas possíveis configurações iniciais evoluem após um passo de tempo para a mesma configuração nula. Em um sistema reversível, cada estado tem um único descentente e um único predecessor, de tal forma que trajetórias representando a evolução temporal de diferentes estados nunca podem se encontrar. Assim, o número total de configurações acessíveis deve permanecer constante com o tempo para sistemas reversíveis (teorema de Liouville). Contudo, em sistemas irreversíveis, o número de configurações acessíveis pode decrescer com o tempo, onde trajetórias partindo de quase todas configuranções iniciais ficam encerradas em atratores formados por apenas algumas das possíveis configurações. Esta evolução para atratores, partindo de um estado inicial arbitrário sem nenhuma correlação entre os sítios da rede, possibilita o surgimento de um comportamento de auto-organização, em que padrões e estruturas podem ser geradas após longos intervalos de tempo a partir de estados iniciais desorganizados.

O comportamento irreversível de autômatos celulares pode ser analisado através do comportamento de sua entropia S. A entropia é definida usualmente como o logaritmo do número médio de estados possíveis do sistema, ou em termos da probabilidade de ocupação de um dado estado do sistema p_i como

$$S = \sum_i p_i \ln p_i. \tag{1.6}$$

A entropia total de um sistema é a soma das entropias de todos os subsistemas estatísticamente indepententes. Ela é maximizada quando um sistema esta completamente desorganizado, e o número máximo de subsistemas agem indepedentemente. Para autômatos celulares Booleanos, ou seja aqueles onde os sítios admitem apenas valores 0 e 1, sua entropia adquire um valor máximo de um bit por sítio para um *ensemble* equiprovável, isto é, onde todas as configurações são igualmente possíveis. Para sistemas reversíveis a evolução temporal quase sempre leva a um aumento na entropia S. Contudo, para sistemas irreversíveis, como na maioria dos autômatos celulares, a entropia pode diminuir com o tempo. Esta diminuição na entropia marca seu carácter irreversível. Autômatos celulares podem, assim, ser considerados análogos discretos de sistemas governados por equações diferenciais de primeira ordem no tempo (tal como a equação de difusão), e exibir a mesma irreversibilidade local. Todavia, pode-se construir autômatos celulares unidimensionais reversíveis deixando que uma particular configuração dependa de duas configurações anteriores, em analogia com equações diferencias de segunda ordem reversíveis, tal como a equação de onda.

Uma vez que estados iniciais desordenados, onde cada sítio pode tomar um dos seus k valores possíveis com igual probabilidade, são estatísticamente aleatórios, e a evolução de autômatos celulares irreversíveis geram um desvio desta estatística equiprovável, pode-se definir entropias específicas para a existência de todas possíveis subsequências de valores de comprimento X de sítrios num dado passo de tempo, onde temos uma probabilidade $p_i^{(x)}$ para cada uma das k^X possíveis subsequências de comprimento X. Podemos definir uma entropia de conjunto espacial $s^{(x)}(X)$ dada por

$$s^{(x)}(X) = \frac{1}{X}\log_k\left(\sum_{j=1}^{k^X}\theta(p_i^{(x)})\right), \tag{1.7}$$

onde $\theta(p) = 1$ para $p > 0$ e $\theta(0) = 0$, e também uma entropia de medida espacial $s_\mu^x(X)$ dada por

$$s_\mu^{(x)}(X) = -\frac{1}{X}\left(\sum_{j=1}^{k^X} p_i^{(x)}\log_k p_i^{(x)}\right), \tag{1.8}$$

onde o sobreíndice (x) denota o comprimento da subsequência X e o subíndice μ denota uma determinada configuração de autômato celular, já que o valor da entropia depende da medida de probabilidade de cada subsequência X para diferentes configurações. A entropia de conjunto, dada pela Eq. 1.7 pode ser determinada diretamente pelo número total $N^{(x)}(X)$ de subsequências de comprimento X, com probabilidade de ocorrência

diferente de zero, pela equação

$$s^{(x)}(X) = \frac{1}{X} \log_k N^{(x)}(X). \tag{1.9}$$

As entropias nas Eqs. 1.7 e 1.8 para autômatos celulares infinitos podem ser calculadas ou através de muitas subsequências X numa dada configuração, ou através de subsequências X em um *ensemble* de diferentes configurações, dando resultados quase sempre iguais se considerarmos que mudanças em alguns valores de sítios não influênciam substancialmente o resultado da medida de probabilidade sobre um *ensemble* de todas possíveis configurações iniciais. Para autômatos celulares de extensão finita, podemos definir as entropias $s^{(x)}(N)$ e $s_\mu^{(x)}(N)$, onde N é o número total de sítios presentes no sistema. O valor de $s^{(x)}(N)$ em um particular passo de tempo é determinado pela fração de configurações acessíveis ao sistema pela evolução temporal partindo de qualquer configuração inicial, sendo igual ao valor de $s_\mu^{(x)}(N)$ se todas configurações acessíveis naquele passo de tempo tiverem a mesma probabilidade de ocorrência sobre um *ensemble* de k^N configurações possíveis.

Das definições 1.7 e 1.8, podemos ver que às entropias $s^{(x)}(X)$ e $s_\mu^{(x)}(X)$ satisfazem as seguintes desigualdades

$$s_\mu^{(x)}(X) \leq s^{(x)}(X) \leq 1 \tag{1.10}$$

e

$$0 \leq s_\mu^{(x)}(X) \leq s^{(x)}(X). \tag{1.11}$$

Pela desigualdade 1.10, $s^{(x)}(X) = s_\mu^{(x)}(X)$ para um sistema equiprovável, em que todas as probabilidades $p_i^{(x)}$ são iguais e $s^{(x)}(X) = 1$ se todas as possíveis subsequências k^X ocorrem, enquanto pela desigualdade 1.11, $s_\mu^{(x)}(X) = s^{(x)}(X) = 0$ se e somente se apenas uma subsequência de comprimento X ocorre com probabilidade $p_i^{(x)} \neq 0$. Ambas as entropias $s_\mu^{(x)}(X)$ e $s^{(x)}(X)$ satisfazem a condição de subaditividade

$$(X_1 + X_2)s(X_1 + X_2) \leq X_1 s(X_1) + X_2 s(X_2), \tag{1.12}$$

onde s denota ambas as entropias.

Podemos definir uma dimensão[1] de conjunto unidimensional $d^{(x)}$ a partir da definição

[1]Em geometria fractal, a dimensão de Hausdorff ou fractal d é uma quantidade estatística que fornece um indicação de como um fractal preenche o espaço, quando se toma escalas cada vez menores. Uma forma de definir dimensão fractal é perguntar quantas bolas (intervalos em 1 dimensão) $N(\epsilon)$ de raio ϵ são necessárias para cobrir uma região fractal; e como este número se comporta no limite quando $\epsilon \to 0$, ou seja $d = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{\log N(\epsilon)}{\log \frac{1}{\epsilon}}$ (ver Apêndice C).

1.9 como

$$d^{(x)} = \lim_{X\to\infty} s^{(x)}(X), \tag{1.13}$$

e da mesma forma uma dimensão de medida unidimensional $d_\mu^{(x)}$ dada por

$$d_\mu^{(x)} = \lim_{X\to\infty} s_\mu^{(x)}(X), \tag{1.14}$$

onde pelas Eqs. 1.10 e 1.11, temos também

$$0 \leq d_\mu^{(x)} \leq d^{(x)} \leq 1 \tag{1.15}$$

Um configuração de autômato celular desordenada, em que todas possíveis sequências de valores de sítio ocorrem com probabilidade diferente de zero, resulta em $d^{(x)} = d_\mu^{(x)} = 1$, enquanto uma configuração homogênea, tal como a configuração nula, resulta em $d^{(x)} = d_\mu^{(x)} = 0$. Para passos de tempo muito grandes, a dimensão de conjunto dada pela Eq. 1.13 pode ser usada para caracterizar o conjunto de configurações pertencentes ao atrator, sem levar em conta suas probabilidades.

Podemos também definir entropias temporais que caracterizam a sequência de valores tomados por um particular sítio através de muitos passos de tempo durante a evolução do autômato celular, com uma probabilidade $p_i^{(t)}$ para cada uma das k^T possíveis sequências de valores que um determinado sítio pode ter em T passos de tempo sucessivos. Em analogia com as Eq. 1.7 e 1.8, nós temos

$$s^{(t)}(T) = \frac{1}{T}\log_k\left(\sum_{j=1}^{k^T}\theta(p_i^{(t)})\right), \tag{1.16}$$

e

$$s_\mu^{(t)}(T) = -\frac{1}{T}\left(\sum_{j=1}^{k^T} p_i^{(t)}\log_k p_i^{(t)}\right), \tag{1.17}$$

respectivamente a entropia de conjunto temporal $s^{(t)}(T)$ e a entropia de medida temporal $s_\mu^{(t)}(T)$, satisfazendo relações análogas às Eqs. 1.10, 1.11 e 1.12 para as entropia espaciais.

De forma análoga, podemos também definir dimensões temporais como dada pela Eq. 1.13 para dimensão de conjunto espacial.

$$d^{(t)} = \lim_{T\to\infty} s^{(t)}(T), \tag{1.18}$$

e a dimensão de medida temporal pode ser definida por

$$d_\mu^{(t)} = \lim_{T\to\infty} s_\mu^{(t)}(T). \tag{1.19}$$

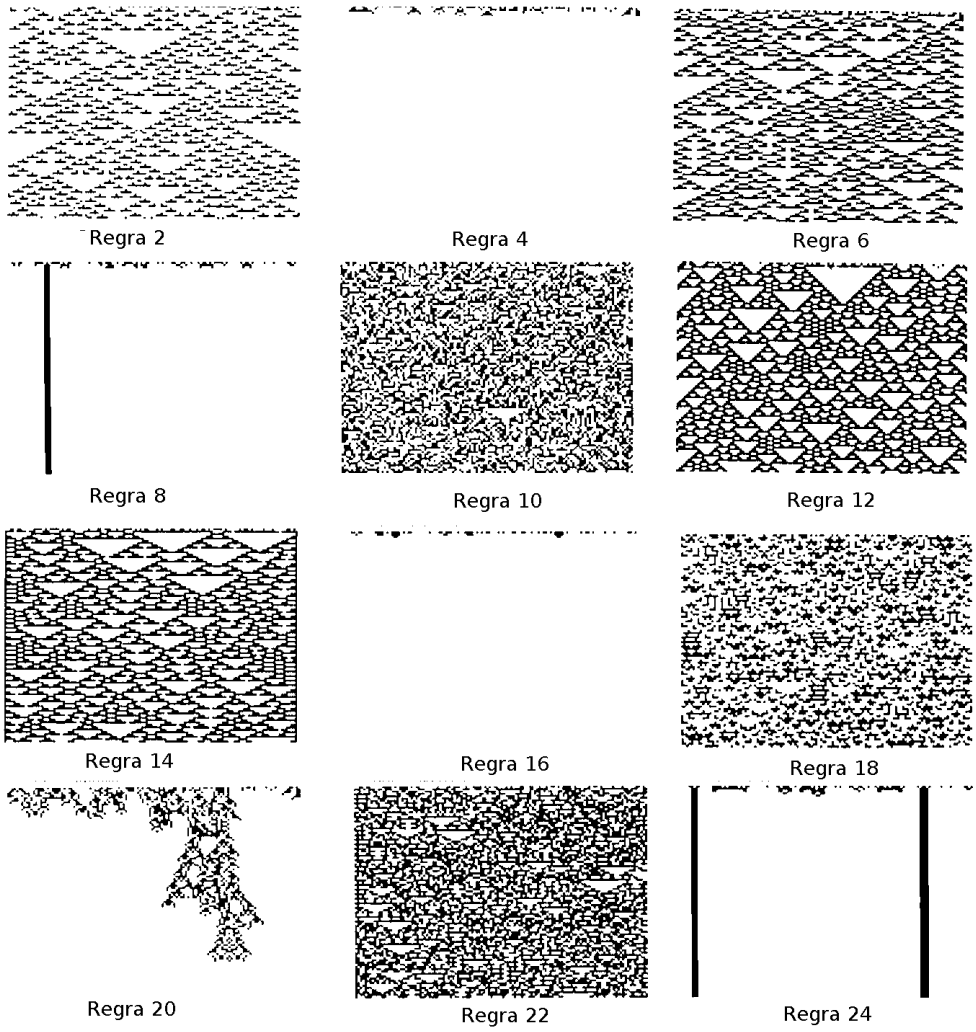

Figura 1.1: Evolução temporal de autômatos celulares unidimensionais com $k = 2$ e $r = 2$, obedecendo 12 diferentes regras autômatas a partir de estados iniciais desorganizados, onde cada sítio tem um propabilidade de $1/2$ para receber valores 1 ou 0. Cada linha horizontal representa um passo de tempo na evolução do autômato. (Fonte: Wolfram (23).)

Para sítios cujos valores variam periodicamente durante a evolução temporal do autômato celular, ou seja dentro de um ciclo limite, nós temos $d^{(t)} = d_{\mu}^{(t)} = 0$.

O comportamento das dimensões definidas acima podem portanto ser usado para determinar o quanto a evolução de autômatos celulares é caótica. De forma geral, se $d_{\mu}^{(x)} > 0$, nós temos um "caos espacial", se $d_{\mu}^{(t)} > 0$, nós temos um "caos temporal".

1.4 Classes de Autômatos Celulares

O desenvolvimento temporal de diferentes tipos de autômatos celulares, partindo de uma configuração inicial aleatória, podem exibir diferentes tipos de padrões dependendo,

é claro, do tipo de regra a ser seguida pelo autômato celular. Um exemplo disso esta representado na Fig. 1.1, onde algumas regras de um autômato unidimensional com $k = 2$ e $r = 2$ são mostradas. Podemos ver da Fig. 1.1 que determinadas regras geram padrões com uma estrutura evidente. As quatro classes de Wolfram podem ser assim simplificadas:

- Classe 1 (regras 4 e 16 na figura 1.1) tem um estado final homogêneo, com $d_\mu^{(x)} = d_\mu^{(t)} = 0$.
- Classe 2 (regras 8 e 24 na figura 1.1) gera estruturas periódicas espacialmente separadas, com $d_\mu^{(x)} > 0$ e $d_\mu^{(t)} = 0$.
- Classe 3 (regras 2, 6, 10, 12, 14, 18, e 22 na figura 1.1) gera padrões desordenados com a presença de "cavidades" triângulares de todos os tamanhos, com $d_\mu^{(x)} > 0$ e $d_\mu^{(t)} > 0$.
- Classe 4 (regra 20 na figura 1.1) gera estruturas localizadas complexas, com $d_\mu^{(x)} > 0$ e $d_\mu^{(t)} > 0$.

Na linguagem de sistemas dinâmicos, Wolfram associa a classe 1 a pontos fixos, classe 2 a ciclos limites, classe 3 ao caos com atratores "estranhos" e a classe 4 a uma nova classe de comportamento complexo que não existe em sistemas dinâmicos com poucos graus de liberdade. Essas quatro classes apresentam níveis de previsibilidade diferentes: Para a classe 1, todas os estados iniciais convergem para um mesmo estado final, sendo seu comportamento completamente previsível. Para a classe 2, precisamos conhecer uma dada região no estado inicial para sabermos como será uma determinada região no seu estado final. Para a classe 3, o conhecimento de uma determinada região no seu estado final depende em geral, de um completo conhecimento do seu estado inicial. Para a classe 4, a exemplo da classe 3, o conhecimento do seu estado final depende de uma região arbitrariamente grande do seu estado inicial, podendo essa dependência ser contudo, ainda mais complexa. Segundo Wolfram, alguns autômatos da classe 4 poderiam simular qualquer outro autômato celular, sendo assim, considerados computadores universais. Embora neste capítulo nós tenhamos abordado apenas o comportamento geral de autômatos unidimesionais, o comportamento geral para o caso bidimensional (32) parece também ser dividido em classes análogas às quatro classes vistas para o caso unidimensional.

2 REDES BOOLEANAS ALEATÓRIAS

2.1 Introdução

Chamamos de redes Booleanas, ao conjunto de N variávies, ou elementos, que podem receber apenas dois valores possíveis (ou seja, 0 ou 1), e que interagem entre si de acordo com certas regras de interação, dadas por um conjunto de funções de acoplamento que determinam o valor de cada variável no próximo passo de tempo, especificando assim, a dinâmica do sistema. Redes Booleanas são de especial interesse em diversos campos, desde regulação e controle genético até modelagem de sistemas de democracia e organização social, passando pela sua aplicação a modelos clássicos da mecânica estatística, como percolacão, modelo de Ising e vidros de spin.

No modelo de redes Booleanas existem duas grandes simplificações em relação a sistemas reais: A primeira é o fato de assumirmos que cada um dos N elementos do sistema podem interagir com K outros elementos, sendo estas interações controladas por funções Booleanas de acoplamento escolhidas aleatoriamente do espaço de todas 2^{2^K} possíveis funcões de K variáveis Booleanas (argumentos). Este carácter genérico na escolha dos acoplamentos das variáveis, constitui uma simplificação de sistemas reais, na medida que a grande maioria dos problemas físicos ou biológicos reais tem acoplamentos muito específicos determinados pela própria estrutura do sistema. Contudo, em muitos casos, a estrutura desses acoplamentos pode ser muito complexa ou simplesmente desconhecida, fundamentando assim, um escolha genérica no acoplamento das variáveis. A segunda simplificação é a natureza binária das variáveis. Em muitos sistemas físicos, variações contínuas nas variáveis dinâmicas podem determinar uma mudança no comportamento do sistema quando um valor crítico da variável é alcançado, por exemplo no potencial de ativação das sinapses de um neurônio ou de uma dada reação química. Apesar dessas variações contínuas nas variáveis dinâmicas, a aproximação binária é particularmente adquada, já que se pode ter uma boa representação dos estados do sistema tanto acima

			Aleatória	Canalizante
$\sigma_{j1(i)}$	$\sigma_{j2(i)}$	$\sigma_{j3(i)}$	$f_i(\sigma_{j1(i)}, \sigma_{j2(i)}, \sigma_{j3(i)})$	$f_i(\sigma_{j1(i)}, \sigma_{j2(i)}, \sigma_{j3(i)})$
1	1	1	1	0
1	1	0	1	1
1	0	1	0	1
1	0	0	1	0
0	1	1	0	1
0	1	0	0	1
0	0	1	1	1
0	0	0	0	1

Tabela 2.1: Exemplo de duas funções Booleanas com três variáveis de controle para um dado sítio i. A primeira delas é uma função tipicamente aleatória, enquanto a segunda é uma função canalizada pelo seu primeiro argumento. Quando $\sigma_{j1(i)} = 0$, o resultado da função é sempre 1, de outra forma pode ser 1 ou 0.

como abaixo desse valor crítico, de uma forma muito mais simples do que se considerarmos funções de acoplamento contínuas entre as variáveis.

2.2 Descrição do Modelo *N-K*

O modelo N-K ou simplesmente o modelo Kauffman, é um modelo dinâmico dado por uma mistura de todas regras Booleanas possíveis. Em um passo de tempo inicial, cada um dos N elementos da rede recebem um valor da variável σ_i que pode assumir apenas o valor 1 ou 0. Em passos de tempo sucessivos, a dinâmica da rede é governada por um conjunto de funções de acoplamento $\{f_i\}$, que especifica a regra Booleana que cada sítio i da rede irá seguir. Essas funções de acoplamento Booleanas f_i têm como argumentos K_i variáveis de controle especificadas para cada sítio i da rede. Desta forma, o valor da variável σ_i no passo de tempo $t+1$ é determinado pelos valores das variáveis de controle K_i no passo de tempo anterior t. Podemos resumir analiticamente a dinâmica do sistema, pela equação

$$\sigma_i(t+1) = f_i(\sigma_{j1(i)}(t), \sigma_{j2(i)}(t), \cdots, \sigma_{jK(i)}(t)), \tag{2.1}$$

onde f_i é a função Booleana que controla o estado do sítio i da rede no tempo $t+1$ e que depende dos valores das K_i variáveis no tempo anterior t. O número de variáveis de controle K_i presentes na rede da qual depende a evolução temporal de um dado sítio i, define a chamada conectividade da rede. Em geral, a conectividade de cada sítio poderia ser diferente para cada sítio, contudo ao longo desse trabalho nós iremos sempre assumir a seguinte condição $K_i = K\,(i = 1, \cdots, N)$. Uma vez especificada a conectividade, o conjunto de variáveis de controle $\{\sigma_{jK(i)}\}$ (*inputs*) e o conjunto de funções Booleanas

$\sigma_{j_1(i)}(t)$	$\sigma_{j_2(i)}(t)$	$\sigma_{j_3(i)}(t)$	$\sigma_{j_4(i)}(t)$	$f_i(\sigma_{j_1}(t), \cdots, \sigma_{j_4}(t))$	
				p	$1-p$
1	0	1	0	1	0
0	1	0	1	1	0
1	1	0	0	1	0

Tabela 2.2: Exemplo de aplicação de um campo de magnetização p para uma rede de conectividade $K = 4$, como sendo a probabilidade da função Booleana de um dado sítio i dar como resultado 1. Três diferentes configurações de vizinhança de um dado sítio i são mostradas.

$\{f_i\}$, para cada sítio i da rede, temos definida uma realização para aquela rede.

Na Eq. 2.1, o conjunto de variáveis de controle $\{\sigma_{jK(i)}\}$ da função Booleana f_i pode assumir 2^K configurações diferentes destas variáveis, dando para cada uma delas, um valor diferente para a função. Desta forma, podemos ter um total de até $N_f = 2^{2^K}$ diferentes funções definidas. Um exemplo de definição destas funções é dado na tabela 2.1 para o caso $K = 3$, onde podemos ter $2^3 = 8$ configurações diferentes dos argumentos $\sigma_{j1(i)}$, $\sigma_{j2(i)}$ e $\sigma_{j1(i)}$, resultando em valores diferentes para a função Booleana f_i, o qual determina o novo estado do sítio i num passo de tempo seguinte. Outras $2^{2^3} = 256$ funções Booleanas de acoplamento podem ser definidas como feito na tabela 2.1, apenas mudando os valores dos resultados das funções para diferentes configurações dos seus argumentos.

Nós podemos definir um *ensemble* para todas as possíveis funções de acoplamento, associando uma probabilidade para cada uma das N_f possíveis funções f_i. Se considerarmos que cada uma das funções têm a mesma probabilidade $1/N_f$ de serem escolhidas, então temos uma distribuição uniforme. Alternativamente, podemos introduzir um campo de magnetização[1](6, 33) na escolha das funções no *ensemble*, com uma probabilidade p da função dar 1 como resultado (spin up) e uma probabilidade $1 - p$ da função dar 0 como resultado (spin down), conforme exemplificado na tabela 2.2 para três diferentes configuração de vizinhança ($K = 4$) de um dado sítio i da rede. Este tipo de *ensemble* foi largamente usado por nós na realização das simulações feitas. Uma outra forma de definir o *ensemble* é dar diferentes pesos para tipos particulares de funções. Funções de canalização (34) podem ser geradas considerando que determinadas variáveis de controle das funções são decisivos para o valor da função. A segunda função da tabela 2.1 é um exemplo de função de canalização, onde se $\sigma_{j1(i)} = 0$, então o resultado da função é também 0, de outra forma a função pode assumir qualquer valor. De forma geral, podemos simular, por exemplo, propiedades aditivas de atividades sinápticas inter-neurais (35) se

[1]Este termo é usado desde que se tenha em mente que cada elemento da rede pode ser considerado um pequeno magneto.

considerarmos que as funções são dadas por uma combinação linear de termos envolvendo as variáveis de controle da função.

Em nosso trabalho, após termos definido um realização para rede, as atualizações dos estados de seus sítios são dadas pela Eq. 2.1 para todos os sítios ao mesmo tempo, isso é conhecido como atualização sincronizada da rede. Contudo, pode-se também realizar atualizações seriais (36) para os estados dos sítios, onde a atualização é feita somente para um sítio em cada passo de tempo escolhido de forma aleatória ou seguindo um esquema de ordenação previamente definido. Além disso, se impusermos que a realização da rede é mantida fixa ao longo do tempo, então nós estamos lidando com a versão *quenched* do modelo Kauffman. Por outro lado, se permitirmos que a realização da rede possa mudar a cada passo de tempo, então nós temos a versão *annealed* para o modelo Kauffman. Uma grande diferença entre as duas versões do modelo é que na versão *quenched* existem ciclos limites. Como a evolução temporal é totalmente determinística nesta versão, e desde que N diferentes variáveis Booleanas podem produzir até 2^N configurações no espaço de estados, nós devemos retornar a uma prévia configuração de rede anteriormente visitado após no maxímo 2^N passos de tempo. Consequentemente, o sistema repetirá as mesmas configurações, sem nunca deixar o ciclo. Cada uma das possíveis 2^N configurações iniciais irão gerar movimentos que eventualmente resultarão num particular comportamento cíclico. Existem muitas questões importantes relacionadas a ciclos limites, entre outras coisas, podemos destacar o cálculo do comprimento destes ciclos, ou seja, do número de configurações que fazem parte deste ciclo, bem como do número de diferentes ciclos ou atratores existentes para uma dada realização do modelo.

Uma das grandes vantagens na utilização do modelo Kauffman é o fato de podermos considerar qualquer tipo de topologia nos acoplamentos dos elementos da rede. A dinâmica da rede depende tanto qualitativa como quantitativamente da forma como definimos as conexões entre os elementos, ou seja, como determinamos o conjunto de variáveis de controle dos sítios da rede. Dois extremos de conexão têm sido amplamente usados. Por um lado, redes uniformes de interação de longo alcance, conhecido como aproximação de campo-médio (37, 38), em que para cada sítio i, as K variáveis de controle são escolhidas aleatóriamente entre as N variáveis da rede (rede uniforme). Tal aproximação foi introduzida para descrever interações genéticas, explicar a ocorrência de mutações e processos de estabilidade em genes biológicos. De fato, isso foi a proposta inicial do modelo N-K. Por outro lado, este modelo tem sido considerado em redes regulares, com interações de primeiros vizinhos, a assim chamada aproximação de curto alcance (6). Por exemplo, as K variáveis de controle podem ser escolhidas dos $2d$ vizinhos mais próximos de uma

rede hiper-cúbica de dimensão d. Neste trabalho de tese, entre outras coisas, nós estudamos o caso intermediário entre estes dois extremos de conexão, fazendo uso da topologia conhecida como topologia do mundo pequeno (ver Capítulo 3), onde as conexões entre os sítio da rede são escolhidas tanto entre elementos distantes como entre seu respectivos elementos vizinhos. A escolha da topologia adotada é de crucial importância para o comportamento cíclico destes sistemas. De particular interesse no nosso trabalho é o modelo Kauffman de primeiros vizinhos na rede quadrada. Neste sistema, o número de ciclos limites relevantes[2] crescem exponencialmente com o tamanho do sistema na região ordenada, como mostrado por Derrida e Flyvbjerg (39). Kauffman identificou estes diferentes ciclos limites como os diferentes tipos de células existentes e encontrou que seu número deveria crescer como $\sqrt{N}$ para N genes interagentes. Assim, o modelo Kauffman de primeiros vizinhos na rede quadrada não é o modelo mais realístico para tal aspecto biológico. Todavia se considerarmos uma rede uniforme de conectividade $K = 2$ tem-se acreditado que tanto o comprimento dos ciclos como o número médio de ciclos limite crescem algebricamente como $\sqrt{N}$ [3], adequando assim, a interpretação do comportamento exibido por sistemas vivos. De fato, isto foi um dos resultados mais interessantes do modelo Kauffman. Contudo, Bilke e Sjunnesson (11) colocaram em questão essa dependência para o número médio de diferentes ciclos, argumentando que o número de diferentes configurações obtidas, tomadas como representativas do espaço de estados foram subestimada. Recentemente, Samuelsson e Troein (42) deram uma prova rigorosa que o número de atratores crescem mais rapidamente que qualquer lei de potência. Até agora, apenas a versão *annealed* do modelo foi resolvida analiticamente, enquanto para a versão *quenched* apenas simulações computacionais foram feitas. Isso é devido principalmente ao fato de que tanto as variáveis de controle $\{\sigma_{jK(i)}\}$ quanto as funções de acoplamento $\{f_i\}$ são fortemente correlacionadas na versão *quenched*, tornando díficil, assim, encontrar uma correta função de distribuição de probabilidade para os estados do sistema, num determinado tempo t, que leve em conta estas particularidades.

2.3 Transição de Fase no Modelo *N-K*

Uma das principais utilidades para o modelo N-K é estudar como os sistemas respondem a pequenas mudanças ou danos inseridos no sistema, ou ainda mais especificamente, como estas mudanças se propagam ao longo de todo o sistema, quando se considera seu

[2]Ciclos limites relevantes são aqueles ciclos que não são rapidamente alcançados por não terem uma base de atração pequena.

[3]O leitor interessando poderia, por exemplo, consultar as Refs. (40, 41)

limite termodinâmico $(N, t) \to \infty$. Se levarmos em consideração duas configurações iniciais de rede $\{\sigma_i(0)\}$ e $\{\rho_i(0)\}$ no tempo $t = 0$, que diferem entre si apenas pelos estados de poucos sítios e que obedecem a mesma dinâmica, a distância $d(t)$ entre estas duas configurações $\{\sigma_i(t)\}$ e $\{\rho_i(t)\}$ num tempo t qualquer é dada por

$$d(t) = \sum_{i=1}^{N} (\sigma_i(t) - \rho_i(t))^2, \tag{2.2}$$

dando o número de sítios que diferem entre estas duas configurações no tempo t. A quantidade $d(t)$ na Eq. 2.2 é conhecida como a distância de Hamming entre configurações no tempo t, ou simplesmente como dano ou informação na rede. Para uma rede uniforme, se no seu desenvolvimento temporal o dano ou o fluxo de informação inicial se propaga para um número de elementos que crescem exponencialmente com o tempo, então o sistema é dito na fase caótica ou desordenada. De modo geral, este comportamento ocorre para valores grandes de K, incluindo até $K = N$. Se, por outro lado, o dano inicial se propaga tipicamente apenas para um número limitado de elementos, o sistema é dito na fase congelada ou ordenada. Este comportamento surge para valores pequenos de K, mais especificamente $K = 0$ e usualmente $K = 1$. Existe uma sintuação intermediária, conhecida como fase crítica, onde o dano inicial se propaga para um número cada vez maior de diferentes elementos do sistema com o passar do tempo, mas de uma forma algébrica, exibindo um comportamento fractal.

Uma outra medida interesante é o overlap normalizado entre configurações $a(t)$, definido como

$$a(t) = 1 - \frac{d(t)}{N}. \tag{2.3}$$

Assim, podemos saber se a vai a 1 ou a um valor menor quando tomamos $t \to \infty$. Se o overlap $a(\infty)$ sempre vai para 1, independentemente das configurações iniciais, então o sistema não pode reter nenhuma fração da informação contida nos estados iniciais. Por outro lado, se $a(\infty) < 1$, o sistema de alguma forma "se lembra" da informação contida nos estados iniciais. Para uma rede uniforme de sítios com conectividade K, podemos encontrar uma expressão analítica para a evolução temporal do overlap $a(t)$. Como para computar o valor de um dado elemento de rede $\sigma_i(t)$ no tempo t, precisamos conhecer no máximo as variáveis de controle e as funções Booleanas de $1 + K + K^2 + \cdots + K^{t-1}$ elementos diferentes, então quando N é muito grande, todos estes elementos podem ser considerados como escolhidos aleatoriamente e não faz a menor diferença se considerarmos a versão *quenched* ou *annealed* do modelo. De forma geral, se considerarmos um *ensemble* de funções Booleanas com um campo de magnetização p, o número de sítios que têm

todas as suas variáveis de controle (entradas) idênticas em ambas as configurações $\{\sigma_i(t)\}$ e $\{\rho_i(t)\}$ é $N[a(t)]^K$, tendo portanto, o mesmo valor no tempo $t+1$. O número de sítios que têm pelo menos uma de suas variáveis de controle diferentes é $N\{1-[a(t)]^K\}$ e estes sítios têm uma probabilidade $2p(1-p)$ de terem o mesmo valor no tempo $t+1$. Considerando ambos os casos, temos

$$a(t+1) = [a(t)]^K + 2p(1-p)\{1-[a(t)]^K\}, \tag{2.4}$$

resultando em

$$a(t+1) = 1 - \frac{1-[a(t)]^K}{K_c}, \tag{2.5}$$

onde K_c é dado em termos de p como

$$K_c = \frac{1}{2p(1-p)}. \tag{2.6}$$

Fazendo $p = 1/2$ nas Eqs. 2.5, 2.6, obtemos

$$a(t+1) = 1 - \frac{1-[a(t)]^K}{2} \qquad \text{sendo} \quad K_c = 2, \tag{2.7}$$

que é o caso particular da evolução temporal do overlap $a(t)$ para funções Booleanas pertencentes a um *ensemble* uniforme. No limite $t \to \infty$, $a(t)$ assintoticamente tenderá para um ponto fixo a^*, e pela Eq. 2.5, teremos

$$a^* = 1 - \frac{1-[a^*]^K}{K_c}. \tag{2.8}$$

A Eq. 2.8 deixa clara a existência de três fases para o modelo. Quando $K > K_c$, o sistema está na fase caótica; a^* é menor que um, mesmo para configurações iniciais bem próximas. Quando K aproxima-se de K_c por valores acima, a^* aumenta cada vez mais em direção a seu valor limite $a^* = 1$, porque cada vez menos variáveis têm seus valores finais sensíveis aos valores iniciais. Por outro lado, quando $K \leqslant K_c$, $a^* = 1$, ou seja, a fração de sítios que têm seus valores finais sensíveis aos valores iniciais do sistema é precisamente zero, para qualquer configuração inicial do sistema. Esta divisão clara para as fases do modelo em termos da conectividade K é perfeitamente obedecida para uma rede uniforme de longo alcance. Contudo, para redes regulares com $K > 0$, o seu ponto fixo a^* é sempre instável e menor que um, refletindo o fato que qualquer rede regular pode armazenar, de alguma forma, a informação de seus estados iniciais. Uma outra forma de analisar transições de fase no modelo é encontrar o valor crítico para o campo de magnetização p, resolvendo para p a Eq. 2.6 e encontrando $p_c(K)$ para um dado valor da conectividade K. Na Fig. 2.1 está representada o diagrama de fase dado pela Eq. 2.6 para o modelo Kauffman em

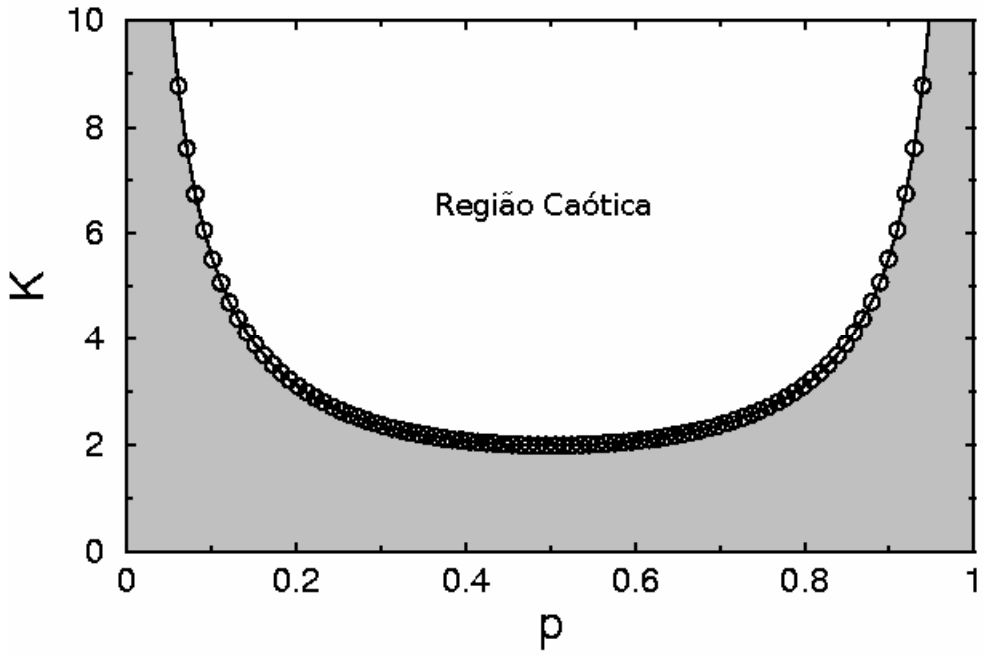

Figura 2.1: Diagrama de fase para o modelo Kauffman em uma rede uniforme de conexões de longo alcance. A área sombreada representa a região congelada, enquanto a região acima da curva representa a região caótica. A linha crítica separando as duas fase é dada pela Eq. 2.6.

uma rede uniforme de conexões de longo alcance, onde a região sombreada representa todos os pontos no espaço p-K que estão na fase congelada, enquanto a região acima da curva representa todos os pontos na fase caótica.

A transição de fase no modelo N-K apresenta estreita similaridade como a transição de percolação da física estatística. O modelo de redes Booleanas de dimensão d com interação de primeiros vizinhos na versão *annealed* é equivalente ao modelo de percolação direcionada (5) na dimensão $d+1$, onde o eixo preferencial de percolação é o eixo dos tempos. Cada sítio do plano $t+1$ está conectado a seus K vizinhos no plano t. Assim, por exemplo, o modelo N-K na rede quadrada resulta numa rede BCC, quando o eixo do tempo é adicionado. Para a versão *quenched* (43, 44), uma correspondência semelhante também é encontrada com o modelo de percolação direcionada quando consideramos redes uniformes de longo alcance. Contudo, o caso particularmente interessante para nós de uma rede de interação de primeiros vizinhos na versão *quenched* permanece ainda sem nenhuma correspondência com algum tipo de modelo de percolação conhecido.

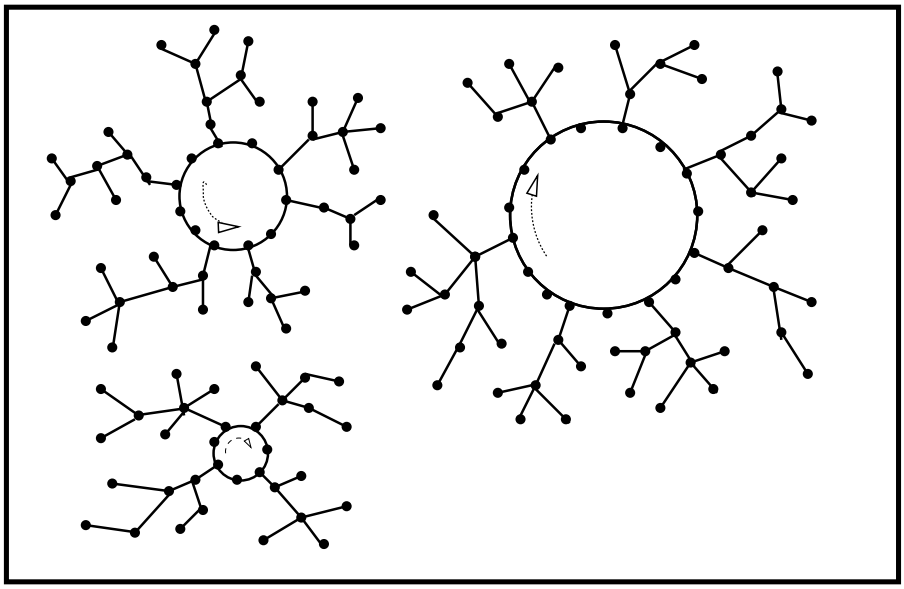

Figura 2.2: Representação esquemática do espaço de estados do modelo Kauffman, dividido em ciclos e em suas respectivas bacias de atração. Cada ponto representa um estado possível do sistema, os estados sobre os círculos representam o regime cíclico da dinâmica do sistema (atrator), enquanto os ramos enraizados nos círculos representam seu regime transiente.

2.4 Comportamento Cíclico no Modelo *N-K*

Na versão *quenched* de uma rede finita, para uma dada configuração inicial, a evolução temporal do sistema torna-se periódica após um certo tempo. Isso acontece por conta do número finito de diferentes configurações no espaço de estados do sistema (2^N configurações diferentes). Após um tempo de no máximo 2^N passos, o sistema deve retornar a uma mesma configuração anteriormente visitada. Desse modo, para cada configuração inicial, o sistema é levado a um atrator periódico ou ciclo limite. O número de diferentes configurações iniciais que levam para um mesmo atrator define uma bacia de atração para uma dada realização do modelo. Como existem diferentes atratores para uma dada realização, podemos dividir o espaço de estados do sistema em um conjunto de diferentes bacias de atração, levando a atratores ou ciclos com diferentes períodos. A Fig. 2.2 mostra o espaço de estados para uma determinada realização, dividido em ciclos e em suas respectivas bacias de atração. Tanto o número de atratores como o período de cada atrator são sensíveis ao tamanho do sistema N e a fase em que o sistema se encontra. Usando simulações de computador, Kauffman estudou o período médio dos atratores para uma rede uniforme com um *ensemble* de funções também uniforme (modelo Kauffman usual), e encontrou que eles cresciam com o tamanho do sistema N de uma forma exponencial para $K \geq 3$ e como uma lei de potência para $K = 1$ e $K = 2$ (conectividade crítica). Contudo, o

comportamento de escala do período médio dos atratores com o tamanho do sistema, na região crítica e abaixo dela ($0 < K \leq 2$), a exemplo do número médio de atratores discutido na secção 2.2, têm sido mostrado (ver Refs. (38) e (45)) crescer linearmente com o tamanho da rede N.

Cada configuração inicial pertence à bacia de atração de um atrator. Então, seja Ω_τ o número de configurações pertencentes a bacia de atração de um atrator τ. Podemos então, associar a cada atrator τ um peso W_τ dado por

$$W_\tau = \frac{\Omega_\tau}{2^N}, \tag{2.9}$$

onde W_τ é a probabilidade que uma configuração inicial escolhida aleatóriamente, faça parte da bacia de atração do atrator τ. Então, a probabilidade Y, para uma dada realização, de duas quaisquer configurações aleatórias cairem no mesmo atrator é dada por

$$Y = \sum_\tau (W_\tau)^2. \tag{2.10}$$

O número de diferentes atratores relevantes é presumivelmente da ordem de $1/Y$. Portanto, quanto menor for a probabilidade Y, maior será o número de diferentes atratores presentes numa dada realização. Para o modelo Kauffman usual, Derrida e Flyvbjerg (39) encontram propriedades estatísticas qualitativamente similares à teoria de vidros de spin na aproximação de campo médio (46) com respeito a essa estrutura de bacias de atração. Por exemplo, no limite termodinâmico $N \to \infty$, a probabilidade Y tende para um valor finito. Isso deixa clara a existência de poucas bacias de atração de grandes dimensões preenchendo todo o espaço de estados. Para o modelo Kauffman de primeiros vizinhos na rede quadrada, eles encontraram que o número de atratores relevantes cresce exponencialmente com o tamanho do sistema na fase congelada. Infelizmente, na fase caótica, os períodos dos atratores são exponencialmente grandes, e a questão pode ser investigada apenas em redes de pequenos tamanhos. O comprimento destes ciclos têm sido medidos para várias redes regulares, e parece crescer exponencialmente com o número de sítios na fase caótica ($\exp(\text{const} \times N)$) e como $\sqrt{L}$ (L sendo o tamanho linear do sistema) na fase congelada (6), enquanto na fase crítica em p_c parece crescer como $\exp(\text{const} \times L)$, existindo porém, fortes flutuações estatísticas (47).

3 O MODELO WS

3.1 Introdução

O modelo WS, devido a Duncan J. (W)atts e a Steven W. (S)trogatz (9), mais conhecido como o modelo do mundo pequeno em virtude de sua analogia com o fenômeno do "mundo pequeno", proposto pelo psicólogo social Milgram (48). Segundo ele, o número médio de pessoas necessárias para connectar duas quaisquer outras, escolhidas aleatoriamente e separadas geograficamente, seria cerca de seis pessoas, o assim chamado "seis graus de separação". Este modelo permite uma interpolação entre redes regulares e uniformes (aleatórias), pela introdução de uma probabilidade q de religação entre as conexões de sítios vizinhos na rede regular para sítios não-vizinhos de longa distância. Assim, podemos estudar a dinâmica de redes contidas no intervalo entre estes dois extremos topológicos, apenas alterando a probabilidade de religação q. Se $q = 0$, temos uma topogogia regular de rede e se $q \neq 0$, temos uma rede uniforme, também conhecido como topologia tipo campo médio, onde sítios escolhidos aleatoriamente podem estar conectados entre si.

O estudo da dinâmica em redes uniformes têm importantes aplicações no estudo de propagação de doenças (49), na sincronização de osciladores (50) e em regulação genética (15), principalmente por possuirem uma distância média entre sítios relativamente pequena, mesmo para redes grandes. A distância média entre sítios nessa topologia cresce logaritmicamente com o tamanho do sistema. Contudo, redes sociais reais estão bem longe de serem descritas por esse tipo de rede, apresentando uma estrutura local com alta probabilidade de conexão (sítios vizinhos ou pessoas vizinhas) e uma baixa probabilidade de conexão entre sítios não-vizinhos escolhidos aleatoriamente. Por exemplo, dois vizinhos podem possuir muitos vizinhos em comum, apresentando portanto, um alto coeficiente de aglomeração (ver secção 3.3.2) em relação a redes uniformes. Situações semelhantes também são encontradas nas conecções em redes neurais(9) e na estrutura de ligação química de macromoléculas (51). Portanto, o modelo WS é útil para conciliar as propriedades locais de redes regulares com propriedades globais de redes uniformes, pela introdução

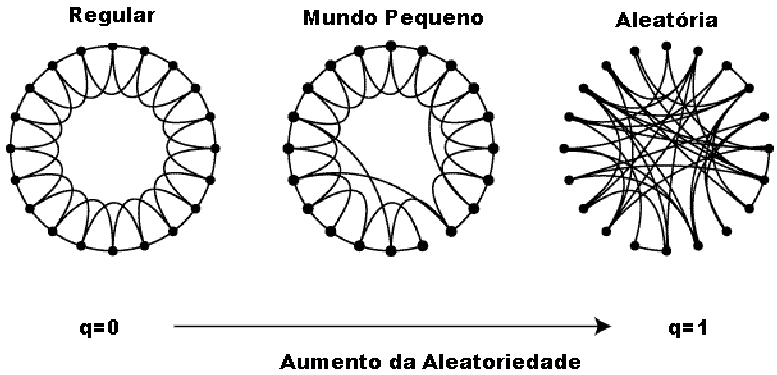

Figura 3.1: Procedimento de religação do modelo WS, interpolando entre uma cadeia regular e uma rede uniforme sem alterar a conectividade média dos sítios. Partindo de uma cadeia regular de sítios ($q = 0$), conexões de longo alcance são introduzidos fazendo aumentar o valor da probabilidade de religação q, de tal forma que quando $q = 1$ todas as conexões são religadas aleatoriamente.(Fonte: Watts and Strogatz (9).)

de conexões de longo alcance entre sítios não-vizinhos na rede regular através da probabilidade de religão q. O comportamento de mundo pequeno, causado pela coexistência de ligações de curto alcance com ligações de longo alcance, resulta numa distância média entre sítios relativamente pequena se comparada a redes regulares mas com um alto grau de aglomeração local (os vizinhos de um dado sítio i têm uma grande chance de serem vizinhos entre si), se comparado com redes uniformes.

Ao longo desse trabalho, nós temos usado a topologia de mundo pequeno aplicada ao modelo Kauffman afim de estudar o processo de *crossover* entre redes regulares e uniformes como forma de encontrar uma nova classe de universalidade, e assim, complementar trabalhos anteriores sobre o assunto. A seguir, nós discutimos o algoritmo para a geração da topologia de mundo pequeno em uma rede unidimensional e algumas de suas propriedades geométricas mais importantes.

3.2 O algoritmo

O algoritmo de construção proposto por Watts e Strogatz para uma rede com topologia de mundo pequeno é dado da seguinte forma: Partindo de uma rede unidimensional com N sítios e condição de contorno (em forma de anel), onde cada sítio da rede esta conectado a seus K vizinhos. Um sítio é escolhido e com uma probabilidade q cada uma de suas K conexões com sítios vizinhos ($K/2$ em cada lado) são religados a outros sítios de rede escolhidos aleatoriamente. O anel é percorrido no sentido horário, e esse procedimento é repetido para cada sítio da rede até que uma volta seja completada. Desta forma,

conexões de longo alcance são introduzidas na rede. Para garantir que a rede continue conectada apesar das conexões de longo alcance, devemos ter $N \gg K \gg \ln(N) \gg 1$. Se auto-conexões e coneções duplas forem excluídas do processo, teremos introduzido em média $qNK/2$ conexões de longo alcance na rede. Na Fig. 3.2 é mostrado o procedimento de religação, partindo de uma cadeia regular ($q = 0$) com $N = 20$ e $K = 4$. Quando $q = 1$, temos uma cadeia uniforme ou gráfico aleatório.

3.3 Propriedades Geométricas

Como sugerido por Watts e Strogatz, duas grandezas são utéis para caracterizar o comportamento de mundo pequeno. A primeira diz respeito ao caracter global do sistema, dado pela distância média característica entre sítios $L(N, q)$ e a segunda diz respeito ao caracter local do sistema, dado pelo seu coeficiente de aglomeração $C(N, q)$.

3.3.1 Distância Média Característica

A distância média característica é definida como sendo o número de sítios no caminho mais curto que conecta dois outros sítios, mediado sobre todos os pares de sítios. Matematicamente, podemos definir $L(N, p)$ como

$$L(N, q) = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{i \neq j} d_{ij}, \tag{3.1}$$

onde d_{ij} é a distância entre os sítios i e j. A distância média caracteristica $L(N, p)$ dada pela Eq. 3.1 é mediada sobre todos os pares de sítios e sobre a disordem induzida pelas religações de sítios. Para $q = 0$, nós temos uma cadeia linear de sítios, e $L(N, 0) \sim N/2K$, ou seja, a distância média característica para uma cadeia regular aumenta linearmente com N. Por outro lado, para $q = 1$ temos uma cadeia uniforme e $L(N, 1) \sim \ln(N)/\ln(K)$. No modelo WS, para valores pequenos de q, $L(N, q)$ comporta-se linearmente com N, enquanto para valores grandes de q, $L(N, q)$ tem um comportamento logarítmico com o tamanho N do sistema. Esta mudança no comportamento de escala de $L(N, q)$ é devida à introdução de conexões de longo alcance na rede, conectando regiões da rede que de outra forma estariam bem distantes entre si, causando uma diminuição não-linear na distância média entre sítios. Investigações numéricas e argumentações analíticas (52–54), mostram que a transição no comportamento de escala de $L(N, q)$ depende, para um dado valor de q, do tamanho do sistema N ou inversamente, do valor de q, para um dado valor de N. De forma que, para um dado valor de q, temos um tamanho de *crossover* para o sistema

de $N^* \sim q^{-\tau}$, onde $\tau = 1/d$ e d é a dimensão da rede regular antes do procedimento de religação ($d = 1$ para a cadeia linear), tal que se $N < N^*$, $L(N,q) \sim N$, enquanto se $N > N^*$, $L(N,q) \sim \ln(N)$. Assim, o comportamento de escala para $L(N,q)$ é dado por

$$L(N,q) \sim N^* F\left(\frac{N}{N^*}\right), \tag{3.2}$$

onde

$$F(u) = \begin{cases} u & \text{se } u \ll 1 \\ \ln(u) & \text{se } u \gg 1. \end{cases} \tag{3.3}$$

Contudo, simulações numéricas (55), e estudos analíticos como grupo de renormalização (53) e expansões em série (56) mostraram que a distância média característica $L(N,q)$ obedece a seguinte lei geral de escala

$$L(N,q) \sim \frac{N^{1/d}}{K} f(qNK) \tag{3.4}$$

onde $f(u)$ é a função de escala universal dada por

$$f(u) = \begin{cases} \text{const} & \text{se } u \ll 1 \\ \ln(u)/u & \text{se } u \gg 1. \end{cases} \tag{3.5}$$

A Eq. 3.5 deixa claro que a distância média característica $L(N,q)$ depende apenas da função escalar $f(u)$ de uma variável escalar $u = qKN^d$. Podemos dar uma interpretação física para a variável u como sendo duas vezes o número médio de religações feitas na rede para um dado valor de q, enquanto a função escalar $f(u)$ forneceria uma média do quanto a distância entre dois sítios da rede é reduzida para um dado valor de u.

3.3.2 O Coeficiente de Aglomeração

Uma outra grandeza importante para a caracterização do comportamento de mundo pequeno é o coeficiente de aglomeração $C(q)$ que caracteriza localmente a topologia. Seja c_i o número de vizinhos de um sítio i, então existe no máximo até $c_i(c_i - 1)/2$ possíveis conexões entre estes vizinhos. Se denotarmos por C_i a fração destas conexões que são de fato existentes na rede, então o coeficiente de aglomeração $C(q)$ é definido como a média de C_i sobre todos os sítios da rede. Para uma rede regular ($q = 0$), cada sítio i tem $c_i = K$ vizinhos e um número de conexões entre eles de $3K/2(K/2-1)/2$, e portanto um coeficiente de aglomeração $C(0) = 3(K/2-1)/2(K-1)$. Em um gráfico do coeficiente de aglomeração relativo $C(q)/C(0)$ contra q, podemos observar que seu valor é muito

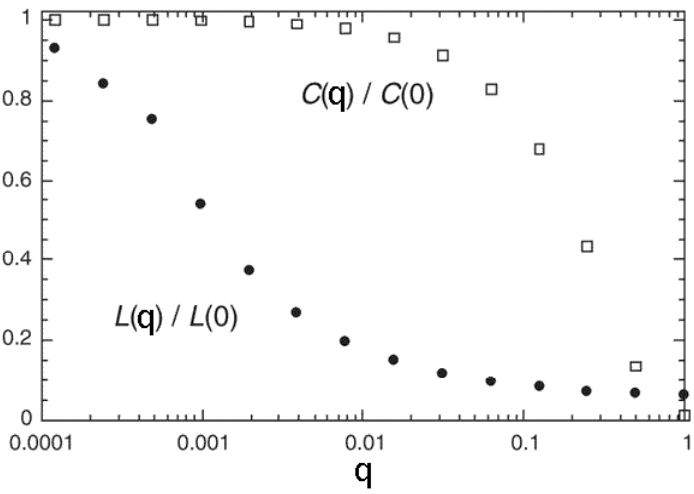

Figura 3.2: Distância média característica $L(N,q)$ e coeficiente de aglomeração $C(q)$ para o modelo WS. Os dados são médias sobre 20 realizações aleatórias do procedimento de religação, para redes com 10^3 sítios e uma conectividade média de $K = 10$ por sítio, e estão normalizados por seus respectivos valores para rede regular ($q = 0$). A queda nos valores de $L(N,q)$ corresponde ao começo do comportamento de mundo pequeno.(Fonte: Watts and Strogatz (9).)

próximo de 1 para uma larga região de valores de q (até cerca de $q = 0,10$), ao passo que a distância média relativa característica $L(N,q)/L(N,0)$ tem uma queda já para valores pequenos de q tão logo N seja suficientemente grande, como mostrado na Fig. 3.3.2 para uma cadeia linear com $N = 10^3$ e uma conectividade média de $K = 10$ vizinhos por sítio. Assim, o fato de $C(q)/C(0)$ praticamente não mudar durante a transição para um comportamento de mundo pequeno revela que esse comportamento é quase imperceptível em seu nível local, sendo portanto a principal característica desse tipo de topologia.

Barrat e Weigt (54) encontraram uma forma de derivar a dependência de $C(q)$ com q, fazendo uso de uma definição alternativa mas equivalente de $C(q)$. De acordo com essa definição, o coeficiente de aglomeração $\widetilde{C}(q)$ é definido como a razão entre o número médio de conexões entre os vizinhos de um sítio e o número médio de possíveis conexões entre os vizinhos de um sítio, resultando na fórmula

$$\widetilde{C}(q) = C(0)(1-q)^3, \tag{3.6}$$

onde

$$C(0) = \frac{3(K/2-1)}{2(K-1)}. \tag{3.7}$$

A diferença entre $\widetilde{C}(q)$ e $C(q)$ é pequena e pode ser mostrado que vai a zero quando fazemos N muito grande. Portanto, o comportamento de $C(q)$ é simplesmente descrito por $C(q) \approx C(0)(1-q)^3$, com uma depedência muito pequena sobre o tamanho do sistema.

4 PERCOLAÇÃO INVASIVA

4.1 Introdução

Percolação invasiva é um processo de crescimento dinâmico que foi primeiro proposto por Lenormand e Bories (57), Chandler *et al* (58), e Wilkinson e Willemsen (8) para explicar o transporte de um fluido, chamado invasor, através de um meio poroso preenchido por outro fluido imissível ao primeiro, chamado defensivo. Em um meio idealizado, a rede de poros e capilares podem ser considerados como uma rede regular, onde para cada sítio ou conexão da rede podemos atribuir uma pressão de capilaridade f_i responsável pela difusão do fluido invasor através do meio. Se a pressão f_i for maior que a pressão de equilíbrio do sistema meio + fluido defensivo, então o fluido invasor avança um sítio a cada passo de tempo na rede. Na prática isso pode ser simulado, atribuindo um número aleatório r no intervalo $[0, 1]$ para cada sítio ou conexão e escolhendo o sítio ou conexão mais próximo da interface entre os dois fluidos com o menor número aleatório. Se nós considerarmos o número r como a resistência que os sítios oferecem a passagem do fluido, então escolher o sítio com o menor número aleatório é equivalente a selecionar um poro com o maior tamanho, desta forma percolação invasiva pode simular processos de drenagem.

Quanto à compressibilidade do fluido defensor, podemos considerar dois tipos de processos de percolação invasiva: Percolação invasiva com aprisionamento, onde o fluido invasor aprisiona o fluido devensivo em regiões específicas na qual o fluido invasor não pode penetrar, refletindo o fato do fluido defensivo ser incompressível. Este modelo foi primeiro estudado por Chandler *et al* (58) e Wilkinson e Willemsen (8). Percolação invasiva sem aprisonamento, onde se considera fluidos defensivos de infinita compressibilidade, ou seja, durante o processo de percolação, regiões cercadas podem ser invadida pelo fluido invasor. Este modelo foi estudado por Wilkinson e Barsony (59) que através de simulações Monte Carlo, encontraram uma conexão entre este processo de percolação com processos de percolação ordinária (60, 61)(mesma classe de universalidade), onde sítios na vizinhaça do agregado de percolação são incorporados a este se os sítios têm números aleatórios $r < p$,

sendo p a probabilidade de percolação na rede.

Dada a importância da estrutura de agregados de percolação invasiva para o nosso trabalho, neste capítulo nós falaremos sobre o algoritmo de criação de percolação invasiva sem aprisionamento, bem como de algumas propriedades fundamentais destes agregados.

4.2 O Algoritmo

O processo de crescimento do agregado a partir de um dado sítio, em uma rede infinita é controlado pelo seguinte algoritmo:

1. Atribua números aleatórios r no intervalo entre $[0, 1]$ para cada sítio de uma rede infinita.
2. Escolha um sítio como a semente do agregado (primeiro sítio pertencente ao agregado), e para cada passo de tempo defina a borda do agregado como os sítios vizinhos mais próximos deste.
3. Em cada passo de tempo aumente o número de sítios pertencentes ao agregado por um, escolhendo o sítio com o menor número aleatório entre os sítios que compõem a borda do agregado naquele passo de tempo.

Agregados de percolação ordinária são formados apena modificando a regra 3 acima, onde para cada passo de tempo, os sítios da borda do agregado que possuem número aleatórios $r \leqslant p$ são incorporados ao agregado, e o processo de crescimento termina quando todos os sítios da borda do agregado possuem números aleatórios $r > p$. A introdução da probabilidade de percolação p em percolação ordinária introduz uma limitação no tamanho do agregado, ao passo que para a percolação invasiva o processo de crescimento pode se estender indefinidamente.

4.3 Propriedades Fundamentais de Percolação Invasiva

4.3.1 O Perfil de Aceitação

A conexão entre o modelo de percolação invasiva sem aprisionamento e o modelo de percolação ordinária é demostrada pela seguinte propriedade fundamental de percolação invasiva. Primeiro se definirmos o "perfil de aceitação" $a_n(r)$ tal que $a_n(r)dr$ seja a

probabilidade que o número aleatório escolhido no n-ésimo passo de tempo esteja no intervalo $[r, r+dr]$. Então, fazendo $n \to \infty$, nós temos

$$a_\infty(r) = \begin{cases} p_c^{-1} & \text{se } r < p_c \\ 0 & \text{se } r > p_c. \end{cases} \tag{4.1}$$

Assim, o perfil de aceitação $a_n(r)$ comporta-se como uma função degrau quando tomamos o limite $n \to \infty$, sendo esta propriedade fundamentada em simulações numéricas (59) e estudos analíticos (62). Na prática um perfil de aceitação cumulativo $b_n(r)$ é computado por

$$b_n(r) = (n + < n_b >_n - 1)^{-1} \sum_{m=1}^{n} a_m(r), \tag{4.2}$$

onde $< n_b >_n$ é o número médio de sítios na borda imediatamente antes que o sítio seja selecionado para fazer parte do agregado. No limite $n \to \infty$, nós temos

$$b_\infty(r) = \begin{cases} 1 & \text{se } r \leqslant p_c \\ 0 & \text{se } r > p_c. \end{cases} \tag{4.3}$$

Wilkinson e Barsony(59) conjecturam que a taxa de convergência do perfil de aceitação cumulativa $b_n(r)$ para uma função degrau segue uma lei de escala governada pelas quantidades

$$B_1 = \int_0^{p_c} [1 - b_n(r)]dr \qquad B_2 = \int_{p_c}^{1} b_n(r)dr, \tag{4.4}$$

que representam o desvio do perfil de aceitação cumulativa $b_n(r)$ de uma função degrau, onde $B_1(n)$ e $B_2(n)$ são supostos ter um comportamento de lei de potência dado por

$$B_1(n) \sim B_2(n) \sim n^{-1/\triangle_p}, \tag{4.5}$$

onde o expoente $\triangle_p$ é chamado o expoente *gap* de percolação, dado por

$$\triangle_p = \beta_p + \gamma_p. \tag{4.6}$$

Os expoentes β_p, γ_p são os expoentes críticos de percolação (ver Apêndice B). Sendo conjeturado que $\triangle_p$ é o mesmo tanto para percolação invasiva como para percolação ordinária. Uma solução exata para o problema na rede de Bethe (63) vem a confirmar isso. Portanto a percolação invasiva sem aprisionamento e a percolação ordinária parecem pertencer a mesma classe de universalidade e assim, percolação invasiva pode ser usada para estudar o comportamento crítico do modelo de percolação ordinária. Para redes bidimensionais, simulações numéricas (59) deram um valor $1/\triangle_p \simeq 0,393$.

4.3.2 A Dimensão Fractal

Podemos também definir uma dimensão fractal associada com a forma geométrica do agregado de percolação invasiva, através do raio do médio quadrado desse agregado

$$R(n) = \left(\left\langle \sum_{m=1}^{n} R_m^2 \right\rangle_n \right)^{1/2}, \tag{4.7}$$

onde R_m é a distância Euclidiana da semente até o m-ésimo sítio escolhido, e $< . >_n$ representa a média sobre todos os agregados de tamanho n. No limite de $n \to \infty$, nós esperamos que $R(n)$ cresça como uma lei de potência em termos do tamanho do agregado n, da seguinte forma

$$R(n) \sim n^{1/d_p}, \tag{4.8}$$

onde d_p é a dimensão fractal do agregado de percolação invasiva varrendo toda a rede. De forma idêntica ao expoente gap de percolação $\triangle_p$, conjectura-se que a dimensão fractal d_p é a mesma tanto para o modelo de percolação invasiva sem aprisionamento como para o modelo de percolação ordinária, e ambos estão relacionados por $\triangle_p = \nu_p d_p$, sendo ν_p um terceiro expoente crítico de percolação que governa como a distância de correlação $\xi_p(p)$ varia com a probabilidade de percolação p, na forma $\xi_p(p) \sim |p - p_c|^{-\nu_p}$, onde p_c é a probabilidade de percolação crítica na rede. Para percolação invasiva com aprisionamento, simulações Monte Carlo (8) resultaram em uma dimensão fractal para redes bidimensionais de $d_p \simeq 1.82$, um tanto menor que o encontrado para o modelo de percolação ordinária $d_p \simeq 1,896$, enquanto para redes tridimensionais nenhuma diferença entre ambos os modelo foi encontrada. Contudo, ainda não está plenamente demostrado que percolação invasiva com aprisionamento não pertença a mesma classe de universalidade da percolação ordinária.

Considerando percolação invasiva com aprisionamento, a probabilidade $P_i(r,t)$ que um sítio, a uma distância r do sítio semente, seja invadido após um intervalo de tempo t, satisfaz à seguinte lei de escala (64):

$$P_i(r,t) \sim r^{-1} f(r^{d_p}/t), \tag{4.9}$$

onde $f(u)$ é uma função de escala com um comportamento de lei de potência dado por $f(u) \sim u^{\zeta_1} (u \ll 1)$ e $f(u) \sim u^{-\zeta_2} (u \gg 1)$, onde os expoentes ζ_1 e ζ_2 para o caso bidimensional são respectivamente 1 e 48/91 (65). Este comportamento de escala implica que o ponto mais provável para se encontrar a interface entre os dois fluidos após um intervalo de tempo t, está em $r \sim t^{1/d_p}$.

5 REDE QUADRADA

5.1 Introdução

Neste capítulo, nós temos estudado o modelo Kauffman ou mais geralmente redes Booleanas aleatórias na topologia regular de rede quadrada, em que cada sítio da rede tem um número de variáveis de controle dado pelo seus quatro primeiros vizinhos ($K = 4$), afim de analisar a dinâmica do processo de propagação do dano (ou informação), buscando calcular pontos críticos de transição de fase, expoentes críticos e dimensões fractais nesse tipo de sistema, sendo nossos resultados comparados com outros resultados existentes na literatura. Para isso, nós simulamos redes quadradas de vários tamanhos, onde danos iniciais são inseridos simulando duas redes idênticas (réplicas), com sítios correspondentes obedecendo à mesma função Booleana, escolhida aleatóriamente para cada sítio (ambas as redes possuem a mesma realização de rede), diferindo apenas pela mudança nos valores das variáveis iniciais de uma pequena quantidade de sítios centrais entre essas redes, e em seguida deixando ambas as redes evoluir no tempo, calculando assim, a distância de Hamming entre ambas as redes. Em nossos cálculos, nós utilizamos a versão *quenched* do modelo, em que após ser escolhida a função Booleana para sítio da rede, ela é mantida ao longo de toda evolução do sistema. O estudo de transição de fase é realizado fazendo-se variar o valor do campo de magnetização p (ver capítulo 2) para as várias realizações de rede e definindo-se um parâmetro de ordem $\psi(t)$ para o sistema em termos da distância de Hamming para passos de tempo muito grandes (limite termodinâmico), de acordo com a teoria de Landau.

Nesse modelo, são observadas três fases para o sistema: A fase congelada em $p < p_c$, onde danos iniciais inseridos no sistema ficam ou restritos a uma pequena porção de sítios da rede ou simplesmente desaparecem no limite $t \to \infty$; a fase crítica em $p = p_c$, onde o dano atinge uma porção considerável de sítios da rede e cresce como uma lei de potência com o tamanho do sistema, apresentando um comportamento fractal; e finalmente a fase caótica em $p > p_c$, onde o dano pode atingir uma grande porção dos sítios da rede, e

cresce exponencialmente com o tamanho do sistema. Uma vez encontrado o ponto crítico p_c para esse modelo, nós procedemos o cálculo dos expoente críticos e das dimensões fractais do sistema. Esta transição de fase é reminescente de outras transições de fase, como a transição para-ferromagnética de sistemas de spin, identificando $\psi(0)$ com o campo magnético H e $\psi(\infty)$ com a magnetização M, então para o paramagneto $p < p_c$, a magnetização $\psi(\infty)$ vai a zero se o campo vai a zero, com uma susceptibilidade constante $\psi(\infty)/\psi(0)$ para campos pequenos. Por outro lado em $p > p_c$, o sistema está em sua fase ferromagnética, e nós temos uma magnetização finita $\psi(\infty)$, quando o campo vai a zero. Se analizarmos em termos de mutação biológica, a fase caótica do modelo é inteiramente inadequada para a manutenção da vida, dada a grande instabilidade do sistema, enquando sistemas no ponto de crítico p_c ou próximo a ele (limiar da fase crítica) parecem gerar as condições propícias para a manutenção da vida, uma vez que o sistema nessas condições garantiria a estabilidade necessária sem prejuizo da possibilidade de evolução do organismo vivo.

Nossos cálculos nesta primeira fase do trabalho foram realizados utilizando um método de manipulação paralela de bits, chamada "multispin coding" (66–68), armazenando 64 bits numa palavra de computador, onde cada bit representa uma variável de sítio (spin up ou down), sendo necessária a utilização de funções lógicas de manipulação de bits (AND/OR), bem como de funções de deslocamento de bits numa palavra de computador (SHIFT) tanto para implementação das regras e atualizações das variáveis para cada sítio como para estabelecer condições de contorno na rede[1].

5.2 O Algoritmo

Uma forma padrão para implementar o modelo Kauffman em computadores é introduzindo um parâmetro p, ou seja, um campo de magnetização p, tal que para cada sítio da rede nós selecionamos entre as 2^{2^K} ($K = 4$ na rede quadrada) regras ou funções Booleanas (ver seção 2.2) uma para a qual o resultado terá valor 1 (spin up) com probabilidade p e 0 (spin down) com probabilidade $1 - p$. Em uma simulação de computador, primeiro percorremos todos os N sítios do sistema, e para cada sítio percorremos também todas as 2^K configurações de vizinhança, e em seguida para cada tal configuração de vizinhança determinamos pelo sorteio de um número aleatório se sua variável (spin) será 1 ou 0 (up ou down); se o número aleatório sorteado for menor que p, então sua variável receberá o

[1]Um exemplo de um programa FORTRAN para o cálculo do parâmetro de ordem na rede quadrada utilizando o método multispin coding é fornecido no Apêndice A

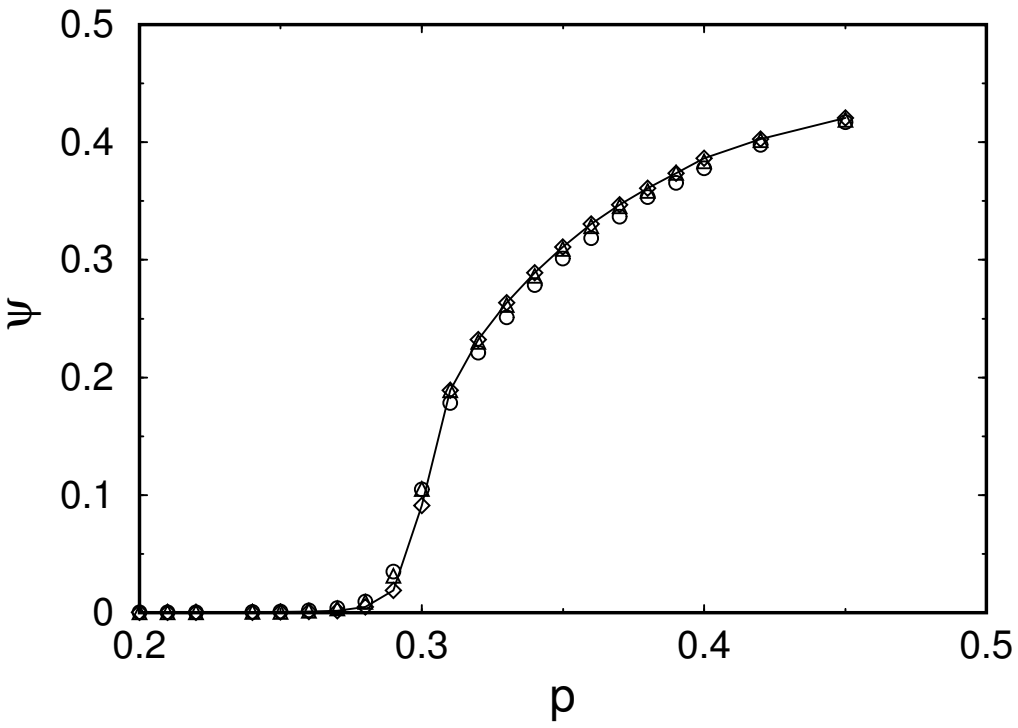

Figura 5.1: Gráfico de ψ *versus* p para o caso de rede quadrada ($q = 0$). Tamanhos de rede L=256; $\circ$, L=384; $\triangle$ and L=512; $\Diamond$.

valor 1, caso contrário, ele receberá o valor 0. Uma vez tendo percorrido todas as configurações de vizinhaça para cada sítio, então podemos dizer que temos fixado uma regra para aquele sítio, ou em outras palavras definido uma função Booleana para ele, e podemos ir para o próximo sítio da rede. Após termos estabelecido as regras para cada sítio da rede, nós temos automaticamente definido uma realização de rede, uma vez que a própria estrutura da rede já define a conectividade para cada sítio. Em seguida, nós selecionamos uma configuração inicial das variáveis Booleanas atribuindo para cada sítio da rede um valor de variável 1 ou 0 com igual probabilidade.

5.3 Transição de fase

Com o objetivo de entender como uma mutação simples se propaga através de um material genético, ou como pequenas falhas de hardware se propagam sobre uma arquitetura de computador, nós consideramos duas redes quadradas (réplicas), idênticas na conectividade e nas regras, e também idênticas na configuração inicial da rede, exceto pela mudança de um pequeno número de variáveis em sítios centrais (tipicamente menos que 1% dos sítios da rede). O número de spins que no passo de tempo t forem diferentes entre estas duas replicas é chamada a distância de Hamming ou simplesmente o dano

naquele passo de tempo. Para duas configurações de rede $\{\sigma_i(t)\}$ e $\{\rho_i(t)\}$, a distância de Hamming normalizada é dada por

$$d(t) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(\sigma_i(t) - \rho_i(t))^2, \tag{5.1}$$

e nós podemos definir um parâmetro de ordem ψ para o sistema tomando na Eq. 5.1 o limite $t \to \infty$, isto é

$$\psi = \lim_{d(0)\to 0}\lim_{t\to\infty}\frac{d(t)}{N}, \tag{5.2}$$

e podemos também definir uma suceptibilidade χ como

$$\chi = \lim_{t\to\infty}\frac{\partial d(t)}{\partial d(0)}. \tag{5.3}$$

Computacionalmente a convergência para o parâmetro de ordem como definido pela Eq. 5.2 é tipicamente alcançada após algumas poucas centenas de passos de tempo. Desta forma nós podemos estudar tanto a transição de fase como a velocidade de propagação da nuvem de dano (ver capítulo 7) em todas as redes tratadas no presente trabalho. O parâmetro de ordem ψ assim como $1/\chi$ vão a zero na concentração crítica p_c de forma similar à transição de fase para-ferromagnética. Em outras palavras, para $p < p_c$, um pequeno dano inicial pode desaparecer ou ficar restrito a um pequeno número de sítios "danificados", ou seja, pertencentes a um aglomerado de sítios danificados, após um tempo suficientemente grande. Podemos dizer então, que o sistema encontra-se na fase congelada. Por outro lado, para todo $p > p_c$, um pequeno dano inicial pode se propagar ao longo de uma parte considerável do sistema. Então nós dizemos que o sistema está na fase caótica. De particular interesse é, contudo, o caso limite $p = p_c$ chamado estado crítico do sistema, onde propriedades fractais aparecem (ver próxima seção). Para saber mais a respeito de transições de fase em autômatos de Kauffman o leitor deveria consultar, por exemplo, a Ref. (5). Como uma forma de encontrar o valor de p_c no modelo Kauffman na rede quadrada, estudamos o comportamento do parâmetro de ordem ψ, definido pela Eq. 5.2, em relação a variações no valor do campo de magnetização p para redes de diferentes tamanhos quando um pequeno número de sítios centrais regularmente espassados são danificados e tomando uma média de 100 diferentes configurações iniciais de rede para cada ponto considerado. Todos os cálculos foram feitos até 3×10^3 passos de tempo sobre um processador Intel Pentium IV. As velocidades de atualização de rede (varredura) utilizando um algoritimo multispin coding sobre uma máquina Intel que pode armazenar 64 spins em uma palavra de computador foi de cerca de 2,44 atualizações por nanosegundo para duas configurações de rede seguindo as mesmas regras de interações

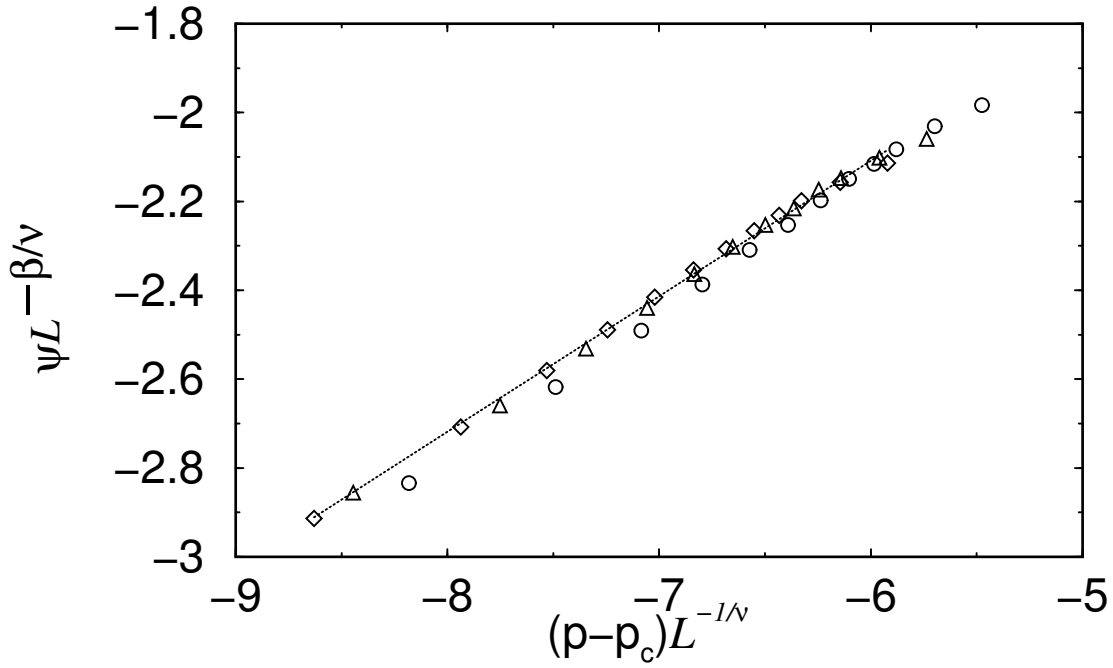

Figura 5.2: Gráfico log-log (base e) de $\psi L^{-\beta/\nu}$ *versus* $(p-p_c)L^{-1/\nu}$ para o caso de rede quadrada ($q=0$).Tamanhos de rede L=256; $\circ$, L=384; $\triangle$ and L=512; $\Diamond$.

na versão *quenched* do modelo. Nosso resultado para o parâmetro de ordem ψ na rede quadrada é mostrado na Fig. 5.1 para três tamanhos de rede ($L = 256$, 384 e 512). A transição entre a fase congelada e a fase caótica é vista ocorrer em torno de $p_c = 0,30$, este resultado é um pouco maior que o resultado obtido pela Ref. (6) de aproximadamente $p_c = 0,28$, usando um método de vetorização simples de um spin por palavra de computador, mas muito próximo ao obtido pela Ref. (69) de cerca de $p_c = 0,31$, usando o algoritmo da Silva-Herrmann[2]. Estas divergências no valor de p_c são em decorrência sobretudo de efeitos do tamanho finito das redes.

Nós estimamos os expoentes críticos para o modelo de rede quadrada, considerando a fração de sítios danificados (ψ) em cada lado do ponto crítico p_c, após um intervalo de tempo suficientemente grande. Na região caótica ($p > p_c$), esta fração de sítios danificados vai a zero como $\psi \sim (p-p_c)^{\beta}$. Enquanto na região congelada, a razão do dano final $d(\infty)$ pelo dano inicial $d(0)$, varia como $\chi \sim (p_c - p)^{-\gamma}$. Em seguida, nós fizemos um colapso de todos os dados afim de testar a consistência dos resultados obtidos, fazendo uso da seguinte relação de escala

$$\psi(L,p) = L^{\beta/\nu} F((p-p_c)L^{-1/\nu}), \tag{5.4}$$

[2]Este método consiste basicamente em encontrar o valor de p_c através da propagação do dano em um gradiente de valores do campo de magnetização p. Para maiores detalhes o leitor deveria consulta a Ref. (70).

	$q = 0,00$	$q = 0,05$	$q = 0,10$
p_c	$0,30$	$0,17$	$0,16$
β	$0,31 \pm 0,04$	$0,78 \pm 0,04$	$0,74 \pm 0,04$
γ	$2,50 \pm 0,15$	$4,75 \pm 0,20$	$4,65 \pm 0,15$

Tabela 5.1: Tabela mostrando os valores do ponto crítico p_c e os respectivos expoentes críticos tanto para a rede quadrada ($q = 0$) como para a aproximação de mundo pequeno ($q \neq 0$). As estimativas de erro apresentadas são desvios padrões simples dos dados.

onde L é a dimensão linear da rede $L \times L$ e ν é o expoente descrevendo a divergência do comprimento de correlação[3] em p_c. A Fig. 5.2 mostra o colapso dos dados na rede quadrada em $p_c = 0,30$, estando em boa concordância com a Ref. (69). Desta Figura, nós podemos observar que os pontos seguindo a relação de escala dada pela Eq. 5.4 têm uma inclinação de reta igual ao expoente crítico β para este modelo. Isto poderia ser uma indicação da qualidade dos nossos dados. Nós também calculamos γ por meio da Eq. 5.3 no limiar crítico p_c. Nossas estimativas para os expoentes críticos e para o valor do ponto crítico p_c, tanto para o caso na rede quadrada como para o caso na aproximação de mundo pequeno (a ser discutido no próximo capítulo) são mostradas na tabela 5.1.

5.4 Dimensões Fractais

Na fase caótica, o dano se propagará e alcançará as bordas da rede após um tempo T_t que é proporcional a L, deixando para trás um número M_0 de sítios danificados durante esse processo, o qual escala como L^d (d é a dimensão da rede). De grande interesse é, contudo, o comportamento de escala de T_t e M_0 exatamente em p_c. Podemos definir através da proporcionalidade assintótica $L \to \infty$, as seguintes dimensões fractais

$$< M_0 > \sim L^{d_0} \tag{5.5}$$

$$< T_t > \sim L^{d_t}, \tag{5.6}$$

[3]No Apêndice B é dada uma relação útil dos expoentes críticos usados no modelo Kauffman em analogia aos existentes para percolação ordinária.

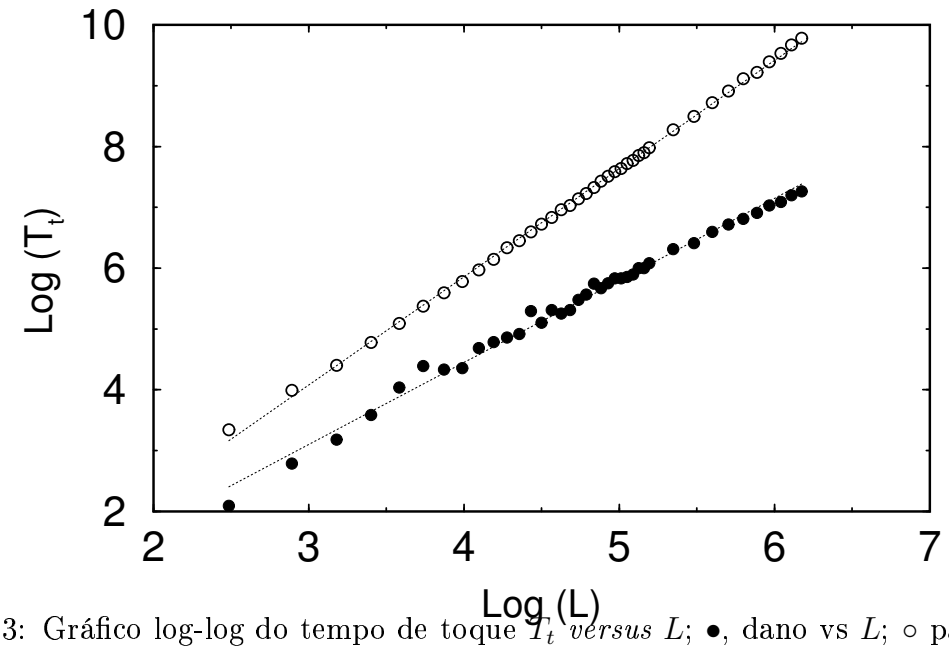

Figura 5.3: Gráfico log-log do tempo de toque T_t *versus* L; •, dano vs L; ∘ para o caso de rede quadrada ($q = 0$).

o subíndice zero na Eq. 5.5 especifica o caso mais geral dos momentos M_k[4] da distribuição de probabilidades p_i de um dado sítio i da rede ser danificado num período de tempo fixo t, na seguinte forma geral

$$M_k = \sum_i p_i^k \sim t^{\phi(k)}, \tag{5.7}$$

onde $p_i = n_i / \sum_i n_i$, e n_i é o número de vezes que um dado sítio é danificado num período de tempo fixo t. Para $k = 0$, nós temos o caso especial M_0 definido na Eq. 5.5, onde $\phi(0) = d_0/d_t$ e em geral nós temos

$$\phi(k) = \phi(0)(1-k) \qquad \text{para} \quad p > p_c. \tag{5.8}$$

Em analogia com a teoria de percolação, nós temos determinado as dimensões fractais d_0 e d_t para a rede quadrada, calculando a massa de dano M_0 e o tempo de toque T_t nas bordas da rede para diversos tamanhos de rede L no ponto crítico p_c. A Eq. 5.5 informa como o dano médio aumenta com o tamanho da rede L no ponto crítico, enquanto a Eq. 5.6 descreve como o tempo médio para o dano se propagar até as bordas da rede aumenta com o tamanho da rede L neste ponto. As médias nas Eqs. 5.5 e 5.6 são tomadas sobre aquelas realizações que eventualmente tocam a borda superior ou inferior da rede.

Para realizar esses cálculos, nós danificamos uma linha inteira de sítios em cada passo de tempo e deixamos o sistema evoluir até a nuvem de dano efetivamente tocar as bordas

[4]Estes momentos M_k têm sido usados para estudar comportamento multifractal no modelo Kauffman. O leitor interessando poderia consultar a Ref. (71), onde é evidenciado tal comportamento em p_c na rede quadrada.

da rede. Nossos resultados para o tempo de toque T_t e a massa de dano M_0 nesse tempo de toque foram mediadas sobre 100 realizações para redes quadradas e são mostradas como um gráfico log-log do tempo contra o tamanho do sistema L na Fig. 5.3. Nossos resultados na rede quadrada são $d_0 = 1,79$ e $d_t = 1,35$. Estes valores estão em boa concordância com os resultados obtidos na Ref. (69) e obdecem às relações de escala. A partir da tabela 5.1, nós temos $\beta = 0,31$ e $\gamma = 2,48$. Assumindo hiper-escala, nós temos $d\nu = \gamma + 2\beta$, assim nós obtemos $\nu = 1,55$. A teoria de percolação ordinária sugere que $d_0 = d - \beta/\nu$, predizendo, portanto, $d_0 = 1,80$ e estando em perfeita concordância com o nosso resultado numérico.

5.5 Teoria de Escala Dinâmica

Para valores bem acima de p_c, o dano criado em um sítio se propaga com uma velocidade v constante. A grosso modo, o dano se moveria quando muito, por um sítio a cada passo de tempo em relação a sua origem. Contudo o caráter aleatório do modelo Kauffman reduziria de algum modo essa velocidade. Para a rede quadrada ($K = 4$), a velocidade de propagação do dano seria de cerca de um quarto da constante da rede ($L/4$) por passo de tempo, em $p = 1/2$. Dessa forma, se ignorarmos constantes de ordem unitária, o tempo t para o dano se propagar a uma distância r da origem é dado por

$$t = \frac{r}{v}. \tag{5.9}$$

Perto de p_c, o comprimento de correlação ξ torna-se muito grande (ver Apêndice B) e a velocidade v é em geral muito pequena. A dimensão de velocidade d_v é definida a partir da proporcionalidade assintótica

$$v \sim \xi^{-d_v}. \tag{5.10}$$

Perto da transição, a Eq. 5.9 é portanto substituida por

$$t = \xi^{d_v} r f(r/\xi), \tag{5.11}$$

com uma função de escala $f(z)$ se aproximando de uma constante para argumentos z muito grandes. Para argumentos pequenos, a função $f(z)$ deve variar como z^{d_v} afim de fornecer um r finito num intervalo de tempo finito. Portanto, temos que

$$t \sim r^{d_t}, \qquad d_t = 1 + d_v. \tag{5.12}$$

Se levarmos em conta apenas aqueles casos onde o dano não se extinge ou não permanece

finito, ou seja $p > p_c$, o dano real M_0 cresce em uma rede de dimensão d como ψr^d com o tempo. No ponto crítico, ψ deve variar como L^{d_0-d}, sendo d_0 a dimensão fractal da rede. Portanto, em p_c nós temos:

$$M_0 \sim \xi^{d_0-d} r^d g(r/\xi), \tag{5.13}$$

com uma função de escala $g(z)$ se aproximando de uma constante para argumentos z muito grandes e variando como z^{d_0-d} para argumentos pequenos. Portanto, no ponto crítico p_c nós temos:

$$M_0 \sim r^{d_0} \sim t^{\phi(0)}, \tag{5.14}$$

onde $\phi(0) = d_0/d_t$. O expoente da Eq. 5.14 deve ser diferente de d_0 para valores abaixo de p_c, uma vez que temos que mediar também sobre tentativas em que o dano não se propaga ao longo da rede, isto é, ou se extinge ou fica restrito a um pequeno número de sítios em volta do sítio perturbado. Contudo, se levarmos em conta todas as tentavivas possíveis de propagação do dano, bem sucedidas ou não, então devemos considerar que o dano atinge um limite assintótico proporcional ao tamanho do agregado médio, o qual varia como $\xi^{d-\eta}$ (sendo η o expoente de Fisher[5]). Portanto, para pontos próximos de p_c, mas não necessariamente acima de p_c, temos

$$M_0 \sim \xi^{2-\eta} h(r/\xi). \tag{5.15}$$

Para argumentos grandes, a função de escala $h(z)$ deve se comportar como uma constante, enquanto para argumentos pequenos ela deve se comportar como $z^{2-\eta}$, ou seja, em pontos próximos a transição de fase, teremos M_0 escalando como

$$M_0 \sim r^{2-\eta}, \tag{5.16}$$

em substituição a Eq. 5.14.

As relações discutidas acima são comumente encontradas em processos de percolação, como a propagação de uma fogueira numa floresta, e em outros fenômenos como o do deslocamento de uma formiga em um labirinto.

[5]Para um maior aprofundamento sobre relações de escala em fenômenos críticos, o leitor deveria consultar o capítulo 3 da Ref. (72)

6 APROXIMAÇÃO DE MUNDO PEQUENO

6.1 Introdução

A exemplo do estudo feito para a rede quadrada, apresentado no capítulo anterior, neste capítulo nós analisaremos o caso mais geral, inserindo uma probabilidade de religação q para cada uma das quatro conexões de primeiros vizinhos entre os sítios na rede quadrada ($K = 4$) para qualquer outro sítio não necessariamente vizinho. Em outras palavras, queremos estudar como a introdução de ligações de longo alcance influenciam o processo de transição de fase, bem como o comportamento fractal apresentado por essas redes de autômatos, descobrindo assim, uma nova classe de universalidade.

No passado, a topologia de conexão para o modelo Kauffman foi assumida ser ou completamente aleatória, conhecida como aproximação de campo médio (modelo Kauffman usual) em que cada sítio da rede tem suas K variáveis de controle escolhidas aleatoriamente entre os N sítios da rede, ou completamente regular. Mas muitas redes biológicas, tecnológicas e sociais são melhor descritas através de grafos que apresentem um aspecto intermediário entre estes dois extremos. A topologia de mundo pequeno, parece ser muito interessante para esse propósito. Com o objetivo de obter um maior conhecimento sobre essa região intermediária, nós interpolamos entre redes regulares e redes uniformes (aleatórias), partindo de uma rede quadrada com N sítios e $K = 4$ variáveis de controle de primeiros vizinhos e introduzindo uma probabilidade de religação q (ver capítulo 3) para cada uma das K entradas, conectando um sítio a qualquer outro na rede, de tal forma que a conectividade média por sítio não seja alterada, como indicada na Fig. 6.1. Sistemas dinâmicos com acoplamento de mundo pequeno entre suas variáveis, exibem uma velocidade de propagação de transmissão de informação elevada e uma alta sincronização entre variáveis inicialmente não correlacionadas. Em particular, pequenos danos na rede, por exemplo mutações no material genético ou doenças sexualmente transmissíveis,

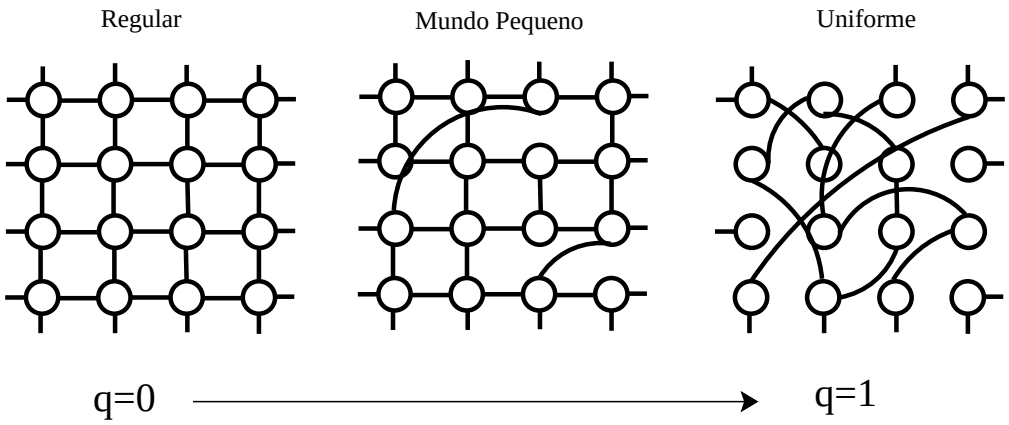

Figura 6.1: Procedimento de religação na aproximação de mundo pequeno. Nesta figura, ligações de longo alcance que estão além da região de rede representada não são mostradas.

espalham-se mais facilmente em redes com a topologia de mundo pequeno que em redes regulares.

A exemplo das simulações feitas para o caso da rede quadrada, para a aproximação de mundo pequeno ($q \neq 0$) nós também temos usado a técnica de "multispin coding" de manipulação paralela de bits para tentar determinar o ponto crítico p_c em analogia a teoria de percolação. Para esse fim, nós analisamos a massa de dano normalizado, isto é, nosso parâmetro de ordem ψ contra o campo de magnetização p. Uma vez determinado o valor do ponto crítico p_c, nós calculamos os expoentes críticos e as dimensões fractais dessas redes.

6.2 Resultados e discussão

Para encontrar o ponto crítico p_c na aproximação de mundo pequeno ($q \neq 0$), estudamos o comportamento do parâmetro de ordem ψ, definido pela Eq. 5.2, em relação a variações no valor do campo de magnetização p para redes de diferentes tamanhos quando um pequeno número de sítios centrais regularmente espassados são danificados e tomando uma média de 1000 diferentes configurações iniciais de rede para cada ponto considerado. Todos os cálculos foram feitos até 3×10^3 passos de tempo sobre um processador Intel Pentium IV, com as religações entre os sítios sendo feitas a cada passo de tempo durante toda a evolução do sistema. As velocidades de atualização de rede (varredura) utilizando um algoritimo multispin coding sobre uma máquina Intel foi a mesma para a rede quadrada, já que os testes de religação de sítios foram feitos para ambos os casos $q = 0$ e $q \neq 0$, portanto de cerca de 2.44 atualizações por nanosegundos para duas configurações de rede seguindo as mesmas regras de interações na versão *quenched* do modelo. Nossos

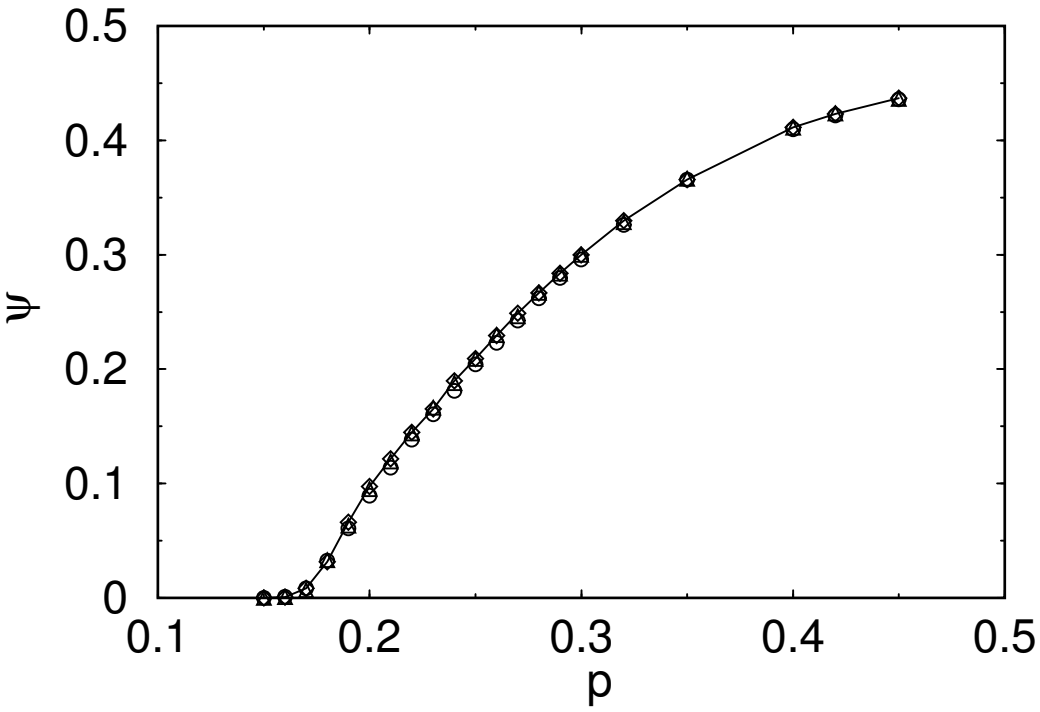

Figura 6.2: Gráfico de ψ *versus* p para o caso de rede quadrada ($q = 0,05$). Tamanhos de rede L=256; $\circ$, L=384; $\triangle$ and L=512; $\Diamond$.

resultados para o parâmetro de ordem ψ na rede com topologia de mundo pequeno são mostrado na Fig. 6.2 para $q = 0,05$ e na Fig. 6.3 para $q = 0,10$, ambos os casos para três tamanhos de rede (L = 256, 384 e 512). A transição entre a fase congelada e a fase caótica ocorre em torno de $p_c = 0,17$ para $q = 0,05$ e em torno de $p_c = 0,16$ para $q = 0,10$. Estes resultados estão bem abaixo do resultado obtido por nós para a rede quadrada ($q = 0$) de cerca de $p_c = 0,30$, usando o mesmo método. O efeito principal de se adicionar ligações de longo alcance em redes regulares como a quadrada é ampliar a região crítica da transição, em comparação com a transição de fase em redes regulares como a quadrada. Dessa forma, podemos entender a adição de ligações de longo alcance na rede como uma pertubação adicional introduzida ao sistema em comparação ao caso de redes regulares.

Nós estimamos os expoentes críticos na aproximação de mundo pequeno, considerando a fração de sítios danificados (ψ) em cada lado do ponto crítico p_c, após um intervalo de tempo suficientemente grande. Na região caótica ($p > p_c$), esta fração de sítios danificados vai a zero como $\psi \sim (p - p_c)^{\beta}$. Enquanto na região congelada, a razão do dano final $d(\infty)$ pelo dano inicial $d(0)$, varia como $\chi \sim (p_c - p)^{-\gamma}$. Em seguida, nós fizemos um colapso dos dados, a exemplo do realizado para a rede quadrada, afim de testar a consistência dos resultados obtidos, fazendo uso da relação de escala dada pela Eq. 5.4. A Fig. 6.4 mostra

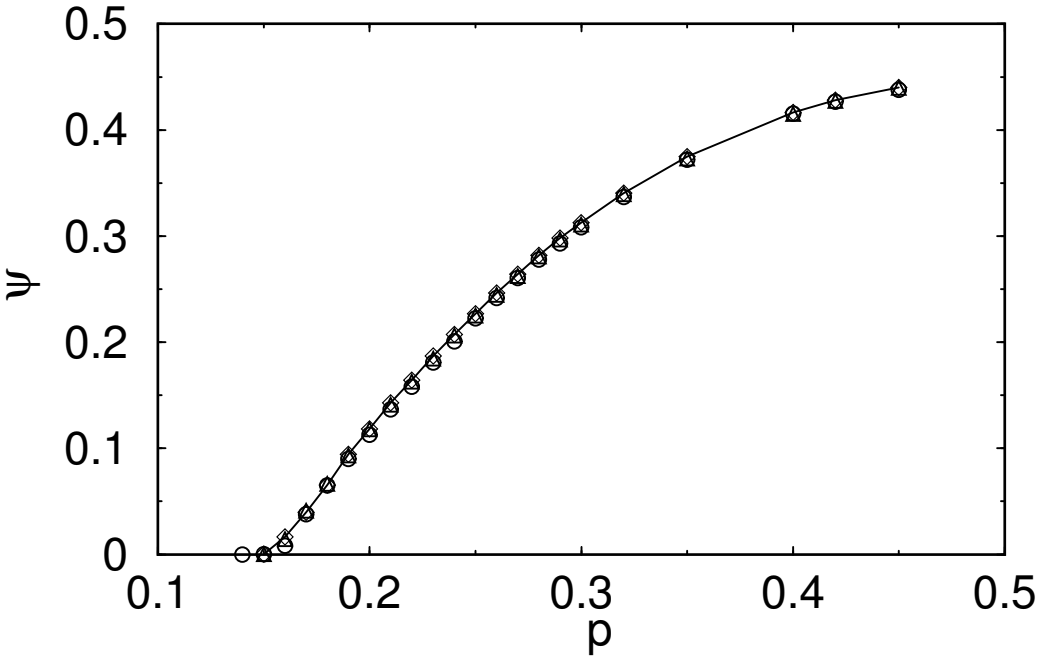

Figura 6.3: Gráfico de ψ *versus* p para o caso de rede quadrada ($q = 0,10$). Tamanhos de rede L=256; $\circ$, L=384; $\triangle$ and L=512; $\Diamond$.

o colapso dos dados na aproximação de mundo pequeno com $q = 0,05$ em $p_c = 0,17$, enquanto a Fig. 6.5 mostra o colapso dos dados nesta aproximação com $q = 0,10$ em $p_c = 0,16$. Destas Figuras, podemos observar que os pontos seguindo a relação de escala dada pela Eq. 5.4 tem uma inclinação de reta igual ao expoente crítico β para este modelo. Isto poderia novamente ser uma indicação da qualidade dos nossos dados. Nós também calculamos γ por meio da Eq. 5.3 no limiar crítico p_c. Nossas estimativas para os expoentes críticos e para o valor do ponto crítico p_c, para a aproximação de mundo pequeno ($q = 0,05$ e $q = 0,10$) são mostradas na tabela 5.1. Nessa aproximação, podemos ver facilmente dos valores mostrados nessa tabela que os expoentes críticos não obdecem à relação de hiper-escala.

Em analogia com a teoria de percolação, nós temos determinado as dimensões fractais d_0 e d_t para o modelo Kauffman na aproximação de mundo pequeno, calculando a massa de dano M_0 através da Eq. 5.5 e o tempo de toque T_t nas bordas da rede através da Eq. 5.6, para diversos tamanhos de rede L no respectivo ponto crítico p_c. As médias dos resultados para determinar ambas as dimensões d_0 e d_t, foram tomadas sobre aquelas realizações que eventualmente tocam a borda superior ou inferior da rede.

Para realizar esses cálculos, nós danificamos uma linha inteira de sítios em cada passo de tempo e deixamos o sistema evoluir até a nuvem de dano efetivamente tocar as bordas da rede. Nossos resultados para o tempo de toque T_t e a massa de dano M_0 durante

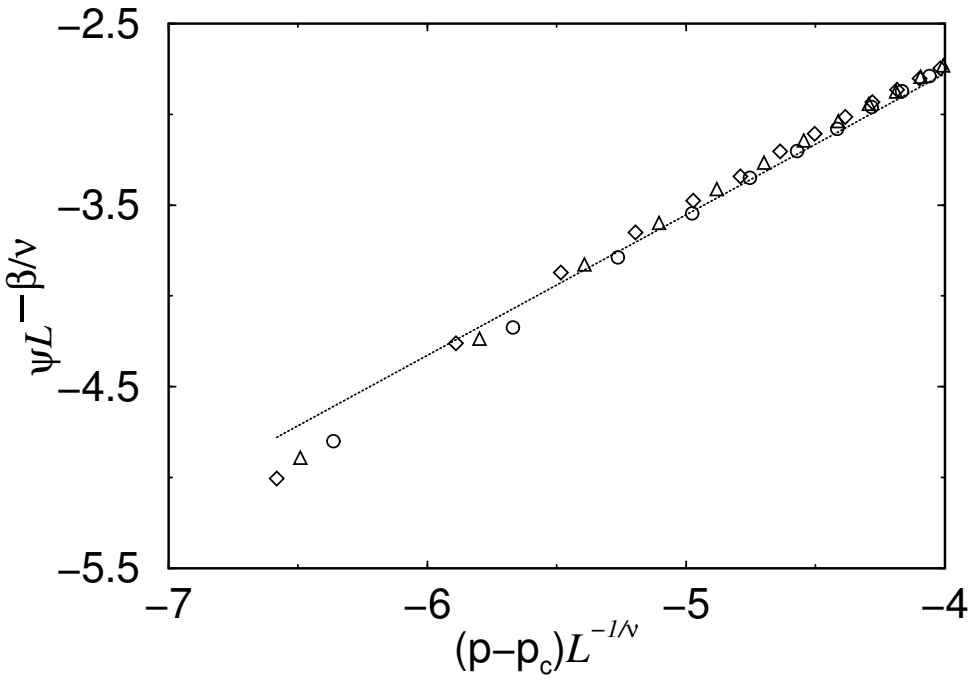

Figura 6.4: Gráfico log-log de $\psi L^{-\beta/\nu}$ *versus* $(p - p_c)L^{-1/\nu}$ na aproximação de mundo pequeno $(q = 0,05)$.Tamanhos de rede L=256; $\circ$, L=384; $\triangle$ and L=512; $\Diamond$.

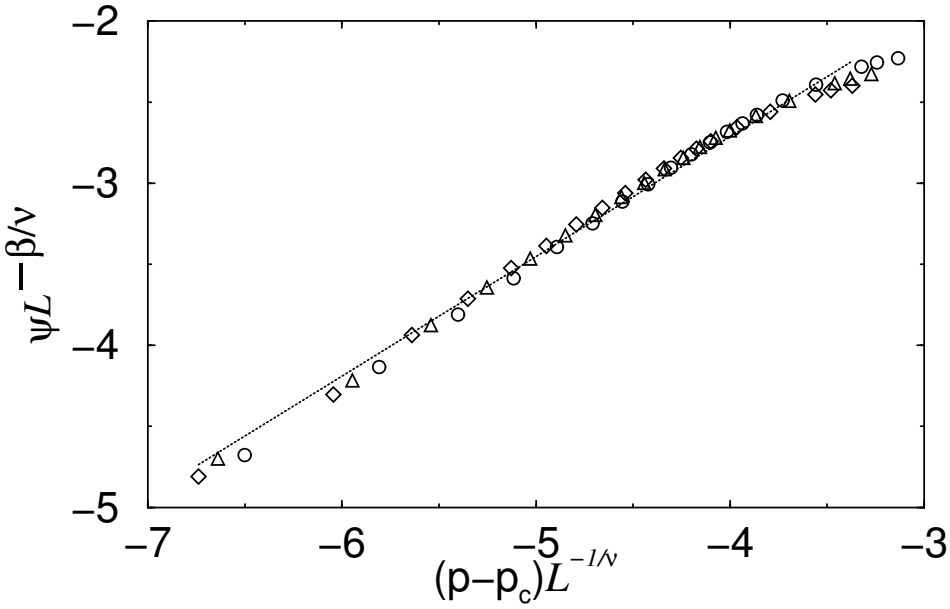

Figura 6.5: Gráfico log-log de $\psi L^{-\beta/\nu}$ *versus* $(p - p_c)L^{-1/\nu}$ na aproximação de mundo pequeno $(q = 0,10)$.Tamanhos de rede L=256; $\circ$, L=384; $\triangle$ and L=512; $\Diamond$.

esse tempo de toque foram mediadas sobre 1000 realizações para redes na aproximação de mundo pequeno e são mostradas como um gráfico log-log do tempo de toque T_t contra o tamanho do sistema L na Fig. 6.6 para $q = 0,05$ e na Fig. 6.7 para $q = 0,10$. Nossos resultados nesta aproximação são $d_0 = 1,04$ e $d_t \sim 0$ para ambos os casos analisados.

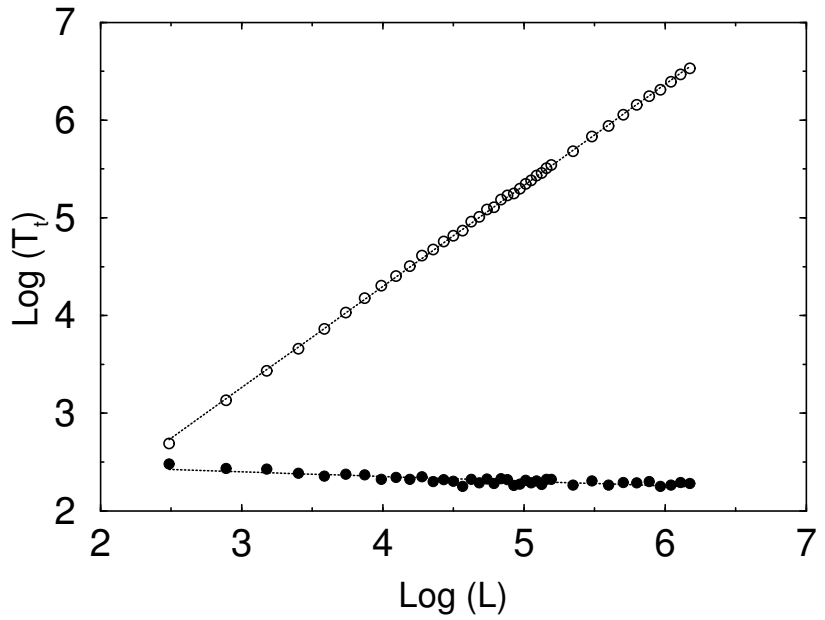

Figura 6.6: Gráfico log-log do tempo de toque T_t *versus* L; •, dano vs L; ∘ na aproximação de mundo pequeno ($q = 0,05$).

Comparativamente estes valores de dimensões fractais estão bem abaixo dos obtidos para o caso da rede quadrada, devido sobretudo a alta capacidade de propagação do dano até atingir as bordas da rede quando são inseridas ligações de longo alcance na rede. Nessa aproximação, podemos ver facilmente a partir dos valores mostrados na tabela 5.1 que os expoentes críticos não obdecem a relação de percolação que sugere $d_0 = d - \beta/\nu$, como satisfeito para o caso da rede quadrada.

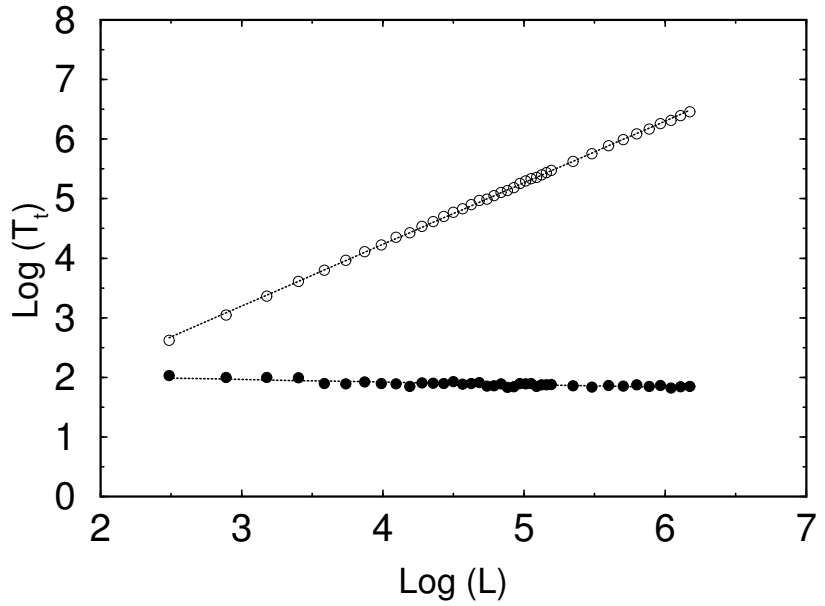

Figura 6.7: Gráfico log-log do tempo de toque T_t *versus* L; •, dano vs L; ∘ na aproximação de mundo pequeno ($q = 0,10$).

7 DINÂMICA DE REDES NA PRESENÇA DE UM DANIFICADOR

7.1 Introdução

Até agora nós temos estudado transições de fase e fractalidade tanto na aproximação regular de rede quadrada ($q = 0$) como na aproximação de mundo pequeno ($q \neq 0$), introduzindo apenas pequenos danos iniciais nas redes e verificando como e em que condições esses danos se propagam ao longo dessas estruturas. Neste capítulo, nós estudaremos transições de fase e processos dinâmicos como velocidade de propagação do dano e distribuição radial do dano total médio em ambas as aproximações, introduzindo um agente danificador ao sistema, apelidado "homem estranho". Ele recebeu este nome por conta da analogia feita com um modelo social em que todos os indivíduos de uma classe ou comunidade seguem as regras ou funções específicas para cada indivíduo, com a exceção de um único indivíduo. No nosso modelo simplificado de redes, isso é equivalente a um problema de redes Booleanas em que todos os spins são determinísticos, ou seja, obedecem sempre a mesma regra Booleana durante toda a evolução temporal do sistema, com exceção de um único spin de rede (homem estranho) que pode mudar suas regras aleatoriamente a cada passo de tempo. Este comportamento aleatório do estado do homem estranho na rede introduz uma quantidade grande de sítios danificados com o tempo, uma vez que o homem estranho produz dano durante todo o processo. Esta característica peculiar de comportamento do homem estranho, motiva uma análise comparativa do estudo de transição de fase entre o método anterior de introdução do dano, abordado nos dois últimos capítulos, e o presente método. Em adição, dada a alta eficácia de danificação obtida com a introdução do homem estranho, isso nos motiva a estudar o impacto gerado na entropia do sistema quando é adicionado o homem estranho, bem como quantidades dinâmicas como a velocidade de propagação do dano e a distribuição radial do dano total médio em

redes regulares (expoente dinâmico z).

Uma outra questão abordada neste capítulo, diz respeito à sensibilidade do processo de propagação do dano na rede quadrada com respeito ao grau de diluição em suas conexões de rede. Em particular, é mostrado que a velocidade de propagação nesse sistema é bastante sensível quando se remove aleatoriamente algumas de suas conexões. O dano permanece confinado em volta do homem estranho quando somente poucas conexões são removidas (tipicamente 20%). Isso mostra a existência de regiões instáveis (33) presentes no sistema, isto é, regiões formadas por sítios susceptíveis sobre o qual depende o processo de propagação do dano. Para fazermos tal análise, nós utilizamos um código computacional que armazena os N sítios de rede em um vetor de dimensão N, onde condições periódicas são inseridas durante esse processo de vetorização. Este procedimento de vetorização de cada spin da rede em um elemento de vetor, embora consuma mais tempo de CPU e seja mais dispendioso em termos de memória que o método de *multispin coding*, possibilita uma maior flexibilidade no que diz respeito a alterações topológicas na rede, como é o caso do modelo de diluição na rede quadrada.

Em nossas simulações, a despeito do aumento na eficiência de danificação, nós não observamos qualquer mudança apreciável no limiar de transição ao caos tanto para a aproximação de rede quadrada como para aproximação de mundo pequeno quando o homem estranho é adicionado em comparação a quando pequenos danos iniciais são inseridos no sistema. Todavia, a velocidade de propagação da nuvem de dano até tocar as bordas do sistema em ambas as aproximações é substancialmente aumentada e obedece uma lei de potência. Em especial, para a aproximação de rede quadrada, nós usamos uma técnica de extrapolação para o infinito como forma de reduzir os efeitos de tamanho finito das redes.

Neste capítulo, nós começamos analisando o impacto gerado na evolução temporal da entropia do sistema, primeiro quando ligações de longo alcance são adicionadas à rede quadrada (aproximação de mundo pequeno) e em seguida quando o homem estranho é inserido na rede. Em seguida, investigamos transições de fase quando o homem estranho é adicionado ao sistema, estudando também o impacto do processo de remoção de conexões (diluição) na rede quadrada. Depois calculamos as velocidades de propagação da nuvem de dano tanto na aproximação de rede quadrada ($q = 0$) como na aproximação de mundo pequeno ($q \neq 0$), calculando seus respectivos expoentes críticos de velocidade α_q. Finalmente, calculamos a distribuição radial do dano total médio na rede quadrada e a partir dele o seu expoente dinâmico (z).

7.2 Resultados e discussão

Para termos uma idéia de como a introdução de ligações de longo alcance, bem como quando se introduz o homem estranho ao sistema, perturba a evolução temporal de uma rede regular como a quadrada, nós fizemos cálculos numéricos da entropia total S da rede, com o sistema partindo de uma dada configuração inicial em um *ensemble* equiprovável e deixando o sistema evoluir de acordo com um conjunto de funções Booleanas de acoplamento $\{f_i\}$ dos sítios da rede. Como dito anteriormente no capítulo 1, a entropia total do sistema pode ser definida como o logaritmo do número médio de estados possíveis do sistema Ω, isto é, $S = \ln \Omega$ ou em termos da probabilidade de ocupação de um dado estado do sistema p_i como

$$S = \sum_i p_i \ln p_i. \tag{7.1}$$

Inicialmente, nós calculamos o valor da entropia S para uma rede quadrada com $N = 16$ sítios fazendo mudar apenas o valor do campo de magnetização p, onde todo o espaço de configurações com $2^{16} = 65536$ configurações possíveis foram geradas para um *ensemble* com 1000 configurações iniciais de rede, para uma dada realização do modelo Kauffman. A Fig. 7.1 mostra a evolução temporal da entropia total S durante os primeiros 100 passos de tempo para cinco valores diferentes de p. Para valores de p abaixo do ponto crítico dessa rede ($p_c \backsimeq 0,25$), o valor da entropia vai a zero após alguns poucos passos de tempo, enquanto para valores de p acima desse ponto crítico o valor da entropia estabiliza em algum valor abaixo do valor de entropia máxima $S = 1$, deixando clara a entrada do sistema em um ciclo limite onde um mesmo número de configurações são igualmente possíveis. Este decréscimo no número de configurações acessíveis é uma característica direta da irreversibilidade desses sistemas. Podemos ver da Fig. 7.1 que durante o regime transiente, isto é, antes do sistema entrar no ciclo limite, o número de estados acessíveis é maior quanto maior for o valor do parâmetro p. Em seguida, nós fomos progressivamente aumentando o número de conexões de longo alcance na rede, introduzindo uma probabilidade de religação q para essa rede sob um campo de magnetização $p = 0,28$, como esta ilustrado na Fig. 7.2 onde cinco valores de q foram considerados, partindo desde o caso de rede quadrada ($q = 0$) até o caso de rede uniforme ou aleatória ($q = 1,00$). Podemos ver da Fig. 7.2 que o resultado de se introduzir ligações de longo alcance na rede é diminuir o número de estados acessíveis do sistema à medida que o valor de q aumenta. Na linguagem de teoria de informação, a memória da rede é cada vez mais perdida quanto maior for o número de conexões de longo alcance introduzidas.

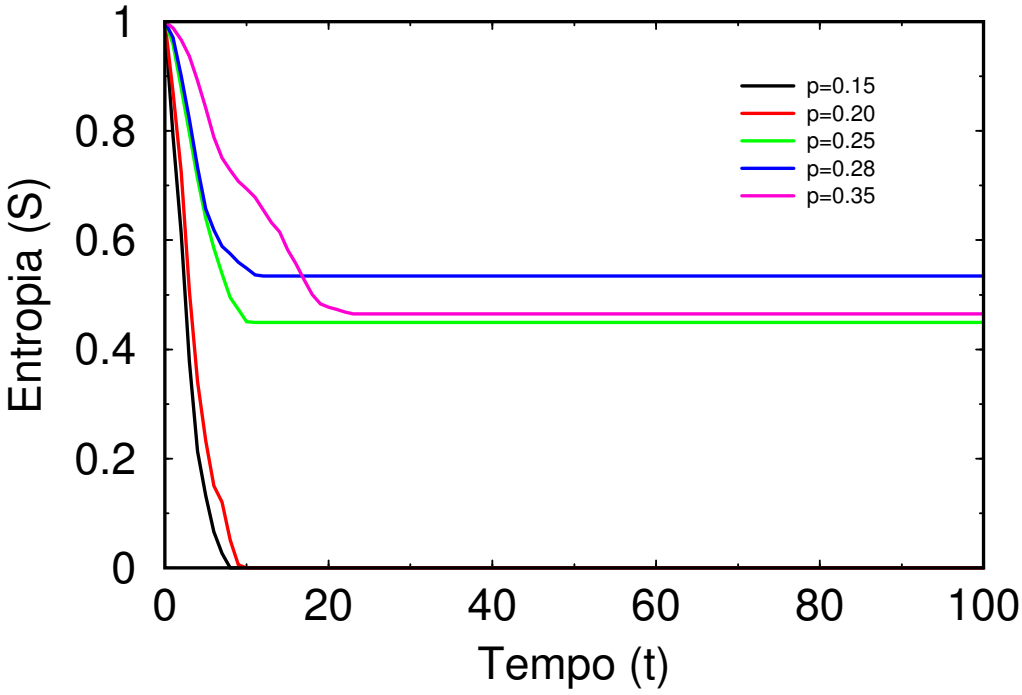

Figura 7.1: Gráfico mostrando a evolução temporal da entropia total S na aproximação de rede quadrada ($q = 0$) com 16 sítios para cinco valores do parâmetro p, para uma dada realização do modelo Kauffman, em um *ensemble* com 1000 configurações iniciais escolhidas aleatoriamente.

De particular interesse é, contudo, quando adicionamos o homem estranho ao sistema. Na Fig. 7.3, são mostrados nossos resultados para o cálculo da entropia quanto adicionamos o homem estranho na rede comparativamente ao caso de rede quadrada sem a presença do homem estranho para dois valores de p. O efeito principal gerado pelo homem estranho é introduzir uma desordem adicional ao sistema, aumentando o valor de sua entropia, e assim, o número de estado acessíveis da rede.

Como um teste preliminar acerca de como o homem estranho age em um sistema de células autômatas, nós simulamos duas réplicas de uma rede quadrada para analisar a evolução temporal da distância de Hamming (ver Eq. 5.1) até 1000 passos de tempo para homens estranhos com diferentes padrões de comportamento na rede, especificada pela probabilidade ϖ de o homen estranho modificar aleatoriamente sua regra num dado instante de tempo. Podemos entender a probabilidade ϖ como uma taxa de atividade do homem estranho. Assim, se considerarmos um homem estranho com $\varpi = 0,50$, então para cada passo de tempo ele tem uma chance de 50% de aleatoriamente modificar sua regra. Nas Figs. 7.4 e 7.5, nós mostramos a evolução temporal da distância de Hamming em uma rede quadrada com 6400 sítios e cinco diferentes valores de ϖ em $p = 0,30$ e $p = 0,40$ respectivamente, mediado sobre 100 diferentes configurações iniciais.

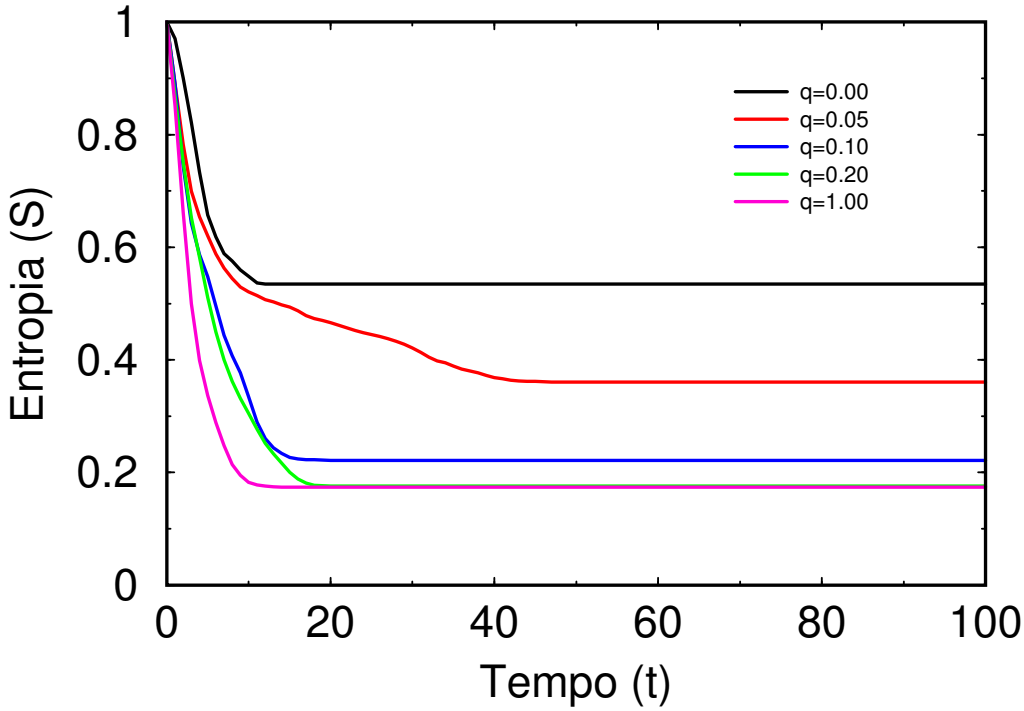

Figura 7.2: Gráfico mostrando a evolução temporal da entropia total S em uma rede quadrada com 16 sítios quando são inseridos ligações de longo alcance (casos $q \neq 0$) para um campo de magnetização de $p = 0,28$, para uma dada realização do modelo Kauffman, em um *ensemble* com 1000 configurações iniciais escolhidas aleatoriamente.

Como podemos observar das Figs. 7.4 e 7.5, mudanças nos valores da probabilidade ϖ são somentes relevantes no estado transiente para $p = 0,40$. Mesmo para valores um tanto pequenos de ϖ como $0,01$, o sistema converge rapidamente em direção a seu estado estacionário, onde a distância de Hamming não muda apreciavelmente com o tempo. Devido ao pouco impacto pela mudança de ϖ quando consideramos o desenvolvimento temporal assintótico do sistema, de agora em diante nós sempre consideraremos $\varpi = 1,00$ ao longo desse trabalho. Todavia, uma variação apreciável de ϖ poderia implicar numa mudança significativa nos tempos necessários para a nuvem de dano tocar as bordas da rede, já este processo acontece eminentemente no regime transiente. Um aspecto interessante do problema é procurar transição de fase na rede quadrada quando o homem estranho é introduzido no sistema, onde temos investigado o impacto causado quando se remove aleatoriamente algumas de suas conexões. Com este procedimento de remoção de conexões de rede, as variáveis de controle (*inputs*) de primeiros vizinhos podem variar de $K = 1$ a $K = 4$ para cada sítio. Este procedimento foi realizado introduzindo uma probabilidade de conexão p_{link} para cada um dos quatro *inputs* dos sítios e impondo pelo menos um *input* por sítio de rede. Os sítios da rede são tratados um de cada vez. Em sentido horário se sorteia um número aleatório para cada um dos seus quatro *inputs*

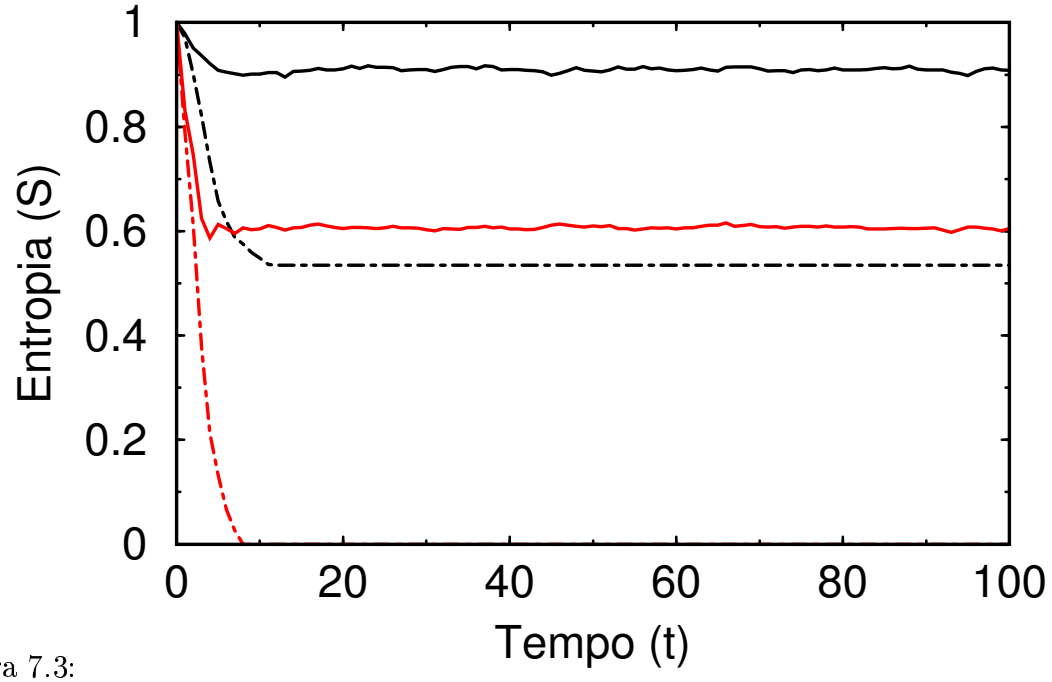

Figura 7.3:
Gráfico mostrando a evolução temporal da entropia total S em uma rede quadrada com 16 sítios quando é inserido o homem estranho no sistema (linhas contínuas: vermelha ($p = 0,15$) e preta ($p = 0,28$)) em comparação ao caso análogo com ausência do homem estranho na rede (linhas descontínuas: vermelha ($p = 0,15$) e preta ($p = 0,28$)), para uma dada realização do modelo Kauffman, em um *ensemble* com 1000 configurações iniciais escolhidas aleatoriamente.

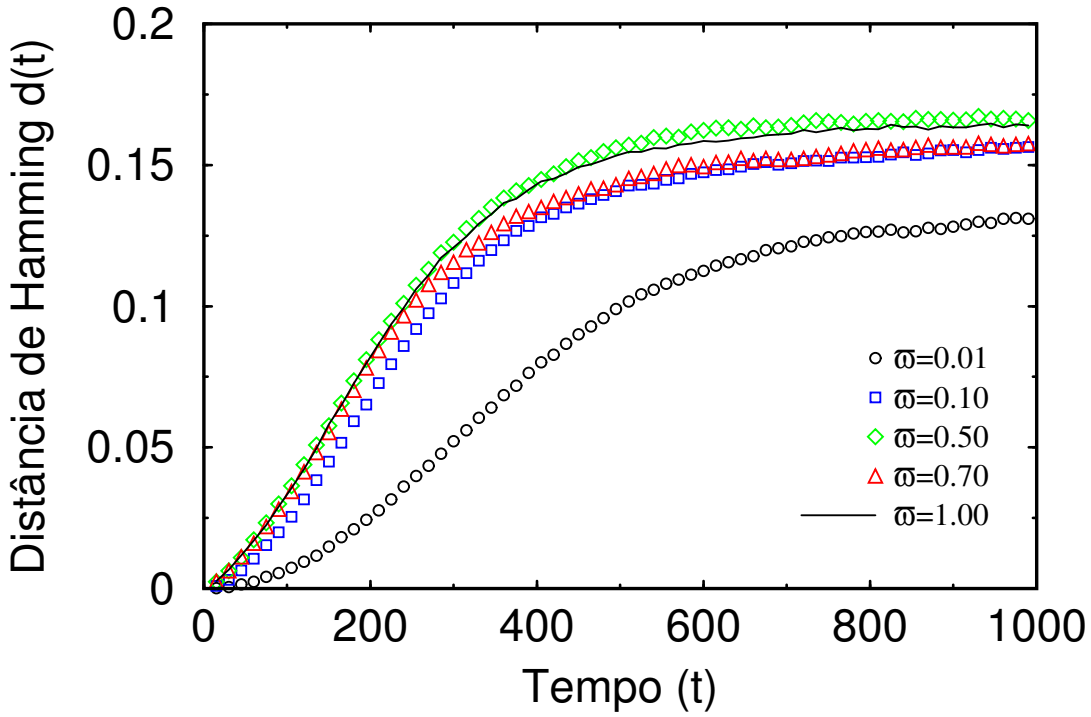

Figura 7.4: Evolução temporal da distância de Hamming em uma rede 80×80 para cinco valores diferentes de ϖ em $p = 0,30$.

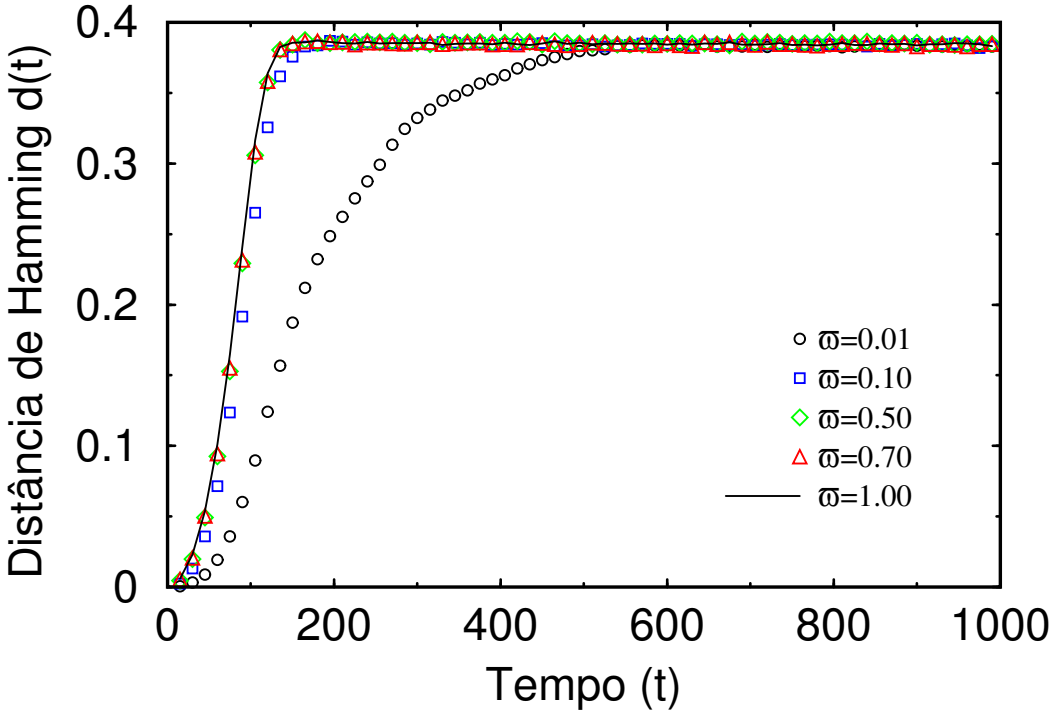

Figura 7.5: Evolução temporal da distância de Hamming em uma rede 80×80 para cinco valores diferentes de ϖ em $p = 0,40$.

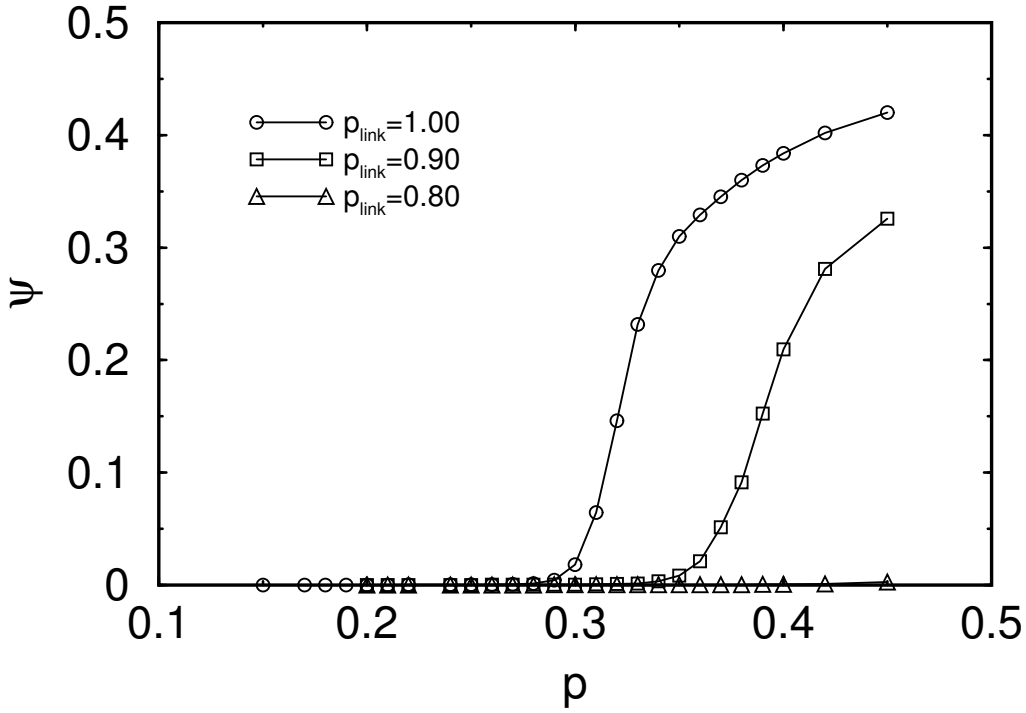

Figura 7.6: Transição de fase em uma rede 500×500 para três valores da probabilidade p_{link}. O ponto crítico em $p_{link} = 1,00$; $\circ$, é 0.31, enquanto em $p_{link} = 0,90$; $\square$, é $0,37$ e em $p_{link} = 0,80$; $\triangle$, há ausência de transição de fase.

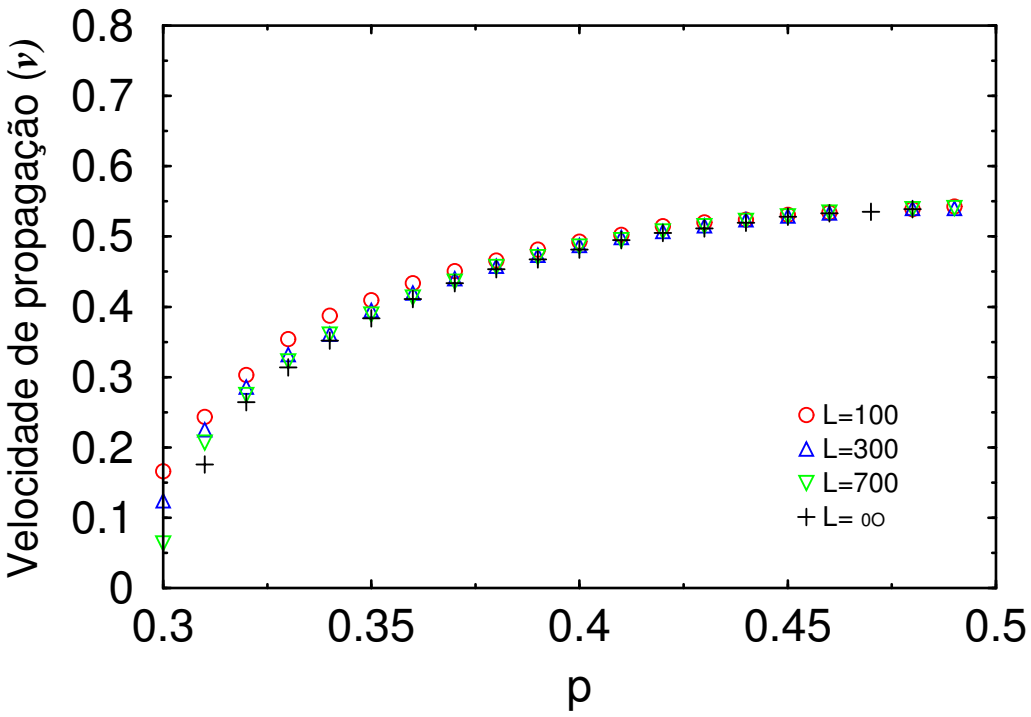

Figura 7.7: Velocidade de propagação do dano na aproximação de rede quadrada ($q = 0$), para redes de tamanhos $L = 100$; $\circ$, 300; $\triangle$, 700;$\bigtriangledown$, junto com uma extrapolação desses dados ($L \to \infty$); $+$.

$\{\sigma_j\}$; se o número sorteado for menor que p_{link} então esse *input* é uma variável da função Booleana f_i (Eq. 2.1), de outra forma é simplesmente descartada. Este procedimento de "looping" é repetido até que pelo menos um *input* seja uma variável da função Booleana. Dessa forma sítios desconectados foram evitados em nossas simulações. Fizemos isso para uma rede quadrada de tamanho 500×500 através do cálculo do parâmetro de ordem ψ (Eq. 5.2) mediado sobre 100 realizações com até 1000 passos de tempo, para três valores diferentes de p_{link}, como esta mostrado na Fig. 7.6. A partir dos resultados mostrados nessa figura, duas conclusões podem ser tiradas: Por um lado, a atividade contínua do homem estranho não afeta o valor do ponto crítico que para rede quadrada esta em aproximadamente $0,31$ de acordo com a Ref. (69). Um mesmo comportamento é esperado quando se considera transições de fase na aproximação de mundo pequeno (73). Por outro lado, o espalhamento do dano na rede quadrada é bastante sensível com respeito à remoção de algumas de sua conexões. Isso é devido à existência de regiões instáveis na rede, da qual depende fortemente o processo de propagação do dano. Como podemos ver da Fig. 7.6, tomando uma probabilidade de conexão $p_{link} = 0,90$, o valor do ponto crítico na rede é aumentado para $p = 0,37$. Ainda mais drástico é quando consideramos um $p_{link} = 0,80$, onde não encontramos mais uma transição de fase, ficando o sistema permanentemente na fase congelada.

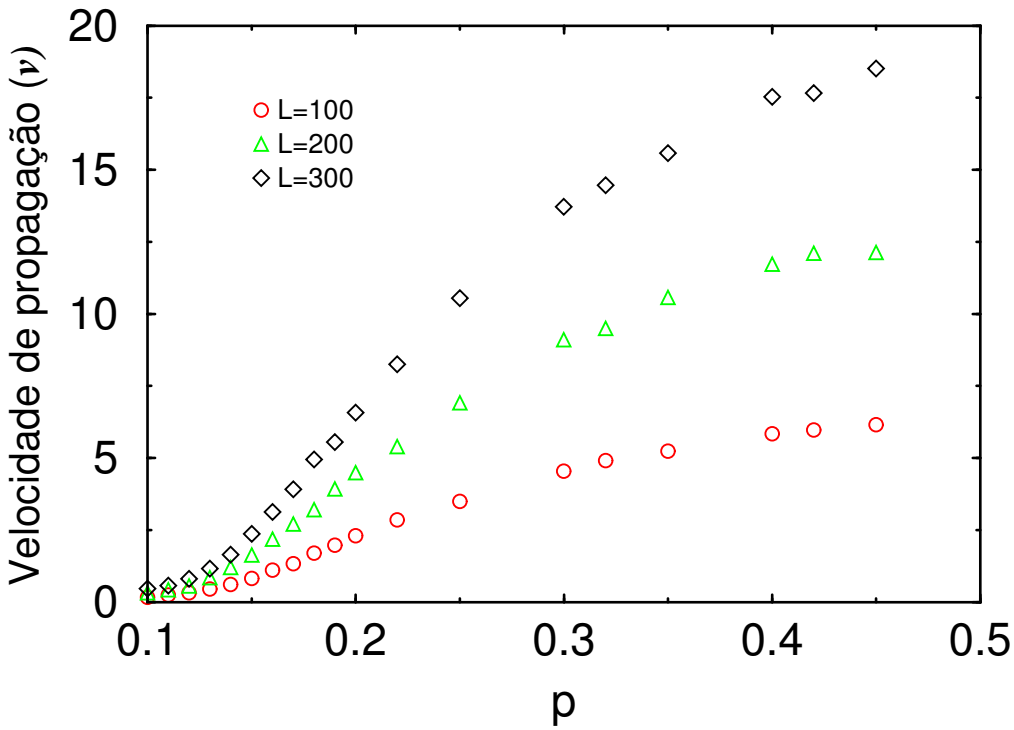

Figura 7.8: Velocidade de propagação do dano na aproximação de mundo pequeno ($q \neq 0$), para redes de tamanhos $L = 100$; $\circ$, 200; $\triangle$, e 300; $\Diamond$.

Tirando vantagem da alta capacidade do homem estranho em provocar dano, nós temos realizado diversos cálculos numéricos afim de calcular a velocidade de propagação do dano v, medindo o tempo gasto para a nuvem de dano efetivamente tocar as bordas da rede, onde o homem estranho é deliberadamente colocado em algum sítio central da rede, tanto na aproximação de rede quadrada ($q = 0$) como na aproximação de mundo pequeno ($q \neq 0$), ambos na versão *quenched* do modelo. Para o caso da aproximação de

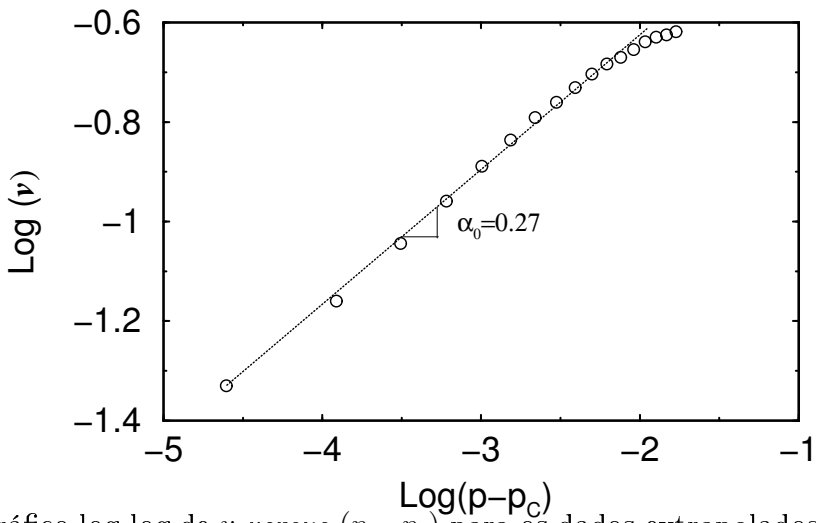

Figura 7.9: Gráfico log-log de v *versus* $(p - p_c)$ para os dados extrapolados da Fig. 7.7 na aproximação de rede quadrada ($q = 0$).

rede quadrada ($q = 0$), nós aplicamos uma técnica de extrapolação como forma de reduzir os efeitos de tamanho finito das redes. Esta extrapolação foi realizada analisando como a velocidade de propagação do dano v depende do recíproco do tamanho da rede ($1/L$) quando tomamos o limite $L \to \infty$ para cada valor de p considerado. A Fig. 7.7 mostra as velocidades de propagação do dano v em redes quadradas $L \times L$, com tamanhos $L = 100$, 300, 700 e $L \to \infty$ (dados extrapolados) mediados sobre 100 diferentes realizações para cada parâmetro p, enquanto a Fig. 7.8 mostra a velocidade de propagação na aproximação de mundo pequeno em $q = 0,05$ para redes de tamahos $L = 100, 200$ e 300 mediado sobre 1000 diferentes realizações. Dessa figura, é notável um considerável aumento da velocidade de propagação em relação ao caso de rede quadrada mostrado na Fig. 7.7, bem como uma clara dependência dessa velocidade de propagação com o tamanho do sistema. Em adição, para o caso de rede quadrada, a velocidade de propagação do dano v é praticamente constante acima de $p = 0,45$. Em outras palavras, faz pouca diferença para a dinâmica do sistema se estamos em $p = 0,45$ ou em $p = 0,50$.

Uma vez calculadas as velocidades de propagação do dano v em ambas as aproximações, em seguida nós fizemos uma estimativa dos expoentes críticos α_q da velocidade. Para a aproximação de rede quadrada ($q = 0$), a Fig. 7.9 mostra um gráfico log-log de v contra $(p - p_c)$ dos dados extrapolados mostrados na Fig. 7.7, nossa estimativa para o expoente crítico de velocidade na rede quadrada ($q = 0$) é $\alpha_0 \approx 0,27$, enquanto na Fig. 7.10 um colapso dos dados para o caso da aproximação de mundo pequeno em $q = 0,05$ é obtido tomando o log-log de v/L contra $(p - p_c)$ dos dados mostrados na Fig. 7.8,

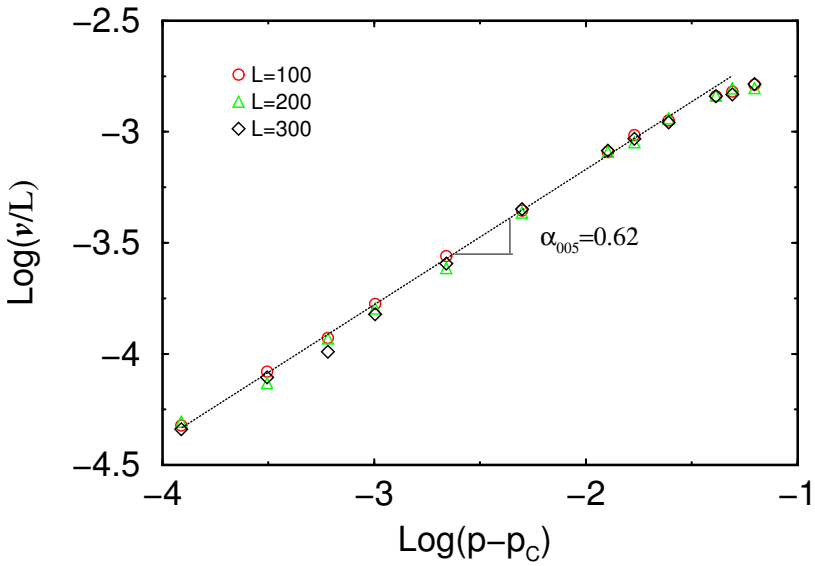

Figura 7.10: Gráfico log-log de v/L *versus* $p - p_c$ dos dados da Fig. 7.8 na aproximação de mundo pequeno ($q = 0,05$). Tamanhos de rede $L = 100$; $\circ$, 200; $\triangle$, e 300; $\Diamond$.

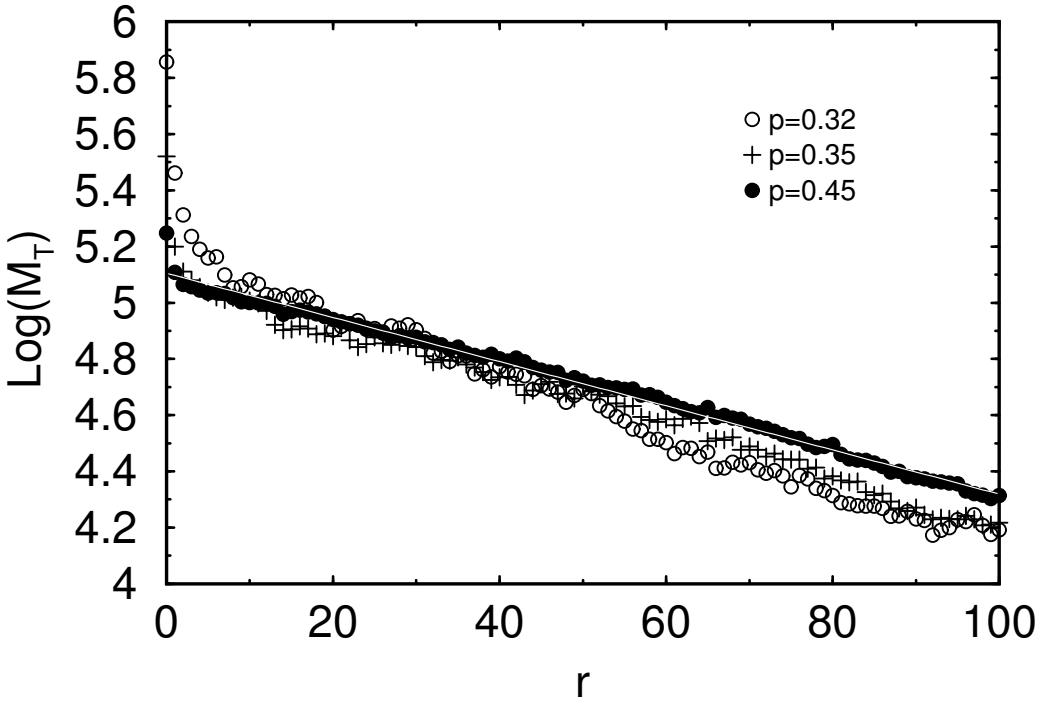

Figura 7.11: Gráfico semi-log do dano total médio M_T *versus* a distância r do homem estranho em uma rede quadrada 200×200 para três valores do parâmetro p acima do ponto crítico, a saber, $p = 0.32$; $\circ$, 0.35; $+$, e 0.45; $\bullet$.

sendo $\alpha_{005} \approx 0,62$ nossa estimativa para o expoente crítico de velocidade em $q = 0,05$. Desses resultados, podemos ver claramente que a velocidade de propagação do dano na aproximação de mundo pequeno ($q \neq 0$) é muito maior que na rede quadrada ($q = 0$) e sobretudo, depende linearmente do tamanho linear da rede (L). Isso está de acordo com a constância da dimensão fractal de tempo d_t, obtida no capítulo anterior.

Uma outra questão de interesse é saber como a nuvem de dano emitida pelo homem estranho evolui com o tempo quando levamos em consideração diferentes valores do campo de magnetização p. Para responder a esta questão, nós temos realizado simulações afim de determinar o expoente dinâmico z do processo de propagação do dano tanto na rede quadrada como em agregados especiais de percolação invasiva (ver próximo capítulo). Inicialmente, nós determinamos a distribuição radial do dano total médio M_T, sendo definido como o número médio de vezes que os sítios ao longo de uma linha reta partindo do homem estranho, colocado em um sítio central da rede, têm sido danificados durante todo o desenvolvimento temporal da rede após o tempo transiente do processo. Na prática, isso foi realizado através de um armazenamento vetorial do dano total[1] ao longo de uma

[1] O dano total fornece o dano acumulado durante todo o tempo de interação na rede, ou seja, o número de vezes que os sítios da rede foram danificados ao longo de toda evolução temporal do sistema, diferindo do dano real que fornece o número de sítios danificados num dado passo de tempo.

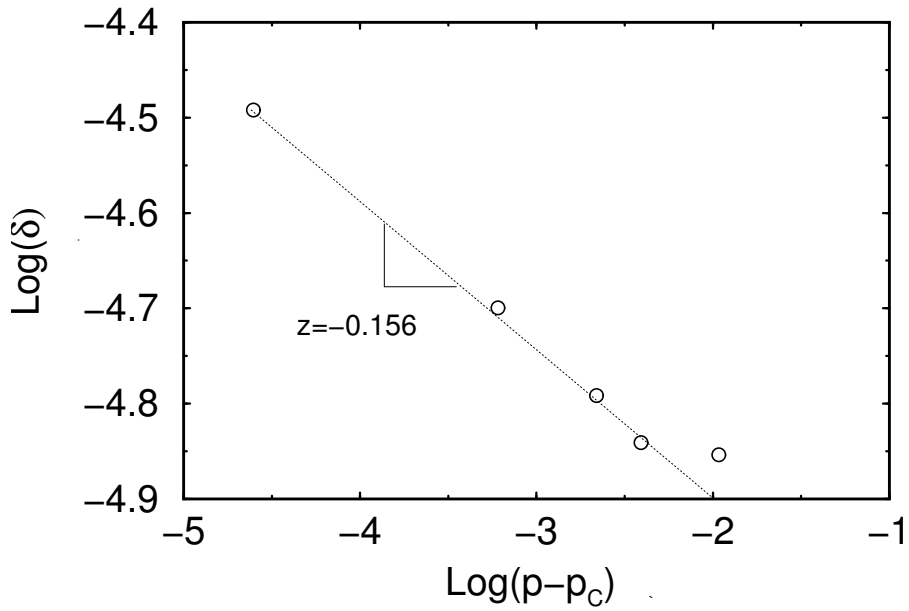

Figura 7.12: Gráfico log-log do comprimento característico inverso δ *versus* $(p - p_c)$ em uma rede 200×200. A inclinação da reta fornece o valor para o expoente dinâmico z.

linha reta partindo do homem estranho em uma rede 200×200 sobre 1000 realizações do modelo. O tempo de evolução da rede foi de duas vezes o tempo de toque T_t nessa rede, como forma de sair do regime transiente do processo para cada valor do parâmetro p considerado. A Fig. 7.11 mostra o gráfico semi-log do M_T contra a distância r do homem estranho para três valores diferentes de p acima do ponto crítico ajustando M_T por

$$M_T = A \exp(\delta r - \phi), \tag{7.2}$$

onde A e ϕ são constantes. O expoente dinâmico z é definido por

$$\delta \propto (p - p_c)^z, \tag{7.3}$$

onde δ é o comprimento característico inverso e p_c é o ponto crítico. Assim, podemos determinar o expoente dinâmico z fazendo um gráfico log-log de δ vs $(p - p_c)$, como mostrado na Fig. 7.12 para uma rede quadrada 200×200 com cinco valores de p considerados. Nossa estimativa para o expoente dinâmico z na rede quadrada foi de $z \approx -0.156$, onde o sinal negativo significa que o dano acumulado decresce quando se fica cada vez mais distante do ponto crítico p_c da rede, uma vez que menos tempo de interação é necessário até a nuvem de dano tocar as bordas da rede, e portanto, há menos dano acumulado na rede para valores cada vez mais distantes do ponto crítico.

8 DINÂMICA EM UM AGREGADO DE PERCOLAÇÃO INVASIVA

8.1 Introdução

A exemplo do estudo feito no capítulo anterior para redes quadradas e de sua variação na aproximação de mundo pequeno quando é inserido o homem estranho no sistema, nesse capítulo nós procedemos uma análise semelhante para uma estrutura de agregado de percolação invasiva confinada em uma região quadrada $L \times L$. Nesse tipo de estrutura, as conexões de cada sítio são dadas pelo crescimento do agregado de percolação invasiva sem aprisionamento (ver capítulo 4), a partir de um sítio semente localizado na região central da rede quadrada. Este processo de crescimento do agregado termina após um determinado número de vezes que o agregado em formação atinge as bordas da rede quadrada (condição de saturação de borda), de tal forma que uma quantidade maior de sítios pertencentes à rede quadrada sejam adicionados ao agregado de percolação como forma de garantir a propagação do dano, provocado pelo homem estranho, até os limites do agregado. A principal motivação para esse estudo é a própria característica de agregado de percolação formado pela nuvem de dano na rede quadrada para pontos acima do ponto crítico p_c da rede, sendo portanto a estrutura de agregados um limite topológico para que o dano possa se propagar pelo sistema.

Neste capítulo, nós estudaremos transições de fase e processos dinâmicos como velocidade de propagação do dano v e distribuição radial do dano total médio M_T em agregados especiais de percolação invasiva (HBSC, sigla da palavra inglesa *high boundary-saturation cluster*), introduzindo o homem estranho ao sistema, tanto na versão *quenched* como na versão *annealed* do modelo Kauffman. Em particular, é visto que para a versão *annealed* do modelo o dano se propaga mais facilmente e com maior velocidade que para a versão *quenched*, além de ter um expoente dinâmico z menor.

8.2 Resultados e discussão

O processo de crescimento do aglomerado de percolação invasiva estudado aqui é parecido com o discutido no capítulo 4, mas diferente em seus detalhes. Estes aglomerados são criados partindo de uma rede quadrada e atribuindo a cada sítio da rede um número aleatório entre 0 e 1. O algoritmo para criar um agregado típico é dado da seguinte forma: Primeiro se escolhe um sítio central na rede para ser a semente inicial do agregado. Em seguida, escolhe-se o sítio com o menor número aleatório entre seus vizinhos mais próximos e adiciona-se este sítio ao aglomerado. Isso define um novo conjunto de primeiros vizinhos para o agregado, isto é, uma nova borda do agregado. Então novamente se conecta ao agregado o sítio com menor número aleatório pertencente a este novo conjunto de sítios vizinhos e assim por diante. Para realizar este procedimento de busca do menor número pertencente a borda do agregado em cada passo de tempo, nós utilizamos um algoritmo de sorteio chamado *heapsort*, em que os elementos de uma lista são organizados em uma estrutura de dados chamado *heap*, de tal forma que que o elemento raiz (elemento com o menor número) é colocado no final da lista e em seguida retirado dela, sempre mantendo a estrutura *heap* para uma próxima retirada, e resultando num tempo de pior cenário de $\Theta(n \log n)$. O processo de crescimento continua até o agregado tocar as bordas da rede quadrada um certo número de vezes. Estes múltiplos toques nas bordas da rede quadrada têm o efeito de aumentar o número de conexões no agregado dentro dessa rede. Tal procedimento foi necessário para garantir a propagação do dano através de todo o sistema. Nós chamamos este agregado, construido com este procedimento, de HBSC (*high boundary-saturation cluster*). Em nosso algortimo, o número de sítios tocando as bordas da rede quadrada é controlado pela variável Σ_s (saturação de borda), definida entre 0 e 1. De tal forma que quando $\Sigma_s = 0,80$, cerca de 80% dos sítios que compõem a borda da rede quadrada farão parte desse agregado. Uma vez criado HBSC, o homem estranho é inserido na semente inicial de uma das réplicas do agregado e a comparação entre eles é realizada ao longo de toda evolução temporal do sistema. As Figs. 8.1 e 8.2 mostram HSBC's confinado numa rede quadrada de tamanho 200×200, respectivamente para $\Sigma_s = 0,10$ e $\Sigma_s = 0,40$, onde alguns sítios danificados por conta da ação do homem estranho, após 100 interações de rede, são também mostrados.

De forma semelhante a feita para a rede quadrada, nós fizemos uma análise para o parâmetro de ordem ψ em HBSC's construidos a partir de uma rede 100×100, onde N na Eq. 5.1 é o número de sítios em um agregado típico. Nossos resultados são mostrados na Fig. 8.3 para três valores da variável de saturação de borda Σ_s. Particularmente, para

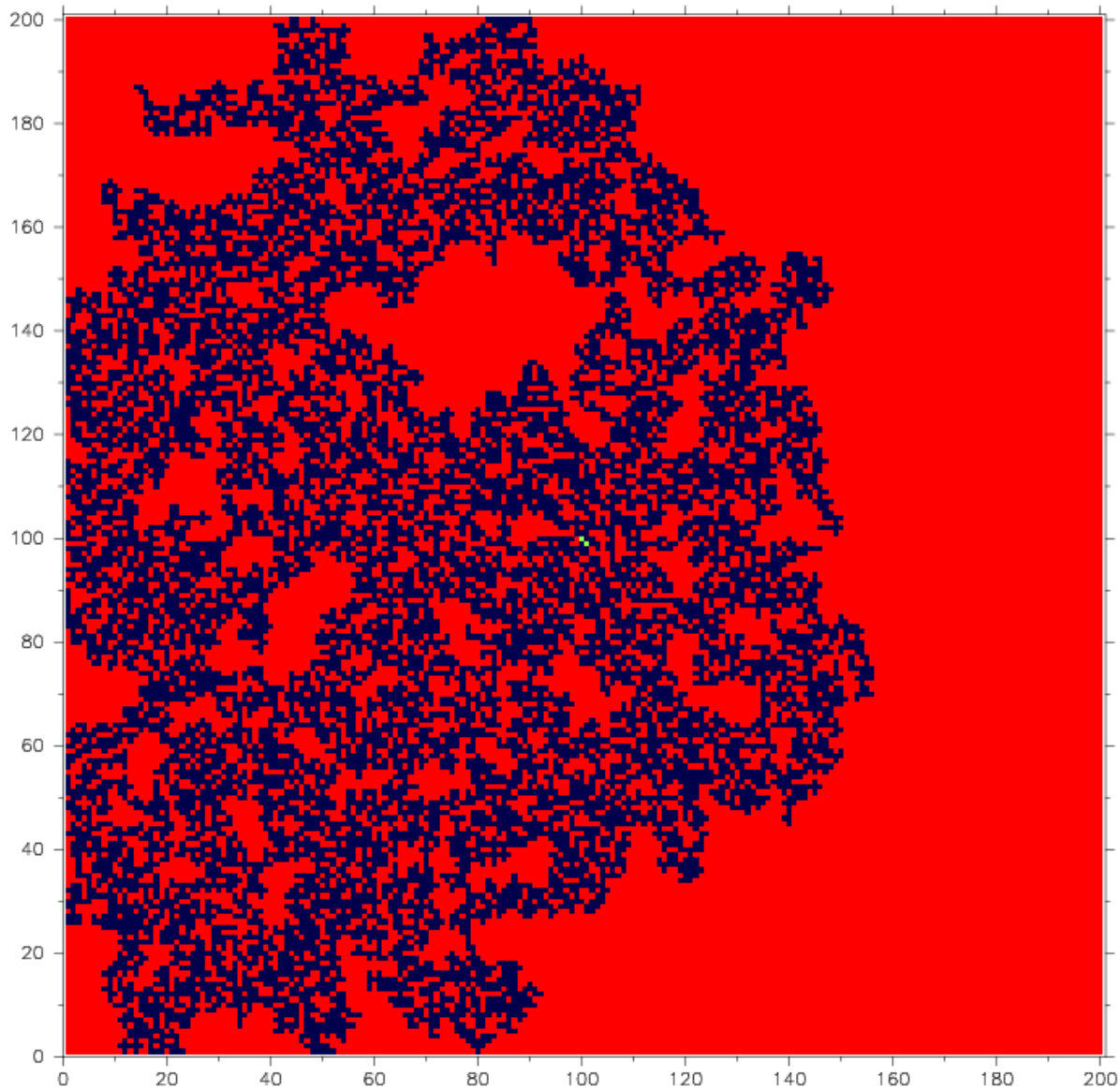

Figura 8.1: Estrutura de HBSC confinado em uma rede quadrada 200×200 para uma saturação de borda $\Sigma_s = 0,10$, visto após 100 interações de rede. Os sítios azuis representam sítios pertencentes ao HBSC, enquanto os sítios verdes representam sítios danificados pelo homem estranho localizado no sítio semente do agregado.

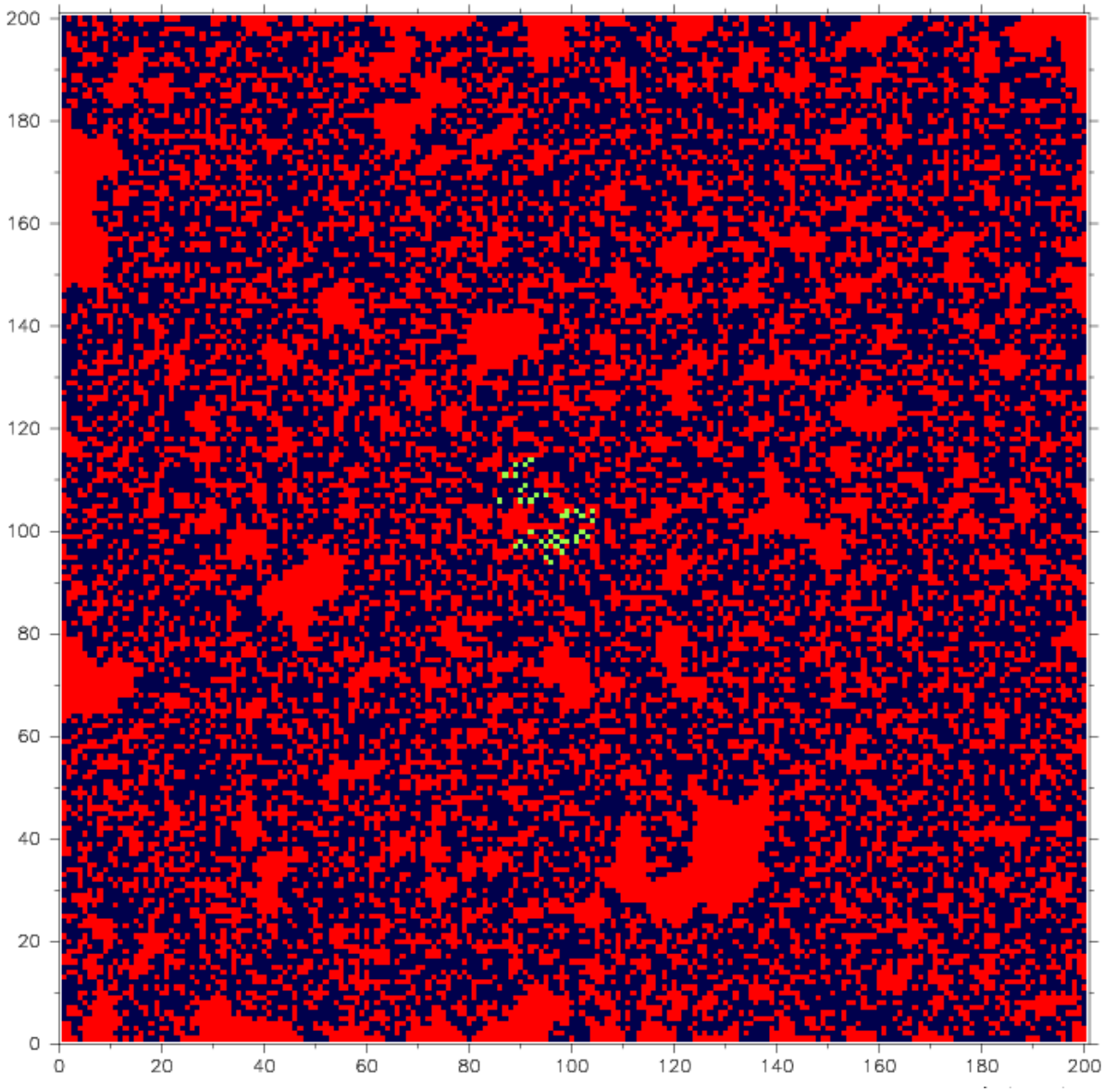

Figura 8.2: Estrutura de HBSC confinado em uma rede quadrada 200×200 para uma saturação de borda $\Sigma_s = 0,40$, visto após 100 interações de rede. Os sítios azuis representam sítios pertencentes ao HBSC, enquanto os sítios verdes representam sítios danificados pelo homem estranho localizado no sítio semente do agregado.

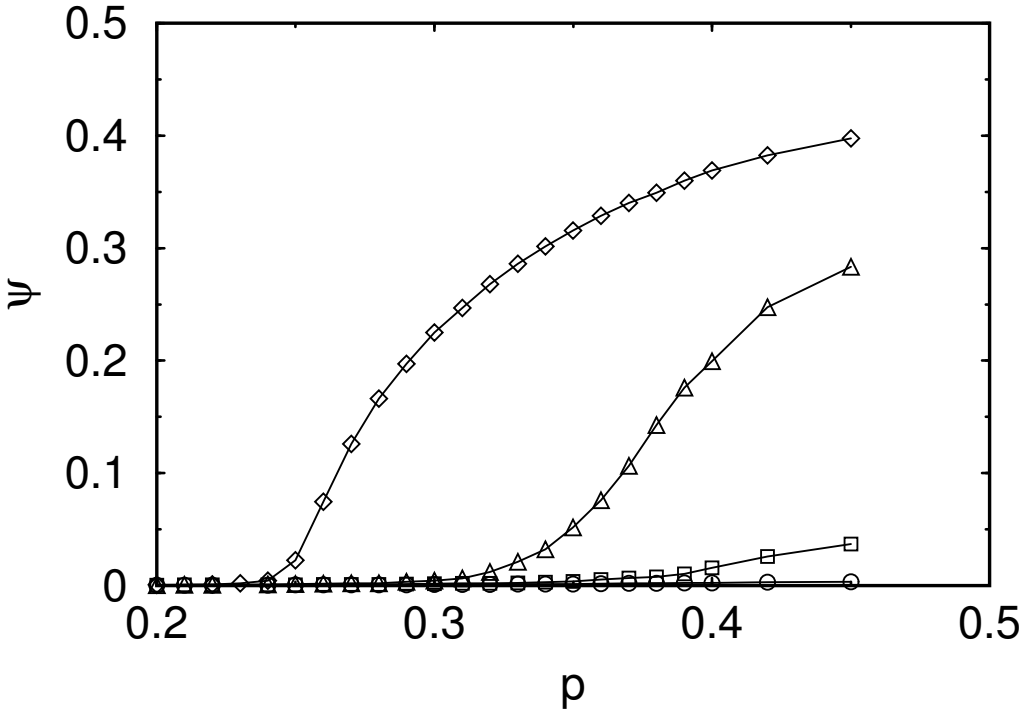

Figura 8.3: Transição de fase em um HBSC confinado em uma rede 100×100 para três valores de saturação de borda Σ_s na versão *quenched*: $\Sigma_s = 0,70$; $\circ$, $\Sigma_s = 0,80$; $\square$ e $\Sigma_s = 0,90$; $\triangle$. Em $\Sigma_s = 0,90$, é também mostrado nosso resultado na versão *annealed*; $\Diamond$.

$\Sigma_s = 0,90$, é mostrada a curva para o parâmetro de ordem ψ támbem na versão *annealed* do modelo. Nós podemos observar uma transição de fase em torno de $p_c = 0,36$ na versão *quenched* e em torno de $p_c = 0,26$ na versão *annealed*. Para outros valores de Σ_s não foram observadas transições de fase na versão *quenched* do modelo, de tal forma que, para efeito de comparação entre ambas as versões, ao longo desse capítulo analisaremos apenas HBSC's com uma saturação de borda de $\Sigma_s = 0,90$. Para essa saturação de borda, a Fig. 8.4 mostra o gráfico log-log de ψ contra $(p - p_c)$ em ambas as versões do modelo. Nossas estimativas para os expoentes críticos β para ambas as versões *quenched* e *annealed* são:

$$\beta^{annealed} = 0,42 \pm 0,02$$
$$\beta^{quenched} = 0,47 \pm 0,02.$$

Devido à alta capacidade do homem estranho em provocar dano, nós temos realizado diversos cálculos numéricos afim de calcular a velocidade de propagação do dano v, medindo o tempo gasto para a nuvem de dano efetivamente tocar as bordas da rede, sendo o homem estranho deliberadamente colocado no sítio semente do HBSC, em ambas as versões do modelo.

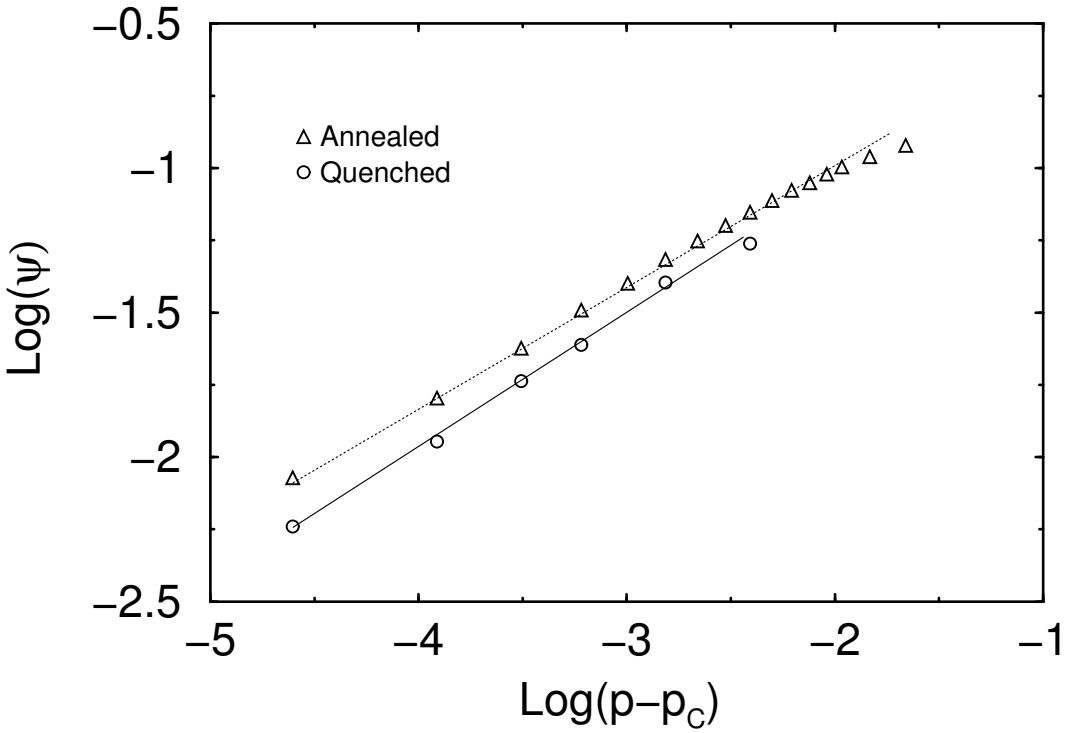

Figura 8.4: Gráfico log-log de ψ *versus* $(p - p_c)$ para um HBSC construido dentro de uma rede 100×100 para ambas as versões *quenched*; $\circ$, e *annealed*; $\triangle$.

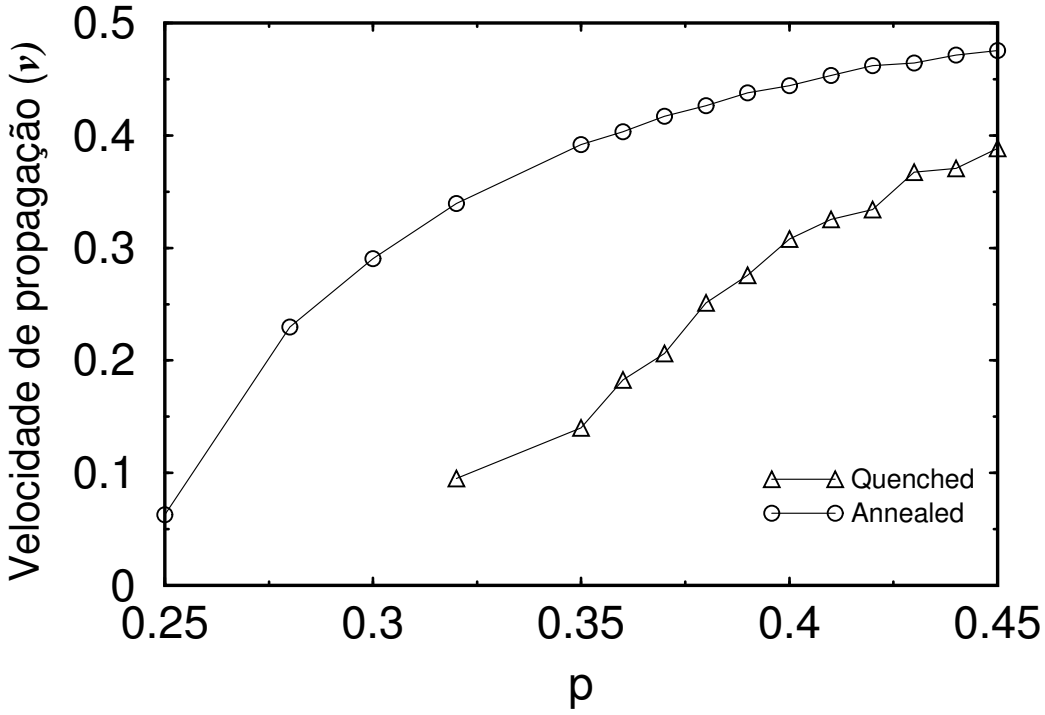

Figura 8.5: Velocidade de propagação v do dano no HBSC com uma saturação de borda de $\Sigma_s = 0,90$ construido dentro de uma rede 100×100 em ambas as versões *quenched*; $\triangle$, e *annealed*; $\circ$.

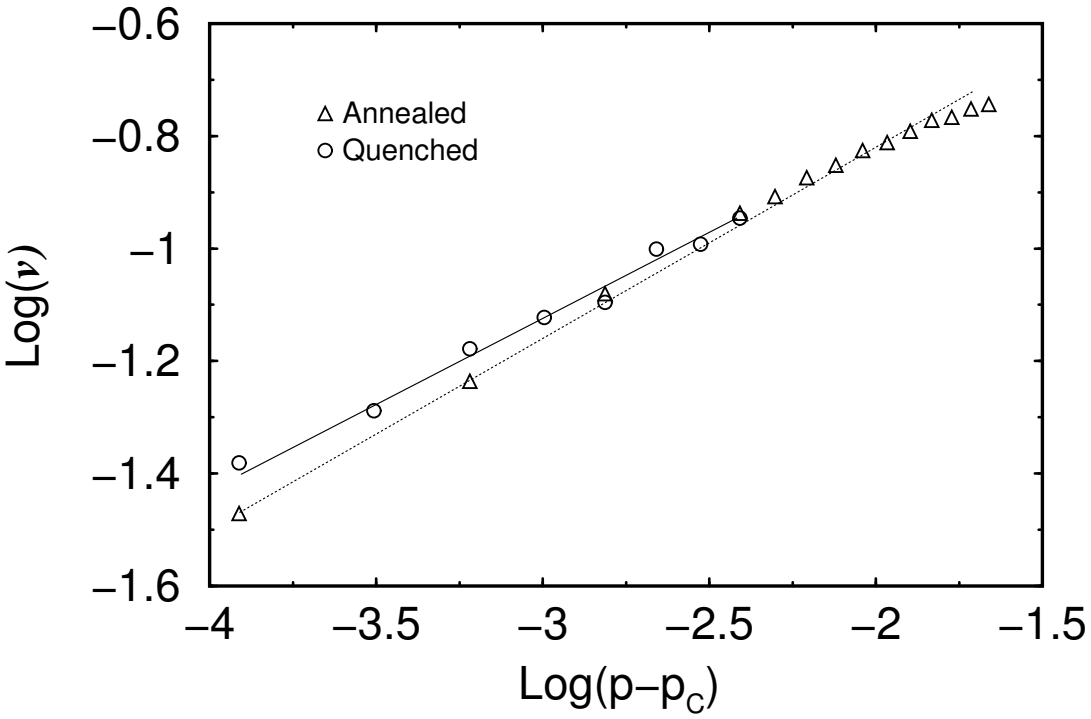

Figura 8.6: Gráfico log-log de v *versus* $(p - p_c)$ para os dados da Fig. 8.5 para ambas as versões *quenched*; $\circ$, e *annealed*; $\triangle$ em um HBSC dentro de uma rede 100×100 com $\Sigma_s = 0,90$.

Nós temos construido HSBC's dentro de redes de tamanho 100×100 e feito simulações sobre 1000 diferentes HSBC's tanto na versão *quenched* como na versão *annealed*. A Fig. 8.5 mostra os resultados obtidos para a velocidade de propagação do dano v em HSBC's em valores acima e um pouco abaixo do ponto crítico p_c nessas estruturas. A principal razão para a velocidade de propagação do dano não ter ido a zero abaixo de p_c é a presença de efeitos de tamanhos finitos dessas redes. Um tanto interessante é observar a partir da Fig. 8.5 que na versão *annealed* a velocidade de propagação do dano é maior que na versão *quenched*, sobretudo devido ao fato de que na versão *annealed* é mais fácil para nuvem de dano contornar os obstáculos irregulares existentes nesse tipo de rede, por conta das contínuas atualizações nas funções Booleanas dos sítios do HBSC.

Para estimar os expoentes críticos α da velocidade de propagação no HBSC, nós fizemos um gráfico log-log da velocidade de propagação v contra $(p - p_c)$ dos resultados da Fig. 8.5, conforme mostrado na Fig. 8.6. Nossos resultados para os expoentes críticos de velocidade no HBSC com saturação de borda de $\Sigma_s = 0,90$ são aproximadamente os mesmos para ambas as versões do modelo. Para a versão *quenched*, nós obtemos $\alpha \approx 0,30$ enquanto para a versão *annealed*, nós obtemos $\alpha \approx 0,33$, onde usamos $p_c = 0,36$ e $p_c = 0,26$ como seus respectivos pontos críticos.

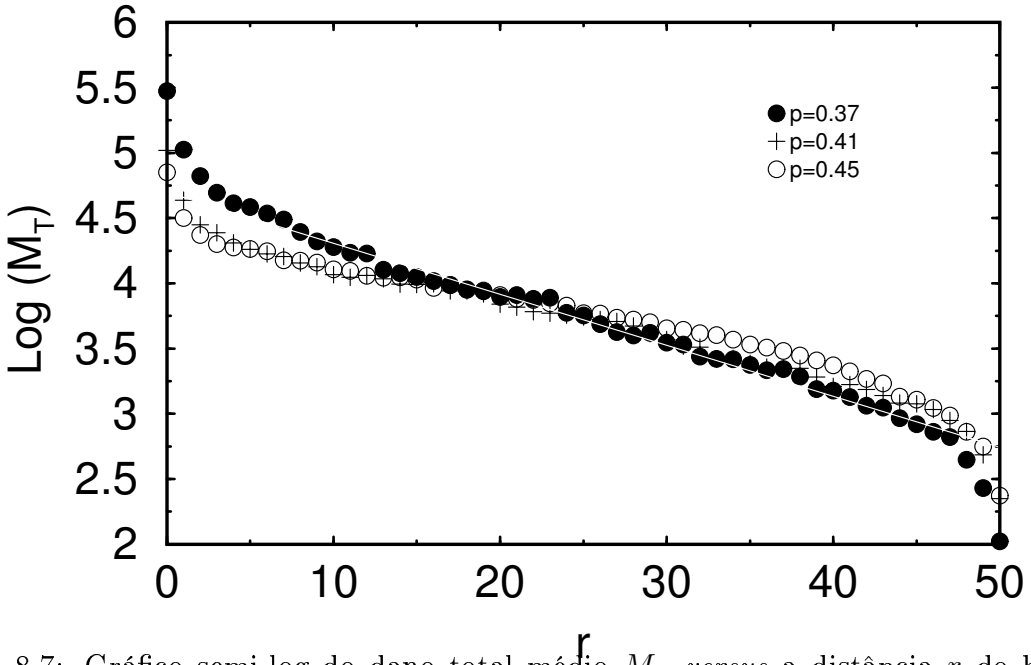

Figura 8.7: Gráfico semi-log do dano total médio M_T *versus* a distância r do homem estranho em um HBSC dentro de uma rede 100×100 para três valores do parâmetro p acima do ponto crítico do agregado na versão *quenched*, a saber, $p = 0,37$; $\bullet$, $0,41$; $+$, e $0,45$; $\circ$.

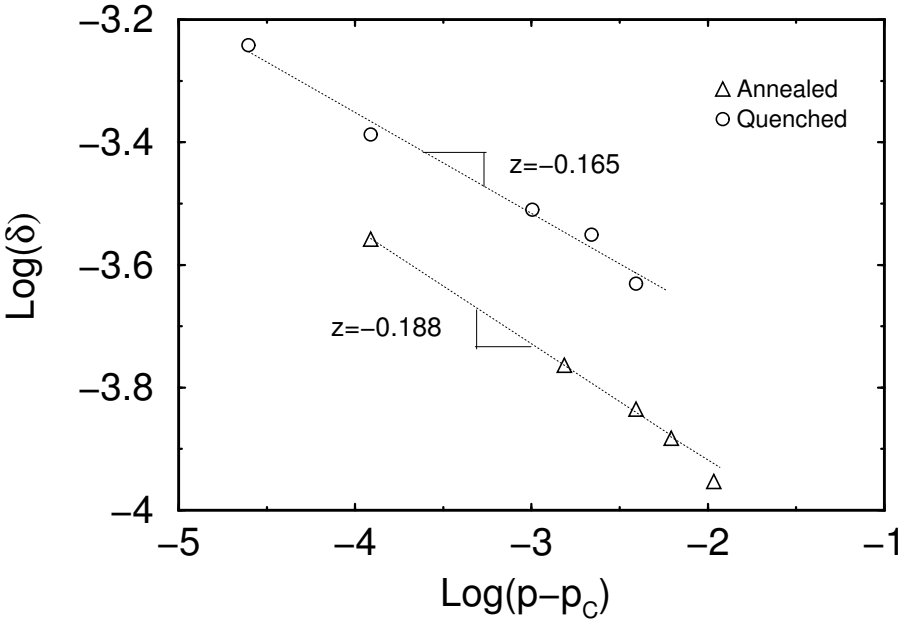

Figura 8.8: Gráfico log-log do comprimento característico inverso δ *versus* $(p - p_c)$ em um HBSC dentro de uma rede 100×100 para ambas as versões *quenched*;$\circ$, e *annealed*; $\triangle$. A inclinação da reta fornece o valor para o expoente dinâmico z.

Da mesma forma que para a rede quadrada, também para o HBSC nós calculamos os expoentes dinâmicos z em ambas as versões do modelo Kauffman, a partir da distribuição radial do dano total médio M_T sobre o HBSC para diferentes valores do parâmetro p acima do ponto crítico do HBSC. Na prática, isso foi feito por meio de um armazenamento

	$q = 0,00$	$q = 0,05$	HBSC
α	$0,27$	$0,62$	$0,30$
β	$0,31 \pm 0,04$	$0,78 \pm 0,04$	$0,47 \pm 0,02$
z	$-0,156$	$*$	$-0,165$

Tabela 8.1: Tabela mostrando os valores para os expoentes críticos α e β nas aproximações de rede quadrada ($q = 0$), de mundo pequeno ($q \neq 0$) e em HBSC na versão *quenched* do modelo, onde são também mostrados os valores do expoente dinâmico z nas arquiteturas de rede quadrada e de HBSC nesta versão do modelo.

vetorial do dano total para cada sítio pertencente ao HBSC, confinado em uma rede 100×100, ao longo de uma linha reta a partir do homem estranho até as bordas da rede quadrada, sobre 1000 realizações diferentes do sistema. A Fig. 8.7 mostra o gráfico semi-log de M_t *versus* a distância radial r partindo do homem estranho na versão *quenched* para três valores diferentes de p acima do valor do ponto crítico e após aproximadamente duas vezes o tempo de toque nesse HBSC.

Nós determinamos os expoentes dinâmicos em ambas as versões do modelo através do gráfico log-log do comprimento inverso característico δ, definido pela Eq. 7.3, *versus* $(p - p_c)$, conforme mostrado na Fig. 8.8. Nossa estimativa para os expoentes dinâmicos z são:

$$z^{quenched} \approx -0,165$$

e

$$z^{annealed} \approx -0,188,$$

sendo o expoente dinâmico para a versão *annealed* menor que o seu valor na versão *quenched*, deixando claro que na versão *annealed* o dano total médio decresce mais rápido do que na versão *quenched*, à medida que ficamos cada vez mais distantes do ponto crítico p_c do sistema. A tabela 8.1 resume nossos resultados para os expoentes críticos α e β nas aproximações de rede quadrada ($q = 0$), de mundo pequeno ($q \neq 0$) e em HBSC, todos na versão *quenched* do modelo. Nessa mesma tabela, são também mostrados os valores do expoente dinâmico z nas arquiteturas de rede quadrada e de HBSC nesta versão do modelo.

CONCLUSÃO

Com o uso do nosso algoritmo baseado na técnica de *multispin coding*, nós inicialmente simulamos autômatos de Kauffman, analizando como pequenos danos centrais espalham-se no sistema tanto na aproximação de rede quadrada ($q = 0$) como na aproximação de mundo pequeno ($q \neq 0$). Neste trabalho, nós temos visto que para a aproximação de mundo pequeno a velocidade de espalhamento do dano é maior que para o caso de rede regular, uma vez que o tempo requerido até a nuvem de dano tocar as bordas inferior ou superior da rede é bem menor que o tempo requerido na aproximação de rede quadrada. Em seguida, fazendo uma análise do parâmetro de ordem ψ variando em relação ao campo de magnetização p, nós pudemos encontrar os respectivos pontos críticos p_c em cada aproximação. Uma vez encontrados os pontos críticos em cada aproximação, nós numericamente calculamos seus respectivos expoentes críticos β e γ, considerando a fração de sítios danificados em cada lado do ponto crítico p_c, após um intervalo de tempo suficientemente grande. Na região caótica ($p > p_c$), esta fração de sítios danificados vai a zero como $\psi \sim (p - p_c)^{\beta}$. Enquanto na região congelada, a razão do dano final $d(\infty)$ pelo dano inicial $d(0)$, varia como $\chi \sim (p_c - p)^{-\gamma}$.

Danificando uma linha central inteira durante todo o desenvolvimento temporal do sistema e calculando o valor do parâmetro de ordem, bem como o tempo necessário para a nuvem de dano tocar as bordas inferior ou superior das redes em p_c para diferentes tamanhos de rede, nós estimamos as dimensões fractais d_0 e d_t em ambas as aproximações como sendo $d_0 = 1,79$ e $d_t = 1,35$ para a rede quadrada ($q = 0$) e $d_0 = 1,04$ e $d_t \approx 0$ para a aproximação de mundo pequeno ($q \neq 0$). Para o último caso, nós não mais observamos relações de escala análogas as de teoria de percolação.

Em seguida, relatamos alguns dos resultados mais importantes de simulações numéricas feitas por nós para estudar a propagação de dano no modelo Kauffman em diferentes grafos tais como redes quadradas e agregados especiais de percolação invasiva (HBSC) fazendo uso de um agente danificador que altera suas regras aletoriamente durante todo o desenvolvimento temporal do sistema. Em particular, nós temos procurado por pontos críticos analisando o parâmetro de ordem para cada caso tratado. Nós não temos encontrado qualquer mudança apreciável tanto para a aproximação de rede quadrada ($q = 0$)

como para o caso na aproximação de mundo pequeno ($q \neq 0$) em relação quando se introduz pequenos danos iniciais ao sistema. Contudo, a velocidade de propagação do dano v é grandemente aumentada devido ao poder do homem estranho em danificar o sistema. Isso decresceu o nosso esforço computacional, uma vez que menos tempo de processamento foi necessário para o cálculo da velocidade de propagação v assim como da distribuição radial do dano total médio M_T nestes grafos. Os expoentes críticos para a velocidade de propagação α assim como os expoentes dinâmicos z foram calculados com razoável precisão para ambos os casos de rede quadrada e de agregados de percolação. Para o agregado de percolação, analisamos tanto o caso *quenched* como o caso *annealed* do modelo Kauffman, mostrando que o dano total médio é menor na versão *annealed* que na versão *quenched* em intervalos de tempo da ordem do tempo de toque T_t no agregado especial de percolação invasiva. Nós encontramos para o caso de rede quadrada um expoente crítico de velocidade $\alpha_0 \sim 0,27$ e um expoente dinâmico $z \approx -0,156$. Para aproximação de mundo pequeno nós obtemos $\alpha_{005} \approx 0,62$, para uma probabilidade de religação de $q = 0.05$ na rede quadrada. Em agregados especiais de percolação invasiva, nós obtemos expoentes críticos de velocidade $\alpha \approx 0,30$ para a versão *quenched* e $\alpha \approx 0,33$ para a versão *annealed* e expoentes dinâmicos de $z \approx -0,165$ na versão *quenched* e $z \approx -0,188$ na versão *annealed*.

Em adição, nós observamos uma alta sensibilidade com respeito à propagação do dano quando algumas conexões de rede são aleatoriamente removidas ou quando consideramos agregados de percolação com diferentes valores de saturação de borda Σ_s. Para a rede quadrada, o dano permanece confinado em volta do homem estranho quando somente poucas conexões são removidas (tipicamente 20%). Isso mostra a existência de regiões instáveis presentes no sistema, isto é, regiões formadas por sítios susceptíveis sobre os quais depende o processo de propagação do dano, enquanto para agregados de percolação, é necessário uma alta saturação de borda Σ_s para que o dano consiga se propagar ao longo do sistema.

Finalmente, nós esperamos que estes e outros cálculos mais elaborados sejam úteis para que se possa entender problemas mais gerais relacionados à propagação de defeitos simples em sistemas desordenados bem descritos por autômatos celulares. Para estudos futuros, seria interessante observar como o homem estranho pertuba a bacia de atração na versão *quenched* do modelo Kauffman nos grafos esdudados aqui. Esta análise seria importante para uma melhor compreensão da dinâmica desses sistemas sendo portanto, objeto de futuras investigações.

APÊNDICE A – Programa Multispin Coding para Rede Quadrada

KAUFFMAN MODEL TO A LATTICE L×L
MULTISPIN CODING PROGRAM * VERSION 01-JUL-2005*

```
*********************************************************************
O programa MULTISPIN.F realiza um cálculo do parâmetro de ordem MEDIA contra
o parâmetro P mediado sobre um número NCOF de realizações. Os valores de P são
fornecidos via arquivo "font.lis" e os resultados do parâmetro de ordem são armazenados
no arquivo "file.dat". A matriz N(I,J) armazena os valores de spin dos sítios da rede,
enquanto a matriz NR(I,J,K) armazena os resultados das funções Booleanas para cada
configuração de vizinhança dos sítios da rede. As matrizes NN(I,J) e NNR(I,J,K) são
referentes a réplica da rede
*********************************************************************
LL é o número de palavras de computador
NBIT é o número bits numa palavra de computador
iMAX é o tempo máximo de interação na rede
NCOF é o número de realizações
Q é a probabilidade de religação dos sítios da rede
*********************************************************************
REAL rand48,sec1,sec2,MEDIA
INTEGER*8 NR, N, NN, M, MM, H
INTEGER TRAMP,LL,cont,sm(3),bit
PARAMETER (LL=4,NBIT=64,L=LL*NBIT,LP1=L+1,LL1=LL+1)
DIMENSION NR(0:LP1,LL,16),N(0:LP1,0:LL1),NN(0:LP1,0:LL1),M(L,LL),
& MM(L,LL),H(L,LL)
DATA iMAX,NCOF,Q/300,100,0.0/
CALL cpu-time(sec1)
```

```
OPEN(1,FILE='file.dat')
OPEN(2,FILE='font.lis')
22 READ(2,*,end=23)P
PP1=1.0+P
sm(1)=3427
sm(2)=6432
sm(3)=4362
cont=0
TRAMP=0
DO 44 IV=1,NCOF
cont= cont+1
DO 1 J=1,LL
DO 2 I=1,L
2 N(I,J)=0
DO 3 II=1,NBIT
DO 3 I=1,L
N(I,J)= ior(ishft(N(I,J),1),ifix(1.5-rand48(sm)))
3 NN(I,J)=N(I,J)
DO 1 K=1,16
DO 5 I=1,L
5 NR(I,J,K)=0
DO 1 II=1,NBIT
DO 1 I=1,L
1 NR(I,J,K)=ior(ishft(NR(I,J,K),1),ifix(PP1-rand48(sm)))
*****************************************************************
INSERCAO DOS FLIPS EM SITIOS DA REDE
*****************************************************************
DO 77 bit=8,32,8
DO 77 J=2,3
DO 77 I=126,130,2
N(I,J)=ibset(N(I,J),bit)
NN(I,J)=ibclr(NN(I,J),bit)
77 CONTINUE
DO 7 ITIME=1,iMAX
DO 8 I=1,L N(I,0)= ishftc(N(I,LL),NBIT-1,NBIT)
```

```
NN(I,0)= ishftc(NN(I,LL),NBIT-1,NBIT)
N(I,LL1)= ishftc(N(I,1),1,NBIT)
NN(I,LL1)= ishftc(NN(I,1),1,NBIT)
8 CONTINUE
DO 9 J=1,LL
N(0,J)=N(L,J)
NN(0,J)=NN(L,J)
N(LP1,J)=N(1,J)
NN(LP1,J)=NN(1,J)
9 CONTINUE
DO 10 J=1,LL
DO 11 I=1,L
A=I+1
B=J-1
C=I-1
D=J+1
E=I
F=J
IF (rand48(sm).LT.Q) A=int((L+1)*rand48(sm))
IF (rand48(sm).LT.Q) B=int((LL+1)*rand48(sm))
IF (rand48(sm).LT.Q) C=int((L+1)*rand48(sm))
IF (rand48(sm).LT.Q) D=int((LL+1)*rand48(sm))
IF (rand48(sm).LT.Q) E=int((L+1)*rand48(sm))
IF (rand48(sm).LT.Q) F=int((LL+1)*rand48(sm))
N1H =iAND(N(E,D),N(E,B))
N2H =iAND(N(E,D),NOT(N(E,B)))
N3H =iAND(NOT(N(E,D)),N(E,B))
N4H =iAND(NOT(N(E,D)),NOT(N(E,B)))
N1V =iAND(N(A,F),N(C,F))
N2V =iAND(N(A,F),NOT(N(C,F)))
N3V =iAND(NOT(N(A,F)),N(C,F))
N4V =iAND(NOT(N(A,F)),NOT(N(C,F)))
NN1H=iAND(NN(E,D),NN(E,B))
NN2H=iAND(NN(E,D),NOT(NN(E,B)))
NN3H=iAND(NOT(NN(E,D)),NN(E,B))
```

```
NN4H=iAND(NOT(NN(E,D)),NOT(NN(E,B)))
NN1V=iAND(NN(A,F),NN(C,F))
NN2V=iAND(NN(A,F),NOT(NN(C,F)))
NN3V=iAND(NOT(NN(A,F)),NN(C,F))
NN4V=iAND(NOT(NN(A,F)),NOT(NN(C,F)))
M(I,J)= iAND(NR(I,J,1),iAND(N1H,N1V))
& +iAND(NR(I,J,2),iAND(N1H,N2V))
& +iAND(NR(I,J,3),iAND(N1H,N3V))
& +iAND(NR(I,J,4),iAND(N1H,N4V))
& +iAND(NR(I,J,5),iAND(N2H,N1V))
& +iAND(NR(I,J,6),iAND(N2H,N2V))
& +iAND(NR(I,J,7),iAND(N2H,N3V))
& +iAND(NR(I,J,8),iAND(N2H,N4V))
& +iAND(NR(I,J,9),iAND(N3H,N1V))
& +iAND(NR(I,J,10),iAND(N3H,N2V))
& +iAND(NR(I,J,11),iAND(N3H,N3V))
& +iAND(NR(I,J,12),iAND(N3H,N4V))
& +iAND(NR(I,J,13),iAND(N4H,N1V))
& +iAND(NR(I,J,14),iAND(N4H,N2V))
& +iAND(NR(I,J,15),iAND(N4H,N3V))
& +iAND(NR(I,J,16),iAND(N4H,N4V))
11 MM(I,J)= iAND(NR(I,J,1),iAND(NN1H,NN1V))
& +iAND(NR(I,J,2),iAND(NN1H,NN2V))
& +iAND(NR(I,J,3),iAND(NN1H,NN3V))
& +iAND(NR(I,J,4),iAND(NN1H,NN4V))
& +iAND(NR(I,J,5),iAND(NN2H,NN1V))
& +iAND(NR(I,J,6),iAND(NN2H,NN2V))
& +iAND(NR(I,J,7),iAND(NN2H,NN3V))
& +iAND(NR(I,J,8),iAND(NN2H,NN4V))
& +iAND(NR(I,J,9),iAND(NN3H,NN1V))
& +iAND(NR(I,J,10),iAND(NN3H,NN2V))
& +iAND(NR(I,J,11),iAND(NN3H,NN3V))
& +iAND(NR(I,J,12),iAND(NN3H,NN4V))
& +iAND(NR(I,J,13),iAND(NN4H,NN1V))
& +iAND(NR(I,J,14),iAND(NN4H,NN2V))
```

```
& +iAND(NR(I,J,15),iAND(NN4H,NN3V))
& +iAND(NR(I,J,16),iAND(NN4H,NN4V))


    10 CONTINUE
DO 14 J=1,LL
DO 14 I=1,L
N(I,J)=M(I,J)
NN(I,J)=MM(I,J)
14 CONTINUE
7 CONTINUE
*****************************************************
CALCULO DO DANO REAL NA REDE(ACMAG)
*****************************************************
ACMAG=0
DO 18 II=0,63
DO 18 J=1,LL
DO 18 I=1,L
H(I,J)=ieor(N(I,J),NN(I,J))
ACMAG=ACMAG+iand(ishft(H(I,J),-II),1)
18 CONTINUE
TRAMP= TRAMP +ACMAG
44 CONTINUE
*******************************************************
CALCULO DA MEDIA SOBRE TODAS CONFINGS INICIAIS
********************************************************
MEDIA=dfloat(TRAMP)/dfloat(cont)
WRITE(1,40)P,MEDIA/(L**2)
40 FORMAT(F5.3,3x,F7.5)
GO TO 22
23 CALL cpu-time(sec2)
print*, "the time-processor was:",sec2-sec1.
STOP
END
************FUNCAO GERADORA DE UM NUMERO PSEUDO-ALEATORIO***********
FUNCTION rand48(seed)
```

```
INTEGER seed(3)
INTEGER*4 i1,i2,i3,i11,i21,i31,i12,i22,i13
INTEGER*4 E66D,DEEC,FFFF
PARAMETER(E66D=58989, DEEC=57068, FFFF=65535)
REAL rand48
i1=seed(1)
IF(i1.LT.0) i1=i1+65536
i2=seed(2)
IF(i2.LT.0) i2=i2+65536
i3=seed(3)
IF(i3.LT.0) i3=i3+65536
i11=i1*E66D
i21=i2*E66D
i31=i3*E66D
i12=i1*DEEC
i22=i2*DEEC
i13=i1*5
i1=IAND(i11,FFFF)+11
i11=ISHFT(i11,-16)+ISHFT(i1,-16)
i1=IAND(i1,FFFF)
i11=i11+IAND(i21,FFFF)+IAND(i12,FFFF)
i2=IAND(i11,FFFF)
i3=ISHFT(i11,-16)+ISHFT(i21,-16)+ISHFT(i12,-16)+
& IAND(i31,FFFF)+IAND(i22,FFFF)+IAND(i13,FFFF)
i3=IAND(i3,FFFF)
c rand48=i3*2**(-16)+i2*2**(-32)
rand48=i3*1.52587890625D-05+i2*2.328306D-10
IF(i1.GE.32768) i1=i1-65536
seed(1)=i1
IF(i2.GE.32768) i2=i2-65536
seed(2)=i2
IF(i3.GE.32768) i3=i3-65536
seed(3)=i3
RETURN
END
```

APÊNDICE B – Leis de Escala

Processos de percolação e o modelo Kauffman possuem uma importante característica em comum de obedecerem leis de escalas universais. O comportamento de muitas quantidades que caracterizam os processos de percolação próximo ao limiar de percolação p_c e o processo de propagação do dano no modelo Kauffman próximo ao ponto crítico p_c, é insensível à estrutura da rede e ao tipo de percolação (*site* ou *bond*). Essa universalidade no comportamento de muitas dessas propriedades em ambos os modelos é descrita quantitativamente por leis de escala obedecidas por essas propriedades em pontos próximos de p_c, e pelos seus respectivos expoentes críticos, os quais dependem somente da dimensão Euclidiana d da rede. Em geral para pontos próximos de p_c, nós temos as seguintes leis de escala:

- O Parâmetro de ordem ψ, que fornece a fração de sítios ocupados (sítios danificados) ou ligações no agregado de percolação (nuvem de dano), seguindo a seguinte lei de escala:
$$\psi \sim (p - p_c)^{\beta}. \tag{B.1}$$

- O comprimento de correlação ξ, que é o raio típico do agregado de percolação (nuvem de dano) para $p < p_c$, e a escala de comprimento sobre o qual a rede percolante (dano na rede) é macroscopicamente homogênea para $p > p_c$, isto é, suas propriedades macroscópicas independem do tamanho linear da rede L, obedece a seguinte lei de escala:
$$\xi \sim |p - p_c|^{-\nu}. \tag{B.2}$$

- A susceptibilidade χ, que diz como o dano final varia com o dano inicial, obedece a seguinte lei de escala:
$$\chi \sim (p_c - p)^{-\gamma}. \tag{B.3}$$

Em $p = p_c$, o comprimento de correlação ξ diverge, e as propriedades macroscópicas do sistema passam a ser dependentes de L. Nesse caso, o agregado de percolação (nuvem

de dano) é estatisticamente auto-similar em todas as escalas menores que ξ, e o número de sítios (ou ligações) ocupados (danificados) M_0 escala com ξ como:

$$M_0 \sim \xi^{d_0}, \tag{B.4}$$

onde d_0 é a dimensão fractal do agregado (nuvem de dano), que das Eqs. B.1 e B.2 é dado por:

$$d_0 = d - \frac{\beta}{\nu}. \tag{B.5}$$

Como $L < \xi$ em $p = p_c$, nós podemos substituir ξ por L na Eq .B.4 e o parâmetro de ordem ψ e a susceptibilidade χ seguiriam as seguintes leis de escala dependentes de L

$$\psi \sim L^{-\beta/\nu} \tag{B.6}$$

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu}. \tag{B.7}$$

APÊNDICE C – Dimensão Fractal

Uma das formas de se definir dimensão fractal é considerar uma transformação de similaridade $r(W)$ que mapeia todos os pontos $x \in W$ sobre os novos pontos $x' = rx$. O conjunto W é dito auto-similar com respeito a razão de escala $r < 1$, se W é igual a união de $n(r)$ réplicas de $r(W)$. Para um conjunto auto-similar W, podemos definir uma dimensão de auto-similaridade d_s dada por

$$d_s = \frac{\ln n(r)}{\ln(1/r)}. \tag{C.1}$$

Uma outra forma, é a dimensão de capacidade d_c, definida em um conjunto de pontos $W \in R^d$ tal que $N(\epsilon)$ denota o número mínimo de caixas de dimensão d necessárias para cobrir o conjunto de pontos W, então $N(\epsilon)$ é proporcional a ϵ^{-d_c} quando $\epsilon \to 0$. Explicitamente, temos

$$d_c = \lim_{\epsilon \to 0^+} \frac{\log N(\epsilon)}{\log \frac{1}{\epsilon}}, \tag{C.2}$$

sendo um caso especial da dimensão mais geral de Hausdorff. Se considerarmos um conjunto de caixas de tamanho linear ϵ_i. A medida de Hausdorff é dada por

$$H_k(\epsilon) = \inf \sum_i \epsilon_i^k, \tag{C.3}$$

onde o ínfimo na Eq. C.3 é o valor mínimo obtido quando levamos em conta todos os possíveis conjuntos de cobertura do conjunto de pontos W, sujeitos ao vínculo $\epsilon_i \leq \epsilon$. A dimensão de Hausdorff d_H é então dada pelo limite

$$\lim_{\epsilon \to 0} H_k(\epsilon) = \begin{cases} 0 & \text{se } k > d_H, \\ \text{finito} & \text{se } k = d_H, \\ \infty & \text{se } k < d_H. \end{cases} \tag{C.4}$$

Para o caso especial em que $\epsilon_i = \epsilon$, a dimensão de Hausdorff d_H se reduz a dimensão de capacidade d_c. Se um objeto é auto-similar, $N(r\epsilon) = n(r)N(\epsilon)$, e portanto, pelas Eqs. C.1 e C.2, nós temos que $d_c = d_s$. E geralmente, nós temos também $d_c \geq d_H$,

mas para a maioria dos casos de interesse ambas as dimensões são iguais, e dessa forma $d_c = d_s = d_H \equiv d_{fractal}$.

Podemos também, definir uma dimensão de informação d_{inf}, a partir da função de informação I dada por

$$I = -\sum_{i=1}^{N} p_i(\epsilon) \ln p_i(\epsilon), \tag{C.5}$$

onde p_i é a probabilidade que o elemento ou estado do sistema esteja ocupado, normalizado por

$$\sum_{i=1}^{N} p_i(\epsilon) = 1. \tag{C.6}$$

A dimensão de informação d_{inf} é então definida por

$$\begin{aligned} d_{inf} &\equiv \lim_{\epsilon \to 0^+} \frac{I}{\ln(\epsilon)} \\ &= \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i(\epsilon) \ln p_i(\epsilon)}{\ln(\epsilon)}. \end{aligned} \tag{C.7}$$

Se cada estado i for igualmente provável de ser visitado, então podemos escrever

$$\sum_{i=1}^{N} p_i(\epsilon) = N p_i(\epsilon) = 1, \tag{C.8}$$

assim

$$p_i(\epsilon) = \frac{1}{N}, \tag{C.9}$$

e a dimensão de informação d_{inf} é dada por

$$\begin{aligned} d_{inf} &= \lim_{\epsilon \to 0^+} \frac{\sum_{i=1}^{N} \frac{1}{N} \ln(\frac{1}{N})}{\ln(\epsilon)} \\ &= \lim_{\epsilon \to 0^+} \frac{\ln(N^{-1})}{\ln(\epsilon)} \\ &= \lim_{\epsilon \to 0^+} \frac{\ln(N)}{\ln(\frac{1}{\epsilon})} = d_c, \end{aligned} \tag{C.10}$$

onde d_c é a dimensão de capacidade, e em geral nós temos $d_{inf} \leqslant d_c$.

Referências

1 WOLFRAM, S. *Theory and Aplications of Cellular Automata.* Singapore: World Scientific, 1986.

2 STAUFFER, D. Computer simulations of cellular automata. *J. Phys. A*, v. 24, p. 909, 1991.

3 VICHNIAC, G. Simulating physics with cellular automata. *Physica D*, v. 10, p. 96, 1984.

4 VICHNIAC, G. Boolean derivatives on cellular automata. *Physica D*, v. 45, p. 63, 1990.

5 DERRIDA, B.; STAUFFER, S. Phase transitions in two-dimensional Kauffman cellular. *Europhys. Lett.*, v. 2, p. 739, 1986.

6 STAUFFER, D. Random boolean networks. *Phil. Mag. B*, v. 56, p. 901, 1987.

7 ARCANGELIS, L. de. Fractal dimensions in three-dimensional Kauffman cellular automata. *J. Phys. A*, v. 20, p. L369, 1987.

8 WILKINSON, D.; WILLEMSEN, J. F. Invasion percolation: A new form of percolation theory. *J. Phys. A*, v. 16, p. 3365, 1983.

9 WATTS, D. J.; STROGATZ, S. H. Collective dynamics of 'small-world' networks. *Nature*, v. 393, p. 440, 1998.

10 GREIL, F.; DROSSEL, B. Dynamics of critical Kauffman networks under asynchronous stochastic update. *Phys. Rev. Lett.*, v. 95, p. 048701, 2005.

11 BILKE, S.; SJUNNESSON, F. Stabilility of the Kauffman model. *Phys. Rev. E*, v. 65, p. 016129, 2002.

12 LUQUE, B.; SOL, R. V. Controlling chaos in random Boolean networks. *Europhys. Lett*, v. 37, p. 597, 1997.

13 ALDANA, M. Boolean dynamics of networks with scale-free topology. *Physica D*, v. 185, p. 45, 2003.

14 IGUCHI, K.; KINASHITA, S.; YAMADA, H. Rugged fitness landscapes of Kauffman models with a scale-free network. *Phys. Rev. E*, v. 72, p. 061901, 2005.

15 KAUFFMAN, S. A. Metabolic stability and epigenesis in randomly constructed genetic nets. *J. Theor. Biol.*, v. 22, p. 437, 1969.

16 HUANG, S.; INGBERG, D. E. Shape-dependent control of cell growth, differentiation, and apoptosis: Switchig between attractors in cell regulatory networks. *Experimental Cell Research*, v. 261, p. 91, 2000.

17 BORNHOLDT, S.; SNEPPEN, K. Neutral mutations and punctuated equilibrium in evolving genetic networks. *Phys. Rev. Lett.*, v. 81, p. 236, 1998.

18 WANG, L.; PICHLER, E. E.; ROSS, J. Oscilations and chaos in neural networks - an exactly solvable model. *Proceeding of National Academy of Sciences of the United States of America*, v. 87, p. 9467, 1990.

19 LYNCH, J. F. On the threshold of chaos in random boolean cellular automata. *Random Structure and Algoritms*, v. 6, p. 239, 1995.

20 GLASS, L.; HILL, C. Ordered and disordered dynamics in random networks. *Europhys. Lett.*, v. 41, p. 599, 1998.

21 DERRIDA, B. Random-energy model: Limit of a family of disordered models. *Phys. Rev. Lett.*, v. 45, p. 79, 1980.

22 DERRIDA, B.; FLYVBJERG, H. The random map model: a disordered model with derterministic dynamics. *J. de Physique*, v. 48, p. 971, 1987.

23 WOLFRAM, S. Universality and complexity in cellular automata. *Physica D*, v. 10, p. 1, 1984.

24 LINDENMAYER, A. Mathematical models for cellular interactions in development. *J. Theoret. Biol.*, v. 18, p. 280, 1968.

25 HERMAN, G. T. Computing ability of a developmental model for filamentous organisms. *J. Theoret. Biol.*, v. 25, p. 421, 1969.

26 ULAM, S. Some ideas and prospects in biomathemamatics. *Ann. Rev. Biol.*, v. 255, 1974.

27 CONWAY, J. H. 1970, Unpublished.

28 GARDNER, M. Mathematical games. *Sci. Amer.*, v. 226, p. 104, 1972.

29 WOLFRAM, S. Statistical mechanics of cellular automata. *Rev. Mod. Phys.*, v. 55, p. 601, 1983.

30 OTT, E. Strange attractor and chaotic motions of dynamical systems. *Rev. Mod. Phys.*, v. 53, p. 655, 1981.

31 DEVANEY, R. L. *An Introduction to Chaotic Dynamical Systems*. Reading, MA: Addison-Wesley Publ. Co., 1989.

32 PACKARD, N.; WOLFRAM, S. Two-dimensional cellular automata. *J. Stat. Phys.*, v. 38, p. 901, 1985.

33 BASTOLLA, U.; PARISI, G. The modular structure of Kauffman networks. *Physica D*, v. 115, p. 219, 1998.

34 STAUFFER, D. On forcing functions in Kauffman random boolean networks. *J. Stat. Phys.*, v. 74, p. 1293, 1987.

35 KÜRTEN, K. E. Correspondence between neural threshold networks and Kauffman boolean cellular automata. *J. Phys. A*, v. 21, p. L651, 1988.

36 STÖLZLE, S. Universality two-dimensional Kauffman model for parallel and sequential updating. *J. Stat. Phys.*, v. 53, p. 995, 1988.

37 DERRIDA, B. Valley and overlaps in Kauffman's model. *Phil. Mag. B*, v. 56, p. 917, 1987.

38 DROSSEL, B.; MIHALJYEV, T.; GREIL, F. Number and length of attractors in a critical Kauffman model with connectivity one. *Phys. Rev. Lett.*, v. 94, p. 088701, 2005.

39 DERRIDA, B.; FLYVBJERG, H. Multivally structure in Kauffman's model: Analogy with spin glass. *J. Phys. A*, v. 19, p. L1003, 1986.

40 FLYVBJERG, H. Recent results for random networks of automata. *Acta Physica Polonica B*, v. 20, p. 321, 1989.

41 BASTOLLA, U.; PARISI, G. Relevant elements, magnetization and dynamical properties in Kauffman networks: a numerical study. *Physica D*, v. 115, p. 203, 1998.

42 SAMUELSSON, B.; TROEIN, C. Superpolynomial growth in the number of attractors in Kauffman networks. *Phys. Rev. Lett.*, v. 90, p. 098701, 2003.

43 DERRIDA, B.; POMEAU, Y. Random networks of automata: A simple annealed aproximation. *Europhys. Lett.*, v. 1, p. 45, 1986.

44 DERRIDA, B.; WEISBUCH, G. Evolution of overlap between configurations in random Boolean networks. *J. Phys., Paris*, v. 47, p. 1297, 1986.

45 BASTOLLA, U.; PARISI, G. The modular structure of Kauffman networks. *Physica D*, v. 115, p. 219, 1998.

46 MEZARD, M. et al. Nature of the spin-glass phase. *Phys. Rev. Lett.*, v. 52, p. 1146, 1984.

47 ARCANGELIS, L. de; STAUFFER, D. Period distribution for Kauffman cellular automata. *J. de Physique*, v. 48, p. 1881, 1987.

48 MILGRAM, S. The small world problem. *Pschol. Today*, v. 2, p. 60, 1967.

49 SATTENSPIEL, L.; SIMON, C. P. The spread and persistence of infectious diseases in structured populations. *Math. Biosci.*, v. 90, p. 367, 1988.

50 KURAMOTO, Y. *Chemical Oscillations, Waves and turbulence.* Berlim: Springer, 1984.

51 GENNES, P. G. de. *Scaling concepts in polymerphysics.* New York: Cornell University Press, 1979.

52 BARTHÉLÉMY, M.; AMARAL, L. A. N. Small-world networks: Evidence for a crossover picture. *Phys. Rev. Lett.*, v. 82, p. 3180, 1999.

53 NEWMAN, M. E. J.; WATTS, D. J. Renormalization group analysis of the small-world network model. *Phys. Lett. A*, v. 263, p. 341, 1999.

54 BARRAT, A.; WEIGT, M. On the properties of small-world networks models. *Eur. Phys. J. B*, v. 13, p. 547, 2000.

55 MENEZES, M. A. de; MOUKARZEL, C. F.; PENNA, T. J. P. First-order transition in small-world networks. *Europhys. Lett.*, v. 50, p. 574, 2000.

56 NEWMAN, M. E. J.; WATTS, D. J. Scaling and percolation in the small-world network model. *Phys. Lett. E*, v. 60, p. 7332, 1999.

57 LENORMAND, R.; BORIES, S. Description d'un mécanisme de connexion de liaison destiné à l'étude du drainage avec piégeage en milieu poreux. *Acad. Sci. Paris*, B291, p. 279, 1980.

58 CHANDLER, R. et al. capillary displacement and percolation in porous media. *J. Fluid Mech.*, v. 119, p. 249, 1982.

59 WILKINSON, D.; BARSONY, M. Monte carlo study of invasion percolation clusters in two and three dimensions. *J. Phys. A*, v. 17, p. L129, 1984.

60 LEATH, P. L. Cluster size and boundary distribution near percolation threshold. *Phys. Rev. Lett.*, v. 36, p. 921, 1976.

61 ALEXANDROWICZ, Z. Critically branched chains and percolation clusters. *Phys. Lett. A*, v. 80, p. 284, 1980.

62 CHAYES, J. T.; CHAYES, L.; NEWMAN, C. M. The stochastic geometry of invasion percolation. *Commun. Math. Phys.*, v. 107, p. 611, 1986.

63 NICKEL, B.; WILKINSON, D. Invasion percolation on the cayley tree: Exact solution of a modified percolation model. *Phys. Rev. Lett.*, v. 51, p. 71, 1983.

64 FURUBERG, L. et al. Dynamics of invasion percolation. *Phys. Rev. Lett.*, v. 18, p. 2117, 1988.

65 ROUX, S.; GUYON, E. Temporal development of invasion percolation. *J. Phys. A*, v. 22, p. 3693, 1989.

66 HARDY, J.; PAZZIS, O. de; POMEAU, Y. Molecular dynamics of a classical lattice gas: Transport properties and time correlation functions. *Phys. Rev. A*, v. 13, p. 1949, 1976.

67 JACOBS, L.; REBBI, C. Multi-spin coding: A very efficient technique for monte carlo simulations of spin systems. *J. Comp. Phys.*, v. 41, p. 203, 1981.

68 HERRMANN, H. J. Fast algorithm for the simulation of Ising models. *J. Stat. Phys.*, v. 45, p. 145, 1986.

69 STAUFFER, D. Hunting for the fractal dimension of the Kauffman model. *Physica D*, v. 38, p. 341, 1989.

70 SILVA, L. R. da; HERRMANN, H. J. Damage spreading in a gradient. *J. Stat. Phys.*, v. 52, p. 463, 1988.

71 CONIGLIO, A.; STAUFFER, D.; JAN, N. Search for multifractality in damage spreading for Kauffman cellular automata. *J. Phys. A*, v. 20, p. L1103, 1987.

72 STANLEY, H. E. *Introducion to phase transitions and critical phenomena.* New York, Oxford: Oxford university press.

73 FERRAZ, C. H. A.; HERRMANN, H. J. The Kauffman model on small-world topology. *Physica A*, v. 373, p. 770, 2007.

Livros Grátis

(http://www.livrosgratis.com.br)

Milhares de Livros para Download:

Baixar livros de Administração
Baixar livros de Agronomia
Baixar livros de Arquitetura
Baixar livros de Artes
Baixar livros de Astronomia
Baixar livros de Biologia Geral
Baixar livros de Ciência da Computação
Baixar livros de Ciência da Informação
Baixar livros de Ciência Política
Baixar livros de Ciências da Saúde
Baixar livros de Comunicação
Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE
Baixar livros de Defesa civil
Baixar livros de Direito
Baixar livros de Direitos humanos
Baixar livros de Economia
Baixar livros de Economia Doméstica
Baixar livros de Educação
Baixar livros de Educação - Trânsito
Baixar livros de Educação Física
Baixar livros de Engenharia Aeroespacial
Baixar livros de Farmácia
Baixar livros de Filosofia
Baixar livros de Física
Baixar livros de Geociências
Baixar livros de Geografia
Baixar livros de História
Baixar livros de Línguas

Baixar livros de Literatura
Baixar livros de Literatura de Cordel
Baixar livros de Literatura Infantil
Baixar livros de Matemática
Baixar livros de Medicina
Baixar livros de Medicina Veterinária
Baixar livros de Meio Ambiente
Baixar livros de Meteorologia
Baixar Monografias e TCC
Baixar livros Multidisciplinar
Baixar livros de Música
Baixar livros de Psicologia
Baixar livros de Química
Baixar livros de Saúde Coletiva
Baixar livros de Serviço Social
Baixar livros de Sociologia
Baixar livros de Teologia
Baixar livros de Trabalho
Baixar livros de Turismo