

Curso Redes Complejas, La Plata, 2023, Clase 3^o

Juan I. Perotti*

*Instituto de Física Enrique Gaviola (IFEG-CONICET),
Ciudad Universitaria, 5000 Córdoba, Argentina and
Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación,
Universidad Nacional de Córdoba, Ciudad Universitaria, 5000 Córdoba, Argentina*
(Dated: September 6, 2023)

Descripción microscópica: Ecuación Maestra. Sistemas en equilibrio termodinámico. Simulación numérica con modelos de agentes. Percolación. El modelo de Ising. Propagación de epidemias. Sincronización. Caminatas aleatorias y difusión.

I. DESCRIPCIÓN MICROSCÓPICA

En esta clase nos enfocamos en estudiar cómo la estructura de la red de interacciones de un sistema complejo afecta a los procesos que operan sobre este.

A. Procesos Markovianos

Si bien existen una gran variedad de formas de estudiar procesos en sistemas complejos, típicamente estos exhiben dinámicas estocásticas. El formalismo de la ecuación maestra resulta particularmente adecuado para estudiar este tipo de dinámicas. Repasemos su derivación.

Por simplicidad, consideramos un sistema cuyo estado microscópico queda determinado por una variable estocástica discreta S . De esta manera, denotamos por

$$P(S(t_q) = s_q, \dots, S(t_1) = s_1, S(t_0) = s_0)$$

a la probabilidad conjunta de observar al sistema en los estados s_0, s_1, \dots, s_q en los tiempos $t_0 < t_1 < \dots < t_q$, respectivamente.

Usando Bayes, podemos escribir

$$\begin{aligned} P(S(t_{q+1}) = s_{q+1}) &= \sum_{s_0, \dots, s_q} P(S(t_{q+1}) = s_{q+1}, S(t_q) = s_q, \dots, S(t_1) = s_1, S(t_0) = s_0) \\ &= \sum_{s_0, \dots, s_q} P(S(t_{q+1}) = s_{q+1} | S(t_q) = s_q, \dots, S(t_1) = s_1, S(t_0) = s_0) P(S(t_q) = s_q, \dots, S(t_1) = s_1, S(t_0) = s_0) \end{aligned}$$

Decimos que la estadística del sistema es Markoviana cuando la anterior expresión se reduce a

$$P(S(t_{q+1}) = s_{q+1}) = \sum_{s_0, \dots, s_q} P(S(t_{q+1}) = s_{q+1} | S(t_q) = s_q) P(S(t_q) = s_q) \quad (1)$$

Es decir, cuando la observación futura resulta independientes de las observaciones pasadas dada la observación presente.

B. Ecuación Maestra

Sean

$$f_s(t) := P(S(t) = s)$$

y

$$g_{ss'}(t, dt) := P(S(t + dt) = s' | S(t) = s)$$

Luego, la Ec. 1 puede reescribirse

$$\begin{aligned} f_s(t+dt) &= \sum_{s'} g_{ss'}(t, dt) f_{s'}(t) \\ f_s(t) + \dot{f}_s(t)dt + \dots &= g_{ss}(t) f_s(t) + \sum_{s': s' \neq s} g_{ss'}(t) f_{s'}(t) \end{aligned} \quad (2)$$

Luego, usando que

$$1 = \sum_{s'} g_{s's}(t, dt) = g_{ss}(t, dt) + \sum_{s': s' \neq s} g_{s's}(t, dt)$$

la Ec. 2 se puede reescribir como

$$\dot{f}_s(t)dt + \dots = -f_s(t) \sum_{s': s' \neq s} g_{s's}(t, dt) + \sum_{s': s' \neq s} g_{ss'}(t, dt) f_{s'}(t)$$

Luego, dividiendo esta expresión por dt , en el límite $dt \rightarrow 0$, se tiene

$$\dot{f}_s(t) = -f_s(t) \sum_{s': s' \neq s} r_{s's}(t) + \sum_{s': s' \neq s} r_{ss'}(t) f_{s'}(t) \quad (3)$$

donde las funciones $r_{ss'}(t)$, que vienen dadas por las condiciones

$$r_{ss'}(t)dt \rightarrow (1 - \delta_{ss'})g_{ss'}(t, dt)$$

para $dt \rightarrow 0$, representan tasas de transición, i.e. probabilidades de transición por unidad de tiempo.

La expresión 3 es la famosa Ecuación Maestra. La misma determina la evolución temporal de la distribución de probabilidades que describe los estados de un sistema cuya dinámica satisface la condición de Markovianidad.

La Ecuación Maestra puede reescribirse como

$$\dot{f}_s(t) = \sum_{s'} k_{ss'}(t) f_{s'}(t) \quad (4)$$

donde

$$k_{ss'}(t) := r_{ss'}(t) - \delta_{ss'} r_s(t)$$

donde a su vez

$$r_s(t) := \sum_{s': s' \neq s} (1 - \delta_{s's}) r_{s's}(t)$$

La forma de la expresión 4 de la Ecuación Maestra es conveniente porque expresa a la misma como una operación lineal.

C. Estado de equilibrio

Cuando existe, el límite

$$f_{ss_0}^\infty := \lim_{t \rightarrow \infty} P(S(t) = s | S(0) = s_0)$$

define el estado de equilibrio del sistema asociado a la condición inicial s_0 . Los estados de equilibrio particionan el conjunto de condiciones iniciales en *cuenas de atracción*. Un sistema se dice ergódico si posee una única cuenca de atracción. Para tasas $r_{ss'}(t)$ independientes del tiempo, los estados de equilibrio pertenece al kernel de la Ecuación Maestra

$$0 = \dot{f}_s^\infty = \sum_{s'} k_{ss'} f_s^\infty$$

D. Balance detallado

Existen múltiples tasas compatibles con un mismo estado de equilibrio. En particular, para un estado de equilibrio arbitrario f_s^∞ , siempre es posible encontrar tasas $r_{ss'}$ que satisfagan la condición de *balance detallado*

$$r_{s's} f_s^\infty = r_{ss'} f_{s'}^\infty$$

Esto resulta particularmente útil para samplear una distribución de equilibrio con simulaciones de Monte Carlo. Cabe resaltar que la condición de balance detallado no es necesaria para que existan tasas sean compatibles con un estado de equilibrio.

E. Simulación numérica con modelos de agentes

1. Caso de equilibrio termodinámico: Equilibrium Monte Carlo

Para un sistema en equilibrio termodinámico, la distribución de equilibrio es la de Boltzmann

$$f_s^\infty = \frac{1}{Z} e^{-\beta E(s)}$$

donde

$$Z = \sum_s e^{-\beta E(s)}$$

$\beta^{-1} > 0$ representa la temperatura y $E(s)$ la energía configuracional del sistema en el estado s .

Existe una infinita variedad de dinámicas estocásticas compatibles con una distribución de Boltzmann. Más precisamente, si consideramos un proceso estocástico, la ecuación de balance detallado indica que

$$\frac{r_{s's}}{r_{ss'}} = e^{-\beta(E(s')-E(s))} = e^{-\beta\Delta E(s \rightarrow s')} \quad (5)$$

donde

$$\Delta E(s \rightarrow s') := E(s') - E(s)$$

representa el cambio energía que sufre el sistema al ir de un estado microscópico s a otro s' . Existen una infita variedad de tasas $r_{ss'}$ (o procesos estocásticos) compatibles con la Ec. 5. Una elección comunmente utilizada y particularmente conveniente parasamplear el espacio de configuraciones de un sistema en equilibrio con simulaciones de Monte Carlo es la que propuso Nicholas Metrópolis

$$r_{s's} = \min(1, e^{-\beta\Delta E(s \rightarrow s')})$$

La regla de Metrópolis resulta conveniente ya que maximiza la tasa de aceptación de los cambios de estado propuestos durante las simulaciones.

Típicamente, las energías $E(s)$ pueden expresarse como sumas de contribuciones locales

$$E(s) = \sum_{k=1}^n \sum_{i_1 \dots i_k} E_{i_1 \dots i_k}(s_{i_1}, \dots, s_{i_k})$$

donde cada término o función $E_{i_1 \dots i_k}$ representa la interacción de k agentes o componentes del sistema. Aquí, s_i representa el estado del agente i . Esta forma resulta particularmente conveniente para realizar simulaciones de Monte Carlo, puesto que transiciones $s \rightarrow s'$ que sólo involucren el cambio de estado de un agente i corresponderá a cambios de energías que involucran sólo los términos asociados a i . A esta metodología se la conoce como *agent based modeling*.

2. Caso de no equilibrio: Kinetic Monte Carlo

Ideas similares al caso de equilibrio pueden aplicarse a sistemas de no equilibrio. No entraremos en detalles por cuestiones de tiempo, pero recomendamos al lector interesado leer sobre métodos de Monte Carlo Cinéticos.

Cuando el estado de un sistema puede representarse como un vector de los estados de sus componentes $s = (s_1, \dots, s_n)$ las tasas de transición pueden frecuentemente factorizarse

$$r_{ss'}(t) = \prod_i r_{s_i s'_{N_i}}(t)$$

donde el conjunto N_i de vecinos de i incluye a i . En otras palabras, la tasa $r_{s_i s'_{N_i}}$ corresponde a la probabilidad condicional

$$P(S_i(t+dt) = s_i | S_j(t) = s_j : j \in N_i)$$

donde la condición involucra a todas las variables estocásticas en la vecindad de i . Esta factorización permite el *agent based modeling* en sistemas fuera de equilibrio termodinámico.

II. EJEMPLOS

A. Percolación

Desde el punto de vista de la teoría de grafos, estudiar un proceso de percolación consiste en analizar cómo las componentes de una red se fragmentan o fusionan como consecuencia de la remoción o incorporación de nodos y/o links. Ya estudiamos este fenómeno en la clase 2 utilizando funciones generatrices. Aquí abordaremos la cuestión desde el enfoque de la mecánica estadística.

Ejercicio 1: Considere el proceso de percolación en donde se remueven links al azar de manera estadísticamente uniforme y de manera independiente. Es posible reformular este proceso como la relajación de la energía de un proceso termodinámico a temperatura cero? Cómo sería la función energía?

Ejercicio 2: Y si en vez de links se removiesen nodos?

A lo largo de un proceso de percolación se suelen estudiar el tamaño relativo de la componente gigante s_1/n como parámetro de orden. Como susceptibilidad, se estudia el valor esperado de la componente microscópica a la que pertenece un nodo elegido al azar

$$\langle s \rangle = \sum_{s: s < s_1} s p_s$$

donde

$$p_s \sim s n_s$$

y n_s es el número de componentes microscópicas de tamaño s . Estas expresiones resultan de mapear el fenómeno de percolación a un modelo de Potts en el límite en que el número de estados por sitio $q \rightarrow 0$ [1].

Un fenómeno de percolación interesante de estudiar consiste en remover nodos en orden decreciente de sus grados [2]. Se observa que redes con distribuciones de grados son particularmente resistentes a fallas aleatorias de sus nodos y particularmente vulnerables a ataques dirigidos de sus hubs.

Ejercicio 3: Simule los procesos de fallas aleatorias y ataques dirigidos sobre redes de Barabási-Albert de tamaños $n = 10^4$ y $q = 3$. Grafique el parámetro de orden y la susceptibilidad función de la fracción de nodos removidos.

Ejercicio 4: Puede representarse un ataque dirigido en términos de la relajación de la energía de un sistema termodinámico a temperatura cero? Cómo sería la función energía? **Ayuda:** Tenga en cuenta la contribución entrópica.

B. El modelo de Ising

Ejercicio 5: Simule el modelo de Ising sobre una red de Barabási-Albert de $n = 10^4$ nodos y $q = 3$ para distintas temperaturas. Grafique el parámetro de orden en función de la temperatura. Ordena el sistema?

1. Expansión en cumulantes

Sabemos que toda la información estadística de un sistema termodinámico está contenida en la función partición $Z = \sum_s e^{-\beta E(s)}$ puesto que es la función generatriz de la distribución de Boltzmann

$$p_s = \frac{1}{Z} e^{-\beta E(s)}$$

Equivalentemente, toda la información estadística está contenida en la energía libre

$$F = U - TS = \sum_s p_s E(s) + \beta^{-1} \sum_s p_s \ln p_s$$

Consideremos las distribuciones marginales

$$p_{s_{i_1} \dots s_{i_k}} = \sum_{\{s_i: i \notin \{i_1, \dots, i_k\}\}} p_s$$

Sean

$$g_{i_1 \dots i_k} := \sum_{s_{i_1} \dots s_{i_k}} p_{s_{i_1} \dots s_{i_k}} \ln p_{s_{i_1} \dots s_{i_k}}$$

Sean, además,

$$G_i = g_i$$

$$G_{ij} = g_i + g_j + g_{ij}$$

$$G_{ijk} = g_i + g_j + g_{ij} + g_{ik} + g_{jk} + g_{ijk}$$

y así hasta obtener

$$g_{1 \dots n} = -S$$

De esta manera,

$$\beta F = \beta \sum_s p_s E(s) + \sum_i g_i + \sum_{ij} g_j + \sum_{ijk} g_{ijk} + \dots + g_{1 \dots n} \quad (6)$$

Notar que

$$g_{ij} = \sum_{s_{ij}} p_{s_{ij}} \ln p_{s_{ij}} - \sum_{s_i} p_{s_i} \ln p_{s_i} - \sum_{s_j} p_{s_j} \ln p_{s_j}$$

Es decir, es la versión entrópica del cumulante $\langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle$. De la misma manera, g_{ijk} es la versión entrópica del cumulante de tercer orden entre s_i , s_j y s_k , y así sucesivamente. Esto sugiere que podemos intentar despreciar contribuciones g_{ij} y superiores si, por ejemplo, s_i no interacciona directamente con s_j . Esta idea es el corazón del método variacional de Ryoichi Kikuchi [3]. Básicamente, Kikuchi propone aproximar la distribución de Boltzmann utilizando una distribución candidata q_s que factorice convenientemente. Por ejemplo,

$$q_s = q_{s_1} \dots q_{s_n}$$

corresponde a la aproximación de campo medio. Luego, Kikuchi propone determinar los factores q_{s_i} minimizando variacional la energía libre expresada en función de q en vez de p , es decir, propone minimizar

$$F(q) = \sum_s q_s E(s) + \beta^{-1} \sum_s q_s \ln q_s$$

Esto funciona porque, se puede probar que $F(q) \geq F$ para toda distribución candidata q , alcanzando la igualdad cuando $q = p$. La utilidad de este enfoque reside en la Ec. 6, ya que la misma se simplifica significativamente cuando q_s factoriza adecuadamente. Por ejemplo, en el caso propuesto de campo medio, $g_{i_1 \dots i_k} = 0$ para todo $k > 1$. Diversas aproximaciones surgen como caso particular del método variacional de Kikuchi. Por ejemplo, la aproximación de Bethe y el correspondiente algoritmo de belief propagation constituye uno de estos casos.

Ejercicio 6: Desarrolle la aproximación de campo medio a partir del método variacional de Kikuchi.

Ejercicio 7: Desarrolle la aproximación de Bethe a partir del método variacional de Kikuchi.

C. Propagación de epidemias

La propagación de epidemias es un fenómeno muy estudiado en redes complejas. Aquí simplemente mencionaremos que en la aproximación de campo medio del modelo SIR sobre redes aleatorias de distribución de grado arbitrario, la condición para que surga un brote epidémico es [4]

$$\frac{\beta}{\mu} \geq \frac{\langle k \rangle}{\langle k^2 \rangle - \langle k \rangle}$$

donde β y μ son las tasas de propagación y recuperación de la infección, respectivamente. Como consecuencia, el umbral de brote epidémico tiende a cero para redes con distribuciones de grado de cola larga.

D. Sincronización

Otro tipo de fenómeno muy estudiado sobre redes complejas, es el de sincronización. Para fijar ideas, se considera, por ejemplo, un sistema de osciladores de fase cuya dinámica está descrita por

$$\dot{\phi}_i = f(\phi_i) + \beta \sum_j a_{ij} h(\phi_j)$$

donde f y h son funciones arbitrarias, $\phi_i(t)$ determina la fase del oscilador i -ésimo al tiempo t , a es una matriz de interacciones y β permite regular la fuerza de interacción. Este tipo de sistemas sincroniza para valores de β suficientemente grandes. Más precisamente, suele exhibir una transición de sincronización a un dado valor crítico de β . El parámetro de orden r que suele usarse viene dado por

$$r e^{i\psi} = \sum_j r_j e^{i\phi_j}$$

donde r_j es la amplitud del oscilador j -ésimo. En el caso anterior de osciladores de fase, $r_j = 1$ para todo j .

Otro modelo muy estudiado es el de Kuramoto

$$\dot{\phi}_i(t) = w_i + \beta \sum_j a_{ij} \sin(\phi_i(t) - \phi_j(t))$$

donde w_i representa la *frecuencia natural* del oscilador i .

E. Caminatas aleatorias

El estudio de caminatas aleatorias en redes es de gran utilidad. Para estudiarlas, denotamos por

$$p_i(t) = P(S(t) = i)$$

a la probabilidad de que un agente o *caminante* se encuentre en el nodo i al tiempo t . Luego, a la dinámica estocástica del caminante la determina la ecuación

$$p_i(t+1) = \sum_j \frac{a_{ij}}{q_j} p_j(t)$$

donde q_j es el grado saliente del nodo j . Matricialmente, esta ecuación adopta la forma

$$p(t+1) = a d^{-1} p(t)$$

donde $d_{ij} = \delta_{ij} q_j$.

La distribución de equilibrio $p := \lim_{t \rightarrow \infty} p(t)$ satisface

$$\begin{aligned} p &= a d^{-1} p \\ (1 - a d^{-1}) p &= 0 \\ (d - a) d^{-1} p &= 0 \\ l d^{-1} p &= 0 \end{aligned}$$

donde

$$l := d - a$$

es la comunmente llamada *matriz laplaciana*. Dicho de otro modo $d^{-1}p$ es el autovector de la matriz laplaciana asociado al autovalor 0. Para una red no dirigida y conectada (i.e. con una sola componente) se puede ver que

$$p_i = \frac{k_i}{2m}$$

donde $k_i = q_i$.

F. Difusión

Nos interesa estudiar cómo una substancia difunde por una red a través de sus links. Denotemos por $\psi_i(t)$ la concentración de la substancia en el nodo i al tiempo t . La ecuación más simple que modela este proceso es

$$\begin{aligned} \dot{\psi}_i(t) &= c \sum_j a_{ij} (\psi_j(t) - \psi_i(t)) \\ &= c \sum_j a_{ij} \psi_j(t) - c \sum_j a_{ij} \psi_i(t) \\ &= c \sum_j a_{ij} \psi_j(t) - c k_i \psi_i(t) \\ &= c \sum_j (a_{ij} - \delta_{ij} k_j) \psi_j(t) \\ &= c \sum_j l_{ij} \psi_j(t) \end{aligned}$$

donde vemos que, nuevamente, aparece la *matriz laplaciana*.

* juan.perotti@unc.edu.ar

- [1] C. M. Fortuin and P. W. Kasteleyn, On the random-cluster model: I. introduction and relation to other models, *Physica* **57**, 536 (1972).
- [2] R. Albert, H. Jeong, and A.-L. Barabási, Error and attack tolerance of complex networks, *nature* **406**, 378 (2000).
- [3] T. Tanaka, *Methods of statistical physics* (United States of America, 2002).
- [4] A. Barrat, M. Barthélemy, and A. Vespignani, *Dynamical Processes on Complex Networks* (Cambridge University Press, 2008).