Procesos dinámicos en sustratos heterogéneas (redes complejas)

Romualdo Pastor

Departament de Fisica i Enginyeria Nuclear

Universitat Politècnica de Catalunya

Barcelona

Sumario

- Introducción:
  - Sistemas complejos heterogéneos y su representación como redes complejas
  - Procesos dinámicos en sistemas complejos heterogéneos
- Sistemas dinámicos en redes complejas:
  - Teoría general de campo medio
- Validación del formalismo de campo medio en redes complejas
  - Ejemplos OK (con restricciones)
  - Ejemplo KO
- Conclusiones

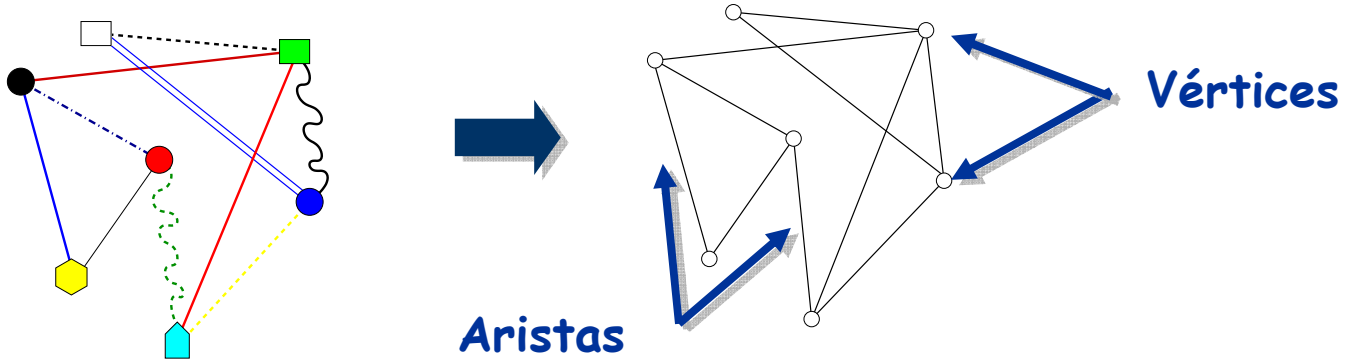
Sistemas complejos heterogéneos

- Muchos sistemas naturales y hechos por el hombre se pueden considerar sistemas complejos heterogéneos
  - Sistemas grandes, formados por un gran número de elementos
  - Los elementos puede ser muy diversas
  - Elementos pueden interactuar entre ellas a través de interacciones diversas y/o no locales

- Ejemplos:
  - Redes de transporte (aeropuertos …)
  - Ecosistemas
  - El lenguaje humano
  - La Internet física, etc.

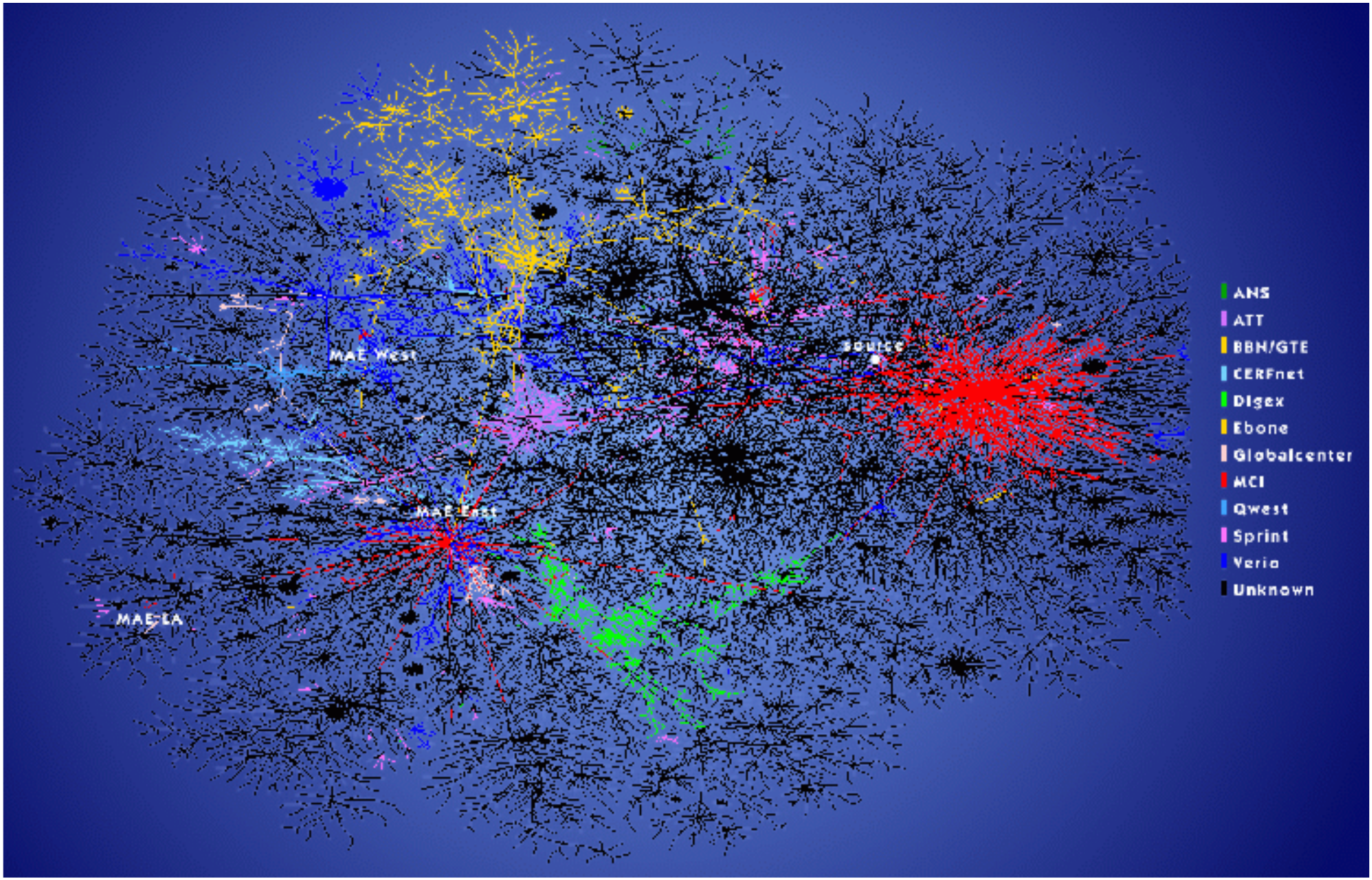
Estudiando sistemas complejos heterogéneos

- La heterogeneidad y el gran tamaño de estos sistemas dificulta su estudio por métodos tradicionales
- Nueva propuesta de estudio
  - Represtación en términos de una red o grafo



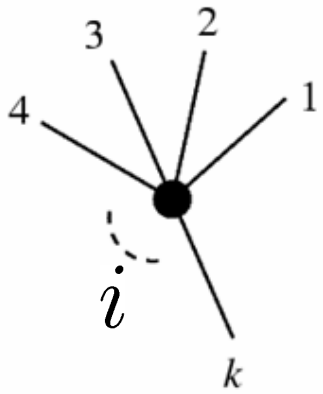
  - Estudio de sus propiedades topológicas
    - Aplicación de técnicas estadísticas

Ejemplo de representación gráfica: la Internet física



Análisis topológico de redes complejas

- La caracterización topológica básica de una red es el grado de sus vértices
  - Grado k_i



  - Número de conexiones entre un vértice de la red y otros vértices diferentes

- Para redes complejas grandes: Caracterización estadística de las propiedades topológicas en términos de
  - Distribución de grados $P(k)$
  - Correlaciones de grados $P(k'|k)$

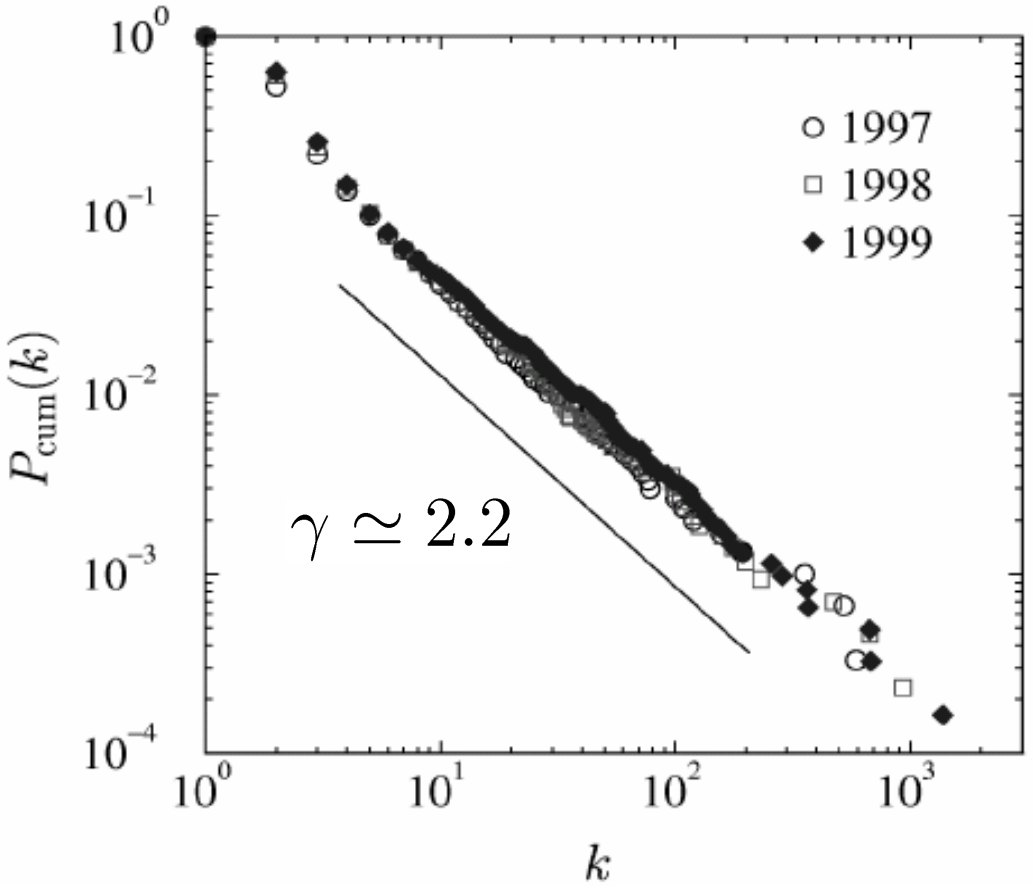
Redes con invariancia de escala (SF)

- Investigación empírica muestra que muchas redes naturales presentan invariancia de escala (SF)
  - Distribución de grados dada por una ley de potencias

$$P(k) \sim k^{-\gamma}$$

  - Exponente de grados

$$2 < \gamma < 3$$



Procesos dinámicos en sustratos complejos heterogéneos

- Sobre muchos sistemas complejos heterogéneos tiene lugar procesos dinámicos con un gran interés teórico y práctico
- Ejemplos:

Proceso Dinámico	Sustrato
Transporte de nutrientes y contaminantes	Ecosistemas
Dinámica de paquetes de información	Internet
Dispersión de epidemias y rumores	Redes sociales

- Para facilitar su estudio, muchos de estos procesos dinámicos pueden representarse en términos de procesos estocásticos que tienen lugar sobre una red compleja, representativa del sistema complejo heterogéneo real

Análisis cuantitativo de procesos dinámicos en redes complejas

- Como en el caso de los retículos Euclídeos, el estudio analítico de procesos dinámicos en redes compleja parte del análisis de campo medio
- Análisis análogo al efectuado en retículos Euclídeos basado en
  - Hipótesis de mezcla homogénea: la mezcla de partículas es homogénea y no depende del espacio (del vértice particular en redes)
- Diferencia fundamental en el caso de redes:
  - Los vértices con grado diferente pueden tener en principio propiedades diferentes
    - Hay que tener en cuenta explícitamente el grado k en las teorías de campo medio

Construcción de teorías de campo medio en redes complejas

- Partimos de dos hipótesis:
  - El grado en la única variable relevante que caracteriza un vértice
  - Todos los vértices con el mismo grado k (en la misma clase de vértices de grado k) tienen las mismas propiedades
- Procedimiento:
  - Seleccionar las variables dinámicas pertinentes que caracterizan en sistema dinámico $\vec{\Psi}(t)$
  - Distinguir el valor de la variable en cada clase de vértices de grado k, $\vec{\Psi}_k(t)$
  - Escribir la ecuación dinámica apropiada para cada variable, partiendo de las reglas dinámicas que definen el proceso

$$\partial_t \vec{\Psi}_k(t) = \vec{\mathcal{F}}[\{\vec{\Psi}_{k'}(t)\}]$$

Ejemplos

- Ejemplos de aplicación de la teoría de campo medio
  - Ejemplos de validez:
    - Procesos epidémicos
      - Modelo epidémico SIS
    - Procesos de reacción-difusión
      - Proceso de difusión-aniquilación (con condiciones)
  - Contraejemplo:
    - Dinámicas de *coarsening*
      - Modelo de Ising con dinámica de Glauber a T=0

El modelo SIS

- Modelo epidemiológico más simple, capaz de sostener un estado estacionario o endémico
  - Los individuos se hallan en un estado susceptible (S) o infectado (I)
  - Los individuos susceptibles se infectan con probabilidad ν si están conectados a otros individuos infectados
  - Los individuos infectados se recuperan (sanan) con probabilidad δ
  - Parámetro característico: tasa de propagación $\lambda = \frac{\nu}{\delta}$

Teoría de campo medio

- Ecuación para la dinámica de la densidad relativa de vértices de grado k infectados, $\rho_k(t)$

$$\frac{\partial \rho_k(t)}{\partial t} = -\rho_k(t) + \lambda k \Theta_k[\{\rho_{k'}(t)\}](1-\rho_k(t))$$

Término de destrucción

Término de creación

$$\Theta_k[\{\rho_{k'}(t)\}] = \sum_{k'} P(k'|k)\rho_{k'}$$

Probabilidad que un elemento de grado k esté conectado a un elemento infectado

Solución de campo medio en redes SF

- Solución en el estado estacionario

$$\rho_k = \frac{\lambda k \Theta}{1 + \lambda k \Theta}$$

- Ecuación auto-consistente a resolver

$$\Theta = \frac{1}{\langle k \rangle} \sum_k k P(k) \frac{\lambda k \Theta}{1 + \lambda k \Theta}$$

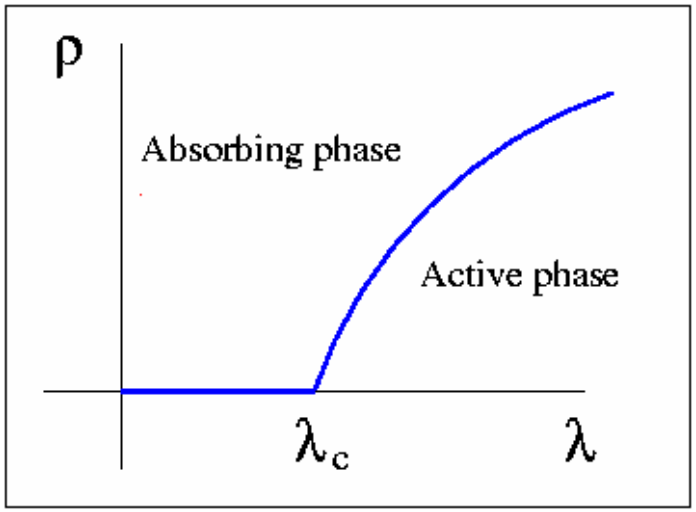
- Soluciones con Θ positivo solo para

$$\lambda > \frac{\langle k \rangle}{\langle k^2 \rangle}$$

Solución de campo medio en redes SF

- Existe una transición de fase entre una fase activa (infectada) para $\lambda > \lambda_c$ y una fase inactiva (sana) para $\lambda < \lambda_c$
  - Transición de fase absorbente con un umbral epidémico

$$\lambda_c = \frac{\langle k \rangle}{\langle k^2 \rangle}$$



  - Para redes SF

$$P(k) \sim k^{-\gamma}$$

  - Si $2 \leq \gamma \leq 3 \Rightarrow \langle k^2 \rangle \to \infty \Rightarrow \lambda_c = 0$
    - ¡¡Umbral epidémico nulo!! : Cualquiera que sea la virulencia λ de la epidemia, se puede propagar por todo el sistema

Solución de campo medio en redes SF

- Predicción cuantitativa para la prevalencia (densidad total de individuos infectados en el estado estacionario) $\rho = \sum_k P(k)\rho_k$ en redes SF

  - Para $2 < \gamma < 3$

$$\rho \sim \lambda^{1/(3-\gamma)} \quad \lambda_c = 0$$

  - Para $\gamma = 3$

$$\rho \sim 2e^{-1/m\lambda} \quad \lambda_c = 0$$

  - Para $\gamma > 3$

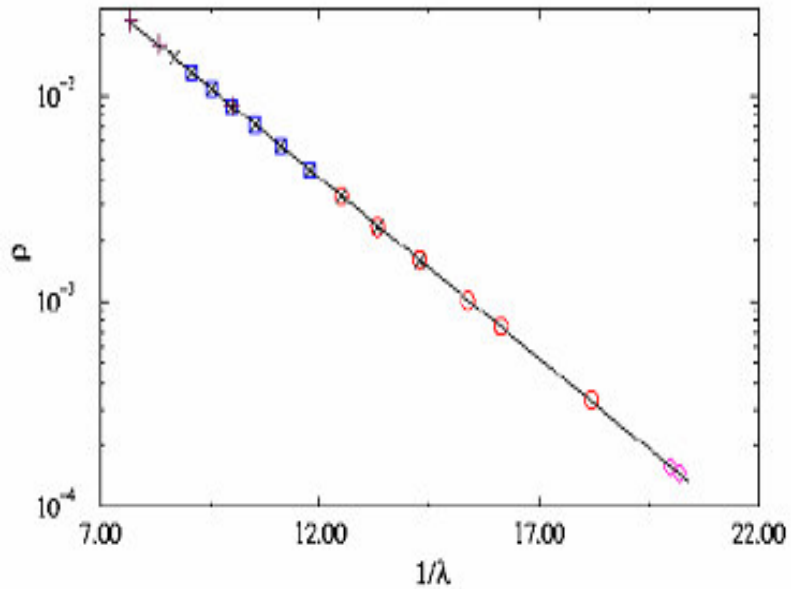
$$\lambda_c = \frac{\langle k \rangle}{\langle k^2 \rangle} \quad \text{finito}$$

Resultados numéricos

- Simulaciones numéricas confirman la predicción de campo medio

Modelo de red

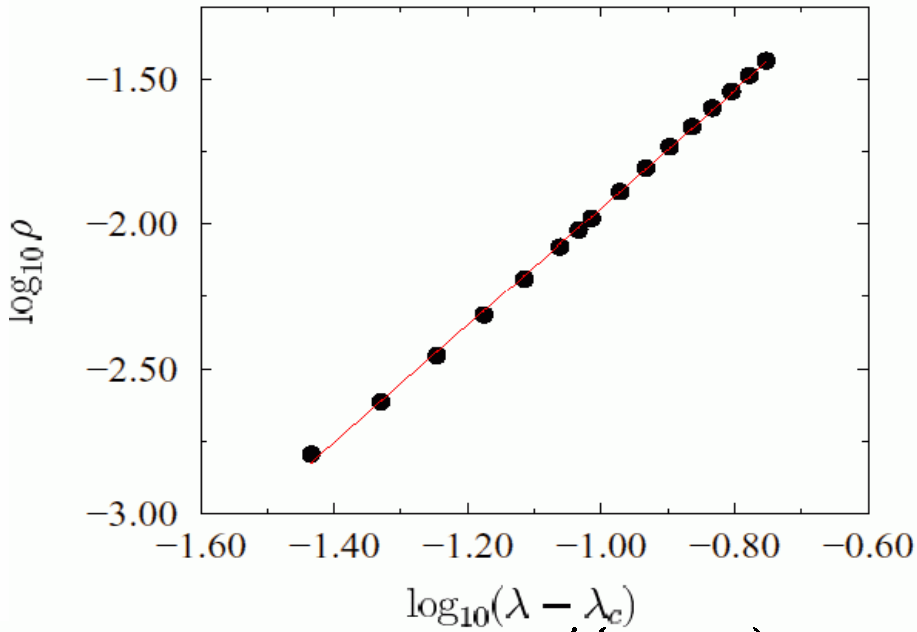
$$\gamma = 2,\ N = 10^7$$



$$\rho \sim 2e^{-1/m\lambda}$$

Sistema real (Internet)

$$\gamma = 2.3,\ N = 10^5$$



$$\rho \sim \lambda^{1/(3-\gamma)}$$

$$(\beta = 1.8, \lambda_c = 0.07)$$

El proceso de difusión-aniquilación

- Clase general de procesos de reacción-difusión
  - Sistemas dinámicos que implican a partículas pertenecientes a un cierto número de "especies" $A_i, \quad i = 1, \ldots, n$
  - Las partículas se difunden estocásticamente y reaccionan al encontrarse según un conjunto dado de reglas de reacción $\mathcal{R}_j, \quad j = 1, \ldots, r$

- Proceso RD más simple: difusión-aniquilación
  - Un único tipo de partículas A
  - Partículas se difunden, con una coeficiente de difusión D
  - Partículas experimentan la reacción $A + A \to \emptyset$ con una tasa λ

Teoría de campo medio

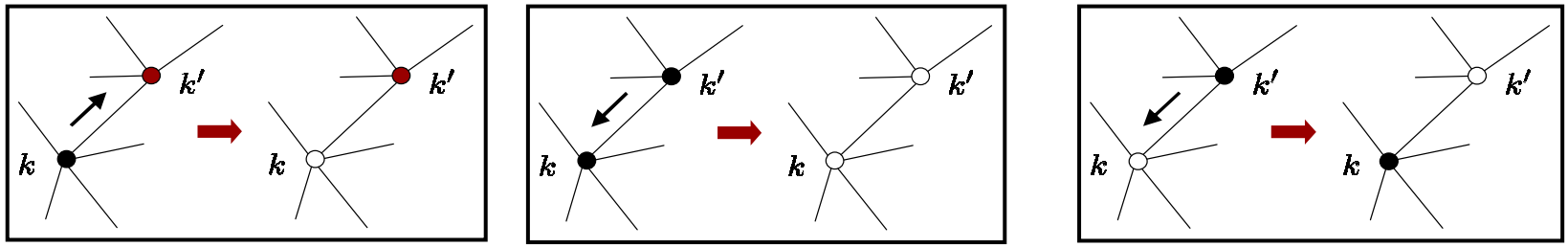
- Ecuación para la dinámica de la densidad relativa de partículas en vértices de grado k, $\rho_k(t)$
  - En redes sin correlaciones:

$$\frac{\partial \rho_k(t)}{\partial t} = -D\rho_k(t) - \lambda \frac{k}{\langle k \rangle}\rho_k(t)\rho(t) + D\frac{k}{\langle k \rangle}(1-\rho_k(t))\rho(t)$$

Término de destrucción por difusión

Término de destrucción por reacción

Término de creación por difusión



Solución de campo medio en redes SF

- Ecuación de campo medio (D = λ = 1)

$$\cancel{\frac{d\rho_k(t)}{dt}} = -\rho_k(t) + \frac{k}{\langle k\rangle}[1-2\rho_k(t)]\rho(t)$$

- Aproximación cuasi-estacionaria

$$\partial_t \rho_k(t) \ll \rho_k(t) \quad \Rightarrow \quad \rho_k(t) = \frac{k\rho(t)/\langle k\rangle}{1+2k\rho(t)/\langle k\rangle}$$

- Ecuación final para la densidad total $\rho(t) = \sum_k P(k)\rho_k(t)$

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = -2\frac{\rho(t)^2}{\langle k\rangle^2}\sum_k \frac{k^2 P(k)}{1+2k\rho(t)/\langle k\rangle}$$

Solución de campo medio en redes SF

- Para redes SF obtenemos
  - Solución para redes infinitas $N \to \infty$

$$\frac{1}{\rho(t)} \sim t^{1/(\gamma-2)}$$

- La densidad decae con el tiempo con un exponente que depende del exponente de grados

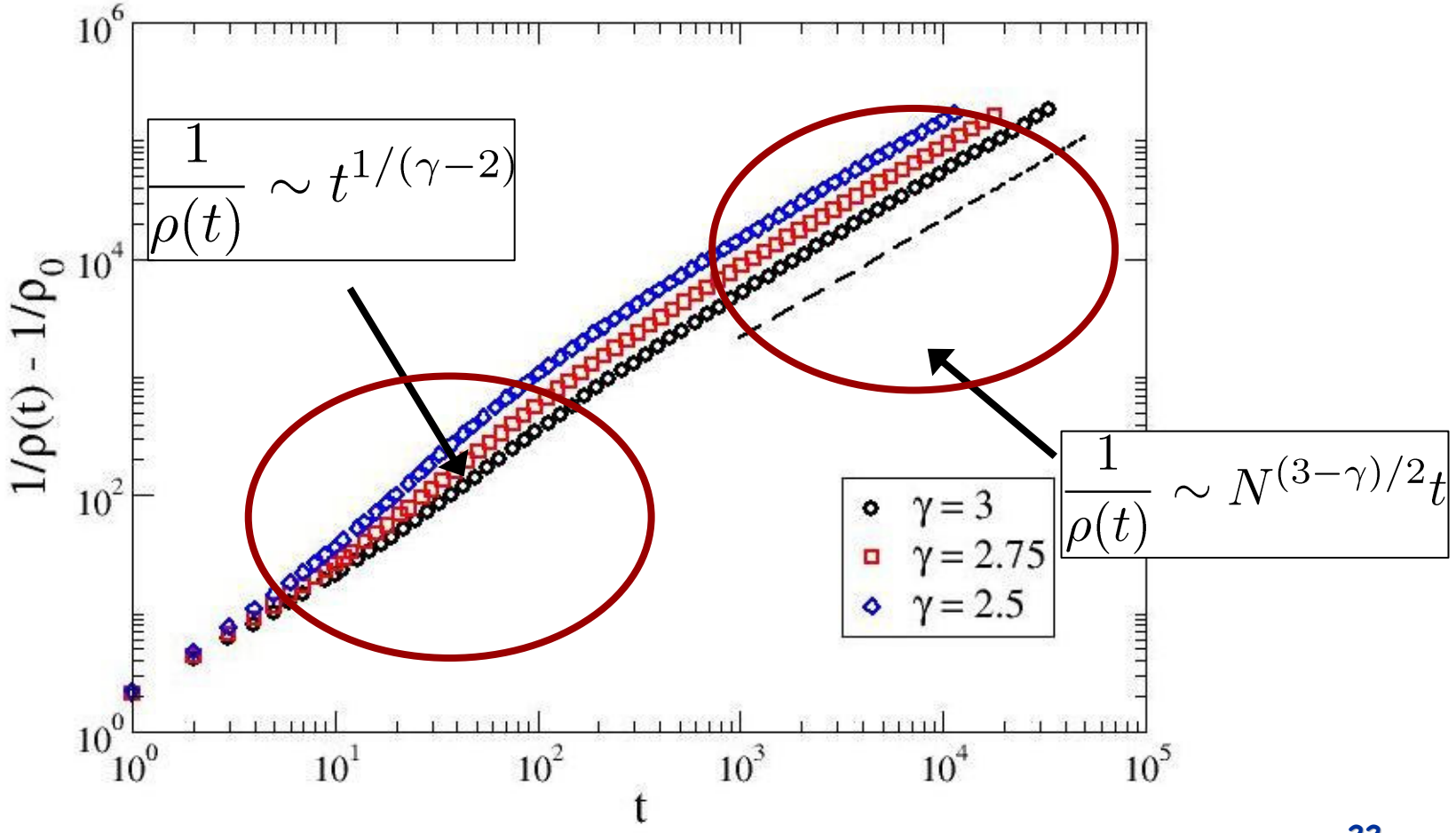
  - Solución para redes finitas $N < \infty$

$$t > t_c(N) \Rightarrow \frac{1}{\rho(t)} \sim N^{(3-\gamma)/2} t$$

- A partir de un tiempo de *cross-over*, comportamiento lineal, con una pendiente que crece con el tamaño del sistema

Resultados numéricos

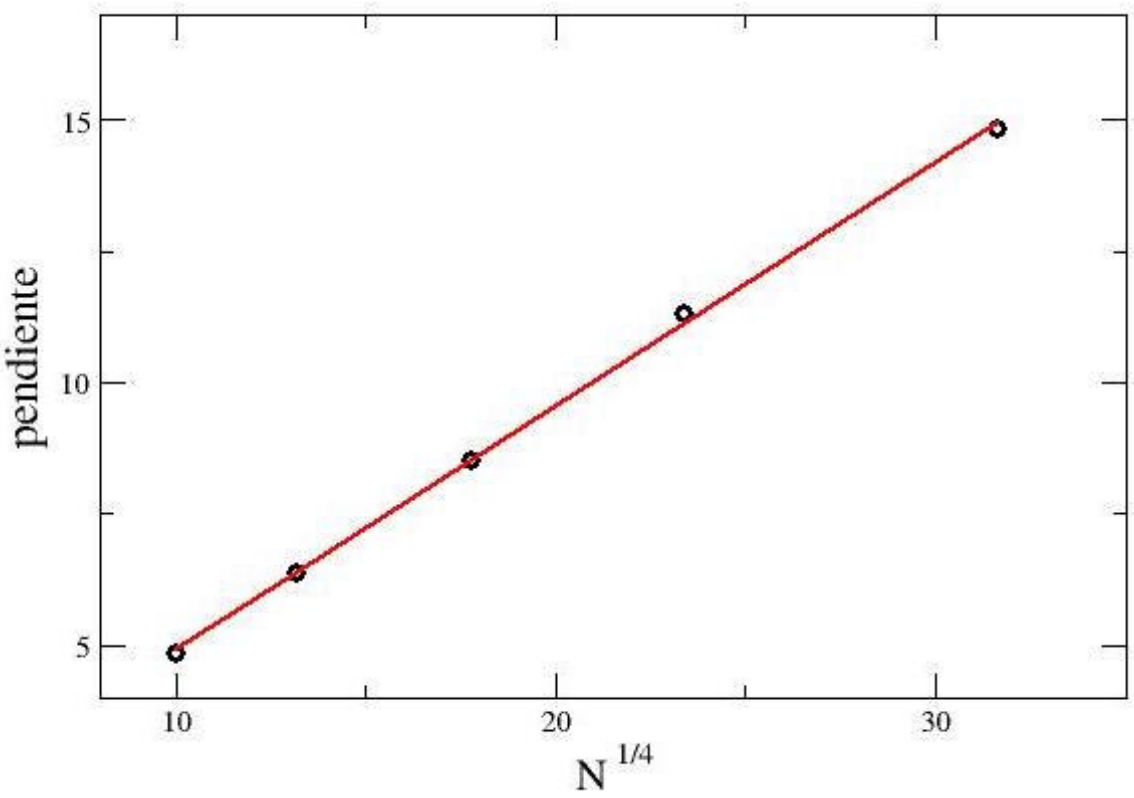
- Simulaciones numéricas confirman el resultado de campo medio



Resultados numéricos

- Para redes finitas, si $\gamma = 2.5$

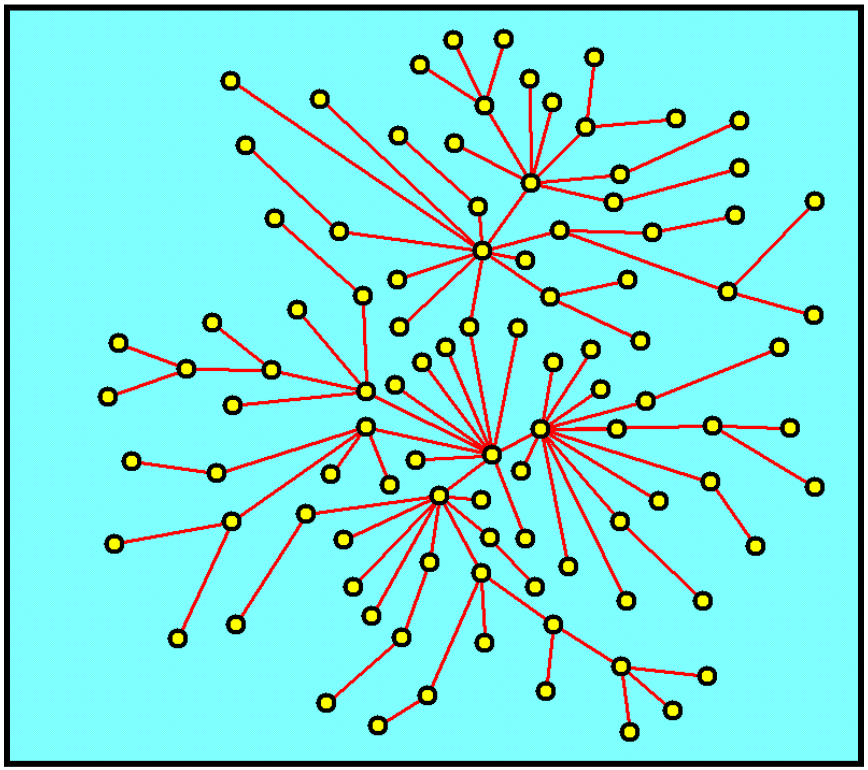
$$t \to \infty \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{\rho(t)} \sim N^{1/4} t$$



¿Funciona siempre el campo medio?

- Para este sistema dinámico podemos preguntarnos:
  - ¿Funciona la teoría de campo medio para todo tipo de redes?

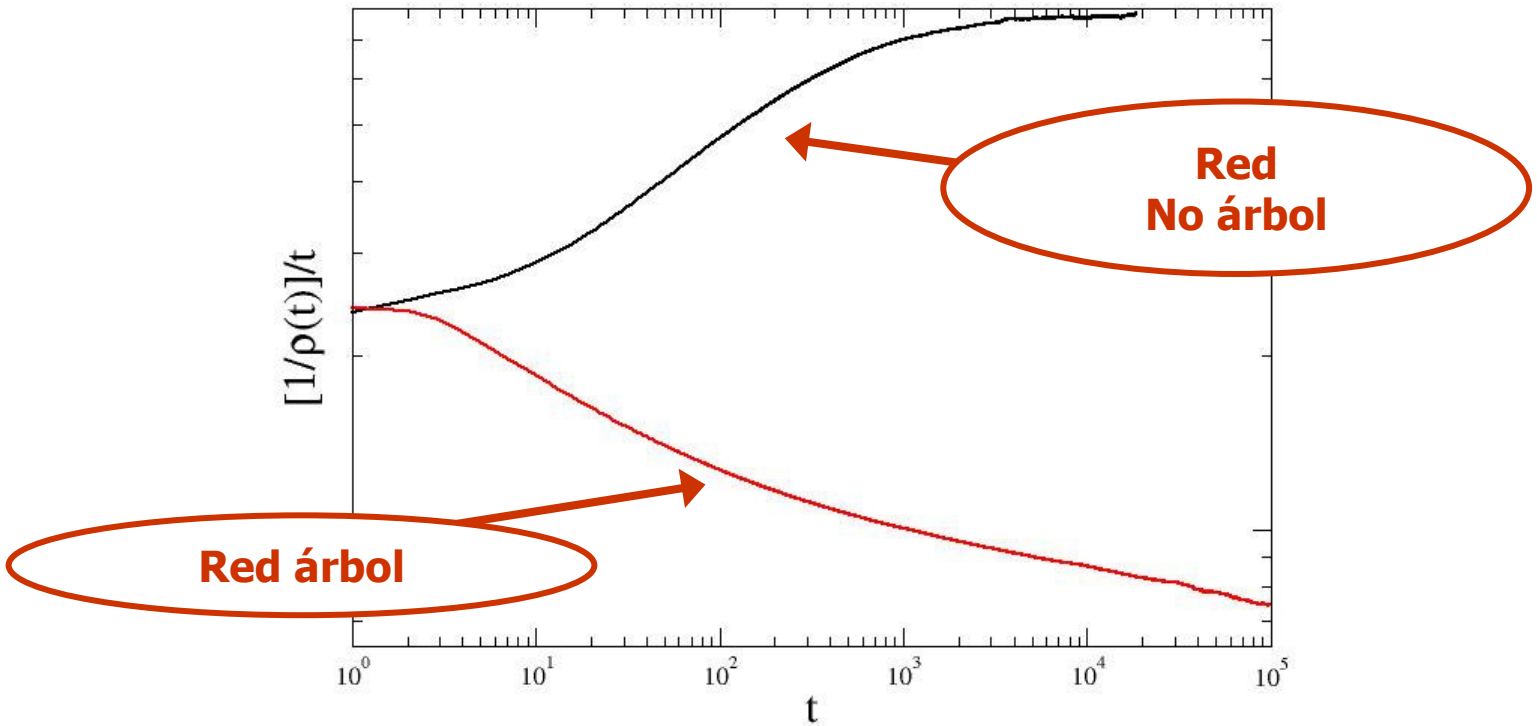
- Consideremos por ejemplo un tipo de red particular:
  - Árboles:
    - Redes que pueden ser insertadas en un espacio 2D y tales que cortando una única arista, la red queda dividida en dos subredes desconectadas
- ¿Que ocurre con el proceso de difusión-aniquilación en esta topología particular?



Resultados numéricos

- Predicción de campo medio: $\frac{1}{\rho(t)} \sim t$ lineal redes finitas

- Numéricamente: Campo medio no funciona el árboles!!



¿Por qué campo medio no funciona?

- Las ecuaciones de campo medio asumen implícitamente difusión normal de las partículas:

$$\frac{d\rho_k(t)}{dt} = -\rho_k(t) + \frac{k}{\langle k \rangle}\rho(t) - \frac{2k}{\langle k \rangle}\rho_k(t)\rho(t)$$

Término de difusión lineal

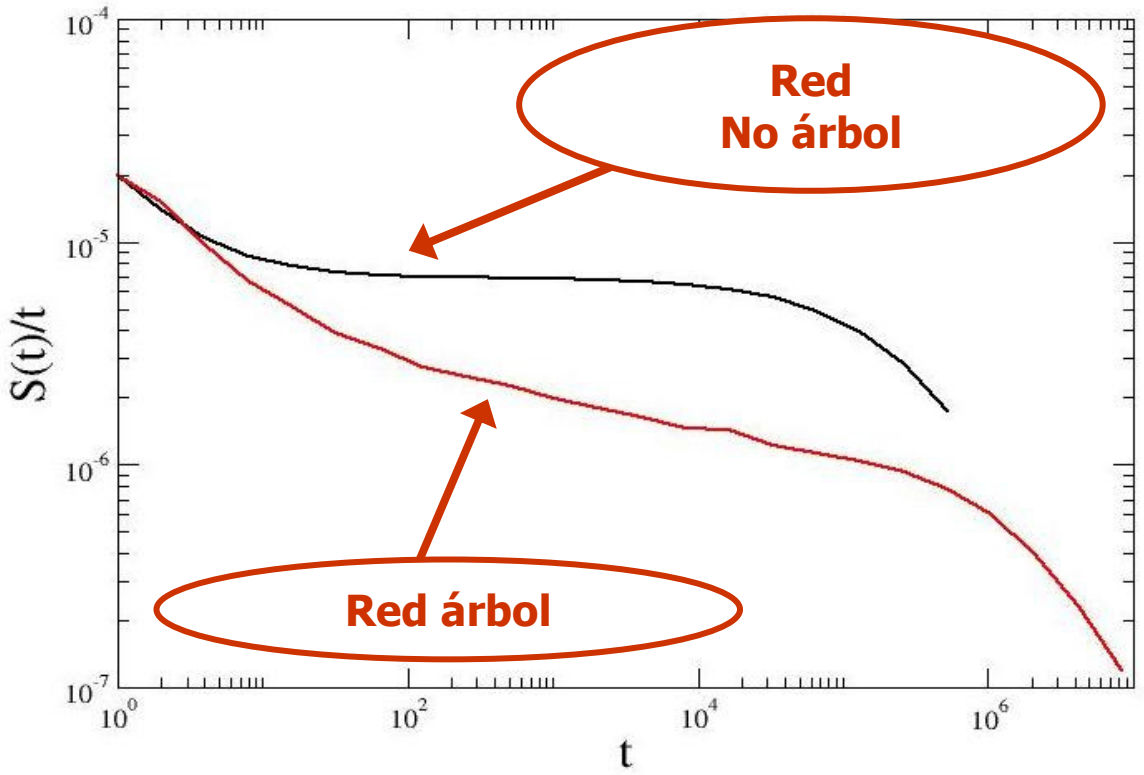
Acoplamiento no lineal

- Comprobar difusión en redes:
  - En redes estándar: El número de vértices diferentes visitados por un random walker a tiempo t crece linealmente con t:

$$S(t) \sim t$$

¿Por qué campo medio no funciona?

- Numéricamente …



  - La difusión se comporta de manera anómala (más lenta) en árboles: no es de extrañar que la teoría de campo medio no funcione!!

Dinámica de Glauber a T=0

- Dinámica de ordenamiento que puede modelar la evolución de sistemas de agentes sociales en términos de una variable binaria (opinión respecto a un tema) que se actualiza en respuesta a la presión de los vecinos de cada individuo
- Definición:
  - Modelo de Ising ($\sigma_i = \pm 1$) en los vértices de una red
  - Los espines se actualizan en función del campo local $h_i = \sum_j a_{ij}\sigma_j$

$$\sigma_i = +1 \quad \Leftarrow \quad h_i(t) > 0$$

$$\sigma_i = -1 \quad \Leftarrow \quad h_i(t) < 0$$

$$\sigma_i = \pm 1 \quad \Leftarrow \quad \text{Con probabilidad } 1/2 \quad h_i(t) = 0.$$

Teoría de campo medio

- Ecuación para la dinámica de la probabilidad que un vértice de grado k esté en estado +1, $q_k(t)$

$$\frac{\mathrm{d}q_k(t)}{\mathrm{d}t} = -q_k(t)\mathrm{Prob}[h_k < 0] - q_k(t)\mathrm{Prob}[h_k = 0]\frac{1}{2}$$

Términos de destrucción

$$+ (1 - q_k(t))\mathrm{Prob}[h_k > 0] + (1 - q_k(t))\mathrm{Prob}[h_k = 0]\tfrac{1}{2},$$

Términos de creación

$$\frac{\mathrm{d}q_k(t)}{\mathrm{d}t} = -q_k(t) + \mathrm{Prob}[h_k > 0] + \frac{1}{2}\mathrm{Prob}[h_k = 0].$$

Teoría de campo medio

- Tras algo de álgebra simple:

$$\mathrm{Prob}[h_k = 0] = \left(\begin{array}{c} k \\ k/2 \end{array} \right) Q^{k/2}(1-Q)^{k/2},$$

$$\mathrm{Prob}[h_k > 0] = \sum_{\ell=\lceil (k+1)/2 \rceil}^{k} \left(\begin{array}{c} k \\ \ell \end{array} \right) Q^{\ell}(1-Q)^{k-\ell},$$

$$Q = \frac{1}{\langle k \rangle} \sum_k k P(k) q_k.$$

Probabilidad que un vértice esté conectado a un vecino en estado +1
(redes sin correlaciones)

- Ecuación final

$$\frac{\mathrm{d}q_k(t)}{\mathrm{d}t} = -q_k(t) + \sum_{\ell=\lceil k/2 \rceil}^{k} \left[1 - \tfrac{1}{2}\delta_{\ell,k/2}\right] \left(\begin{array}{c} k \\ \ell \end{array} \right) Q^{\ell}(1-Q)^{k-\ell}.$$

Solución de campo medio en redes SF

- El sistema siempre se ordena (todos los espines +1 o -1 a t = 1)
- Tiempo de ordenamiento partiendo de condiciones iniciales simétricas (sistema desordenado, con magnetización nula)
  - Tiempo t_{ord} hasta alcanzar una magnetización dada
    - $2 < \gamma < 5/2$, t_{ord} decrece con N (tamaño de la red)

$$t_{\rm ord} \sim N^{(\gamma-5/2)/2} \ln N$$

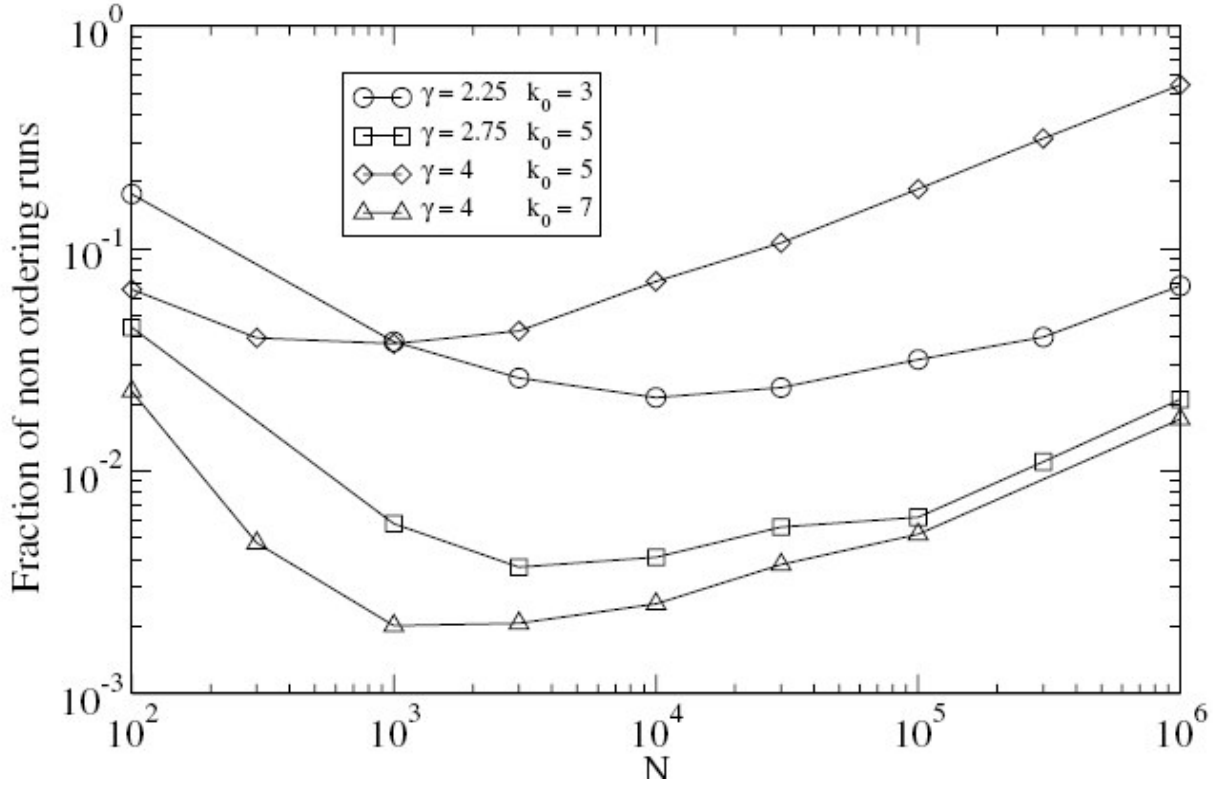
    - $\gamma > 5/2$, t_{ord} crece logarítmicamente con N

$$t_{\rm ord} \sim \ln N$$

  - El valor $\gamma = 5/2$ aparece como un número mágico en la dinámica de ordenamiento, separando dos regimenes diversos

Resultados numéricos

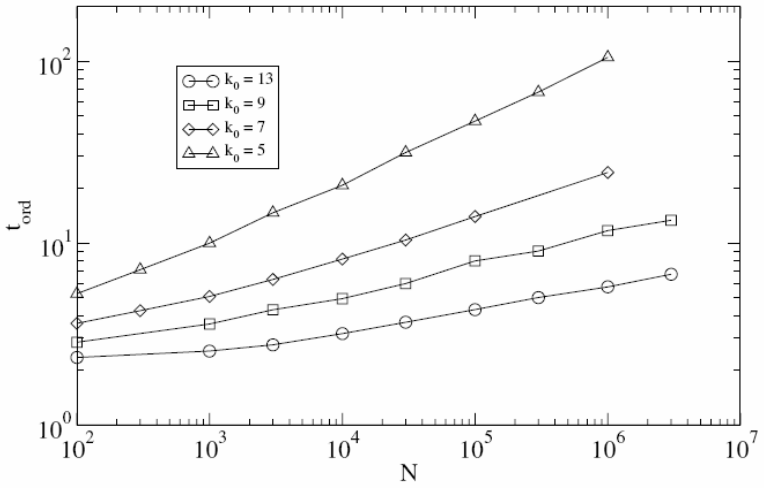
- No todos los sistemas consiguen ordenarse

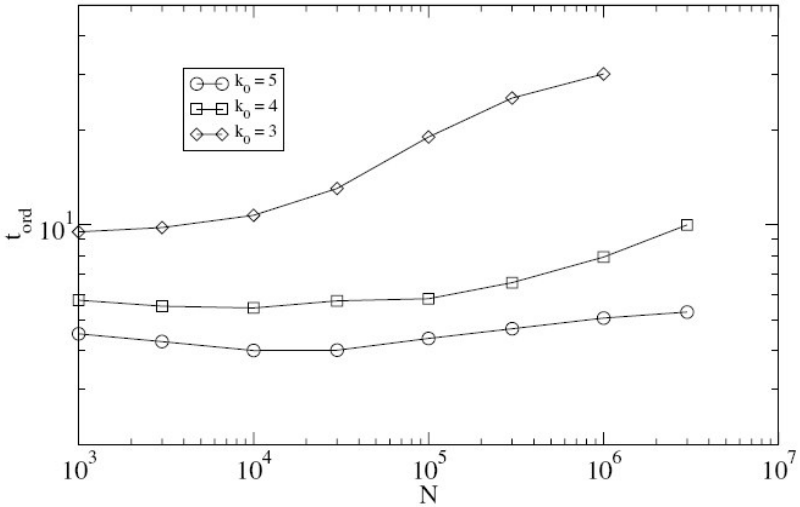


- En el límite termodinámico, ninguna red consigue ordenarse, sea cual sea su valor de γ

Resultados numéricos

- Tiempo de ordenamiento restringido a las realizaciones que sí se ordenan





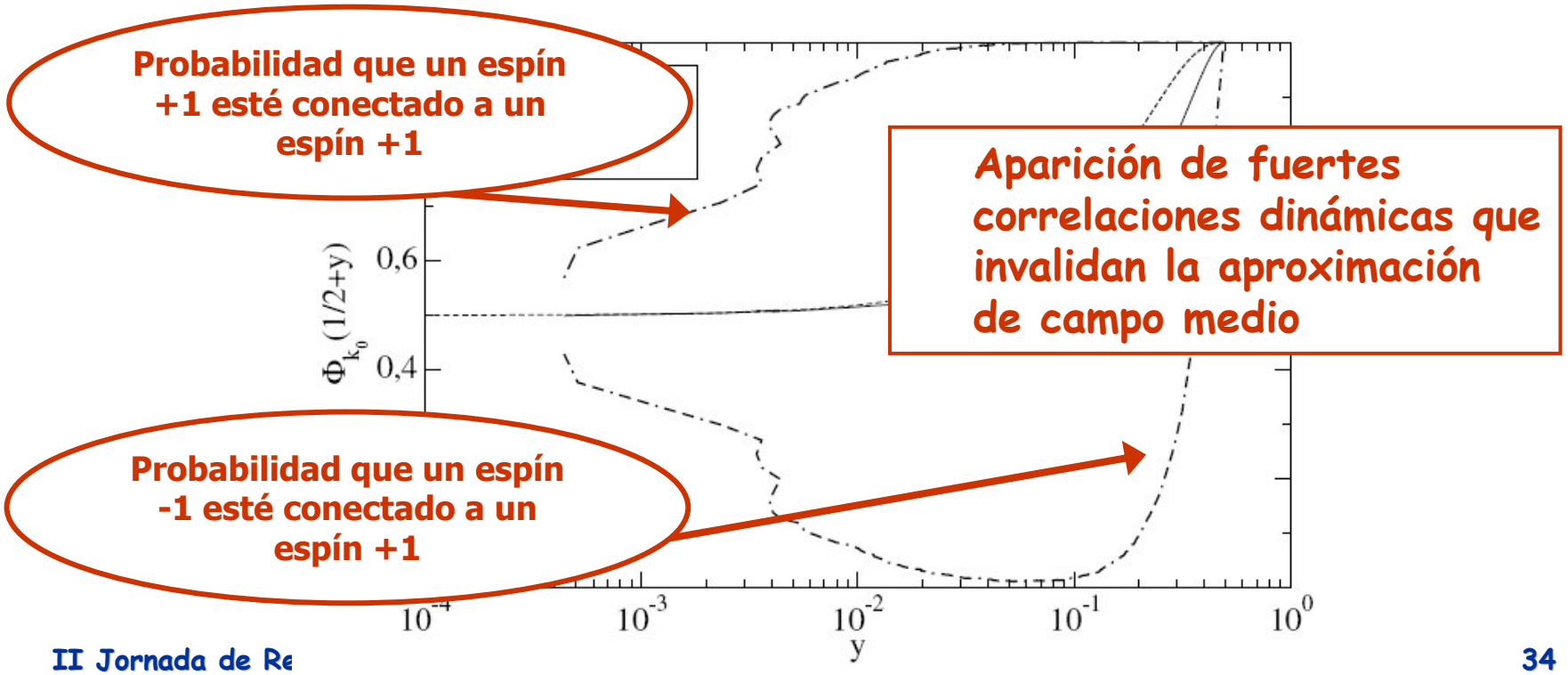
$\gamma = 4 > 5/2$

$\gamma = 2.25 < 5/2$

- Para $\gamma > 5/2$ no crece logarítmicamente, sino como una ley de potencias
- Para $\gamma < 5/2$ no decrece, sino que crece

¿Por qué MF no funciona?

- La asunción de campo medio más relevante resulta ser la siguiente:
  - La probabilidad que un espín σ_i esté conectado a un espin +1 (variable dinámica Q), es independiente del estado de σ_i
- Numéricamente, en cambio …



Conclusiones

- Los procesos dinámicos en sistemas complejos heterogéneos pueden modelarse como procesos estocásticos sobre redes complejas
- Como en los espacios Euclídeos, en redes complejas las teorías de campo medio ofrecen una primera aproximación cuantitativa al comportamiento de los sistemas dinámicos
- Los resultados de campo medio deben, no obstante, interpretarse con precaución
  - En algunos sistemas (bajo ciertas condiciones) la solución de campo medio parece ser exacta
  - En otros, campo medio proporciona resultados incorrectos, debido a la presencia de correlaciones dinámicas explícitas
- Advertencia contra el optimismo:
  - Las teorías de campo medio pueden proporcionar información cualitativa sobre dinámicas en redes complejas, pero en ciertos casos una descripción correcta puede necesitar de formalismos más sofisticados.

Agradecimientos

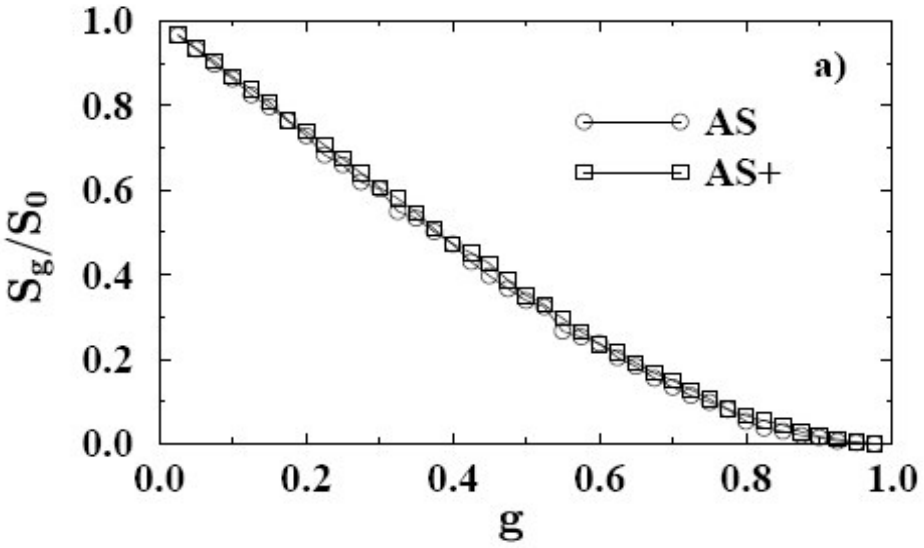
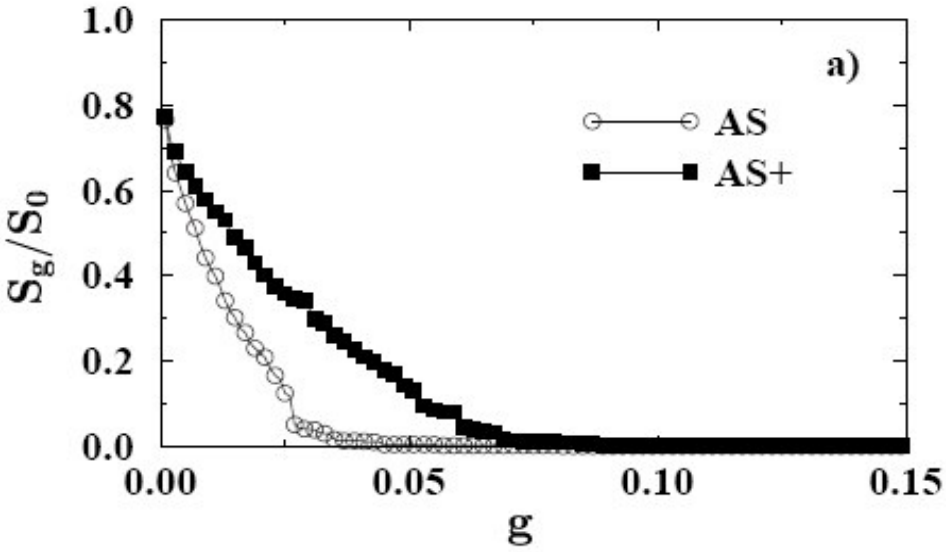
- Proyectos:
  - MEC, FIS2004-05923-C02-01
  - DURSI, Generalitat de Catalunya

- Colaboradores:
  - A. Barrat (U. Paris Sud)
  - M. Barthelemy (CEA)
  - M. Boguñá (UB)
  - C. Castellano (Università di Roma *La Sapienza*)
  - M. Catanzaro (UPC)
  - Y. Moreno (UZ)
  - A. Vespignani (Indiana University)

Efectos de una topología SF

- Una topología SF puede tener un impacto muy importante en las propiedades del sistema
  - Gran resistencia a la eliminación aleatoria de elementos
  - Gran debilidad frente a la eliminación de los elementos más conectados

Eliminación aleatoria de elementos



Eliminación dirigida de elementos