UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS

CÉSAR HENRIQUE COMIN

Estudo da relação estrutura-dinâmica em redes modulares

São Carlos

2016

CÉSAR HENRIQUE COMIN

Estudo da relação estrutura-dinâmica em redes modulares

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo, para obtenção do título de Doutor em Ciências.

Área de concentração: Física Aplicada
Opção: Física Computacional
Orientador: Prof. Dr. Luciano da Fontoura Costa

Versão Corrigida

(Versão original disponível na Unidade que aloja o Programa)

São Carlos

2016

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Ficha catalográfica revisada pelo Serviço de Biblioteca e Informação do IFSC,
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

Comin, César Henrique

Estudo da relação estrutura-dinâmica em redes modulares / César Henrique Comin; orientador Luciano da Fontoura Costa - versão corrigida -- São Carlos, 2016.

163 p.

Tese (Doutorado - Programa de Pós-Graduação em Física Computacional) -- Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2016.

1. Redes complexas. 2. Comunidades. 3. Passeio aleatório. 4. Integra-e-dispara. I. Costa, Luciano da Fontoura, orient. II. Título.

Agradecimentos

Agradeço à minha família, pela paciência e confiança.

Aos professores que tive ao longo da minha carreira, pois eles são responsáveis pela pessoa que sou hoje. Em especial, agradeço aos professores do IFSC, pelo exemplo de dedicação à ciência.

Aos meus colegas do curso de Física Computacional, pelos momentos de alegria e discussões ao longo da graduação.

Ao professor Luciano, que me guiou durante todos esses anos.

Aos companheiros de grupo, pelas frutíferas discussões sobre ciência, redes, visualização e dezenas de outros temas.

Agradeço também à FAPESP (processo nº 2011/22639-8) pelo apoio financeiro.

Resumo

COMIN, C.H. *Estudo da relação estrutura-dinâmica em redes modulares*. 2016. 163 p. Tese (Doutorado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2016.

Redes complexas têm sido cada vez mais utilizadas para a modelagem e análise dos mais diversos sistemas da natureza. Um dos tópicos mais estudados na área de redes está relacionado com a identificação e caracterização de grupos de nós mais conectados entre si do que com o restante da rede, chamados de *comunidades*. Neste trabalho, mostramos que comunidades podem ser caracterizadas por quatro classes gerais de propriedades, relacionadas com a topologia interna, dinâmica interna, fronteira topológica, e fronteira dinâmica das comunidades. Verificamos como estas diferentes características influenciam em dinâmicas ocorrendo sobre a rede. Em especial, estudamos o *inter-relacionamento* entre a topologia e a dinâmica das comunidades para cada uma dessas quatro classes de atributos. Mostramos que certas propriedades provocam a alteração desse inter-relacionamento, dando origem ao que chamamos de *comportamento específico* de comunidades. De forma a apresentarmos e analisarmos este conceito nos quatro casos considerados, estudamos as seguintes combinações topológicas e dinâmicas. Na primeira, investigamos o passeio aleatório tradicional ocorrendo sobre redes direcionadas, onde mostramos que a direção das conexões entre comunidades é o principal fator de alteração no relacionamento topologia-dinâmica. Aplicamos a metodologia proposta em uma rede real, definida por módulos corticais de animais do gênero *Macaca*. O segundo caso estudado aborda o passeio aleatório enviesado ocorrendo sobre redes não direcionadas. Mostramos que o viés associado às transições da dinâmica se tornam cada vez mais relevantes com o aumento da modularidade da rede. Verificamos também que a descrição da dinâmica a nível de comunidades possibilita modelarmos com boa acurácia o fluxo de passageiros em aeroportos. A terceira análise realizada envolve a dinâmica neuronal integra-e-dispara ocorrendo sobre comunidades geradas segundo o modelo Watts-Strogatz. Mostramos que as comunidades podem possuir não apenas diferentes níveis de ativação dinâmica, como também apresentar diferentes regularidades de sinal dependendo do parâmetro de reconexão utilizado na criação das comunidades. Por último, estudamos a influência das posições de conexões inibitórias na dinâmica integra-e-dispara, onde mostramos que a inibição entre comunidades dá origem a interessantes variações na ativação global da rede. As análises realizadas revelam a importância de, ao modelarmos sistemas reais utilizando redes complexas, considerarmos alterações de parâmetros do modelo na escala de comunidades.

Palavras-chave: Redes complexas. Comunidades. Passeio aleatório. Integra-e-dispara.

Abstract

COMIN, C.H. *Unveiling the relationship between structure and dynamics on modular networks*. 2016. 163 p. Tese (Doutorado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2016.

There has been a growing interest in modeling diverse types of real-world systems through the tools provided by complex network theory. One of the main topics of research in this area is related to the identification and characterization of groups, or *communities*, of nodes more densely connected between themselves than with the rest of the network. We show that communities can be characterized by four general classes of features, associated with the internal topology, internal dynamics, topological border, and dynamical border of the communities. We verify that these characteristics have direct influence on the dynamics taking place over the network. Particularly, for each considered class we study the *interdependence* between the topology and the dynamics associated with each network community. We show that some of the studied properties can influence the topology-dynamics interdependence, inducing what we call the communities *specific behavior*. In order to present and characterize this concept on the four considered classes, we study the following combinations of network topology and dynamics. We first investigate traditional random walks taking place on a directed network. We demonstrate that, for this dynamics, the direction of the edges between communities represents the main method for the modification of the topology-dynamics relationship. We apply the developed approach on a real-world network, defined by the connectivity between cortical regions in primates of the *Macaca* genus. The second studied case considers the biased random walk on undirected networks. We demonstrate that the transition bias of this dynamics becomes more relevant for higher network modularity. In addition, we show that the biased random walk can be used to model with good accuracy the passenger flow inside the communities of two airport networks. The third analysis is done on a neuronal dynamics, called integrate-and-fire, applied to networks composed of communities generated by the Watts-Strogatz model. We show that the considered communities can not only possess distinct dynamical activation levels, but also yield different signal regularity. Lastly, we study the influence of the positions of inhibitory connections on the integrate-and-fire dynamics. We show that inhibitory connections placed between communities can have a non-trivial influence on the global behavior of the dynamics. The current study reveals the importance of considering parameter variations of network models at the scale of communities.

Keywords: Complex networks. Communities. Random walk. Integrate-and-fire.

Lista de Figuras

- Figura 1 – Exemplo de rede modular. Os nós estão coloridos de acordo com a comunidade à qual eles pertencem. 32
- Figura 2 – Esquematização das possíveis formas de diferenciação de comunidades em redes, e sua relevância para o estudo da relação entre topologia e dinâmica. (a) Representação de uma rede possuindo propriedades topológicas $\mathcal{T}_r$ e dinâmicas $\mathcal{D}_r$. Um subgrupo de nós c presente nessa rede, indicado pela região cinza escuro, possui maior densidade de conexões internas do que com o restante da rede, ou seja, o subgrupo c representa um módulo da rede. Esse subgrupo pode se diferenciar do restante da rede através de parâmetros da sua (b) topologia interna, (c) dinâmica interna, (d) fronteira topológica e (e) fronteira dinâmica. (f) Tal diferenciação pode provocar uma separação dos nós ao considerarmos certas propriedades topológicas e dinâmicas. 34
- Figura 3 – Exemplo de modificação no relacionamento entre topologia e dinâmica em comunidades. Através de uma dinâmica de difusão aplicada sobre a rede cortical da Macaca (75), podemos associar valores de atividade à cada nó da rede. (a) Se desconsiderarmos a direção das arestas, temos uma relação trivial entre atividade e grau. (b) A mesma dinâmica aplicada sobre a rede direcionada apresenta diferentes relacionamentos entre atividade e grau. Analisando as distribuições de cada propriedade de forma isolada, mostradas na forma de histogramas, não podemos identificar o agrupamento observado. Em ambas as figuras, os nós estão coloridos de acordo com as comunidades identificadas pelo algoritmo descrito em.(78) 36
- Figura 4 – Exemplo de rede (a) simples e (b) direcionada. 39
- Figura 5 – Exemplos de redes com diferentes valores de reciprocidade r de arestas. 42
- Figura 6 – Exemplos de redes possuindo comunidades. Para cada caso, mostramos os diferentes valores de grau associados ao nó 7, de acordo com as definições apresentadas no texto. Ilustramos os casos de uma rede (a) não direcionada e (b) direcionada. 45
- Figura 7 – Distribuição de grau de uma rede Erdős-Rényi possuindo $N = 1000000$ nós e $\bar{k} = 10$ 47

- Figura 8 – Ilustração da geração de uma rede possuindo três comunidades de acordo com o modelo de partição fixa. Um conjunto de inicial de nós (a) é particionado em 3 comunidades, como mostrado em (b). Os nós são então conectados de acordo com a matriz de conectividade ρ . Um exemplo de realização da conectividade é mostrado em (c). 47
- Figura 9 – Distribuição de grau de uma rede Barabási-Albert possuindo $N = 1000000$ nós e $\bar{k} = 6$ 48
- Figura 10 – Valores do coeficiente de aglomeração e tamanho médio dos menores caminhos para redes geradas segundo o modelo Watts-Strogatz. Os valores estão em função da probabilidade de reconexão p do modelo. Note que ambas as propriedades estão normalizadas pelo seu respectivo valor apresentado ao considerarmos $p = 10^{-4}$ 50
- Figura 11 – Ilustração da dinâmica integra-e-dispara. O nó i recebe sinais unitários das suas conexões de entrada, esses sinais são somados ao longo do tempo, formando o potencial V_i do nó. Quando o potencial ultrapassa o limiar T , o nó dispara sinais unitários para suas arestas de saída. . . 57
- Figura 12 – Exemplo das possíveis divisões estrutura-dinâmica no passeio aleatório direcionado. Cada subfigura mostra o gráfico de dispersão entre a atividade e grau de entrada dos nós. Os pontos estão coloridos de acordo com a comunidade à qual os respectivos nós pertencem. No entorno de cada gráfico de dispersão, plotamos o histograma da variável relacionada ao respectivo eixo do gráfico. (a) Tanto a topologia quanto a dinâmica dos nós não apresentam agrupamento. (b) A topologia dos nós é distinta, mas não a dinâmica. (c) Os nós possuem atividade distintas, mas topologia similares. (d) Observamos dois grupos de nós ao considerarmos tanto a topologia quanto a dinâmica dos mesmos. . . . 62
- Figura 13 – (a) Visualização de como o desbalanço entre comunidades implica em variações nas respectivas eficiências. (b) Invariância relativa da eficiência quando o balanço é mantido constante e a densidade interna da comunidade 2 é variada. As linhas tracejadas correspondem ao resultado teórico obtido com a Equação 3.5. Cada ponto representa 100 realizações do modelo de criação de redes. As barras de erro indicam o desvio padrão calculado sobre essas realizações. 64

Figura 14 – Variação da eficiência de três comunidades para diferentes valores de reciprocidade interna das comunidades. Símbolos representam valores experimentais, obtidos em 100 realizações da rede, enquanto que as linhas tracejadas indicam os valores analíticos esperados para cada comunidade. Cada comunidade possui 1000 nós, e a conectividade entre elas é indicada pela Equação 3.10. Barras de erro indicam o desvio padrão dos valores medidos nas diversas realizações. 66

Figura 15 – Relação entre atividade do passeio aleatório e grau de entrada dos nós para duas redes seguindo a conectividade indicada pela Equação 3.10. As redes diferem apenas pela reciprocidade interna, r , das comunidades, que é de (a) $r = 1$ e (b) $r = 0$. Cada comunidade possui 1000 nós. . . . 66

Figura 16 – Verificação da validade da Equação 3.5 em diferentes topologias de rede. O erro relativo entre valores experimentais e analíticos, indicado pela Equação 3.11 foi utilizado. (a) Erro em função da fração entre grau médio externo e interno das comunidades, as curvas representam diferentes valores de grau médio interno. (b) Erro em função do grau médio externo de nós da comunidade 1, para diferentes razões de tamanhos entre as comunidades. (c) Erro em função da reciprocidade interna das comunidades, para diferentes densidades de conectividade entre as comunidades. 68

Figura 17 – Distribuição de probabilidade acumulada dos graus de redes geradas pelo modelo proposto. A conectividade das redes está indicada na Equação 3.14. Para cada rede, utilizamos um diferente valor de $\bar{x}_{\text{ext}}$, que é mostrado na legenda da figura. Por utilizarmos o modelo BA, esperamos uma distribuição do tipo $F(k) \approx k^{-2}$, também mostrada na figura. 70

Figura 18 – Análise das probabilidades de transição para nós presentes na comunidade 1 de redes possuindo 3 comunidades, onde cada comunidade possui 1000 nós. A primeira linha de gráficos indica a distribuição de valores encontrada experimentalmente, enquanto que a segunda linha indica a distribuição esperada analiticamente. Os gráficos presentes em cada coluna se referem ao mesmo valor de $\bar{x}_{12}$ utilizado, que é indicado sobre cada coluna. 72

- Figura 19 – Variação da eficiência ao modificarmos o balanço de conexões entre comunidades BA. (a) Eficiência de redes geradas experimentalmente, representa por símbolos, comparada com os valores previstos pela Equação 3.17, indicados por linhas tracejadas. (b) Mesmas condições experimentais que em (a), mas utilizando a Equação 3.21 para a predição analítica. Foram geradas 100 realizações para cada caso, sendo que as barras de desvio padrão são mostradas na figura. Cada comunidade possui 3000 nós. 74
- Figura 20 – Verificação da validade da Equação 3.21 em diferentes topologias de rede. Para tanto, o erro relativo entre valores experimentais e analíticos, indicado pela Equação 3.11 foi utilizado. (a) Erro em função da fração entre grau médio externo e interno das comunidades, onde as curvas representam diferentes valores de grau médio interno utilizados. (b) O mesmo que em (a), mas com cada curva representando uma diferente razão entre tamanhos das comunidades. (c) Erro em função do número médio de conexões saindo da comunidade 1 e chegando à comunidade 2, para diferentes densidades internas das comunidades. 75
- Figura 21 – (a) Visualização das duas comunidades do maior componente fortemente conexo da rede cortical da Macaca. O componente é formado por 85 nós e possui um grau médio de $\bar{k} = 27.7$. (b) Relação entre atividade e grau de entrada de cada nó. Os nós estão coloridos de acordo com a comunidade à qual eles pertencem. 76
- Figura 22 – Atividade do passeio aleatório aplicado sobre a rede cortical (círculos) comparada com a atividade da rede gerada pelo modelo (triângulos) e com a predição analítica (linhas tracejadas). 78
- Figura 23 – Visualização de nós especiais na rede da Macaca. Nós coloridos em branco e cinza pertencem às duas comunidades encontradas na rede, enquanto que nós coloridos em vermelho apresentam um forte desvio da nossa predição analítica. Apresentamos duas visualizações, (a) utilizando a posição original dos nós e (b) utilizando o algoritmo Kamada-Kawai para calcularmos as posições dos nós. 79
- Figura 24 – Atividade da dinâmica de passeio aleatório com *fitness* em função do grau dos nós. Foi utilizada uma rede ER de $N = 1000$ nós e $\bar{k} = 20$. (a) Todos os nós possuem o mesmo valor de *fitness*. (b) Metade dos nós possuem o dobro do valor de *fitness* do que a outra metade. 82

Figura 25 – Valores do coeficiente ξ para duas comunidades possuindo distribuição de grau em lei de potência. Os símbolos representam resultados obtidos experimentalmente para 50 realizações da rede. A linha tracejada indica os valores esperados de acordo com a Equação 4.12. Os resultados foram obtidos para (a) diferentes níveis de interconectividade entre as comunidades e (b) diferentes valores de <i>fitness</i> para a comunidade 1.	87
Figura 26 – Atividade do passeio aleatório enviesado, normalizada pelo grau, em função do grau dos nós. As redes utilizadas possuem duas comunidades e conectividade indicada pela Equação 4.19. Cada comunidade possui 1000 nós e topologia interna (a) ER e (b) BA.	90
Figura 27 – Eficiência do passeio aleatório enviesado em função do (a) grau médio externo das comunidades e (b) coeficiente de relacionamento entre o grau e <i>fitness</i> dos nós. Para cada ponto experimental foram utilizadas 50 realizações do modelo.	91
Figura 28 – Atividade do passeio aleatório em função do grau dos nós para a rede de aeroportos americana. A cada nó associamos um valor de <i>fitness</i> igual ao grau do mesmo. (a) Atividade em função do grau encontrada experimentalmente. (b) O mesmo resultado experimental de (a), mas com cada ponto colorido de acordo com a comunidade à qual o respectivo nó pertence. Adicionalmente, as linhas vermelhas indicam a relação esperada de acordo com a Equação 4.18.	92
Figura 29 – Visualização da rede americana de aeroportos. Os nós estão coloridos de acordo com as comunidades identificadas pelo método descrito em.(78)	94
Figura 30 – Análise da atividade real e simulada para a rede de aeroportos americanos. A atividade real é dada pelo número de passageiros que transitaram pelo aeroporto no ano de 2013. (a) Atividade real em função do grau dos nós, a linha vermelha indica a função encontrada por regressão linear dos pontos. (b) Atividade real comparada com a atividade simulada, obtida ao aplicarmos a dinâmica de passeio aleatório com uma regra apropriada dos valores de <i>fitness</i> . Os termos ρ e $\tilde{\rho}$ representam o coeficiente de correlação de Pearson ao considerarmos, respectivamente, as variáveis em escala linear e logarítmica.	95
Figura 31 – Visualização da rede mundial de aeroportos. Cada nó foi colorido de forma a diferenciar o país ao qual ele pertence. Note que devido à limitações de visualização, nós pertencentes a diferentes países podem possuir cores similares.	96

Figura 32 – Coeficiente angular obtido através da regressão linear entre o logaritmo das variáveis π_{real} e π_{teo} (azul) e entre π_{real} e π_{exp} (verde), para diferentes valores de α . O valor ideal de α deve fornecer um coeficiente angular unitário para ambas as relações.	97
Figura 33 – Análise de atividade para a rede global de aeroportos. (a) Atividade dos nós medida numericamente em função do grau. A atividade foi encontrada aplicando-se a dinâmica de passeio aleatório enviesado na condição $\phi_i = k_i^{0.6}$. A linha vermelha indica o valor previsto analiticamente. (b) Atividade real de cada país comparada com a atividade prevista pela Equação 4.17. (c) Atividade real de cada país comparada com a respectiva atividade obtida numericamente. Os termos ρ e $\tilde{\rho}$ indicam, respectivamente, a correlação de Pearson entre as variáveis em escala linear e logarítmica.	98
Figura 34 – Número de passageiros que passaram por aeroportos de cada país no ano de 2013 (normalizados pela soma do número de passageiros total) comparado com a atividade do passeio aleatório encontrada experimentalmente.	98
Figura 35 – Comparação entre o grau dos nós presentes na rede de aeroportos americanos (RITA) e os mesmos aeroportos encontrados na rede de aeroportos global (OpenFlights).	99
Figura 36 – Comparação entre os modelos integra-e-dispara original e simplificado. (a) Fração de nós disparando na rede em função do tempo. (b) Comparação entre a taxa de disparo dos nós ao considerarmos a dinâmica original e a sua versão simplificada. As duas dinâmicas foram aplicadas em uma rede ER possuindo $N = 1000$ e $\bar{k} = 20$. Os parâmetros dinâmicos utilizados estão descritos no texto.	102
Figura 37 – Patamar de ativação da dinâmica integra-e-dispara aplicada sobre redes ER, em função do grau médio da rede. Estão plotados os valores obtidos para o modelo original e simplificado da dinâmica. Cada ponto do gráfico representa 20 realizações da rede e da dinâmica, e barras de erro indicam o desvio padrão observado nas diferentes realizações. . . .	103
Figura 38 – Comparação da distribuição de cargas (potencial) em cada neurônio, calculada experimentalmente e analiticamente utilizando a Equação 5.5. Para cada gráfico foram utilizadas 10 redes ER com $N=10000$. O grau médio e potencial limiar de disparo utilizados estão indicados sobre cada gráfico.	106

- Figura 39 – Patamar de ativação, R , de redes ER para diferentes valores de grau médio e limiar de disparos da dinâmica integra-e-dispara. Os valores foram calculados experimentalmente utilizando redes com $N = 10000$ e 20 realizações para cada ponto da figura. A linha azul indica a fronteira de parâmetros que resultam em $R \approx 0.1$ 107
- Figura 40 – Verificação da magnitude do termo negativo presente na Equação 5.11. Calculamos numericamente os valores de F_k^d , definido na Equação 5.12, para diferentes valores de grau e limiar. Para cada gráfico, a ativação da rede foi mantida em (a) $R=0.1$ e (b) $R=0.3$. Notamos que a região cinza não possui valores calculados, pois F_k^d é definido apenas para $k > T$. 109
- Figura 41 – Comparação entre os valores experimentais e analíticos calculados para (a) P_k^d e (b) C_k . As redes possuem $N = 10000$ e $\langle k \rangle = 40$, e o limiar de disparos foi fixado em $T = 40$. Cada ponto representa 50 realizações experimentais. As barras de erro indicam o desvio padrão calculado ao longo das realizações. 112
- Figura 42 – Comparação entre os valores experimentais e analíticos obtidos para a ativação da dinâmica integra-e-dispara em redes ER. Cada ponto representa 50 realizações do modelo e da dinâmica. As redes possuem $N = 10000$ 114
- Figura 43 – Comparação entre os valores experimentais e analíticos calculados para (a) P_k^d e (b) C_k . As redes possuem $N = 10000$ e $\langle k \rangle = 5$. O limiar de disparos foi fixado em $T = 5$. Cada ponto representa 50 realizações experimentais. 115
- Figura 44 – Energia em função do tempo para a dinâmica integra-e-dispara aplicada em redes ER com $N = 10000$. O tipo de energia que cada curva representa está descrito no texto. As redes utilizadas possuem (a) $\langle k \rangle = 40$ e (b) $\langle k \rangle = 5$ 116
- Figura 45 – Comparação entre valores experimentais e analíticos obtidos para o patamar de ativação da dinâmica integra-e-dispara em redes ER. Os pontos estão coloridos de acordo com o grau médio da respectiva rede utilizada. A abscissa do gráfico indica a diferença entre o limiar de disparos utilizado na dinâmica e o grau médio da rede. 117
- Figura 46 – Relação entre taxa de disparo e grau de entrada para nós de duas comunidades direcionadas com desbalanço de conexões. A linha preta representa a função $f_{i|m} = \xi_m k_i^{\text{in}}$, onde ξ_m foi calculado através de regressão linear dos pontos. 118

Figura 47 – Eficiência de três comunidades de acordo com a conectividade entre as comunidades 1 e 2, para a dinâmica integra-e-dispara. (a) Valores calculados através da regressão linear da relação entre taxa de disparo e grau dos nós. (b) Mesmos valores mostrados em (a), mas normalizados pela taxa global de disparos da rede, R	119
Figura 48 – Eficiência de três comunidades de acordo com a conectividade entre as comunidades 1 e 2, para a dinâmica integra-e-dispara. A linha tracejada indica os valores esperados para a atividade do passeio aleatório, dada pela Equação 3.5.	120
Figura 49 – (a) Taxa de disparo em relação ao grau dos nós na rede <i>C. elegans</i> . O mesmo resultado de (a) é mostrado nos gráficos (b) e (c), mas em cada gráfico destacamos uma das comunidades para fins de melhor visualização. As linhas vermelhas indicam o ajuste linear feito para os valores obtidos em cada comunidade.	122
Figura 50 – Taxa de disparos em relação ao grau de entrada dos nós para diferentes tipos de reconexões aleatórias aplicadas na rede <i>C. elegans</i> . As reconexões foram realizadas segundo o procedimento (a) CM, (b) CMCS e (c) CMC.	123
Figura 51 – Relação entre taxa de disparos e grau dos nós da rede <i>C. elegans</i> , onde colorimos os pontos de acordo com a posição do respectivo neurônio no corpo do animal.	124
Figura 52 – Taxa de disparos em função do grau de entrada de nós na rede <i>C. elegans</i> . Cada ponto está colorido de acordo com uma das 5 comunidades à qual ele pertence. As linhas indicam as eficiências calculadas experimentalmente para cada comunidade. O gráfico superior esquerdo apresenta o comportamento de todas as comunidades no mesmo eixo. Os demais gráficos mostram o comportamento individual de cada comunidade. . .	126
Figura 53 – (a) Visualização da rede <i>C. elegans</i> através do algoritmo Kamada-Kawai.(166) As principais funções de cada comunidade estão indicadas na figura. (b) Evolução temporal da eficiência de cada comunidade na dinâmica integra-e-dispara.	128
Figura 54 – Propriedades do patamar de ativação da dinâmica integra-e-dispara em redes WS. (a) Patamar de ativação, R , em função da fração de reconexões p . (b) Coeficiente de variação do patamar de ativação para diferentes p . As redes utilizadas possuem $N = 100000$, $\bar{k} = 40$. O limiar de disparos foi fixado em $T = 40$. Cada ponto representa 10 realizações da rede e da dinâmica. As barras de erro, representando o desvio padrão para as 10 realizações, estão mostradas no gráfico.	129

- Figura 55 – Propriedades do modelo WS para diferentes frações de reconexão, p , da rede. (a) Coeficiente de aglomeração e média dos menores caminhos. Os valores de ambas propriedades foram divididos pelo valor obtido para $p = 0.0001$. (b) Valor absoluto do coeficiente de aglomeração para diferentes p . As redes utilizadas possuem $N = 10000$ e $\bar{k} = 6$. Cada ponto do gráfico representa 10 realizações do modelo. 130
- Figura 56 – Comparação entre os valores experimentais e analíticos calculados para o patamar de ativação de redes WS. Os valores analíticos foram calculados através da Equação 5.25. As redes possuem $N = 100000$. Foram consideradas 10 realizações para cada ponto experimental, sendo que o desvio padrão dos valores calculados para as realizações é muito pequeno para ser mostrado no gráfico. 131
- Figura 57 – Resultados da dinâmica integra-e-dispara aplicada numa rede possuindo comunidades WS com diferentes probabilidades de reconexão p . (a) Fração de nós disparando na rede em função do tempo, calculada separadamente para cada comunidade. (b) Taxa de disparo dos nós presentes em cada comunidade, em função do respectivo grau. 133
- Figura 58 – Eficiência de duas comunidades de acordo com o número de conexões entre as mesmas. As comunidades diferem topologicamente de acordo com o parâmetro p utilizado na sua geração. Cada comunidade possui 10000 nós. Utilizamos um limiar de $T = 43$ para a dinâmica. Cada ponto do gráfico representa 20 realizações da rede e da dinâmica. . . . 133
- Figura 59 – Diferença de eficiência entre duas comunidades de acordo com o número de conexões entre as mesmas. As comunidades foram geradas segundo o modelo WS, e possuem 10000 nós cada. (a) Diferença de eficiência ao considerarmos diversos valores para a fração de reconexão, p , de uma das comunidades. Nesse caso, as comunidades possuem $\bar{x}_{\text{int}} = 40$. (b) Diferença de eficiência ao variarmos o grau médio interno, $\bar{x}_{\text{int}}$, das duas comunidades. Uma comunidade possui $p = 1$, enquanto que a outra possui $p = 0.1$ 134
- Figura 60 – Regularidade de disparos observada para duas comunidades geradas pelo modelo WS com diferentes parâmetros p . As comunidades possuem $\bar{x}_{\text{int}} = 20$, $\bar{x}_{\text{ext}} = 5$ e 1000 nós. O gráfico à esquerda mostra a distribuição do desvio padrão de intervalos entre disparos para cada comunidade. Os gráficos à direita mostram alguns exemplos de trem de disparos observados nas comunidades. 135

Figura 61 – Coeficiente de variação, CV_I , dos intervalos entre disparos calculados para a dinâmica integra-e-dispara. As redes consideradas possuem $N = 75000$ e $\bar{k} = 40$. O limiar de disparo da dinâmica foi fixado em $T = 40$. (a) Distribuição de CV_I para diferentes valores de p . (b) Média dos valores de CV_I ao longo de p . Note que as barras do gráfico indicam o desvio padrão da distribuição, e não o desvio padrão para as diferentes realizações do modelo. 136

Figura 62 – Média do coeficiente de variação de intervalos entre disparos, em função do grau médio externo das comunidades. Foram utilizadas redes formadas por duas comunidades, cada qual com $\bar{x}_{\text{int}} = 40$ e 75000 nós. O potencial limiar de disparos foi variado de acordo com o grau médio da rede. Cada ponto representa 10 realizações da rede e da dinâmica. As barras de erro indicam o desvio padrão observado para as 10 realizações. 137

Figura 63 – Influência de conexões inibitórias internas às comunidades (Interna) e entre as comunidades (Externa) na ativação da rede *C. elegans*. (a) Patamar de ativação em função da fração de conexões inibitórias, f_I . (b) Diferença média entre as curvas mostradas em (a). Cada ponto em ambos os gráficos representa 1000 realizações da dinâmica integra-e-dispara. Barras de erro indicam o desvio padrão ao longo das realizações. O limiar de disparo utilizado foi $T=15$ 139

Figura 64 – Influência de conexões inibitórias internas às comunidades (Interna) e entre as comunidades (Externa) na ativação de redes com comunidades. A topologia das redes consideradas possui (a) a mesma estrutura de comunidades e (b) a mesma estrutura de comunidades e distribuição de grau da rede *C. elegans*. Em ambos os gráficos mostramos o patamar de ativação em função da fração de conexões inibitórias. Cada ponto representa 1000 realizações da dinâmica integra-e-dispara. Barras de erro indicam o desvio padrão ao longo das realizações. O limiar de disparo utilizado foi $T=15$ 140

Figura 65 – Ilustração dos sistemas estudados e reprodução dos principais resultados obtidos no presente trabalho. A parte superior dessa figura, representando as quatro formas de diferenciação de comunidades, foi apresentada no Capítulo 1. (a) Rede direcionada, sobre a qual estudamos o passeio aleatório tradicional. (b) Rede possuindo nós com diferentes valores de *fitness*, onde estudamos o passeio aleatório enviesado. (c) Comunidades possuindo topologia Watts-Strogatz, e conectadas de forma uniformemente aleatória, sobre as quais estudamos a dinâmica integra-e-dispara. (d) Redes possuindo conexões inibitórias internas ou externas às comunidades para a dinâmica integra-e-dispara. Os respectivos resultados para cada caso foram apresentados e discutidos na (a1) Seção 3.1 e 3.2, (a2) Seção 3.3, (b1) Seção 4.1, (b2) Seção 4.2, (c1) Seção 5.4, (c2) Seção 5.4, (d1) Seção 5.5 e (d2) Seção 5.5. 143

Lista de tabelas

Tabela 1	– Razão entre os coeficientes ξ de duas comunidades para diferentes níveis de modularidade da rede. As expressões foram calculadas utilizando a Equação 4.15.	87
Tabela 2	– Razão entre eficiências das duas comunidades da rede <i>C. elegans</i> em diferentes situações experimentais, e também no caso da rede real. . . .	124
Tabela 3	– Funções associadas às comunidades da rede <i>C. elegans</i> . A terceira coluna indica o papel desempenhado pela maioria dos neurônios presentes na respectiva comunidade. As funções estão ordenadas de acordo com o número de neurônios relacionados. A quarta coluna indica a porcentagem de neurônios da comunidade possuindo tais funções.	127
Tabela A4	– Principais pacotes Python utilizados no desenvolvimento das análises. .	163

Lista de Abreviaturas e Siglas

BA	Barabási-Albert
CV	Coeficiente de Variação
ER	Erdős-Rényi
IATA	<i>International Air Transport Association</i>
PF	Partição Fixa
RITA	<i>Research and Innovative Technology Administration</i>
WS	Watts-Strogatz

Lista de Símbolos

$\mathcal{T}_c$	Conjunto de características topológicas da comunidade c
$\mathcal{D}_c$	Conjunto de características dinâmicas da comunidade c
$\mathcal{T}_{r \leftrightarrow c}$	Conjunto de características topológicas da conectividade entre as comunidades r e c
$\mathcal{D}_{r \leftrightarrow c}$	Conjunto de características dinâmicas do relacionamento entre as comunidades r e c
$\mathbf{A}$	Matriz de adjacência da rede
a_{ij}	Elemento da linha i e coluna j da matriz de adjacência
k_i	Grau do nó i
N	Número de nós da rede
k_i^{in}	Grau de entrada do nó i
k_i^{out}	Grau de saída do nó i
P_x	Função massa de probabilidade da variável discreta x
$\delta_{i,j}$	Delta de Kronecker
$\bar{x}, \langle X \rangle$	Média da variável aleatória X
E, M	Número de arestas da rede
(i, j)	Aresta presente entre os nós i e j
r	Reciprocidade da rede
r_m	Reciprocidade da comunidade m
N_c	Número de nós da comunidade c
Q	Modularidade da rede
$x_m(i)$	Grau do nó i , presente na comunidade m
$x_{mq}(i)$	Número de conexões que o nó i , presente na comunidade m , faz com nós da comunidade q
$x_m^{\text{in}}(i)$	Grau de entrada do nó i , presente na comunidade m

$x_m^{\text{out}}(i)$	Grau de saída do nó i , presente na comunidade m
$\bar{x}_{mq}$	Número médio de conexões que nós da comunidade m fazem com nós da comunidade q
$\bar{x}_{\text{int}}$	Grau médio entre nós da mesma comunidade
$\bar{x}_{\text{ext}}$	Grau médio entre nós de comunidades distintas
σ_x	Desvio padrão da variável x
n	Número de comunidades da rede
κ	Matriz de conectividade média entre comunidades, utilizada no modelo de partição fixa
p	Probabilidade de reconexão de arestas no modelo Watts-Strogatz
$\mathcal{A}$	Atividade do passeio aleatório na rede, dada pela probabilidade estacionária da dinâmica
$\mathcal{A}_{i m}$	Atividade do passeio aleatório para o nó i , presente na comunidade m
$\mathbf{T}$	Matriz de transição do passeio aleatório
ϕ_i	<i>Fitness</i> associado ao nó i
$R^d(t)$	Patamar de ativação da rede na dinâmica integra-e-dispara
f_i	Taxa de disparos do nó i na dinâmica integra-e-dispara
R	Patamar de ativação do estado auto-sustentado assíncrono da dinâmica integra-e-dispara
V_i^t	Potencial do nó i no instante t na dinâmica integra-e-dispara
T	Potencial limiar de disparo para a dinâmica integra-e-dispara
p_{mh}	Probabilidade de transição do passeio aleatório entre as comunidade m e h
π_m	Probabilidade de encontrarmos o agente do passeio aleatório na comunidade m
$\mathbf{X}_m$	Classe de equivalência de nós da comunidade m
ξ_m	Eficiência da comunidade m
$\mathbf{r}$	Sequência de valores indicando a reciprocidade de cada comunidade da rede

$\mathcal{X}$	Erro relativo da predição analítica para o passeio aleatório
$R_{mh}(i)$	Probabilidade de transição entre as comunidades m e h , dado que o agente se encontra sobre o nó i
Φ_m	<i>Fitness</i> associado a todos os nós da comunidade m
Ψ_m	Classe de equivalência do passeio aleatório enviesado para nós da comunidade m
Γ_i	Conjunto de nós vizinhos ao nó i
α	Expoente do relacionamento entre os valores de <i>fitness</i> e grau para cada nó
θ	Fase de carga de um nó qualquer da rede
y	Ganho de carga típico de um nó qualquer da rede
P_k^y	Probabilidade de que um nó de grau k receba uma carga y em um dado instante de tempo
P_k^c	Probabilidade de que um nó de grau k possua carga c em um dado instante de tempo
$\min(a, b)$	Menor valor entre as variáveis a e b
$\max(a, b)$	Maior valor entre as variáveis a e b
P^c	Probabilidade de encontrarmos um nó com carga c em um dado instante de tempo
P_k^d	Probabilidade de que um nó de grau k dispare em um dado instante de tempo
F_k^d	Termo de aproximação da dinâmica integra-e-dispara
C_k	Carga típica apresentada por nós de grau k disparando sinais
$E_T(t)$	Energia total da rede no instante t
CV_x	Coefficiente de variação da variável x
CM	Modelo de configuração
CMC	Modelo de configuração com comunidades
CMCS	Modelo de configuração com comunidades simetrizadas
f_I	Fração de conexões inibitórias na dinâmica integra-e-dispara

Sumário

1	INTRODUÇÃO	31
2	CONCEITOS BÁSICOS	39
2.1	Notação e medidas básicas	39
2.2	Comunidades em redes	42
2.2.1	Definição	42
2.2.2	Notação para redes com comunidades	44
2.3	Modelos de rede utilizados	46
2.4	Redes reais utilizadas	49
2.5	A dinâmica de passeio aleatório em redes	51
2.5.1	Passeio aleatório em redes direcionadas	52
2.5.2	Passeio aleatório enviesado	53
2.6	A dinâmica integra-e-dispara em redes	54
3	PASSEIO ALEATÓRIO EM REDES DIRECIONADAS MODULARES	59
3.1	Passeio aleatório em redes com comunidades Erdős-Rényi	59
3.2	Passeio aleatório em redes com comunidades Barabási-Albert	69
3.3	Comportamento específico de comunidades na rede da Macaca	75
4	PASSEIO ALEATÓRIO ENVIESADO EM REDES MODULARES .	81
4.1	Influência do <i>fitness</i> na relação topologia-dinâmica	82
4.2	Atuação do <i>fitness</i> em redes de aeroportos	91
4.2.1	Rede americana de aeroportos	91
4.2.2	Rede global de aeroportos	95
5	INTEGRA-E-DISPARA EM REDES MODULARES	101
5.1	Comparação entre a dinâmica simplificada e original	101
5.2	Análise teórica da dinâmica integra-e-dispara em redes Erdős-Rényi	103
5.3	Integra-e-dispara em redes direcionadas com comunidades	116
5.3.1	Integra-e-dispara em comunidades Erdős-Rényi	116
5.3.2	Integra-e-dispara na rede <i>Caenorhabditis elegans</i>	121
5.4	Integra-e-dispara no modelo Watts-Strogatz	127
5.4.1	Integra-e-dispara em redes Watts-Strogatz sem comunidades	127
5.4.2	Integra-e-dispara em redes com comunidades Watts-Strogatz	131
5.5	Integra-e-dispara com conexões inibitórias	138
6	CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS	141

REFERÊNCIAS 147

APÊNDICE A – Recursos computacionais 161

1 Introdução

A área de redes complexas cresceu muito nos últimos 15 anos.(1–6) Iniciada em meados de 1999 com a modelagem da estrutura da *World Wide Web* (7,8), da internet (9) e do efeito de pequeno mundo (10), atualmente já se tornou uma área desenvolvida a ponto de possuir subáreas como redes temporais (11), redes multicamadas (12,13) e sincronização.(14) Isso porque foi-se percebendo cada vez mais que estudos clássicos, principalmente em física, biologia e ciências sociais, possuíam sérias limitações ao se considerar uma topologia de interação uniforme entre os elementos que compõe o sistema. Num primeiro momento, pesquisadores da área procuraram descobrir *quais* eram as diferenças na topologia de interação que deviam ser consideradas. Com isso, muitos estudos foram feitos sobre os mais diversos temas relacionados à topologia de redes, como o efeito de pequeno mundo (10,15), a distribuição de grau em lei de potência (7,8,16), a presença de comunidades (17–19), a robustez de redes (20–22), o efeito da correlação de grau entre nós vizinhos (23,24), dentre outros.(16,25–28) Posteriormente, surgiram estudos focados na influência da topologia em dinâmicas ocorrendo *sobre* a rede.(14,26,27,29,30) Ao longo dos anos o número de estudos de dinâmicas em redes continuou crescendo, e atualmente existe uma vasta literatura sobre o tema, incluindo, epidemias (5,29), sincronização (14), modelos de opinião (31,32), dinâmicas neuronais (33–35), navegação em redes (36,37), dentre outros.(1)

O estudo do relacionamento entre topologia e dinâmica em redes é motivado por três aspectos principais, que chamaremos de previsão, planejamento e otimização. Quanto ao aspecto da previsão, a ideia é verificarmos como a estrutura restringe ou mesmo define dinâmicas ocorrendo sobre a rede, o que possibilita a obtenção de previsões sobre o comportamento dinâmico do sistema. Por exemplo, é possível analisarmos o impacto que a falha de um grupo de roteadores possui no tráfego de dados da Internet.(21,22) Em relação ao planejamento, se o relacionamento topologia-dinâmica de um sistema for previamente conhecido, o sistema pode ser projetado para exibir características dinâmicas desejadas. Um exemplo desse aspecto é o planejamento da malha de ruas de uma cidade com a finalidade de evitar possíveis congestionamentos.(38) Por último, a otimização diz respeito à modificação progressiva da estrutura com a finalidade de se otimizar certas propriedades dinâmicas do sistema. Por exemplo, podemos nos perguntar que conexões de uma rede social precisam ser controladas para que a velocidade de propagação de um rumor seja maximizada.(39)

Inserido na análise do relacionamento entre a estrutura e dinâmica de redes está o estudo do impacto que comunidades (40) representam em tal relacionamento. Estudos iniciais sobre o tema foram feitos especialmente sobre redes sociais.(41) Apesar desses

Figura 1 – Exemplo de rede modular. Os nós estão coloridos de acordo com a comunidade à qual eles pertencem.

Fonte: Elaborada pelo autor.

estudos serem muito simplificados, e em geral não considerarem a dinâmica do sistema, várias ideias foram aproveitadas na teoria moderna de redes. Por exemplo, o conceito de *mixing* dos nós (42), que descreve a probabilidade de indivíduos de diferentes comunidades se conectarem entre si, possui suas origens na análise de redes sociais.(41) Claramente, foi com o trabalho de Newman e Girvan (19) que o assunto ganhou maior notoriedade. Os autores descreveram um algoritmo que poderia ser usado para detectar comunidades em redes e, mais importante, definiram a medida de modularidade, que possibilitava medir quão nítida era a divisão dos nós nas comunidades encontradas. Na Figura 1 mostramos um exemplo de uma rede considerada modular, composta por duas comunidades. A partir do trabalho de Newman e Girvan, inúmeros métodos de detecção de comunidades em redes simples não direcionadas foram criados (17), e posteriormente houve extensões para redes com peso (43,44) e direcionadas.(18) Uma referência para se conhecer muitos desses métodos é o artigo publicado por Fortunato.(17)

A extensão natural da análise de comunidades em redes foi o estudo do relacionamento entre comunidades e o comportamento dinâmico do sistema. Esses estudos podem ser divididos em duas classes. Na primeira, o pesquisador encontra a estrutura de comunidades da rede e então se pergunta *porque* o sistema está dividido na forma encontrada. Análises em diversos tipos de redes, como redes de interação de proteínas (45–48), redes corticais (49–52), redes metabólicas (53–56) e redes sociais (40, 57–59) foram realizadas com essa finalidade. A segunda classe de estudos é focada em aplicar uma dinâmica na rede com comunidades e verificar o efeito dessas comunidades no comportamento dinâmico dos nós. Dinâmicas de epidemia (60–63), sincronização (64–67), difusão (68–71) e atividade neuronal (34, 72–74) são comumente utilizadas para tal finalidade.

Apesar de existirem muitos estudos relacionados à influência de comunidades na topologia e dinâmica de redes, há um aspecto desse problema que foi pouco analisado na literatura. Ele consiste no fato de que a modularidade, por si só, não provoca diferenças dinâmicas entre as comunidades de um sistema. Por exemplo, apesar da rede mostrada

na Figura 1 ser modular, as comunidades consideradas, e as conexões entre elas, são perfeitamente simétricas. Nesse caso, se todos os nós da rede possuírem os mesmos parâmetros dinâmicos, as duas comunidades apresentarão exatamente a mesma dinâmica, não importando a modularidade da rede. A riqueza de comportamentos usualmente observada em redes com comunidades surge justamente da combinação entre modularidade e desigualdades topológicas e dinâmicas das comunidades.

Intuitivamente, grupos de nós pertencentes a uma comunidade podem se diferenciar do restante do sistema através de quatro modos principais. Na Figura 2 apresentamos esses diferentes modos. O sistema original, ilustrado na Figura 2(a), possui propriedades topológicas $\mathcal{T}_r$ e dinâmicas $\mathcal{D}_r$. Um subgrupo de elementos c , indicado em cinza escuro na Figura 2(a), possuindo uma certa densidade de conexões com o restante do sistema, se diferencia de acordo com os seguintes aspectos. No primeiro, mostrado na Figura 2(b), os elementos do subgrupo alteram sua conectividade de forma a possuírem propriedades topológicas $\mathcal{T}_c$ diferentes do restante do sistema, dando origem a uma topologia interna diferenciada. Por exemplo, podemos ter que a densidade de conexões entre nós do subgrupo é maior do que o esperado para o sistema. O segundo aspecto pelo qual os nós podem se diferenciar é através de suas características dinâmicas $\mathcal{D}_c$ internas, como representado na Figura 2(c). Um exemplo seria uma maior susceptibilidade desses nós a certas doenças, caso os nós representem pessoas interagindo numa rede social.

A terceira possibilidade de diferenciação ocorre na conectividade, $\mathcal{T}_{r \leftrightarrow c}$, entre os elementos de c e o restante do sistema. Tal conectividade representa o que chamaremos de fronteira topológica da comunidade. Este caso está ilustrado na Figura 2(d). A modularidade pertence à essa forma de diferenciação. Entretanto, pelo fato da modularidade agir ativamente em todas as outras forma de diferenciação, nesse trabalho a consideraremos como uma característica à parte do sistema. Outros fatores, como posicionamento das arestas, direção ou peso também podem influenciar em $\mathcal{T}_{r \leftrightarrow c}$.

A quarta possibilidade de diferenciação, indicada na Figura 2(e), decorre de propriedades do relacionamento dinâmico $\mathcal{D}_{r \leftrightarrow c}$ entre nós de c e o restante da rede, ou seja, da fronteira dinâmica da comunidade. Por exemplo, em uma rede neuronal os nós de c , representando neurônios, podem projetar um alto número de conexões inibitórias para o restante da rede.

As quatro formas de diferenciação apresentadas raramente podem ser estudadas isoladamente em sistemas reais. Isso porque o surgimento de uma comunidade está associado a um relacionamento cíclico entre os quatro fatores de diferenciação. Isto é, uma pequena diferenciação dinâmica em um grupo de nós pode provocar uma alteração da conectividade entre os mesmos, que por sua vez altera a conectividade entre esses nós e o restante do sistema, e assim por diante. Em geral, a propriedade que permeia esse relacionamento cíclico, e de fato influencia fortemente o comportamento da comunidade,

Figura 2 – Esquemática das possíveis formas de diferenciação de comunidades em redes, e sua relevância para o estudo da relação entre topologia e dinâmica. (a) Representação de uma rede possuindo propriedades topológicas $\mathcal{T}_r$ e dinâmicas $\mathcal{D}_r$. Um subgrupo de nós c presente nessa rede, indicado pela região cinza escuro, possui maior densidade de conexões internas do que com o restante da rede, ou seja, o subgrupo c representa um módulo da rede. Esse subgrupo pode se diferenciar do restante da rede através de parâmetros da sua (b) topologia interna, (c) dinâmica interna, (d) fronteira topológica e (e) fronteira dinâmica. (f) Tal diferenciação pode provocar uma separação dos nós ao considerarmos certas propriedades topológicas e dinâmicas.

Fonte: Elaborada pelo autor.

é a diferença de densidade interna e externa de arestas conectadas à comunidade, que já apresentamos como sendo a modularidade da rede. É importante ressaltar que poderíamos definir medidas de modularidade para cada forma de diferenciação apresentada. Nesse caso, o termo *modularidade* seria utilizado no sentido literal da palavra, ou seja, ele estaria associado à presença de módulos na rede, e não no sentido da medida clássica de redes definida em (19). Entretanto, não investigaremos tais definições nesse trabalho e, portanto, usaremos o termo modularidade para indicar especificamente a presença de variações de densidades entre grupos de nós.

Ao modelarmos um sistema através de redes, permitimos a variação de parâmetros do modelo, sejam eles topológicos ou dinâmicos, e a caracterização de como tais parâmetros influenciam em propriedades de interesse do sistema. O objetivo do nosso trabalho é promovermos a variação sistemática de parâmetros de comunidades, e verificarmos como estes modificam propriedades relevantes de diferentes tipos de sistemas. Em particular,

estamos interessados em estudar a influência de certos parâmetros na modificação do *relacionamento* entre a topologia e dinâmica de comunidades, como indicado na Figura 2(f).

Para ilustrarmos essa ideia de forma mais clara, utilizaremos uma rede real onde tal fenômeno pode ser observado. A rede que utilizaremos representa a conectividade típica entre regiões do córtex de animais do gênero *Macaca*.⁽⁷⁵⁾ Essa rede será denominada como rede da Macaca no decorrer do texto. Na rede em questão, cada região do córtex é representada por um nó. Se a região i envia projeções axonais para a região j , associamos a esse par de nós uma aresta direcionada saindo de i e apontando para j . Como discutido em (76), essa rede possui duas comunidades bem definidas, cada qual possuindo propriedades topológicas distintas. Por motivos que serão explicados nos próximos capítulos, podemos utilizar uma dinâmica de difusão (77) para estudar o papel da topologia na propagação de *atividade* cortical ao longo dessa rede.

Se desconsiderarmos a direção das arestas e aplicarmos a dinâmica de difusão sobre a rede da Macaca, obtemos o relacionamento entre atividade e grau mostrado na Figura 3(a). Nessa situação, a atividade dos nós é completamente determinada pelo grau (isto é, o número de conexões) dos mesmos. Portanto, existe uma relação única entre a atividade dos nós (dinâmica) e o respectivo grau (topologia). Ao considerarmos a direção das arestas na dinâmica de difusão, temos o resultado mostrado na Figura 3(b). Nesse caso, o relacionamento, antes único, entre atividade e grau é separado em dois grupos principais. Isso quer dizer que a adição de direção nas arestas impõe restrições globais à dinâmica de tal forma que passamos a observar diferentes atividades para nós de grau similares. Em ambas as figuras, colorimos os nós de acordo com duas comunidades presentes na rede, encontradas através de um método de otimização da modularidade.⁽⁷⁸⁾ Vemos que os agrupamentos observados se relacionam com as comunidades identificadas na rede. Portanto, temos que a relação entre atividade e grau dos nós se modifica dependendo da comunidade à qual eles pertencem. Ainda mais interessante é o fato de que ao considerarmos o grau ou a atividade de forma isolada, não observamos os mesmos agrupamentos de nós. Esse fato pode ser visto através dos histogramas de cada medida, mostrados na Figura 3(b).

A modificação do relacionamento entre topologia e dinâmica de comunidades dá origem ao que chamaremos de *comportamento específico* da comunidade. Pretendemos estudar variadas topologias e dinâmicas de redes, buscando identificar casos onde é possível quantificarmos o conceito de comportamento específico. É importante observarmos que tal estudo necessita primeiramente da definição das características topológicas e dinâmicas do sistema a serem comparadas. No nosso caso, usualmente consideraremos como propriedade topológica o grau dos nós. Já em relação à dinâmica, buscaremos utilizar propriedades que estejam associadas à ideia de atividade dinâmica dos nós, como por exemplo a taxa de disparos de neurônios ou o número de passageiros em aeroportos. Dessa forma,

Figura 3 – Exemplo de modificação no relacionamento entre topologia e dinâmica em comunidades. Através de uma dinâmica de difusão aplicada sobre a rede cortical da Macaca (75), podemos associar valores de atividade à cada nó da rede. (a) Se desconsiderarmos a direção das arestas, temos uma relação trivial entre atividade e grau. (b) A mesma dinâmica aplicada sobre a rede direcionada apresenta diferentes relacionamentos entre atividade e grau. Analisando as distribuições de cada propriedade de forma isolada, mostradas na forma de histogramas, não podemos identificar o mesmo agrupamento observado. Em ambas as figuras, os nós estão coloridos de acordo com as comunidades identificadas pelo algoritmo descrito em.(78)

Fonte: Elaborada pelo autor.

buscaremos associar os casos estudados com a ideia de *eficiência* da comunidade. Esse conceito está relacionado com a atividade que a comunidade consegue exercer dado um custo para sua criação e manutenção. Por exemplo, no caso da rede da Macaca temos que nós presentes em uma das comunidades possuem maior atividade do que nós de grau similar associados à outra comunidade. Nesse cenário podemos dizer que, levando em conta essas duas propriedades, uma comunidade é mais eficiente do que a outra. Essa diferença de eficiência leva ao agrupamento observado no espaço topologia-dinâmica.

É importante observarmos que o conceito de comportamento específico, e seu impacto no relacionamento entre topologia e dinâmica, possui algumas similaridades com o recente tópico de redes multicamadas.(12,13) A principal diferença é que estudos em redes multicamadas usualmente consideram os nós e arestas em diferentes contextos de interação. Por exemplo, em uma rede social, uma das camadas da rede, que poderíamos chamar de comunidade, pode representar a interação de trabalho entre pessoas numa empresa, enquanto que a outra camada representa interações familiares. Apesar dessa abordagem estar relacionada com os nossos estudos, não pretendemos considerar tal generalização nos sistemas que analisaremos.

De forma a realizarmos uma análise abrangente dos processos envolvidos no rela-

cionamento topologia-dinâmica em redes, estudaremos os quatro casos de diferenciação indicados na Figura 2. Primeiramente, investigaremos a dinâmica de passeio aleatório (77) em redes direcionadas (Capítulo 3). Mostraremos que essa dinâmica apresenta uma inesperada riqueza de comportamentos ao modificarmos a conectividade interna e externa das comunidades. Em especial, veremos que a alteração da direção das arestas entre comunidades leva a diferentes relacionamentos entre topologia e dinâmica na rede. Através de resultados analíticos e modelos experimentais, apresentaremos uma explicação para o agrupamento observado na rede da Macaca.

Passaremos então ao estudo de uma dinâmica de passeio aleatório na qual os nós possuem variadas probabilidades de receber visitas (37) (Capítulo 4). Essa dinâmica representa o caso de diferenciação no qual comunidades podem possuir propriedades dinâmicas distintas. Mostraremos analiticamente que a atividade da dinâmica possui diferentes relacionamentos com o grau dos nós dependendo do nível de modularidade da rede.

Em seguida, estudaremos a dinâmica neuronal integra-e-dispara (79) (Capítulo 5). Primeiramente, realizaremos um estudo analítico sobre a dinâmica aplicada em redes sem a presença de comunidades. Na sequência, verificaremos a influência da densidade de atalhos de comunidades na taxa de disparos da rede, bem como na regularidade dos sinais dinâmicos apresentados pelos nós. Tal situação representa comunidades com diferenciação topológica interna. Em seguida, estudaremos a atuação de conexões inibitórias na dinâmica. Consideraremos tanto casos onde as conexões inibitórias são adicionadas internamente às comunidades, quanto casos onde essas conexões aparecem entre comunidades, dando origem à fronteiras dinâmicas na rede. Mostraremos que o posicionamento das arestas inibitórias possui forte influência no comportamento global do sistema.

No capítulo 6, apresentaremos nossas conclusões sobre os estudos realizados. Mencionaremos também possíveis trabalhos futuros a serem elaborados sobre o tema.

2 Conceitos básicos

Apresentaremos nesse capítulo alguns conceitos básicos necessários para o entendimento dos estudos realizados. Em especial, apresentaremos os modelos de redes e as redes reais utilizadas, bem como as dinâmicas que aplicaremos nessas redes.

2.1 Notação e medidas básicas

Uma rede, também chamada de grafo, G é representada matematicamente pelo par ordenado $G = (\mathcal{V}, \mathcal{E})$, que corresponde a um conjunto $\mathcal{V}$ de vértices, também chamados de nós, relacionado a um conjunto $\mathcal{E}$ de arestas, ou conexões. Para definirmos a estrutura de uma rede é comum utilizarmos uma matriz de adjacência $\mathbf{A}$, na qual o elemento a_{ij} é o valor na linha i e coluna j da matriz. No caso de uma rede *simples*, $a_{ij} = 1$ se o nó i estiver conectado ao nó j , e $a_{ij} = 0$ caso contrário. Na Figura 4(a) apresentamos um exemplo de rede simples. Podemos também definir uma rede na qual as arestas possuem direção, isto é, dizemos que a aresta sai do nó i e chega ao nó j . Nesse caso $a_{ij} = 1$, mas não necessariamente temos que $a_{ji} = 1$, ou seja, a matriz $\mathbf{A}$ é em geral não simétrica. Na Figura 4(b) mostramos um exemplo de rede direcionada.

Figura 4 – Exemplo de rede (a) simples e (b) direcionada.

Fonte: Elaborada pelo autor.

A medida mais básica de um vértice da rede é o número de arestas que estão conectadas ao mesmo, chamada de grau do vértice. Para uma rede simples, o grau k_i de

um vértice i é dado por

$$k_i = \sum_{j=1}^N a_{ij}, \quad (2.1)$$

onde N é o número de nós da rede. Note que a somatória poderia ser feita no índice i , já que a matriz $\mathbf{A}$ de uma rede simples é simétrica. Caso a rede seja direcionada, cada vértice possui tanto um grau de *entrada* (número de conexões que apontam para o vértice) quanto um grau de *saída* (número de conexões que saem do vértice). Os graus de entrada k_i^{in} e saída k_i^{out} do vértice i são dados por

$$k_i^{\text{in}} = \sum_{j=1}^N a_{ji} \quad (2.2)$$

$$k_i^{\text{out}} = \sum_{j=1}^N a_{ij}. \quad (2.3)$$

Outro conceito importante é a distribuição de grau P_k de uma rede (1), que nada mais é do que o número de nós da rede possuindo grau k , normalizada pelo número total de nós da rede. Matematicamente, escrevemos P_k na forma

$$P_k = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta_{k, k_i}, \quad (2.4)$$

onde $\delta_{i,j} = 1$ se $i = j$ e $\delta_{i,j} = 0$ caso contrário, e k_i representa o grau do nó i . A definição para a distribuição de grau de entrada $P_{k^{\text{in}}}$ e saída $P_{k^{\text{out}}}$ é análoga. É importante observarmos que ao longo do texto usaremos o símbolo P_x para representar a função de probabilidade de uma dada variável discreta x .

Uma propriedade de fundamental importância para o estudo de redes é o grau médio que a rede possui, que é definido pela equação

$$\bar{k} = \sum_{k=0}^{\infty} P_k k. \quad (2.5)$$

Notamos que ao longo do texto utilizaremos tanto o símbolo $\bar{x}$ quanto $\langle x \rangle$ para representarmos a média da variável x . Dada a definição do grau médio, a propriedade

$$N\bar{k} = 2E \quad (2.6)$$

é válida para qualquer rede simples, sendo que E é o número de arestas da rede.

Para redes direcionadas, podemos calcular tanto o grau médio de entrada quanto de saída. No entanto, essas duas propriedades possuem o mesmo valor para qualquer rede direcionada (1), ou seja,

$$\bar{k}^{\text{in}} = \sum_{k^{\text{in}}=0}^{\infty} P_{k^{\text{in}}} k^{\text{in}} = \sum_{k^{\text{out}}=0}^{\infty} P_{k^{\text{out}}} k^{\text{out}} = \bar{k}^{\text{out}}. \quad (2.7)$$

Em se tratando de redes direcionadas, é interessante quantificarmos o grau de “direcionabilidade” das arestas. Se os nós i e j estiverem conectados apenas por uma aresta (i, j) (saindo de i e apontando para j) ou (j, i) (saindo de j e apontando para i), dizemos que a relação entre i e j é não recíproca, ou não mútua. Se ambas as arestas estiverem presentes, a relação entre eles é recíproca, ou mútua. A medida de reciprocidade (41, 80) quantifica a fração de relacionamentos mútuos na rede. Sua definição mais usual (41) é dada por

$$r = \frac{E^{\leftrightarrow}}{E^{\rightarrow} + E^{\leftrightarrow}}, \quad (2.8)$$

onde $E^{\leftrightarrow}$ é o número de relacionamentos recíprocos e $E^{\rightarrow} = E - 2E^{\leftrightarrow}$ o número de relacionamentos não recíprocos.

Uma outra definição de reciprocidade, as vezes utilizada na literatura, indica a probabilidade de haver uma aresta (j, i) dado que a aresta (i, j) está presente na rede. Essa definição é dada pela equação

$$r' = \frac{2E^{\leftrightarrow}}{E}. \quad (2.9)$$

Há ainda uma terceira definição proposta em (81), que quantifica a reciprocidade da rede relativa a uma rede aleatória de mesmo tamanho e grau médio. Optamos por utilizar a definição imposta pela Equação 2.8, pelo fato dessa ser mais largamente utilizada na literatura. Na Figura 5 apresentamos três exemplos de redes possuindo diferentes valores de reciprocidade.

Outra característica de rede que utilizaremos é a chamada média de tamanho dos menores caminhos.(1) Um caminho de tamanho n entre os nós i e j é definido como uma sequência de nós $S = (q_1, q_2, \dots, q_n)$ onde os nós q_j e q_{j+1} estão conectados na rede para qualquer j . Para todos os pares de nós da rede, encontramos o menor caminho possível entre cada par. A média dos valores encontrados quantifica a média de tamanho dos menores caminhos. Utilizaremos essa medida apenas em redes simples.

Utilizaremos também o chamado coeficiente de aglomeração.(1) Essa medida está relacionada com a probabilidade de que os nós j e k estejam conectados, dado que eles

Figura 5 – Exemplos de redes com diferentes valores de reciprocidade r de arestas.

Fonte: Elaborada pelo autor.

possuem um vizinho em comum i . A definição que usaremos pode ser escrita como

$$C = \frac{3 \times \text{Número de triângulos}}{\text{Número de triplas conectadas}}. \quad (2.10)$$

Um triângulo na rede é definido como um conjunto de três nós conectados entre si. Uma tripla conectada é definida como uma sequência de nós (i, j, k) onde i está conectado com j e j está conectado com k .

2.2 Comunidades em redes

2.2.1 Definição

Elementos presentes em sistemas naturais não interagem de forma homogênea. Por exemplo, pessoas tendem a se agrupar de acordo com famílias, empresas, preferência musical, nacionalidade, e uma série de outros fatores.(40, 57–59) Neurônios se agrupam em camadas, colunas e módulos corticais.(49–52, 82) Proteínas se agrupam de acordo com sua função celular.(45–48) Dada a generalidade e quantidade de sistemas nos quais comunidades são observadas, não há na literatura uma definição universalmente aceita de comunidades.

As primeiras formalizações do conceito, do ponto de vista de redes, podem ser atribuídas às ciências sociais. Em (41), os autores resumizam os diversos conceitos da área em quatro aspectos principais, mutualismo, alcance, grau e coesão interna. Todos esses conceitos se relacionam à ideia *local* de comunidades, isto é, à análise de particularidades de um subconjunto de nós da rede. Adicionalmente, esses conceitos estão unicamente relacionadas à conectividade dos nós. A intuição básica por trás dessas definições é que uma comunidade está associada a grupos de nós mais conectados entre si do que com o

restante da rede, o que pode ser escrito matematicamente como

$$\frac{2m}{N_c(N_c - 1)} > \frac{2M}{N(N - 1)} > \frac{m_{N_c N}}{N_c(N - N_c)}. \quad (2.11)$$

Na equação, N_c representa o número de nós presentes em determinado grupo de nós c e m o número de conexões entre nós desse grupo. N e M indicam, respectivamente, o número de nós e conexões da rede, e $m_{N_c N}$ o número de conexões entre os N_c nós do grupo c e os $N - N_c$ nós restantes da rede.

Ainda nas ciências sociais, uma outra visão sobre o conceito de comunidades se relaciona com a posição ou função social de um indivíduo. A ideia é que indivíduos possuindo padrões de conectividade similares tendem a exercer posições sociais equivalentes no sistema, e portanto podem ser considerados como pertencentes a uma mesma comunidade. Esse conceito é formalizado pelo chamado modelo de blocos (83), ou *blockmodel* em inglês. Uma fundamental diferença entre o modelo de blocos e os conceitos anteriormente estudados na área é que esse modelo representa uma partição global da rede. Nesse caso, os nós são *particionados* em diferentes subconjuntos, e um significado (função social) é atribuído à cada subconjunto encontrado.

Uma limitação do modelo de blocos é que este não é baseado em inferência estatística. Dessa forma, não é possível parametrizarmos uma distribuição de probabilidades aos blocos encontrados. Pelo mesmo motivo, não é possível definirmos uma medida de qualidade da partição realizada na rede. A extensão do modelo de blocos que formalizou esses conceitos define o chamado modelo de blocos estocástico (84), ou *stochastic blockmodel* em inglês.

A partir dos conceitos desenvolvidos nas ciências sociais, diversas abordagens para se definir comunidades em redes foram apresentadas na literatura. (70, 85–90) Curiosamente, o foco dessas abordagens envolve o particionamento global de redes, enquanto que a identificação local de comunidades é, em geral, ignorada. Notadamente, a definição de comunidades mais largamente utilizada na teoria de redes é a proposta em (19), chamada de *modularidade*. Na realidade, a modularidade é definida como uma medida de qualidade de uma dada partição da rede, no sentido de densidade de arestas indicada pela Equação 2.11. Ela pode ser escrita como

$$Q = \frac{1}{2M} \sum_{ij} \left(a_{ij} - \frac{k_i k_j}{2M} \right) \delta_{I_i, I_j} \quad (2.12)$$

onde a_{ij} é, como já apresentado, o elemento da linha i e coluna j da matriz de adjacência da rede, e M é o número de conexões da rede. O termo I_x indica o índice da comunidade à qual o nó x foi associado, e temos que $\delta_{I_i, I_j} = 1$ se $I_i = I_j$ e $\delta_{I_i, I_j} = 0$ caso contrário. O termo $\frac{k_i k_j}{2M}$ indica o número esperado de conexões entre nós de grau k_i e k_j se a rede tivesse sido construída de forma uniformemente aleatória, mas com os mesmos valores de grau

da rede original. Ele representa uma comparação da configuração de arestas da rede em relação a um modelo nulo da rede, que nesse caso é o chamado modelo de configuração.⁽¹⁾ Portanto, a modularidade da partição aumenta conforme temos um maior número de conexões do que o esperado entre nós de mesmo I_x .

O cenário mais comum no qual essa medida é utilizada é num processo de otimização do particionamento da rede. Isto é, ao considerarmos diversos particionamentos possíveis da rede, aquele com maior modularidade é definido como sendo o mais adequado. Dessa forma, a medida de modularidade se torna em si uma definição de comunidades da rede. Inúmeros métodos foram formalizados na literatura para se realizar a otimização da modularidade de redes.^(17,18)

Recentemente, houve diversos esforços para se definir comunidades em redes de forma mais geral. Particularmente, em (18) uma comunidade é definida como sendo um *conjunto de nós que possuem atributos similares*. Os autores argumentam que o que se entende por *atributo* e *similaridade* depende do sistema sendo estudado, e sob qual aspecto o sistema será analisado. Por exemplo, se utilizarmos unicamente a medida de modularidade para particionar a rede, estaremos considerando como conjunto de atributos de um nó o número de arestas de cada tipo (isto é, levando para cada comunidade definida na rede) que ele possui. Adicionalmente, a medida de modularidade representaria uma quantificação da similaridade entre os nós. Apesar de tais definições serem aplicáveis no nosso trabalho, elas ainda não são bem estabelecidas. Portanto, utilizaremos sempre a medida de modularidade para detectar as comunidades das redes que analisaremos.

2.2.2 Notação para redes com comunidades

Pelo fato de comunidades em redes se relacionarem com diferentes classes de nós, precisamos definir uma notação que possibilite indicarmos a conectividade entre essas diferentes classes. Nessa seção apresentaremos tal notação.

Como já definido, a cada nó i da rede podemos associar um grau k_i que consiste no número de arestas conectadas a esse nó. Quando trabalharmos com redes de comunidades, comumente utilizaremos o símbolo $x_m(i)$ para representarmos o grau do nó i que se encontra na comunidade m . Note que nesse caso o índice do nó aparece entre parênteses, diferentemente da notação de grau usual k_i . Portanto, x_m representa o número de arestas conectadas a nós da comunidade m .

A extensão natural dessa notação aparece ao indicarmos o número de conexões que o nó i , da comunidade m , faz com nós da comunidade q . Esse número é simbolizado por $x_{mq}(i)$. Portanto, x_{mq} representa o número de conexões que nós da comunidade m fazem com a comunidade q . Note que $x_m \neq x_{mm}$. Na Figura 6(a) apresentamos um exemplo de rede contendo três comunidades. O conjunto de nós pertencentes à comunidade

m é indicado por C_m , como ilustrado na figura. Também indicamos na figura os graus relacionados ao nó 7 da rede, que está localizado na comunidade 2.

Figura 6 – Exemplos de redes possuindo comunidades. Para cada caso, mostramos os diferentes valores de grau associados ao nó 7, de acordo com as definições apresentadas no texto. Ilustramos os casos de uma rede (a) não direcionada e (b) direcionada.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Ao trabalharmos com redes direcionadas, temos uma pequena mudança de significado da notação. Primeiramente, o grau de entrada de um nó, k_i^{in} , passa a ser referenciado como $x_m^{\text{in}}(i)$, indicando que o nó está na comunidade m . O mesmo ocorre para o grau de saída, simbolizado por $x_m^{\text{out}}(i)$. Dessa forma, temos que x_m^{in} e x_m^{out} representam, respectivamente, o grau de entrada e saída de nós da comunidade m . Ao indicarmos a conectividade entre comunidades, utilizamos o termo $x_{mq}(i)$ para representar o número de arestas que saem do nó i e chegam a nós da comunidade q , sendo que sabemos que o nó i se encontra na comunidade m . Portanto, em redes direcionadas, x_{mq} está sempre relacionado com as arestas de saída dos nós da comunidade m . Na Figura 6(b) apresentamos um exemplo de rede direcionada, e os respectivos graus relacionados ao nó 7 da rede.

Continuando com as definições, dizemos que uma aresta é interna se ela liga nós presentes na mesma comunidade. Por outro lado, uma aresta é externa se ela liga nós presentes em comunidade diferentes. Portanto, podemos definir o conceito de grau interno e externo de um nó. O grau interno de um nó é dado pelo número de conexões internas que o nó possui, enquanto que o grau externo é o número de conexões externas associadas ao nó. Com isso, vemos que x_{mm} representa valores de grau interno de nós da comunidade m . O símbolo x_{mq} , para $m \neq q$, representa os graus externos dos mesmos nós. Note que para redes direcionadas, cada nó possui um grau de entrada interno, um grau de entrada externo, um grau de saída interno, e um grau de saída externo. Com a nossa notação,

podemos representar apenas o grau de saída interno (x_{mm}) e o grau de saída externo (x_{mq} , $q \neq m$) dos nós.

Trabalharemos também com a média das variáveis apresentadas. Por exemplo, $\bar{x}_{mq}$ representa o número médio de conexões que nós da comunidade m fazem com a comunidade q . Para redes não direcionadas possuindo comunidades de igual tamanho, temos sempre que $\bar{x}_{mq} = \bar{x}_{qm}$. Em alguns casos, consideraremos redes nas quais todas as n comunidades possuem o mesmo grau médio interno. Em tal situação, utilizaremos o termo $\bar{x}_{\text{int}}$, definido como $\bar{x}_{\text{int}} = \bar{x}_{11} = \bar{x}_{22} = \dots = \bar{x}_{nn}$. Para situações onde o grau médio externo das comunidades são iguais, os representaremos por $\bar{x}_{\text{ext}}$.

2.3 Modelos de rede utilizados

Modelos de redes são comumente utilizados para se representar certas propriedades observadas em redes reais. Tal representação permite a variação sistemática de parâmetros do modelo, e o respectivo estudo da influência desses parâmetros em dinâmicas ocorrendo sobre a rede. Apresentamos a seguir os modelos utilizados neste trabalho.

Modelo Erdős-Rényi: O modelo Erdős-Rényi, definido por Paul Erdős e Álfred Rényi em 1960 (91), é um dos modelos mais básicos de redes. Nesse modelo, usualmente chamado de modelo ER, cada par de nós possui uma probabilidade de conexão fixa, o que dá origem a uma rede com distribuição de grau binomial (um exemplo é mostrado na Figura 7). Seja p essa probabilidade de conexão, uma rede com N nós deve possuir grau médio $\bar{k} = Np$. Redes geradas pelo modelo ER possuem uma regularidade muito grande, isto é, o grau médio da rede representa bem o grau esperado de um nó qualquer da rede. Isso porque, dado que a distribuição de grau é binomial, a variância dos graus pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \text{Var}(k) &= Np(1-p) \\ &= \bar{k}\left(1 - \frac{\bar{k}}{N}\right) \\ &\approx \bar{k}, \end{aligned} \tag{2.13}$$

onde consideramos que $\bar{k} \ll N$. Dessa forma, o desvio padrão dos valores de grau é dado por $\sigma_k \approx \sqrt{\bar{k}}$.

Modelo de partição fixa: Devido à sua natureza uniformemente aleatória, o modelo ER raramente é utilizado para representar redes reais. Entretanto, ele possui particular aplicação na análise de redes com comunidades. Isso porque, utilizando uma generalização do modelo ER, podemos gerar redes possuindo comunidades com conectividade interna e externa predeterminada. Tal generalização é conhecida como modelo de

Figura 7 – Distribuição de grau de uma rede Erdős-Rényi possuindo $N = 1000000$ nós e $\bar{k} = 10$.
Fonte: Elaborada pelo autor.

partição fixa (92), ou *planted partition model* em inglês. O processo de geração de uma rede através desse modelo funciona da seguinte forma. Primeiro, particionamos N nós em n grupos distintos. Na sequência, definimos uma matriz de conectividade ρ , onde o elemento p_{mq} dessa matriz indica a probabilidade de conexão entre nós dos grupos m e q . Os nós são então conectados segundo as probabilidades indicadas em ρ . De acordo com os valores da matriz ρ , podemos gerar redes possuindo variados níveis de modularidade. Uma ilustração do procedimento de geração da rede é mostrada na Figura 8.

Figura 8 – Ilustração da geração de uma rede possuindo três comunidades de acordo com o modelo de partição fixa. Um conjunto de inicial de nós (a) é particionado em 3 comunidades, como mostrado em (b). Os nós são então conectados de acordo com a matriz de conectividade ρ . Um exemplo de realização da conectividade é mostrado em (c).

Fonte: Elaborada pelo autor.

Ao longo das nossas análises, utilizaremos o modelo de partição fixa como base inicial para a geração de redes com comunidades. Trabalharemos com versões modificadas desse modelo nas quais, por exemplo, adicionamos diferentes valores de reciprocidade às comunidades ou conectamos comunidades com topologias distintas. É importante notarmos também que ao invés de trabalharmos com a matriz ρ , utilizaremos a matriz de graus médios κ , na qual o elemento κ_{mq} dessa matriz é dado por $\bar{x}_{mq}$. Este último definido na seção anterior.

Modelo Barabási-Albert: Em contraste com o modelo ER, muitas redes observadas na natureza não possuem distribuição de grau binomial, e sim do tipo lei de potência.(93,94) Em 1999 foi criado um modelo que, através de dois mecanismos fundamentais conhecidos como *crescimento* e ligação *preferencial*, possibilitava a geração de redes com distribuição de grau da forma $P_k \propto k^{-3}$.(7) Esse modelo ficou conhecido como modelo Barabási-Albert (BA), e foi um dos principais responsáveis pelo crescimento da área de redes complexas. Na Figura 9 mostramos a distribuição de grau típica de uma rede BA. Notamos que é comum se referir a redes possuindo distribuição de grau lei de potência simplesmente como redes lei de potência.

Figura 9 – Distribuição de grau de uma rede Barabási-Albert possuindo $N = 1000000$ nós e $\bar{k} = 6$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Em se tratando de redes com comunidades, recentemente foi proposto um modelo (42,95) que possibilita a criação de redes lei de potência, na qual o tamanho das comunidades também é dado por uma distribuição lei de potência. Esse modelo é extremamente poderoso e possibilita a criação dos mais diversos tipos de redes, incluindo redes direcionadas e com peso. Por outro lado, dada a generalidade do modelo, há grandes

dificuldades em estudá-lo de forma analítica.

Modelo Watts-Strogatz: Muitos modelos de rede, em especial os modelos ER e BA, tendem a gerar redes com baixo coeficiente de aglomeração. Contudo, redes reais usualmente apresentam altos valores para essa propriedade.(10,96) A geração de redes com alto coeficiente de aglomeração comumente envolve uma noção de espacialidade, na qual consideramos a rede como estando imersa em um espaço métrico. Os chamados modelos de redes espaciais (96) estão relacionados com tal conceito. Nesses modelos, a probabilidade de conexão entre os nós se torna proporcional à distância entre eles. Um modelo que segue tal princípio é o chamado modelo Watts-Strogatz (10), abreviado como modelo WS. Esse modelo tenta explicar a presença simultânea de altos valores de coeficiente de aglomeração e baixos valores de média de tamanho dos menores caminhos observada em grande parte das redes reais.

O modelo funciona da seguinte forma. Posicionamos N nós em um círculo de raio arbitrário, e conectamos cada nó com os seus l vizinhos mais próximos. Esse procedimento cria uma rede com alto coeficiente de aglomeração, mas também com alta distância topológica entre os nós. Para diminuirmos a distância topológica, reconectamos de forma uniformemente aleatória cada aresta da rede com probabilidade p . Esse procedimento gera o que chamamos de *atalhos* na rede, sendo que o parâmetro p se relaciona com a densidade de atalhos criados. Na Figura 10 mostramos os valores de coeficiente de aglomeração e de tamanho médio dos menores caminhos para redes geradas segundo o modelo WS, de acordo com diferentes parâmetros p . Note que ambas as propriedades estão normalizadas pelo seu respectivo valor apresentado quando $p = 10^{-4}$. Vemos que existe um intervalo de valores de p no qual o modelo WS gera redes com alto coeficiente de aglomeração e baixa média de tamanho dos menores caminhos. Esse intervalo é usualmente chamado de regime de pequeno mundo.

2.4 Redes reais utilizadas

Ao longo do trabalho também utilizamos redes obtidas de sistemas reais. Abaixo descrevemos brevemente as informações mais relevantes sobre essas redes.

Rede da Macaca: Essa rede representa a conectividade direcionada entre regiões do córtex de animais do gênero *Macaca*. Ela foi construída e analisada pelos autores de.(75) Para construir a rede, os autores utilizaram o repositório CoCoMac ¹ (97), que reúne informações sobre centenas de trabalhos destinados ao estudo de marcações axonais realizadas no córtex desses animais. Nessa rede, os nós são associados a módulos corticais, e as arestas representam tratos axonais identificados na literatura (98–100), e presentes

¹ Disponível em: <<http://cocomac.g-node.org/main/index.php?>>. Acesso em: 10 de Janeiro de 2016.

Figura 10 – Valores do coeficiente de aglomeração e tamanho médio dos menores caminhos para redes geradas segundo o modelo Watts-Strogatz. Os valores estão em função da probabilidade de reconexão p do modelo. Note que ambas as propriedades estão normalizadas pelo seu respectivo valor apresentado ao considerarmos $p = 10^{-4}$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

no repositório CoCoMac. A rede possui 95 regiões corticais mapeadas, sendo que o maior componente conexo da rede é formado por $N = 85$ nós. O grau médio desse componente é $\bar{k} = 27.7$. Na nossa análise, apenas o maior componente será utilizado. A rede foi obtida da página *Web* do laboratório do Professor Marcus Kaiser ².

Redes de aeroportos: Na chamada rede de aeroportos, nós representam aeroportos e arestas, em geral, representam a presença de ao menos uma linha aérea entre dois aeroportos. Ao longo das análises utilizaremos duas redes de aeroportos, denominadas como a *rede americana de aeroportos* e a *rede global de aeroportos*. Ambas as redes foram construídas por nós. A rede americana de aeroportos foi construída utilizando-se a base de dados do Departamento dos Transportes dos Estados Unidos ³. Essa base possui informações sobre voos entre aeroportos no território dos Estados Unidos, bem como o número de passageiros presentes em cada voo. Obtivemos os dados de todos os voos no ano de 2013, e associamos a cada aeroporto o número total de passageiros que passaram pelo aeroporto durante o ano. Apesar da rede ser direcionada, ela possui uma reciprocidade muito alta ($r = 0.9$), e portanto simetrizamos as conexões para torná-la não direcionada. A rede possui $N = 1057$ nós e $\bar{k} = 22.3$.

A rede global de aeroportos foi construída através de informações sobre rotas

² Disponível em <http://www.dynamic-connectome.org/?page_id=25>. Acesso em: 10 de Janeiro de 2016.

³ Disponível em <<http://www.transtats.bts.gov/DataIndex.asp>>. Acesso em: 10 de Janeiro de 2016.

entre aeroportos presentes no serviço OpenFlights ⁴. Essas informações são obtidas e mantidas pelos administradores do serviço, e eventuais erros são corrigidos através da colaboração dos usuários do serviço. Além da informação sobre rotas, obtivemos também a posição, nome, cidade, país e código dos aeroportos. O serviço não possui informação sobre o número de passageiros. A rede resultante possui reciprocidade $r = 0.97$, e portanto também simetrizamos suas conexões. O número de nós da rede é $N = 3010$ e ela possui $\bar{k} = 11.6$.

Rede *C. elegans*: Essa rede representa conexões entre neurônios do nematoide *Caenorhabditis elegans*. Baseando-se nos mapeamentos realizados em trabalhos anteriores (101, 102), e em uma série de novas imagens de microscopia eletrônica, Chen *et al.* (103, 104) mapeou um grande número de sinapses químicas e elétricas presentes no nematoide. Os dados foram disponibilizados no repositório WormAtlas ⁵. Dos dados disponibilizados, além da informação sobre a conectividade e tipo de sinapse, adquirimos também o nome e posição dos neurônios. Adicionalmente, obtivemos o tipo de cada neurônio (sensorial, motor ou interneurônio) utilizando os dados disponíveis em ⁶. A rede possui $N = 279$ nós e $\bar{k} = 10.7$. A reciprocidade da rede é $r = 0.47$.

2.5 A dinâmica de passeio aleatório em redes

Dada a importância e o abrangente estudo da dinâmica de passeio aleatório em física (105–107), matemática (108), biologia (109, 110) e diversas outras áreas, é natural que essa dinâmica também possua grande relevância na área de redes. (77, 111–120) Nesse caso, a forma mais básica da dinâmica ocorrendo sobre redes simples é definida da seguinte maneira. Consideramos que há um agente navegando pelos nós de uma rede. Em sistemas reais, esse agente pode representar, dentre outras situações, uma pessoa navegando por páginas da *World Wide Web* ou um passageiro realizando viagens entre aeroportos. Se o agente estiver sobre o nó j no instante de tempo t , ele escolhe um dos nós vizinhos de j para visitar no instante de tempo $t + 1$. A probabilidade dele escolher um dos vizinhos de j é igual para todos os vizinhos. Portanto, cada vizinho tem uma probabilidade $1/k_j$ de receber a visita do agente no instante $t + 1$. Com isso, se denominarmos a probabilidade do agente estar sobre o nó j no instante t como $\mathcal{P}_j(t)$, temos que a probabilidade dele ser encontrado sobre o nó i no instante $t + 1$ é dada por

$$\mathcal{P}_i(t + 1) = \sum_{j=1}^N \frac{a_{ji}}{k_j} \mathcal{P}_j(t), \quad (2.14)$$

⁴ Disponível em <<http://openflights.org/data.html>>. Acesso em: 10 de Janeiro de 2016.

⁵ Disponível em: <<http://www.wormatlas.org/neuronalwiring.html>>. Acesso em: 10 de Janeiro de 2016.

⁶ <<http://ims.dse.ibaraki.ac.jp/ccep/download.html>>. Acesso em: 10 de Janeiro de 2016.

onde k_j é o grau do nó j , N o número de nós da rede e a_{ji} é o elemento (j, i) da matriz de adjacência $\mathbf{A}$.

O passeio aleatório definido dessa forma é conhecido na área de redes como passeio aleatório tradicional ou não enviesado, pois as probabilidades de transição do agente para cada vizinho de um nó são idênticas. Após um período de tempo suficientemente longo, a dinâmica é garantida de atingir o equilíbrio se a rede possuir apenas um componente conexo e houver ao menos um ciclo ímpar na rede.(121) Com isso, temos que $\mathcal{P}_i(t+1) = \mathcal{P}_i(t) = \mathcal{P}_i^\infty$ para $t \rightarrow \infty$. As probabilidades $\mathcal{P}_i^\infty$ são chamadas de *probabilidades estacionárias* do passeio aleatório, pois elas não se modificam com o tempo. Para encontrarmos $\mathcal{P}_i^\infty$, podemos usar a condição de balanceamento detalhado $\mathcal{P}_i^\infty k_j = \mathcal{P}_j^\infty k_i$ (5,112) juntamente com a condição $\sum_j \mathcal{P}_j^\infty = 1$ para obter

$$\mathcal{P}_i^\infty = \frac{k_i}{Nk}. \quad (2.15)$$

De forma a definirmos uma notação mais concisa, e para evocarmos uma interpretação física ao problema, ao longo do trabalho chamaremos a probabilidade estacionária do passeio aleatório $\mathcal{P}_i^\infty$ de *atividade*, $\mathcal{A}_i$, do nó i . Isto é, ao citarmos a atividade de um nó, estaremos nos referindo à probabilidade estacionária do passeio aleatório sobre esse nó.

Computacionalmente, podemos calcular as atividades dos nós através da diagonalização da matriz de transição, $\mathbf{T}$, do passeio aleatório. O elemento t_{ij} dessa matriz é dado por

$$t_{ij} = \frac{a_{ij}}{k_i}, \quad (2.16)$$

e representa a probabilidade do agente realizar a transição do nó i para o nó j . Segundo o teorema de Perron–Frobenius (122), essa matriz sempre possui pelo menos um autovalor igual a 1, e o autovetor à esquerda associado possui as probabilidades estacionárias do passeio aleatório. Portanto, basta encontrarmos tal autovetor através de métodos tradicionais (123) para obtermos as atividades dos nós. Notamos que como trabalharemos sempre com o maior componente conexo de redes (1), sempre haverá apenas um autovalor igual a 1.

2.5.1 Passeio aleatório em redes direcionadas

No caso de redes direcionadas, o agente percorrendo a dinâmica obedece a direção das arestas. Dessa forma, ele pode escolher apenas arestas de saída associadas ao nó

corrente para realizar a transição. Com isso, reescrevemos a Equação 2.14 como

$$\mathcal{P}_i(t+1) = \sum_{j=1}^N \frac{a_{ji}}{k_j^{\text{out}}} \mathcal{P}_j(t). \quad (2.17)$$

No caso de redes direcionadas, a dinâmica já não obedece mais a condição de balanceamento detalhado, e não podemos encontrar uma expressão fechada para $\mathcal{P}_i^\infty$. Efetivamente, a relação entre atividade e o grau de um dado nó passa a ser não-linear, e não muito bem entendida. Um dos objetivos do presente trabalho é estudar as propriedades que surgem nessa dinâmica quando a direção das arestas é considerada. Fortunato *et al.* (124) estudou o problema de busca em redes direcionadas, e encontrou uma expressão aproximada para a dinâmica de *PageRank*, que é basicamente um passeio aleatório direcionado com a presença de saltos aleatórios ocorrendo com probabilidade q . No limite $q \rightarrow 0$, o *PageRank* se reduz à definição de passeio aleatório utilizada neste trabalho. Dessa forma, o resultado encontrado por Fortunato *et al.* para a atividade do passeio aleatório em redes direcionadas pode ser escrito como

$$\mathcal{A}_i = \frac{1}{N \bar{k}^{\text{in}}} k_i^{\text{in}} \quad (2.18)$$

onde k_i^{in} é o grau de entrada do nó i . Uma das contribuições do presente trabalho foi a obtenção e estudo de uma expressão mais detalhada da atividade do passeio aleatório em redes direcionadas. A derivação dessa expressão é apresentada no Capítulo 3.

2.5.2 Passeio aleatório enviesado

Uma variação da dinâmica de passeio aleatório que também utilizaremos é o chamado passeio aleatório enviesado.(125,126) Nessa dinâmica, a cada nó i é associado um valor ϕ_i , que pode estar relacionado com a aptidão, importância, custo ou outra característica do nó. No que se segue, chamaremos essa característica de *fitness* do nó, que é a nomenclatura utilizada em certos modelos de redes (127,128) nos quais nós possuem diferenciada atratividade para receber conexões. A cada iteração da dinâmica, o agente executando o passeio aleatório faz a transição do nó j para o nó i com probabilidade

$$P_{j \rightarrow i} = \frac{\phi_i a_{ji}}{\sum_{l=1}^N a_{jl} \phi_l}. \quad (2.19)$$

Com isso, a probabilidade do agente ser encontrado sobre o nó i no instante de tempo $t + 1$ pode ser escrita como

$$\mathcal{P}_i(t + 1) = \sum_{j=1}^N \frac{\phi_i a_{ji}}{\sum_{l=1}^N a_{jl} \phi_l} \mathcal{P}_j(t). \quad (2.20)$$

Portanto, a probabilidade do agente realizar a transição para um vizinho i do nó j é proporcional ao *fitness* do nó i . Em consequência, a probabilidade do nó i ser visitado pelo agente em qualquer instante de tempo está relacionada ao valor ϕ_i associado ao nó. Por outro lado, essa probabilidade ainda depende do grau que o nó possui.

A adição de *fitness* aos nós possibilita a criação de grupos dinâmicos na rede. Por exemplo, podemos definir dois grupos de nós na rede possuindo valores de *fitness* distintos, o que implicará em uma diferenciada probabilidade de cada grupo receber visitas do agente. No nosso caso, iremos variar os valores de *fitness* para nós pertencentes a diferentes comunidades da rede.

Um caso especial da dinâmica ocorre quando os valores de *fitness* são proporcionais aos graus dos nós, ou seja, $\phi_i \propto k_i^\alpha$. Nessa condição, a dinâmica é chamada de passeio aleatório enviesado ao grau. Diversas propriedades dessa dinâmica foram estudadas na literatura.(36,37,119,126,129,130) O interesse em se estudar o passeio aleatório enviesado ao grau está no fato de que, apesar da transição do agente ainda ser definida de forma local, a dinâmica apresenta interessantes propriedades globais.(36,37) Tais propriedades não estão presentes no passeio aleatório não enviesado.

2.6 A dinâmica integra-e-dispara em redes

O estudo do comportamento coletivo de neurônios tem sido cada vez mais abordado na literatura.(82,131,132) Em especial, programas como o *Human Brain Project*⁷ e o *BRAIN Initiative*⁸ possuem como objetivo entender a morfologia, eletrofisiologia e conectividade de uma parcela significativa do córtex de animais. Isso porque, assim como em tantas outras áreas onde a teoria de redes é aplicada, foi-se percebendo que grupos de neurônios dão origem a comportamentos dinâmicos que não podem ser explicados pelas propriedades individuais dos mesmos.(133) No nosso caso, estamos particularmente interessados em estudar a influência da conectividade no comportamento coletivo de neurônios.

Inevitavelmente, o estudo da dinâmica de neurônios envolve a escolha de um modelo específico a ser analisado. Exemplos de modelos definidos na literatura incluem Hodgkin-Huxley (134), Hindmarsh-Rose (135), Morris-Lecar (136), FitzHugh-Nagumo

⁷ <<http://www.braininitiative.nih.gov/>>. Acesso em: 10 de Janeiro de 2016.

⁸ <<https://www.humanbrainproject.eu/>>. Acesso em: 10 de Janeiro de 2016.

(137) e Izhikevich.(138) O objetivo de tais modelos é a definição de equações matemáticas que reproduzam características eletrofisiológicas observadas experimentalmente *in vivo* ou *in vitro*. A diferença entre tais modelos reside especialmente na quantidade de diferentes comportamentos neuronais que eles conseguem representar.(139) Infelizmente, a maioria dos modelos mencionados não são facilmente aplicáveis em redes. Em especial, devido ao elevado número de parâmetros ou custo computacional apresentado pelas equações do modelo.

Um modelo neuronal que possui fácil aplicação em redes, e portanto é muito utilizado na literatura, é o chamado modelo integra-e-dispara com vazamento.(79, 140, 141) Esse modelo é utilizado para descrever o comportamento de neurônios do ponto de vista informativo, como por exemplo taxas de disparo, correlações de intervalos entre disparos e codificação de dados.(79, 142) Apesar de sua simplicidade, o modelo apresenta uma interessante riqueza de comportamentos em redes esparsas.(143–148)

A equação usualmente utilizada para descrever a evolução do potencial de um neurônio i executando uma dinâmica integra-e-dispara é dada por (79)

$$\tau_m \frac{dV_i}{dt} = -(V_i - E_r) + \mathcal{R}I^{ext} + \sum_{j=1}^N \sum_f g_{ij} \alpha(t - t_j^f), \quad (2.21)$$

onde V_i representa o potencial de membrana do neurônio, τ_m a escala temporal e E_r o potencial de repouso na ausência de estímulos. O termo I^{ext} indica uma corrente externa aplicada ao neurônio, que pode ser entendida como estímulos captados por neurônios sensoriais ou ruídos advindos de outras regiões do córtex.(149) Essa corrente sofre uma resistência $\mathcal{R}$. O duplo somatório representa sinais pós-sinápticos enviados pelos vizinhos de i . O termo g_{ij} indica a eficácia sináptica entre os nós i e j , isto é, a variação base do potencial do nó i ao receber um sinal pós-sináptico do nó j . O termo t_j^f representa o f -ésimo instante de disparo do nó j . $\alpha(t)$ é a função resposta do neurônio, isto é, ela representa o potencial de i quando este recebe um sinal de j . No momento em que o potencial do neurônio excede o potencial limiar T , ele emite um disparo para cada vizinho, e o neurônio salta para um estado hiperpolarizado.

O comportamento coletivo da rede é comumente analisado através do parâmetro $R^d(t)$, usualmente chamado de *ativação* da rede, definido como (142)

$$R^d(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N s_i(t), \quad (2.22)$$

onde $s_i(t) = 1$ se o nó i disparou no instante t e $s_i(t) = 0$ caso contrário. Dessa forma, $R^d(t)$ fornece a fração de nós da rede que estão disparando a cada instante de tempo. Outra característica usualmente estudada em dinâmicas neuronais é a taxa de disparos

dos neurônios, dada por

$$f_i = \frac{1}{t_2 - t_1} \sum_{t=t_1}^{t_2} s_i(t), \quad (2.23)$$

onde $t_2 - t_1$ é o intervalo de tempo considerado no cálculo da taxa.

A dinâmica integra-e-dispara possui três propriedades usualmente estudadas na literatura: a) a existência de estados auto-sustentados (33, 34, 150), b) estados síncronos e assíncronos (79, 151–153) e c) avalanches. (33, 154) Nesse projeto analisaremos o comportamento da rede em estados auto sustentados assíncronos. Estados auto-sustentados ocorrem quando, na ausência de estímulos externos (no nosso caso, $I^{ext} = 0$), a dinâmica nunca entra no estado absorvente, isto é, $R^d(t) \neq 0$ para qualquer t . O estado assíncrono ocorre quando os neurônios estão completamente desincronizados (79), fazendo com que o parâmetro R^d tenda a uma constante para tempos longos. Nesse caso, definimos o patamar de ativação da rede como sendo

$$R = \frac{1}{t_{\max} - t_0} \sum_{t=t_0}^{t_{\max}} R^d(t). \quad (2.24)$$

O termo $t_{\max}$ representa o tempo de simulação da dinâmica, enquanto que t_0 indica um instante de tempo após o qual a dinâmica atingiu o estado assíncrono. Precisamos calcular a média de R^d devido ao tamanho finito da rede, que faz com que sua ativação apresente pequenas flutuações em relação ao valor esperado para o estado assíncrono.

Ao longo do trabalho utilizaremos uma versão simplificada do modelo integra-e-dispara, na qual o estado auto-sustentado assíncrono ainda pode ser observado. Nesse caso, escrevemos a equação dinâmica em uma forma discreta, dada por

$$V_i^{t+1} = \begin{cases} V_i^t + \sum_{j=1}^N \sum_f l_{ij} a_{ij} \delta_{t,t_j^f} & \text{se } V_i^t < T \\ \sum_{j=1}^N \sum_f l_{ij} a_{ij} \delta_{t,t_j^f} & \text{se } V_i^t \geq T. \end{cases} \quad (2.25)$$

Na equação, V_i^t é o estado (potencial) do nó i na iteração t , t_j^f o instante do f -ésimo disparo do nó j e $\delta_{t,t_j^f} = 1$ se $t = t_j^f$ e $\delta = 0$ caso contrário. O termo l_{ij} indica a presença de uma sinapse excitatória ($l_{ij} = 1$) ou inibitória ($l_{ij} = -1$) do nó i para o nó j . O modelo definido dessa forma possui semelhança com o tradicional modelo McCulloch–Pitts. (155) Na Figura 11 ilustramos a evolução da Equação 2.25 para um dado nó i da rede.

As aproximações feitas para definir o modelo simplificado são as seguintes. Supomos que não há correntes externas atuando sobre os neurônios, dessa forma $I^{ext} = 0$. Também definimos que o potencial de repouso de cada neurônio é $E_r = 0$, ou seja, deslocamos o potencial V_i' dos neurônios segundo $V_i = V_i' - E_r$. Outra importante alteração é que

Figura 11 – Ilustração da dinâmica integra-e-dispara. O nó i recebe sinais unitários das suas conexões de entrada, esses sinais são somados ao longo do tempo, formando o potencial V_i do nó. Quando o potencial ultrapassa o limiar T , o nó dispara sinais unitários para suas arestas de saída.

Fonte: Elaborada pelo autor.

supomos que cada neurônio recebe disparos de seus vizinhos numa taxa maior que $1/\tau_m$, de forma que seu potencial não decai significativamente no intervalo entre dois disparos recebidos.

Em relação às sinapses, modelamos o sinal pós-sináptico como uma função delta de Dirac, que no caso discreto é melhor representada pelo delta de Kronecker, aqui simbolizado por $\delta_{x,y}$. A amplitude das sinapses, representada por g_{ij} na Equação 2.21, possui particular interesse no estudo de redes. Isso porque a consideração de diferentes valores de g_{ij} para as conexões representa estudarmos redes com peso. Um ponto particularmente interessante que pode ser estudado é a influência da distribuição das amplitudes no comportamento dinâmico da rede. Por exemplo, poderíamos modelar g_{ij} de acordo com uma variável aleatória descrita por uma distribuição Gaussiana. Como esse estudo não é prioridade neste trabalho, definimos que todas as sinapses possuem a mesma amplitude. Com essa definição, apenas nos interessa a amplitude da sinapse relativa ao limiar T utilizado, dessa forma, podemos definir, sem perda de generalidade, que a amplitude de cada sinapse é unitária, isto é, $g_{ij} = 1$ para todo i e j .

Para aplicarmos a dinâmica na rede, utilizamos a seguinte condição inicial. Sorteamos, com probabilidade uniforme, o valor do potencial inicial de cada nó i , V_i^0 , no intervalo $[0, T + 1]$. Esse procedimento garante que uma fração $2/T$ dos nós disparem em $t = 0$. Dependendo do valor de T e dos parâmetros da rede, a dinâmica evolui para o estado assíncrono auto-sustentado, que é o caso que estamos interessados em estudar.

3 Passeio aleatório em redes direcionadas modulares

A primeira dinâmica utilizada nas nossas análises será a dinâmica de passeio aleatório. Decidimos por utilizar essa dinâmica devido a três motivos principais: 1) Como discutido na Seção 2.5, essa dinâmica atua nos mais diversos sistemas da natureza; 2) Como veremos, características triviais apresentadas pela dinâmica em redes não direcionadas apresentam grande complexidade ao considerarmos direção nas arestas. Isso torna possível compararmos o comportamento observado para os nós de redes direcionadas com os valores previstos para o caso não direcionado; 3) É possível estudarmos a dinâmica analiticamente, desde que certas condições sejam satisfeitas. Essas condições serão apresentadas ao longo do texto. Notamos que os desenvolvimentos apresentados nesta seção foram publicados em.(156)

3.1 Passeio aleatório em redes com comunidades Erdős-Rényi

Para encontrarmos a atividade do passeio aleatório em uma rede modular, precisamos primeiramente considerar a probabilidade do agente estar em uma dada comunidade. Suponhamos que a rede possui N nós e n comunidades. De forma a simplificar a análise, vamos supor também que as comunidades possuem o mesmo tamanho $N_c = N/n$, já que a análise para tamanhos diferentes é análoga ao que apresentaremos. Nesse caso, a evolução para a probabilidade P_m de encontrarmos o agente na comunidade m é dada por

$$\frac{dP_m}{dt} = -P_m \sum_h p_{mh} + \sum_h P_h p_{hm}, \quad (3.1)$$

onde p_{mh} é a probabilidade do agente realizar a transição da comunidade m para h . Após um tempo longo, a dinâmica atinge o equilíbrio ¹, isto é, temos que $dP_m/dt = 0$. Nessa situação, a probabilidade do agente estar em uma dada comunidade está associada ao autovetor à esquerda π , relacionado ao autovalor unitário da matriz de transição $\mathbf{T}$ (122), cujos elementos são dados por p_{mh} .

Com a finalidade de encontrarmos uma expressão para p_{mh} , podemos agrupar os nós em “classes de equivalência”, isto é, definimos o vetor de classe $\mathbf{X}_m = (x_{m1}, x_{m2}, \dots, x_{mn})$ como sendo o conjunto de todos os nós da comunidade m que fazem x_{m1} conexões

¹ O equilíbrio é atingido se a rede representar uma cadeia de Markov irredutível e aperiódica.(111) Essas condições são análogas a considerarmos que a rede possui apenas um componente conexo e ao menos um ciclo ímpar.

com a comunidade 1, x_{m2} conexões com a comunidade 2, e assim por diante. Dessa forma, os elementos da matriz $\mathbf{T}$ podem ser escritos como

$$p_{mh} = \sum_{\mathbf{X}_m} P(m \rightarrow h \mid \mathbf{X}_m) P(\mathbf{X}_m) \quad (3.2)$$

onde $P(m \rightarrow h \mid \mathbf{X}_m)$ é a probabilidade condicional de que o agente, estando em um nó com exatamente $\mathbf{X}_m = \{x_{m1}, \dots, x_{mn}\}$ conexões, se mova da comunidade m para h . Essa probabilidade pode ser escrita como

$$P(m \rightarrow h \mid \mathbf{X}_m) = \frac{x_{mh}}{x_m^{\text{out}}}, \quad (3.3)$$

onde $x_m^{\text{out}} = \sum_{l=1}^n x_{ml}$ corresponde ao grau de saída dos nós da classe $\mathbf{X}_m$.

Se considerarmos redes poissonianas, como é o caso da rede Erdős-Rényi quando N é muito grande e a probabilidade de conexão pequena (1), podemos resolver a equação 3.2 de forma exata. Mas sabemos que os graus dos nós de uma rede poissoniana podem ser bem representados pela média da respectiva distribuição de grau da rede.(1) Portanto, podemos simplificar os cálculos utilizando uma hipótese homogênea, isto é, considerando que cada nó possui o mesmo número de arestas apontando para cada comunidade da rede. Com essa hipótese, cada nó dentro da comunidade m faz $x_{mh} = \bar{x}_{mh}$ conexões com a comunidade h . De forma equivalente, podemos dizer que cada nó da comunidade m pertence à mesma classe $\mathbf{X}_m$. Com essas considerações, a probabilidade p_{mh} está relacionada com o chamado *mixing parameter* (42), e pode ser escrita como

$$p_{mh} = \frac{\bar{x}_{mh}}{\bar{x}_m^{\text{out}}}. \quad (3.4)$$

Através das probabilidades p_{mh} podemos construir a matriz de transição entre comunidades, e obter a probabilidade assintótica do agente estar na comunidade m , dada por π_m . Multiplicando essa probabilidade pela atividade esperada sobre o nó em uma rede direcionada sem comunidades, dada pela Equação 2.18, encontramos uma melhor estimativa para a atividade dos nós da rede. Note que essa multiplicação implica em considerarmos a Equação 2.18 como sendo a probabilidade condicional do agente estar em um determinado nó i dado que ele se encontra numa comunidade m . Dessa forma, a atividade do nó i pertencente à comunidade m é dada por

$$\mathcal{A}_{i|m} = \frac{\pi_m}{\frac{N}{n} \bar{x}_m^{\text{in}}} k_i^{\text{in}} = \xi_m k_i^{\text{in}}, \quad (3.5)$$

onde $\bar{x}_m^{\text{in}} = \sum_{l=1}^n \bar{x}_{lm}$ é a média do grau de entrada dos nós da comunidade m . Chamaríamos o coeficiente ξ_m de *eficiência* da comunidade m , já que ele representa o potencial da comunidade m de gerar atividade através das conexões de entrada de seus nós. Se

desejamos aumentar a eficiência relativa entre duas comunidades existem apenas duas opções, ou aumentamos o grau médio interno de uma das comunidades, ou modificamos o balanço de conexões entre as comunidades, isto é, modificamos a relação $\bar{x}_{mh} - \bar{x}_{hm}$. Vamos mostrar logo mais que apenas a segunda opção é válida.

Para testarmos a acurácia da Equação 3.5, criamos um modelo computacional, baseado no modelo de partição fixa apresentado na Seção 2.3, que possibilita gerarmos redes modulares direcionadas. Através desse modelo podemos controlar diversos parâmetros das comunidades. Em especial, o modelo permite ajustarmos a reciprocidade das arestas internas à cada comunidade. O modelo é definido da seguinte forma. Primeiro, especificamos a matriz κ , que possui dimensão $n \times n$ e indica o grau médio interno (valores na diagonal) e externo (valores fora da diagonal) de cada comunidade. Por definição, vemos que os elementos da matriz são dados pela variável $\bar{x}_{mh}$ discutida acima. Outro parâmetro do modelo é o vetor de reciprocidade $\mathbf{r}$, que controla, para cada comunidade, a probabilidade de que a aresta entre dois nós seja mútua.⁽¹⁾ Criamos então n redes Erdős-Rényi não direcionadas, onde a m -ésima rede possui grau médio $\bar{x}_{mm}^{\text{ini}} = 2 * \bar{x}_{mm} / (1 + r_m)$. Feito isso, associamos uma direção aleatória para cada aresta das redes criadas. Em seguida, uma aresta recíproca (j, i) a cada aresta (i, j) é adicionada à m -ésima comunidade com probabilidade r_m . Esse procedimento gera cada comunidade com o grau médio interno $\bar{x}_{mm}$ e reciprocidade r_m desejados. Finalmente, as redes são interconectadas, sendo que o número de arestas utilizadas para conectar cada rede é dado pelos elementos que estão fora da diagonal da matriz κ . Os nós a serem conectados entre cada par de comunidades são escolhidos aleatoriamente e com probabilidade uniforme.

Antes de testarmos a acurácia da Equação 3.5, utilizaremos o modelo proposto para melhor ilustrarmos o conceito de comportamento específico de comunidades, e a respectiva interpretação desse conceito como sendo a eficiência associada à topologia de comunidades. Para tanto, utilizamos o modelo para criar redes possuindo diferentes tipos de interconectividades entre duas comunidades presentes na rede. A dinâmica de passeio aleatório foi aplicada nessas redes, e a probabilidade estacionária, ou atividade, do agente estar em cada nó da rede foi encontrada. Na Figura 12 mostramos as relações entre atividade e grau de entrada dos nós nas diferentes situações de interconectividade consideradas. As matrizes κ utilizadas como parâmetro do modelo estão indicadas em cada gráfico. A reciprocidade das comunidades utilizadas em cada caso foi de $r_1 = r_2 = 0.8$. Se as redes fossem não direcionadas, teríamos uma relação linear entre a atividade e o grau de entrada dos nós. Como esse não é o caso para o nosso modelo, há uma forte dispersão em torno dos valores esperados para uma rede não direcionada equivalente, dados por

$$\mathcal{A}_i = \frac{k_i}{\sum_{j=1}^N k_j}. \quad (3.6)$$

No caso mostrado na Figura 12(a), a interconectividade entre comunidades é simétrica (isto é, o balanço de conexões entre as duas comunidades é zero) e portanto a relação entre o grau do nó e sua atividade é indistinguível entre as duas comunidades. Isso é confirmado pela projeção 1D de cada eixo, indicada pelas curvas verdes no entorno do gráfico de dispersão. A análise se torna mais interessante com o resultado mostrado na Figura 12(b). Nesse caso, uma comunidade é bem mais densa (isto é, possui mais arestas) do que a outra, e portanto há uma clara distinção entre a topologia das duas. Apesar desta distinção, a atividade dos nós em ambas as comunidades continua sendo muito similar. Isto quer dizer que os nós formaram grupos topológicos, mas não dinâmicos.

Figura 12 – Exemplo das possíveis divisões estrutura-dinâmica no passeio aleatório direcionado. Cada subfigura mostra o gráfico de dispersão entre a atividade e grau de entrada dos nós. Os pontos estão coloridos de acordo com a comunidade à qual os respectivos nós pertencem. No entorno de cada gráfico de dispersão, plotamos o histograma da variável relacionada ao respectivo eixo do gráfico. (a) Tanto a topologia quanto a dinâmica dos nós não apresentam agrupamento. (b) A topologia dos nós é distinta, mas não a dinâmica. (c) Os nós possuem atividade distintas, mas topologia similares. (d) Observamos dois grupos de nós ao considerarmos tanto a topologia quanto a dinâmica dos mesmos.

Fonte: Elaborada pelo autor.

No caso mostrado na Figura 12(c) temos um resultado, de certa forma, oposto ao mostrado na Figura 12(b). Uma combinação adequada de balanço entre comunidades e densidade provoca a separação do comportamento dinâmico dos nós, como podemos ver pelo vale na distribuição de atividade. Apesar disso, a distribuição de grau dos nós não possui distinção. É importante notarmos que essa análise poderia ser feita utilizando-se outras características topológicas ou dinâmicas, que provavelmente apresentariam resultados diferentes dos mostrados na figura. Estamos particularmente interessados no grau e atividade dos nós porque no caso do passeio aleatório não direcionado a relação entre essas duas propriedades é perfeitamente linear.

Na Figura 12(d) mostramos o caso que estamos mais interessados em estudar. Não há uma distinção clara entre os nós se considerarmos apenas a topologia ou dinâmica isoladamente, mas quando ambos os aspectos são levados em conta, podemos observar a clara influência da estrutura das duas comunidades no comportamento dinâmico dos nós. Inclusive, esse caso revela a importância que o conceito de comportamento específico possui nesse tipo de sistema. Cada comunidade representa um diferente relacionamento entre a atividade e o grau dos nós na rede, ou seja, a atividade de um nó possuindo determinado grau de entrada é modificada de acordo com as características da comunidade à qual o nó pertence. Se considerarmos que o grau de entrada do nó representa um custo associado à sua operação, podemos dizer então que o comportamento específico da comunidade está relacionado à sua eficiência de receber visitas do passeio aleatório.

Voltando à Equação 3.5, é interessante testarmos a acurácia dessa equação para quantificar a eficiência de comunidades. Para tanto, foram geradas diversas redes possuindo $N = 3000$ e $n = 3$ comunidades, sendo que cada comunidade possui $N/n = 1000$ nós. A interconectividade entre as comunidades é dada por

$$\kappa = \begin{bmatrix} 15 & \bar{x}_{12} & 1 \\ 4 & 15 & 1 \\ 4 & 2 & 15 \end{bmatrix}, \quad (3.7)$$

sendo que o número médio de conexões entre as comunidades 1 e 2, $\bar{x}_{12}$, foi variado no intervalo $[0, 10]$. Utilizamos uma reciprocidade interna de $r_1 = r_2 = r_3 = 0.8$ para cada comunidade. Os valores de eficiência obtidos para essas redes estão mostrados na Figura 13(a). Para cada ponto da figura, 100 redes foram criadas, e através de regressão linear o coeficiente angular da relação entre atividade e grau de entrada foi estimado. As linhas tracejadas do gráfico representam os valores de ξ_m esperados pela Equação 3.5, encontrados através da diagonalização da matriz de transição $\mathbf{T}$ (de dimensão 3×3) e dos parâmetros do modelo de criação de redes, que caracterizam cada comunidade.

Vemos pela figura que a hipótese homogênea é capaz de manter informação suficiente sobre o sistema, de forma a predizer corretamente a eficiência das comunidades.

Notamos também que o balanço de conexões entre as comunidades 1 e 2, dado pelo termo $\bar{x}_{12} - \bar{x}_{21}$ pode ser utilizado para facilmente controlarmos a relação entre atividade e grau de entrada dos nós.

Figura 13 – (a) Visualização de como o desbalanço entre comunidades implica em variações nas respectivas eficiências. (b) Invariância relativa da eficiência quando o balanço é mantido constante e a densidade interna da comunidade 2 é variada. As linhas tracejadas correspondem ao resultado teórico obtido com a Equação 3.5. Cada ponto representa 100 realizações do modelo de criação de redes. As barras de erro indicam o desvio padrão calculado sobre essas realizações.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Como já mencionado, a propriedade mais interessante da Equação 3.5 é que cada comunidade pode apresentar diferentes eficiências. É possível mostrarmos que se as comunidades forem balanceadas, o grau interno da comunidade não pode alterar sua eficiência. O procedimento é bem simples. Primeiro, consideramos que $\bar{x}_{mh} = \bar{x}_{hm}$ para qualquer valor de h e m , o que implica em $\bar{x}_m^{\text{out}} = \bar{x}_m^{\text{in}}$. Com isso, podemos verificar por substituição que $\pi_m = \frac{1}{n} \bar{x}_m^{\text{in}} / \bar{k}^{\text{in}}$ é um autovetor da matriz de transição $\mathbf{T}$. Substituindo π_m na Equação 3.5, temos que

$$\mathcal{A}_{i|m} = \frac{1}{N \bar{k}^{\text{in}}} k_i^{\text{in}}, \quad (3.8)$$

que não depende da comunidade e recupera o resultado anteriormente encontrado por Fortunato et al. (124), indicado pela Equação 2.18. Esse resultado mostra que comunidades mais densas possuem maior atividade, mas a relação entre atividade e grau de entrada dos seus nós permanece a mesma para todas as comunidades. Se tentarmos aumentar a atividade da comunidade m através da adição de arestas, tanto o seu grau médio de entrada $\bar{x}_m^{\text{in}}$ quanto a probabilidade π_m do agente estar na comunidade irão aumentar na mesma proporção, fazendo com que a eficiência da comunidade permaneça praticamente a mesma.

Há apenas uma pequena alteração na eficiência que ocorre devido ao aumento do grau médio de entrada $\bar{k}^{\text{in}}$ de todos os nós da rede, que em geral é pouco afetado pela mudança de densidade interna de uma única comunidade. Nós observamos que esse comportamento também ocorre quando as comunidades estão desbalanceadas. Esse caso é mostrado na Figura 13(b), onde criamos redes possuindo três comunidades, com $N/n = 1000$ nós cada, e apresentando conectividade

$$\kappa = \begin{bmatrix} 15 & 2 & 1 \\ 4 & \bar{x}_{22} & 1 \\ 4 & 2 & 15 \end{bmatrix}, \quad (3.9)$$

sendo que variamos o grau médio interno da comunidade 2.

É interessante verificarmos também o comportamento da eficiência ao variarmos a reciprocidade das arestas em cada comunidade. Para isso, criamos novamente redes possuindo três comunidades, utilizando os parâmetros

$$\kappa = \begin{bmatrix} 15 & 1.2 & 0.1 \\ 3.4 & 15 & 0.1 \\ 2.3 & 0.1 & 15 \end{bmatrix}. \quad (3.10)$$

É importante notarmos que a matriz κ utilizada dá origem a uma rede com modularidade muito alta. Escolhemos essa matriz de forma a enaltecermos a influência da reciprocidade no comportamento específico das comunidades. A reciprocidade interna das comunidades foi variada, sendo que, para cada caso, o mesmo valor de reciprocidade foi utilizado para as três comunidades. Na Figura 14 mostramos a variação de ξ de acordo com os valores de reciprocidade. Apresentamos tanto os valores medidos numericamente (símbolos) quanto os valores esperados pela Equação 3.5 (linha tracejada). Vemos que há uma variação de ξ para baixas reciprocidades, não prevista pelo modelo. Em particular, para reciprocidade nula há uma grande diferença entre os valores medidos experimentalmente e os previstos analiticamente. De forma a verificarmos o que provoca tal desvio, plotamos na Figura 15 dois exemplos de relação entre atividade e grau. Ambos os exemplos utilizam a mesma matriz de conectividade indicada na Equação 3.10. No primeiro exemplo, mostrado na Figura 15(a), as três comunidades possuem reciprocidade máxima. Vemos que nesse caso a relação entre atividade e grau é bem definida para as três comunidades. Em contrapartida, mostramos na Figura 15(b) o que ocorre nessa relação quando a reciprocidade das comunidades é zero. Vemos que ainda existe uma relação característica entre atividade e grau, mas a baixa reciprocidade provoca flutuações de larga escala na atividade do passeio aleatório.

Flutuações de larga escala ocorrem no regime de baixa reciprocidade porque nessa situação formam-se na rede o que chamamos de “armadilhas” de conectividade. Tais

Figura 14 – Variação da eficiência de três comunidades para diferentes valores de reciprocidade interna das comunidades. Símbolos representam valores experimentais, obtidos em 100 realizações da rede, enquanto que as linhas tracejadas indicam os valores analíticos esperados para cada comunidade. Cada comunidade possui 1000 nós, e a conectividade entre elas é indicada pela Equação 3.10. Barras de erro indicam o desvio padrão dos valores medidos nas diversas realizações.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 15 – Relação entre atividade do passeio aleatório e grau de entrada dos nós para duas redes seguindo a conectividade indicada pela Equação 3.10. As redes diferem apenas pela reciprocidade interna, r , das comunidades, que é de (a) $r = 1$ e (b) $r = 0$. Cada comunidade possui 1000 nós.

Fonte: Elaborada pelo autor.

armadilhas representam grupos de nós possuindo muito mais arestas de entrada do que de saída. Isso provoca um aumento desproporcional da atividade do passeio aleatório no interior de tais grupos, podendo até causar a perda de ergodicidade do sistema.(111) No nosso caso, essas armadilhas são causadas por flutuações estatísticas na conectividade da rede. Em redes reais elas podem ter um significado mais relevante. Por exemplo, páginas da *World Wide Web* ricas em informação (e portanto possuindo muitas arestas de entrada), mas com poucos ponteiros para outras páginas tendem a formar tais armadilhas. Inclusive, tal conceito é a motivação por trás da chamada matriz Google (157), e do respectivo algoritmo PageRank utilizado para medir a importância de páginas da *Web*.(157)

Continuando nossas análises sobre o uso da Equação 3.5 para quantificar a eficiência de comunidades, comparamos resultados experimentais com os valores previstos pela equação em uma série de configurações topológicas das comunidades. Denotando por ξ_m^a e ξ_m^e a eficiência da comunidade m medida analiticamente e experimentalmente, respectivamente, podemos definir o erro relativo da predição analítica como

$$\mathcal{X} = \frac{1}{n} \sum_{m=1}^n \frac{|\xi_m^a - \xi_m^e|}{\xi_m^e}. \quad (3.11)$$

De forma a simplificarmos o número de parâmetros, utilizamos para a análise redes possuindo duas comunidades, isto é, consideramos $n = 2$.

Na Figura 16(a) apresentamos os valores de $\mathcal{X}$ ao modificarmos a relação entre grau médio externo e interno das comunidades. Notamos que o grau médio externo é dado por $\bar{x}_{\text{ext}} = \bar{x}_{12} = \bar{x}_{21}$, enquanto que o grau médio interno é definido por $\bar{x}_{\text{int}} = \bar{x}_{11} = \bar{x}_{22}$. Portanto, a razão $\bar{x}_{\text{ext}}/\bar{x}_{\text{int}}$ ajusta o nível de modularidade da rede. Cada curva mostrada na Figura 16(a) representa um diferente valor de grau médio interno utilizado. Os resultados mostram que, nos casos considerados, o erro relativo da predição analítica é sempre pequeno. Em especial, notamos que o erro permanece pequeno mesmo para $\bar{x}_{\text{int}} = \bar{x}_{\text{ext}}$, caso onde não há comunidades na rede.

É interessante verificarmos também se o tamanho das comunidades influencia na precisão da expressão analítica. Para tanto, utilizamos redes formadas por duas comunidades, ambas possuindo grau médio interno $\bar{x}_{\text{int}} = 20$. Também fixamos o parâmetro $\bar{x}_{21} = 4$. Uma das comunidades possui tamanho $N_1 = 1000$, enquanto que o tamanho, N_2 , da outra comunidade foi variado. Na Figura 16(b) mostramos o erro relativo para diferentes tamanhos considerados, sendo que variamos o balanço de conexões entre as comunidades para cada caso. Cada curva representa uma diferente razão, $r_N = N_2/N_1$, entre tamanhos. Está claro que o erro permanece pequeno para diferentes combinações de tamanho e balanço entre comunidades.

Um comportamento mais interessante ocorre ao variarmos a reciprocidade das redes. Utilizando redes formadas por duas comunidades, cada qual com grau médio in-

Figura 16 – Verificação da validade da Equação 3.5 em diferentes topologias de rede. O erro relativo entre valores experimentais e analíticos, indicado pela Equação 3.11 foi utilizado. (a) Erro em função da fração entre grau médio externo e interno das comunidades, as curvas representam diferentes valores de grau médio interno. (b) Erro em função do grau médio externo de nós da comunidade 1, para diferentes razões de tamanhos entre as comunidades. (c) Erro em função da reciprocidade interna das comunidades, para diferentes densidades de conectividade entre as comunidades.

Fonte: Elaborada pelo autor.

terno $\bar{x}_{\text{int}} = 20$, variamos a reciprocidade interna, r , de cada comunidades para diferentes níveis de modularidade da rede. O resultado é mostrado na Figura 16(c). Como já discutido anteriormente, ao diminuirmos a reciprocidade temos um maior desvio dos valores esperados analiticamente. Mas é interessante notarmos que esse desvio aumenta com a modularidade da rede. Dessa forma, vemos que quanto maior a modularidade, maior é a influência da direção das arestas na atividade do passeio aleatório, caso a rede possua baixa reciprocidade.

Como último resultado da nossa análise analítica em redes com comunidades ER, vamos mostrar que a eficiência de comunidades desbalanceadas deve necessariamente ser distinta. Começando com n comunidades balanceadas, invertamos uma fração $1 - \epsilon$ das arestas que saem da comunidade f e chegam à comunidade m . Isso é repetido para todas as comunidades m , de forma a provocar um grande aumento de atividade na comunidade f . Precisamos mostrar que, em condições razoáveis, a eficiência da comunidade f após o processo de reconexão, ξ'_f , é maior do que no resto da rede, isto é, $\xi'_f/\xi'_m > 1$ para qualquer m . Para tanto, primeiro observamos que as novas probabilidades de transição p'_{mh} são dadas por

$$p'_{mh} = \begin{cases} \frac{\bar{x}_{mh} + \bar{x}_{mh}(1-\epsilon)\delta_{f,h}}{\bar{x}_m^{\text{out}} + \bar{x}_{mf}(1-\epsilon)} & m \neq f \\ \frac{\bar{x}_{fh}\epsilon}{\epsilon \sum_{l \neq f} \bar{x}_{fl} + \bar{x}_{ff}} & m = f, h \neq f \\ \frac{\bar{x}_{ff}}{\epsilon \sum_{l \neq f} \bar{x}_{fl} + \bar{x}_{ff}} & m = h = f, \end{cases} \quad (3.12)$$

onde $\delta_{f,h} = 1$ se $f = h$ e $\delta_{f,h} = 0$ caso contrário. Portanto, no limite $\epsilon \rightarrow 0$ a razão π'_f/π'_m para $m \neq f$, entre os elementos do autovetor $\boldsymbol{\pi}'$ da nova matriz de transição deve divergir. Por outro lado, assumindo que $\bar{x}_m^{\text{in}}$ representa o grau médio de entrada dos nós da comunidade m após o processo de reconexão, a razão do grau de entrada, dada por

$$\frac{\bar{x}_m^{\text{in}}}{\bar{x}_f^{\text{in}}} = \frac{\bar{x}_m^{\text{in}} - (1 - \epsilon)\bar{x}_{mf}}{\bar{x}_f^{\text{in}} + (1 - \epsilon)\sum_{l \neq f} \bar{x}_{fl}} \approx \frac{\bar{x}_m^{\text{in}} - \bar{x}_{mf}}{2\bar{x}_f^{\text{in}} - \bar{x}_{ff}} \quad (3.13)$$

permanece limitada. Portanto, a razão entre as eficiências das comunidades f e m é necessariamente maior do que um, para qualquer m .

3.2 Passeio aleatório em redes com comunidades Barabási-Albert

No caso de comunidades com distribuição de grau em lei de potência (42), a tarefa de encontrarmos uma expressão para a atividade do passeio aleatório se torna mais difícil. Isso porque a alta heterogeneidade de grau dessas redes ocasiona fortes flutuações na dinâmica. Por outro lado, intuitivamente sabemos que o mesmo comportamento do passeio aleatório observado para redes ER pode ocorrer em redes com distribuição de grau heterogênea. Infelizmente, na literatura de redes não há um modelo padrão que possa ser usado para gerarmos redes de comunidades com topologia de lei de potência, no qual o balanço entre as comunidades possa ser sistematicamente controlado. A princípio, o modelo proposto em (42) é capaz de gerar tais redes. Porém, como o modelo não foi originalmente definido para essa finalidade, precisaríamos utilizar diversas restrições apropriadas nos parâmetros do modelo para conseguirmos controlar a direção das arestas.

Optamos por utilizar um modelo simplificado no qual n redes Barabási-Albert (que chamaremos de redes BA) (7) são criadas e conectadas aleatoriamente entre si, através do mesmo procedimento apresentado na seção anterior. É importante verificarmos se redes geradas por tal procedimento ainda possuem distribuição de grau em lei de potência. Para tanto, geramos diversas redes através do modelo, sendo que a interconectividade entre as comunidades de cada rede gerada é dada pela matriz

$$\boldsymbol{\kappa} = \begin{bmatrix} 6.0 & \bar{x}_{\text{ext}} & \bar{x}_{\text{ext}} \\ \bar{x}_{\text{ext}} & 6.0 & \bar{x}_{\text{ext}} \\ \bar{x}_{\text{ext}} & \bar{x}_{\text{ext}} & 6.0 \end{bmatrix}. \quad (3.14)$$

O parâmetro $\bar{x}_{\text{ext}}$ representa a interconectividade entre todas as comunidades, ou seja, ele define a modularidade da rede. As três comunidades consideradas possuem 10000 nós. Na Figura 17 apresentamos a distribuição de probabilidade acumulada dos graus de algumas das redes geradas. Diferentes símbolos representam diferentes valores de $\bar{x}_{\text{ext}}$ utilizados. Vemos que a distribuição de grau das redes geradas por esse modelo continua

muito próxima à uma lei de potência, havendo apenas pequenos desvios para graus muito baixos ou muito altos. Tais desvios tendem a aumentar com o valor de $\bar{x}_{\text{ext}}$. Entretanto, estamos interessados em casos nos quais $\bar{x}_{\text{ext}}$ é menor do que o grau médio interno de cada comunidade. Portanto, consideramos que o modelo proposto de fato possibilita gerarmos redes possuindo comunidades e distribuição de grau em lei de potência.

Figura 17 – Distribuição de probabilidade acumulada dos graus de redes geradas pelo modelo proposto. A conectividade das redes está indicada na Equação 3.14. Para cada rede, utilizamos um diferente valor de $\bar{x}_{\text{ext}}$, que é mostrado na legenda da figura. Por utilizarmos o modelo BA, esperamos uma distribuição do tipo $F(k) \approx k^{-2}$, também mostrada na figura.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Considerando redes geradas por tal procedimento, podemos utilizar a Equação 3.2 para encontrar a probabilidade de transição entre comunidades do passeio aleatório. A equação pode ser escrita como

$$\begin{aligned}
 p_{mh} &= \sum_{\mathbf{X}_m} P(m \rightarrow h \mid \mathbf{X}_m) P(\mathbf{X}_m) \\
 &= \sum_{x_{m1}} \sum_{x_{m2}} \dots \sum_{x_{mn}} F^{(1)} F^{(2)} \dots F^{(n)} \frac{x_{mh}}{x_m^{\text{out}}} \\
 &= \prod_{k=1..n} \left(\sum_{x_{mk}} F^{(k)} \right) \frac{x_{mh}}{x_m^{\text{out}}} \tag{3.15}
 \end{aligned}$$

onde

$$F^{(k)} = \begin{cases} B^{(k)} & \text{se } k \neq m \\ a \frac{1}{x_{mm}^3} & \text{se } k = m. \end{cases} \tag{3.16}$$

Note que o procedimento realizado na Equação 3.15 foi a separação do somatório sobre a classe de equivalência $\mathbf{X}_m$ em uma série de somatórios sobre cada termo de $\mathbf{X}_m$. Portanto, nossa hipótese é que não há correlação entre o número de conexões que os nós fazem com cada comunidade da rede. O termo $B^{(k)}$ representa uma função binomial sobre a variável x_{mk} , possuindo média $\bar{x}_{mk}$ e probabilidade de sucesso $\frac{n\bar{x}_{mk}}{N}$. A constante a é um fator de normalização da distribuição de lei de potência da variável x_{mm} . Essa variável descreve o grau interno de nós pertencentes à comunidade m .

Podemos escrever a Equação 3.15 de uma forma mais direta como

$$p_{mh} = a \prod_{\substack{k=1..n \\ k \neq m}} \left(\sum_{x_{mk}} B^{(k)} \right) \sum_{x_{mm}} \frac{1}{x_{mm}^3} \frac{x_{mh}}{x_m^{\text{out}}}. \quad (3.17)$$

O produto dos termos $B^{(k)}$ e $1/x_{mm}^3$ presentes nas somas representa a probabilidade de encontrarmos um nó pertencente à classe de equivalência $\mathbf{X}_m$, enquanto que o termo $\frac{x_{mh}}{x_m^{\text{out}}}$ é a probabilidade de transição associada à respectiva classe de equivalência. Por exemplo, se a rede possuir três comunidades, a probabilidade de transição da comunidade 1 para a comunidade 2 pode ser escrita como

$$p_{12} = a \sum_{x_{12}} B^{(2)} \sum_{x_{13}} B^{(3)} \sum_{x_{11}} \frac{1}{x_{11}^3} \frac{x_{12}}{x_{11} + x_{12} + x_{13}}. \quad (3.18)$$

Utilizando a Equação 3.17, podemos representar com boa acurácia as probabilidades de transição para cada nó da rede. Para demonstrarmos essa afirmação, definimos a quantia

$$R_{mh}(i) = \frac{x_{mh}(i)}{x_m^{\text{out}}(i)} \quad (3.19)$$

para cada nó i da comunidade m . Isto é, cada nó i da rede envia $x_{mh}(i)$ conexões para a comunidade h , onde m é a comunidade à qual o nó pertence. O grau de saída desse nó i é $x_m^{\text{out}}(i)$. Portanto, a probabilidade de um agente executando o passeio aleatório, estando sobre o nó i , fazer a transição da comunidade m para h é dada por $R_{mh}(i)$. A distribuição de probabilidades dos valores R_{mh} é dada pelo produtório presente na Equação 3.17. A média dos valores de R_{mh} para a comunidade m da rede representa a probabilidade de transição p_{mh} entre as comunidades m e h .

Comparamos os valores esperados de R_{mh} com os respectivos valores medidos experimentalmente, que chamaremos de $\tilde{R}_{mh}$, em diversas situações de conectividade entre as comunidades. Na Figura 18 mostramos alguns resultados típicos dos valores de transição

medidos experimentalmente. Nesse caso, a matriz de conectividade utilizada foi

$$\kappa = \begin{bmatrix} 6.0 & \bar{x}_{12} & 0.5 \\ 4 & 6.0 & 1 \\ 2 & 2 & 6.0 \end{bmatrix}. \quad (3.20)$$

Apenas transições da comunidade 1 para a comunidade 2 são mostradas. A primeira linha de gráficos se refere a valores medidos experimentalmente, a segunda linha indica a distribuição de valores esperada segundo o produtório da Equação 3.17. Cada coluna de gráficos é referente a um diferente valor de $\bar{x}_{12}$ utilizado na geração da rede. Vemos pela figura que a distribuição dos valores experimentais é muito próxima aos valores esperados analiticamente, para os parâmetros de comunidades considerados. Portanto, temos um forte indício de que a Equação 3.17 pode ser utilizada para descrever as probabilidades de transição entre comunidades. Tais probabilidades, dadas pela média dos valores de transição, estão indicadas por linhas verticais em cada gráfico da Figura 18. Notamos que o mesmo resultado é obtido para diferentes variações da matriz κ .

Figura 18 – Análise das probabilidades de transição para nós presentes na comunidade 1 de redes possuindo 3 comunidades, onde cada comunidade possui 1000 nós. A primeira linha de gráficos indica a distribuição de valores encontrada experimentalmente, enquanto que a segunda linha indica a distribuição esperada analiticamente. Os gráficos presentes em cada coluna se referem ao mesmo valor de $\bar{x}_{12}$ utilizado, que é indicado sobre cada coluna.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Apesar da Equação 3.17 fornecer uma boa descrição das transições entre comunidades, ela é consideravelmente complexa, o que dificulta possíveis análises sobre a eficiência de comunidades em redes BA. Podemos simplificar a expressão se considerarmos que os graus externos dos nós são bem representados pela média da distribuição associada, já que as comunidades são conectadas entre si de forma uniformemente aleatória. Essa hipótese é a mesma que fizemos na seção anterior. Utilizando essa aproximação, os termos da Equação 3.17 associados a graus externos dos nós, ou seja, os termos x_{mh} onde

$h \neq m$, se tornam bem descritos pelo seu valor médio, $\bar{x}_{mh}$. Com isso, podemos reescrever a Equação 3.17 como

$$p_{mh} = a \sum_{x_{mm}} \frac{\bar{x}_{mh}(1 - \delta_{m,h}) + x_{mm}\delta_{m,h}}{x_{mm}^3 \left(\sum_{l \neq m} \bar{x}_{ml} + x_{mm} \right)}. \quad (3.21)$$

Note que o termo x_{mm} indica o grau interno dos nós da comunidade m .

De forma a verificarmos a alteração de eficiência em redes BA, geramos diferentes redes de acordo com o nosso modelo experimental. A matriz de conectividade utilizada foi

$$\boldsymbol{\kappa} = \begin{bmatrix} 16 & \bar{x}_{12} & 0.25 \\ 1 & 16 & 0.25 \\ 1 & 0.5 & 16 \end{bmatrix}. \quad (3.22)$$

Cada comunidade possui reciprocidade interna máxima. Na Figura 19 mostramos a variação de eficiência das comunidades ao modificarmos o valor de $\bar{x}_{12}$. Cada ponto do gráfico foi calculado utilizando-se 100 realizações do modelo. Na Figura 19(a) comparamos os valores medidos experimentalmente com a previsão analítica fornecida pela Equação 3.17. Vemos que, assim como observado para redes ER, a relação entre atividade e grau do passeio aleatório pode ser sistematicamente variada para redes com distribuição de grau heterogênea. Adicionalmente, observamos que a expressão analítica fornece uma boa indicação dessa relação.

Na Figura 19(b) mostramos o mesmo resultado experimental indicado na Figura 19(a), mas utilizando a Equação 3.21 como predição analítica. Vemos que, para os parâmetros de $\boldsymbol{\kappa}$ considerados, a expressão simplificada ainda fornece uma excelente previsão dos valores esperados ao modificarmos $\bar{x}_{12}$.

De forma a verificarmos as situações nas quais a predição analítica pode ser utilizada, calculamos o erro relativo, definido na Equação 3.11, em diferentes situações experimentais. Como observado anteriormente, esse erro representa a diferença normalizada entre os valores experimentais e analíticos, sendo que utilizaremos a Equação 3.21 para obter os valores analíticos. Os resultados dessa série de experimentos estão mostrados na Figura 20. Para calcularmos o valor experimental indicado em cada ponto do gráfico, foram consideradas 100 realizações do modelo proposto. Cada rede gerada possui 2 comunidades, sendo que as comunidades possuem reciprocidade máxima em todos os experimentos.

No primeiro experimento, verificamos como o erro relativo se comporta quando $\bar{x}_{12} = \bar{x}_{21} = \bar{x}_{\text{ext}}$, condição na qual as comunidades estão balanceadas. Utilizamos duas comunidades possuindo 3000 nós, e variamos a modularidade da rede através da modificação

Figura 19 – Variação da eficiência ao modificarmos o balanço de conexões entre comunidades BA. (a) Eficiência de redes geradas experimentalmente, representa por símbolos, comparada com os valores previstos pela Equação 3.17, indicados por linhas tracejadas. (b) Mesmas condições experimentais que em (a), mas utilizando a Equação 3.21 para a predição analítica. Foram geradas 100 realizações para cada caso, sendo que as barras de desvio padrão são mostradas na figura. Cada comunidade possui 3000 nós.

Fonte: Elaborada pelo autor.

da razão entre o grau médio externo e interno dos nós, $\bar{x}_{\text{ext}}/\bar{x}_{\text{int}}$. O resultado é mostrado na Figura 20(a). Utilizamos diferentes valores de $\bar{x}_{\text{int}}$ para verificar se há alguma mudança de comportamento no erro ao variarmos esse parâmetro. Vemos que o erro relativo permanece baixo para todas as condições experimentais impostas. Dessa forma, temos que se as comunidades forem balanceadas e com igual tamanho, a Equação 3.21 fornece uma boa previsão de eficiência. Isso ocorre porque, nessa situação, não há diferença de eficiência entre as comunidades, e portanto o estado estacionário do passeio aleatório é bem aproximado pelo grau dos nós.

Ao modificarmos o tamanho relativo entre as comunidades, temos o resultado mostrado na Figura 20(b). Nesse caso, a comunidade 1 possui $N_1 = 1000$ nós, enquanto que o tamanho da comunidade 2 foi variado. Cada curva representa uma diferente razão, $r = N_2/N_1$, entre tamanhos das comunidades. Novamente verificamos como o erro se comporta para diferentes níveis de modularidade da rede. Vemos pela figura que se a rede possuir modularidade alta, o erro relativo permanece baixo para diferentes tamanhos de comunidade. Para níveis moderados de modularidade o tamanho das comunidades passa a influenciar fortemente nos valores experimentais observados, e a Equação 3.21 não pode ser utilizada para explicar a eficiência das comunidades. Notamos que um resultado similar é obtido ao utilizarmos a Equação 3.17.

Figura 20 – Verificação da validade da Equação 3.21 em diferentes topologias de rede. Para tanto, o erro relativo entre valores experimentais e analíticos, indicado pela Equação 3.11 foi utilizado. (a) Erro em função da fração entre grau médio externo e interno das comunidades, onde as curvas representam diferentes valores de grau médio interno utilizados. (b) O mesmo que em (a), mas com cada curva representando uma diferente razão entre tamanhos das comunidades. (c) Erro em função do número médio de conexões saindo da comunidade 1 e chegando à comunidade 2, para diferentes densidades internas das comunidades.

Fonte: Elaborada pelo autor.

O resultado revela que em redes possuindo comunidades com diferentes tamanhos e um nível de modularidade moderado, o que normalmente ocorre em redes reais, é muito difícil estudarmos o conceito de eficiência das comunidades. Isso porque a heterogeneidade de grau dessas redes passa a dominar a dinâmica, escondendo as variações sutis causadas pela configuração em escala intermediária da rede.

A última série de experimentos que realizamos foi variar o balanço de conexões entre as comunidades. Isto é, fixando $\bar{x}_{21} = 4$, variamos o valor de $\bar{x}_{12}$. O mesmo procedimento foi repetido para diferentes densidades internas das comunidades, indicadas pelo parâmetro $\bar{x}_{\text{int}}$. O resultado pode ser visto na Figura 20(c). Vemos que o erro relativo permanece baixo para pequenos valores de desbalanceamento entre as comunidades, isto é, na região $\bar{x}_{12} \approx 4$. Nas demais situações, a dinâmica de passeio aleatório se comporta de forma não prevista pela equação. Isso porque o alto desbalanceamento entre as comunidades provoca um fluxo de atividade entre elas. Esse fluxo modifica a relação linear entre grau e atividade observada para cada comunidade, adicionando heterogeneidade à dinâmica e causando o alto desvio observado.

3.3 Comportamento específico de comunidades na rede da Macaca

Nesta seção, apresentamos uma aplicação dos conceitos desenvolvidos sobre o passeio aleatório direcionado. Utilizamos a rede cortical da Macaca, descrita na Seção 2.4,

para mostrar que a relação entre atividade do passeio aleatório e o grau de entrada dos nós pode possuir comportamentos distintos de acordo com a comunidade analisada. Notamos que a análise do passeio aleatório em redes corticais representa um recente tópico de interesse na literatura. Em especial, para a modelagem de propagação de doenças como Alzheimer e demência frontotemporal (158–160) e para a modelagem da conectividade funcional à partir da conectividade estrutural do córtex.(161–163)

Os nós da rede cortical da Macaca possuem posições bem definidas. Dessa forma, podemos visualizar a rede para facilitar a interpretação de algumas de suas propriedades. Tal visualização é mostrada na Figura 21(a). Observando a figura, vemos que os nós estão divididos, espacialmente, em dois grupos principais. Com a finalidade de verificarmos a relação entre os grupos espaciais e a topologia da rede, utilizamos um algoritmo de otimização da modularidade (78) para detectar as comunidades presentes na rede. Notamos que também identificamos as comunidades utilizando os algoritmos propostos em.(89, 164) O resultado obtido foi idêntico. Com isso, colorimos os nós da rede mostrada na Figura 21(a) de acordo com as comunidades identificadas. Vemos que as comunidades estão, de fato, relacionadas com a posição espacial dos nós. Isto é, a rede é formada por uma comunidade contendo os nós da região posterior e outra comunidade contendo nós da região anterior do córtex.

Figura 21 – (a) Visualização das duas comunidades do maior componente fortemente conexo da rede cortical da Macaca. O componente é formado por 85 nós e possui um grau médio de $\bar{k} = 27.7$. (b) Relação entre atividade e grau de entrada de cada nó. Os nós estão coloridos de acordo com a comunidade à qual eles pertencem.

Fonte: Elaborada pelo autor.

A comunidade da região anterior corresponde a elementos responsáveis pela execução de tarefas de alto nível, como integração de sentidos e planejamento, enquanto que a comunidade posterior está relacionada com o processamento primário dos sentidos, incluindo a área do córtex visual no lobo occipital, temporal e parietal.(165) Também encontramos uma forte assimetria de conexões entre essas duas comunidades, com muito

mais conexões saindo do módulo anterior e chegando ao módulo posterior, do que o contrário.

Aplicamos, então, a dinâmica de passeio aleatório na rede da Macaca, obtendo assim a atividade de cada nó. Na Figura 21(b) mostramos a atividade, $\mathcal{A}_i$, em função do grau de entrada, k_i^{in} , de cada nó i da rede. Vemos claramente que a relação entre atividade e grau contradiz o comportamento linear previsto pela Equação 2.18. Isso porque os diferentes relacionamentos observados estão associados com as comunidades presentes na rede. Na Figura 21(b), colorimos cada ponto do gráfico de acordo com a comunidade à qual o respectivo nó pertence, revelando que a relação entre atividade e grau de entrada é de fato influenciada pelas diferentes propriedades estruturais de cada comunidade.

Através das análises realizadas sobre o passeio aleatório direcionado, obtivemos um modelo razoável para explicar a não-linearidade observada na relação entre atividade e grau de entrada na rede cortical. Todos os parâmetros relevantes das comunidades dessa rede foram encontrados, e esses parâmetros foram usados para gerar uma única realização do nosso modelo, considerando uma distribuição de grau poissoniana para as comunidades. As comunidades identificadas possuem 42 e 43 nós, e a conectividade entre elas é dada por

$$\boldsymbol{\kappa} = \begin{bmatrix} 23.9 & 4.36 \\ 1.22 & 25.95 \end{bmatrix}. \quad (3.23)$$

As reciprocidades internas das comunidades são dadas por $\mathbf{r} = (0.624, 0.714)$. Na Figura 22 mostramos novamente a relação entre atividade do passeio aleatório e grau de entrada para a rede da Macaca. Mostramos também os valores obtidos para a dinâmica aplicada sobre a rede gerada pelo modelo computacional, utilizando os parâmetros $\boldsymbol{\kappa}$ e $\mathbf{r}$ identificados para a rede real. Vemos que o modelo apresentado na Seção 3.1 representa bem a separação entre atividade e grau de entrada observada para a rede.

Como a rede possui apenas duas comunidades, é possível escrevermos a Equação 3.5 em uma forma fechada para a comunidade 1. Temos que

$$\mathcal{A}_{i|1} = \frac{\pi_1}{N_1 (\bar{x}_{21} + \bar{x}_{11})} k_i^{\text{in}}, \quad (3.24)$$

onde a atividade da comunidade 1, π_1 , é dada por

$$\pi_1 = \frac{1}{1 + \frac{\bar{x}_{12} \bar{x}_{21} + \bar{x}_{22}}{\bar{x}_{21} \bar{x}_{12} + \bar{x}_{11}}}. \quad (3.25)$$

Uma expressão similar pode ser obtida para a comunidade 2, bastando apenas realizarmos

Figura 22 – Atividade do passeio aleatório aplicado sobre a rede cortical (círculos) comparada com a atividade da rede gerada pelo modelo (triângulos) e com a predição analítica (linhas tracejadas).

Fonte: Elaborada pelo autor.

uma inversão de índices. Com isso, as atividades dos nós da rede podem ser escritas como

$$\mathcal{A}_i = \begin{cases} 2.1 \times 10^{-4} k_i^{\text{in}}, & \text{se } i \in C_1, \\ 5.9 \times 10^{-4} k_i^{\text{in}}, & \text{se } i \in C_2. \end{cases} \quad (3.26)$$

Os valores previstos pela Equação 3.26 são mostrados na Figura 22. Observamos uma boa concordância entre a atividade analítica e a originalmente observada na rede. O desvio da previsão analítica ocorre principalmente pelo fato da distribuição de grau das comunidades não ser poissoniana. Adicionalmente, correlações de grau entre nós vizinhos também modificam a atividade da rede, e estas não foram levadas em conta no modelo. Claramente, existe um conjunto de nós que apresenta um grande desvio da previsão analítica. Observando a Figura 22, vemos que esses nós possuem grau de entrada muito alto. De forma a entendermos melhor porque eles desviam da previsão analítica, selecionamos todos os nós possuindo $k^{\text{in}} > 40$, e visualizamos sua posição na rede original da Macaca. O resultado pode ser visto na Figura 23(a). As cores branca e cinza dos nós indicam a comunidade à qual cada nó pertence. Em vermelho, mostramos os nós possuindo $k^{\text{in}} > 40$.

Vemos que os nós de alto grau de entrada tendem a prover a conectividade entre as duas comunidades, pois grande parte das conexões externas da comunidade associada à região anterior estão ligadas a esses nós. Uma outra forma de verificarmos esse comportamento é através de um algoritmo de visualização de redes. Utilizamos o algoritmo Kamada-Kawai (166) para calcularmos posições apropriadas para os nós considerando ex-

Figura 23 – Visualização de nós especiais na rede da Macaca. Nós coloridos em branco e cinza pertencem às duas comunidades encontradas na rede, enquanto que nós coloridos em vermelho apresentam um forte desvio da nossa predição analítica. Apresentamos duas visualizações, (a) utilizando a posição original dos nós e (b) utilizando o algoritmo Kamada-Kawai para calcularmos as posições dos nós.

Fonte: Elaborada pelo autor.

clusivamente a topologia da rede. Notamos que foi utilizada a versão simetrizada da rede para calcularmos as posições. O resultado está mostrado na Figura 23(b). Usando esse procedimento, os nós de alto grau são posicionados entre as duas comunidades, reforçando a ideia de que esses nós são responsáveis por prover a conectividade dos módulos anterior e posterior.

Considerando que alguns nós da rede da Macaca possuem propriedades diferentes dos demais, é natural propormos que uma divisão mais apropriada da rede considere três comunidades ao invés de duas. A divisão em duas comunidades que utilizamos ao longo da análise possui modularidade 0.4. A modularidade da rede ao considerarmos os três grupos de nós apresentados na Figura 23 (branco, cinza e vermelho) se torna 0.33, o que representa uma queda considerável. Portanto, ao considerarmos a modularidade como sendo a propriedade que define comunidades em redes, não é adequado estabelecermos uma terceira comunidade na rede da Macaca.

Como já discutido, comunidades podem ser definidas através de diferentes critérios. Analisando os resultados mostrados nas Figuras 22 e 23, vemos que a relação entre topologia e dinâmica poderia ser utilizada como um critério para se definir comunidades. Nesse caso, poderíamos considerar que além de duas comunidades apresentando eficiências bem determinadas, existe uma terceira comunidade na rede, que não segue o mesmo comportamento observado para as outras duas comunidades. A sistematização de uma abordagem de detecção de comunidades utilizando tal conceito é um interessante tópico para futuras análises.

4 Passeio aleatório enviesado em redes modulares

Como vimos, o passeio aleatório em redes direcionadas possui diversas propriedades interessantes que não são observadas no caso não direcionado. Em especial, temos a possibilidade de diversas relações entre a atividade da dinâmica e o grau dos nós, que surge do desbalanço de conexões entre comunidades da rede. Iremos analisar neste capítulo uma outra forma pela qual tal comportamento pode ser observado na dinâmica de passeio aleatório. Estudaremos uma variação dessa dinâmica chamada de passeio aleatório enviesado. Nela, um valor escalar é associado a cada nó, e esse valor altera a probabilidade do nó receber o agente do passeio aleatório. Essa dinâmica foi apresentada na Seção 2.5.2. Ressaltamos que as redes estudadas neste capítulo são todas não direcionadas, e portanto a alteração da atividade dos nós frente ao grau dos mesmos se dá pela variação do *fitness* associado às comunidades.

Como exemplo inicial, aplicamos a dinâmica de passeio aleatório enviesado em uma rede ER não direcionada, possuindo 1000 nós. Na Figura 24 apresentamos a atividade medida para a dinâmica ao considerarmos duas distribuições de *fitness*. No caso mostrado na Figura 24(a), todos os nós possuem o mesmo valor de *fitness*, e por consequência, a relação entre atividade e grau é exata. Na Figura 24(b) mostramos o que ocorre quando associamos um alto valor de *fitness* à metade dos nós da rede. Podemos ver que o mesmo efeito observado no caso de redes direcionadas, isto é, a presença de diferentes coeficientes angulares para a relação entre atividade e grau para determinados grupos de nós, também pode ser visto no modelo com *fitness*. Nesse caso, podemos dizer que nós de *fitness* similares formam as comunidades da rede. Portanto, é interessante estudarmos como os grupos mostrados na Figura 24(b) se modificam com a modularidade do sistema.

É importante notarmos que, além do passeio aleatório enviesado apresentar os mesmos princípios de comportamento específico de comunidades observados no caso direcionado, é mais factível analisarmos essa dinâmica de forma teórica. Isso porque temos uma separação entre o principal efeito que causa a distinção dos nós em dois grupos (o *fitness*) e a topologia da rede. Dessa forma, utilizando a dinâmica com *fitness* podemos associar qualquer modelo de rede com qualquer distribuição de valores de *fitness* para os nós. Em alguns casos específicos, é possível derivarmos expressões analíticas para a relação entre atividade e grau nas comunidades.

Figura 24 – Atividade da dinâmica de passeio aleatório com *fitness* em função do grau dos nós. Foi utilizada uma rede ER de $N = 1000$ nós e $\bar{k} = 20$. (a) Todos os nós possuem o mesmo valor de *fitness*. (b) Metade dos nós possuem o dobro do valor de *fitness* do que a outra metade.

Fonte: Elaborada pelo autor.

4.1 Influência do *fitness* na relação topologia-dinâmica

Para encontrarmos o relacionamento entre atividade e grau, primeiro utilizamos o fato de que a evolução da probabilidade P_m do agente estar na comunidade m é novamente dada pela Equação 3.1, que por conveniência reproduzimos abaixo.

$$\frac{dP_m}{dt} = -P_m \sum_h p_{mh} + \sum_h P_h p_{hm}.$$

Como discutido anteriormente, os termos p_{mh} representam as probabilidades de transição entre comunidades. No caso do passeio aleatório com *fitness*, não podemos dividir os nós nas mesmas classes de equivalência definidas na Seção 3.1, porque as probabilidades de transição agora dependem do *fitness* dos vizinhos de cada nó. Uma solução é simplificarmos a distribuição dos valores de *fitness* da rede. Supondo que todos os nós de uma dada comunidade m possuem o mesmo valor de *fitness* Φ_m , podemos descrever todos os valores de *fitness* da rede através do vetor $\Phi = (\Phi_1, \Phi_2, \dots, \Phi_n)$. Isso possibilita definirmos uma nova classe de equivalência da dinâmica, dada por $\Psi_m = \Phi * \mathbf{X}_m = (\Phi_1 x_{m1}, \Phi_2 x_{m2}, \dots, \Phi_n x_{mn})$. Dessa forma, temos que

$$p_{mh} = \sum_{\Psi_m} P(m \rightarrow h \mid \Psi_m) P(\Psi_m) \quad (4.1)$$

onde $P(m \rightarrow h \mid \Psi_m)$ é a probabilidade condicional de que o agente, estando em um nó da comunidade m com exatamente $x_{m1}, \dots, x_{mn}$ conexões para as outras comunidades da

rede, faça a transição da comunidade m para h . Note que as conexões associadas a cada termo x_{mh} leva a nós possuindo *fitness* Φ_h . Portanto, a probabilidade condicionada nas classes de equivalência pode ser escrita como

$$P(m \rightarrow h \mid \Psi_m) = \frac{\Phi_h x_{mh}}{\sum_{l=1}^n \Phi_l x_{ml}}. \quad (4.2)$$

Podemos usar novamente a hipótese homogênea, supondo que os graus dos nós são bem representados pela média de graus em cada comunidade. Com isso obtemos

$$p_{mh} = \frac{\Phi_h \bar{x}_{mh}}{\sum_{l=1}^n \Phi_l \bar{x}_{ml}}. \quad (4.3)$$

Seguindo os passos utilizados para a dedução da Equação 3.5, seja π_m o m -ésimo autovalor da matriz de transição formada pelas probabilidades p_{mh} , temos que

$$\mathcal{A}_{i|m} = \frac{\pi_m}{\frac{N}{n} \bar{x}_m} k_i = \xi_m k_i, \quad (4.4)$$

onde $\bar{x}_m = \sum_{l=1}^n \bar{x}_{ml}$.

Note que a Equação 4.4 possui uma diferença fundamental em relação à Equação 3.5, que é o fato do termo ξ_m não envolver direção das arestas. Mesmo assim, obtivemos uma expressão para a atividade do passeio aleatório enviesado muito similar à obtida para o passeio aleatório em redes direcionadas. Dessa forma, vemos que é possível alterar o comportamento específico das comunidades em redes não direcionadas do mesmo modo que fizemos para o caso direcionado, desde que associemos valores de *fitness* distintos para os nós de cada comunidade. A forma como esses valores de *fitness* são associados aos nós é o que da origem a diferentes relacionamentos entre a topologia e a atividade do passeio aleatório.

Apesar da Equação 4.4 possuir a grande vantagem de ser facilmente associada aos resultados obtidos para redes direcionadas, sua dedução carrega muitas restrições presentes na análise do caso direcionado. Podemos encontrar uma expressão mais geral para a dinâmica de passeio aleatório enviesado partindo do fato de que a probabilidade estacionária dessa dinâmica é conhecida (126), e dada por

$$\mathcal{A}_i = \frac{\sum_{j \in \Gamma_i} \phi_j \phi_i}{\sum_{k=1}^N \sum_{l \in \Gamma_k} \phi_l \phi_k}. \quad (4.5)$$

Note que nessa equação o termo ϕ_i representa o valor de *fitness* do nó i . O termo Γ_i é o conjunto de nós vizinhos ao nó i .

Para trabalharmos com a Equação 4.5, precisamos definir a distribuição dos valores de *fitness* para os nós. Como uma primeira análise, iremos supor novamente que os valores de *fitness* dos nós de uma dada comunidade h podem ser bem representados por um único valor. Representaremos esse valor como Φ_h . Nesse caso, temos que a igualdade

$$\sum_{j \in \Gamma_i} \phi_j = \sum_{h=1}^n x_{mh}(i) \Phi_h \quad (4.6)$$

é válida para um nó i da comunidade m , sendo que $x_{mh}(i)$ é o número de conexões que o nó i faz com a comunidade h . Com isso, podemos reescrever a Equação 4.5 como

$$\mathcal{A}_{i|m} = \frac{\Phi_m \sum_{h=1}^n x_{mh}(i) \Phi_h}{\sum_{q=1}^n \sum_{l \in C_q} \sum_{r=1}^n x_{qr}(l) \Phi_r \Phi_q}, \quad (4.7)$$

onde C_q é o conjunto de nós da comunidade q .

Nosso objetivo é encontrar uma relação do tipo $\mathcal{A}_{i|m} = \xi_m k_i$, de forma a evidenciar o ganho de atividade dos nós proporcionado pela comunidade na qual eles se encontram. Supondo que tal relação exista, para encontrarmos ξ_m primeiro somamos a atividade dos nós em cada comunidade, obtendo

$$\begin{aligned} \sum_{i \in C_m} \mathcal{A}_{i|m} &= \pi_m = \sum_{i \in C_m} \xi_m k_i \\ \pi_m &= \xi_m \sum_{i \in C_m} k_i \\ \pi_m &= \xi_m \sum_{i \in C_m} \sum_{h=1}^n x_{mh}(i) \\ \pi_m &= N_m \xi_m \sum_{h=1}^n \bar{x}_{mh}, \end{aligned} \quad (4.8)$$

O termo N_m indica o número de nós na comunidade m . Já o termo π_m representa, assim como nos cálculos para redes direcionadas, a probabilidade de encontrarmos o agente na comunidade m . Ele pode ser encontrado através da manipulação da Equação 4.7

$$\begin{aligned}
\pi_m &= \sum_{i \in C_m} \mathcal{A}_{i|m} \\
&= \frac{\Phi_m \sum_{i \in C_m} \sum_{h=1}^n x_{mh}(i) \Phi_h}{\sum_{q=1}^n \sum_{l \in C_q} \sum_{r=1}^n x_{qr}(l) \Phi_r \Phi_q} \\
&= \frac{\Phi_m \sum_{h=1}^n \Phi_h \sum_{i \in C_m} x_{mh}(i)}{\sum_{q=1}^n \sum_{r=1}^n \Phi_r \Phi_q \sum_{l \in C_q} x_{qr}(l)} \\
&= \frac{N_m \Phi_m \sum_{h=1}^n \Phi_h \bar{x}_{mh}}{\sum_{q=1}^n \sum_{r=1}^n N_q \Phi_r \Phi_q \bar{x}_{qr}}. \tag{4.9}
\end{aligned}$$

Com isso, podemos reescrever a Equação 4.7 na forma

$$\mathcal{A}_{i|m} = \frac{\Phi_m \sum_{h=1}^n \Phi_h \bar{x}_{mh}}{\left(\sum_{s=1}^n \bar{x}_{ms} \right) \left(\sum_{q=1}^n \sum_{r=1}^n N_q \Phi_r \Phi_q \bar{x}_{qr} \right)} k_i = \xi_m k_i. \tag{4.10}$$

Note que na derivação da Equação 4.10 não foram feitas hipóteses em relação à distribuição de grau da rede, apenas consideramos valores de *fitness* únicos para cada comunidade. Vemos pela Equação 4.10 que ξ_m não depende do valor absoluto de *fitness*, mas sim da razão dos valores para diferentes comunidades. A equação também evidencia que se os nós possuírem o mesmo valor de *fitness*, ou seja, se $\Phi_q = \Phi_0$ para qualquer q , teremos

$$\mathcal{A}_{i|m} = \frac{1}{\sum_{q=1}^n \sum_{r=1}^n N_q \bar{x}_{qr}} k_i = \frac{1}{N \bar{k}} k_i. \tag{4.11}$$

Nesse caso, a topologia das comunidades não possui qualquer influência na relação entre atividade e grau do nó.

É importante observarmos que no caso do passeio aleatório com *fitness* que estamos considerando, no qual cada comunidade possui um valor particular de *fitness*, não podemos mais associar ξ_m com a eficiência da comunidade. Isso porque, nesse caso, o custo associado a cada nó é dado tanto pelo grau quanto pelo seu valor de *fitness*. A análise de eficiência poderia ser feita somente se considerássemos um custo generalizado da forma $c = k^\beta + q\phi^\gamma$. Contudo, os expoentes utilizados para definir tal custo possuem forte dependência do sistema sendo estudado. Portanto, não abordaremos tal generalização sobre a eficiência

de comunidades. Por outro lado, o coeficiente ξ_m ainda pode ser interpretado como um potencial da comunidade m em gerar atividade.

Um exemplo de aplicação da Equação 4.11 é quando temos apenas duas comunidades de tamanhos iguais. Nesse caso

$$\mathcal{A}_{i|1} = \Phi_1 \frac{\Phi_1 \bar{x}_{11} + \Phi_2 \bar{x}_{12}}{\frac{N}{2} (\bar{x}_{11} + \bar{x}_{12}) (\Phi_1^2 \bar{x}_{11} + 2\Phi_1 \Phi_2 \bar{x}_{12} + \Phi_2^2 \bar{x}_{22})} k_i, \quad (4.12)$$

com uma expressão similar para $\mathcal{A}_{i|2}$, fazendo uma troca de índices $1 \leftrightarrow 2$. Note que, como as comunidades são não direcionadas e possuem mesmo tamanho, temos que $\bar{x}_{12} = \bar{x}_{21} = \bar{x}_{\text{ext}}$.

Na Figura 25 mostramos a variação do coeficiente ξ considerando redes formadas por duas comunidades, cada qual gerada segundo o modelo BA. Cada comunidade possui 1000 nós. Variamos tanto a conectividade entre as comunidades quanto o *fitness* associado à uma das comunidades. Na Figura 25(a) indicamos a variação de ξ para redes geradas experimentalmente, com comunidades conectadas de acordo com os parâmetros

$$\kappa = \begin{bmatrix} 10 & \bar{x}_{\text{ext}} \\ \bar{x}_{\text{ext}} & 10 \end{bmatrix}, \quad (4.13)$$

sendo que $\bar{x}_{\text{ext}}$ ajusta a modularidade da rede. Na figura, esse termo é variado no intervalo $[0.5, 19.5]$. Os valores de *fitness* para os nós das comunidades 1 e 2 são, respectivamente, $\Phi_1 = 1.5$ e $\Phi_2 = 1$. Vemos que a baixa interconectividade entre as comunidades amplifica a diferença de *fitness* existente entre as mesmas. Isto é, os valores do coeficiente ξ para as duas comunidades se tornam cada vez mais distintos conforme diminuimos $\bar{x}_{\text{ext}}$.

Na Figura 25(a) também mostramos, através de linhas tracejadas, a previsão analítica fornecida pela Equação 4.12. Vemos que a equação representa bem os dados experimentais obtidos. Dessa forma, podemos encontrar analiticamente a razão entre os coeficientes ξ das duas comunidades. Tal razão é dada por

$$\begin{aligned} \frac{\xi_1}{\xi_2} &= \frac{\Phi_1 (\Phi_1 \bar{x}_{11} + \Phi_2 \bar{x}_{\text{ext}}) \frac{N}{2} (\bar{x}_{22} + \bar{x}_{\text{ext}}) (\Phi_1^2 \bar{x}_{11} + 2\Phi_1 \Phi_2 \bar{x}_{\text{ext}} + \Phi_2^2 \bar{x}_{22})}{\Phi_2 (\Phi_2 \bar{x}_{22} + \Phi_1 \bar{x}_{\text{ext}}) \frac{N}{2} (\bar{x}_{11} + \bar{x}_{\text{ext}}) (\Phi_1^2 \bar{x}_{11} + 2\Phi_1 \Phi_2 \bar{x}_{\text{ext}} + \Phi_2^2 \bar{x}_{22})} \\ &= \frac{\Phi_1 (\Phi_1 \bar{x}_{11} + \Phi_2 \bar{x}_{\text{ext}}) (\bar{x}_{22} + \bar{x}_{\text{ext}})}{\Phi_2 (\Phi_2 \bar{x}_{22} + \Phi_1 \bar{x}_{\text{ext}}) (\bar{x}_{11} + \bar{x}_{\text{ext}})}. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Como estamos interessados na influência de $\bar{x}_{\text{ext}}$ na alteração da razão entre os coeficientes, podemos simplificar a Equação 4.14 se considerarmos o caso $\bar{x}_{11} = \bar{x}_{22} = \bar{x}_{\text{int}}$. Com isso obtemos

$$\frac{\xi_1}{\xi_2} = \frac{\Phi_1 (\Phi_1 \bar{x}_{\text{int}} + \Phi_2 \bar{x}_{\text{ext}})}{\Phi_2 (\Phi_2 \bar{x}_{\text{int}} + \Phi_1 \bar{x}_{\text{ext}})}. \quad (4.15)$$

Figura 25 – Valores do coeficiente ξ para duas comunidades possuindo distribuição de grau em lei de potência. Os símbolos representam resultados obtidos experimentalmente para 50 realizações da rede. A linha tracejada indica os valores esperados de acordo com a Equação 4.12. Os resultados foram obtidos para (a) diferentes níveis de interconectividade entre as comunidades e (b) diferentes valores de *fitness* para a comunidade 1.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Através da Equação 4.15, podemos encontrar a razão entre os coeficientes ξ para alguns casos particularmente interessantes de interconectividade entre as comunidades. Tais casos são mostrados na Tabela 1. Eles representam possíveis estratégias que podem ser aplicadas na rede de forma a se alterar o potencial de grupos de nós em gerar atividade. Por exemplo, vemos que uma dada comunidade pode sempre modificar ξ através do aumento do seu *fitness*. Mas de acordo com a Tabela 1, se a modularidade da rede for baixa a variação do *fitness* não vai surtir muito efeito, e possivelmente uma melhor estratégia seria eliminar conexões com outras comunidades.

Tabela 1 – Razão entre os coeficientes ξ de duas comunidades para diferentes níveis de modularidade da rede. As expressões foram calculadas utilizando a Equação 4.15.

Condição	Razão entre coeficientes
Comunidades pouco conectadas ($\bar{x}_{\text{ext}} \rightarrow 0$)	$\frac{\xi_1}{\xi_2} = \frac{\Phi_1^2}{\Phi_2^2}$
Ausência de comunidades na rede ($\bar{x}_{\text{ext}} = \bar{x}_{\text{int}}$)	$\frac{\xi_1}{\xi_2} = \frac{\Phi_1}{\Phi_2}$
Alta conectividade entre comunidades ($\bar{x}_{\text{ext}} \rightarrow \infty$)	$\frac{\xi_1}{\xi_2} = 1$

Fonte: Elaborada pelo autor

Na Figura 25(b) mostramos a variação de ξ entre duas comunidades possuindo variados valores de *fitness*. As comunidades possuem $\bar{x}_{\text{int}} = 10$ e $\bar{x}_{\text{ext}} = 2$. Os valores de

fitness dos nós da comunidade 2 foram fixados em $\Phi_2 = 1$, enquanto que os valores dos nós da comunidade 1 foram variados no intervalo $[0.1, 6]$. Vemos que nesse regime de alta modularidade, a variação do *fitness* da comunidade 1 provoca forte alteração na relação interna entre atividade e grau para ambas as comunidades. Vemos também que a equação representa corretamente os valores obtidos experimentalmente ao variarmos o *fitness* da comunidade.

Até agora estudamos o passeio aleatório enviesado supondo que cada comunidade possui o mesmo valor de *fitness*. Um outro caso particularmente interessante de se estudar ocorre quando os valores de *fitness* dos nós estão relacionados com os graus dos mesmos. Desse modo, temos uma relação do tipo $\phi_i = \eta k_i^\alpha$ entre essas variáveis. Essa hipótese considera que nós possuindo um alto número de conexões tendem a possuir também uma maior atratividade para o agente executando a dinâmica de passeio aleatório. Em outras palavras, se o agente estiver sobre um nó i possuindo uma vizinhança Γ_i , ele se move para um nó $j \in \Gamma_i$ com uma probabilidade proporcional a k_j . Tal hipótese já foi utilizada em diversos estudos.(36, 37, 167, 168)

Utilizando essa condição para o *fitness*, podemos encontrar novamente uma expressão fechada para a atividade dos nós. Primeiramente, vamos considerar que cada comunidade esteja isolada do restante da rede. Nesse caso, a probabilidade de encontrarmos o agente em um nó i da comunidade m é dada por

$$\begin{aligned}
 \mathcal{A}_{i|m}^{(0)} &= \frac{\sum_{j \in \Gamma_i} \phi_j \phi_i}{\sum_{h \in C_m} \sum_{l \in \Gamma_h} \phi_l \phi_h} \\
 &= \frac{\eta^2 \sum_{j \in \Gamma_i} k_j^\alpha k_i^\alpha}{\eta^2 \sum_{h \in C_m} \sum_{l \in \Gamma_h} k_l^\alpha k_h^\alpha} \\
 &\approx \frac{\bar{x}_m^\alpha k_i k_i^\alpha}{\bar{x}_m^\alpha \sum_{h \in C_m} k_h k_h^\alpha} \\
 &= \frac{k_i^{\alpha+1}}{N_m \bar{x}_m^{\alpha+1}}.
 \end{aligned} \tag{4.16}$$

Note que utilizamos a aproximação $\sum_{j \in \Gamma_i} k_j^\alpha \approx \bar{x}_m^\alpha k_i$, que considera que os graus dos *vizinhos* do nó i são bem descritos pelo valor de grau médio $\bar{x}_m^\alpha$ da comunidade.

Tendo encontrado a atividade interna de cada comunidade, precisamos agora encontrar a probabilidade do agente estar em cada comunidade quando estas estiverem conectadas entre si. Nessa escala do sistema, é possível desconsiderarmos variações locais de grau. Com isso, podemos considerar que cada nó i da comunidade m possui $x_{mh}(i) \approx \bar{x}_{mh}$ conexões com cada comunidade h . Utilizando essa condição, temos que os valores de *fitness*

dos nós da comunidade m são dados pelo grau médio da comunidade, ou seja, $\Phi_m = \bar{x}_m$. Portanto, podemos reescrever a Equação 4.9 como

$$\pi_m = \frac{N_m \bar{x}_m^\alpha \sum_{h=1}^n \bar{x}_h^\alpha \bar{x}_{mh}}{\sum_{q=1}^n \sum_{r=1}^n N_q \bar{x}_r^\alpha \bar{x}_q^\alpha \bar{x}_{qr}}. \quad (4.17)$$

A probabilidade do agente estar sobre o nó i da comunidade m é dada pelo produto entre a probabilidade dele estar na comunidade m e a atividade interna do nó i na comunidade, isto é,

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{i|m} &= \pi_m \mathcal{A}_{i|m}^{(0)} \\ &= \frac{\bar{x}_m^\alpha \sum_{h=1}^n \bar{x}_h^\alpha \bar{x}_{mh}}{x_m^{\alpha+1} \sum_{q=1}^n \sum_{r=1}^n N_q \bar{x}_r^\alpha \bar{x}_q^\alpha \bar{x}_{qr}} k_i^{\alpha+1} \\ &= \xi_m k_i^{\alpha+1}. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Portanto, temos que a atividade da dinâmica está relacionada de forma não linear com o grau dos nós.

É importante observarmos que no caso do *fitness* associado ao grau, podemos novamente interpretar o coeficiente ξ_m como sendo um indicativo da eficiência da comunidade m . Isso ocorre porque, diferentemente do que consideramos anteriormente, o grau e o *fitness* dos nós não são mais dois termos descorrelacionados associados a diferentes tipos de custo para a geração de atividade. Como o *fitness* é determinado pelo grau, a atratividade de um nó para receber visitas do agente da dinâmica depende somente do grau do nó. Com isso, podemos entender o coeficiente ξ_m como sendo o potencial de nós presentes na comunidade m para gerar atividade dinâmica, dado um custo proporcional a $k^{\alpha+1}$ para a criação e manutenção de cada nó.

Apresentaremos dois exemplos de passeio aleatório enviesado ocorrendo em diferentes modelos de redes. No primeiro, conectamos duas comunidades ER de forma aleatória, segundo a matriz de conectividade

$$\kappa = \begin{bmatrix} 10 & 2 \\ 2 & 20 \end{bmatrix}. \quad (4.19)$$

Aplicamos nessa rede o passeio aleatório enviesado, sendo que fixamos o *fitness* de cada nó i como $\phi_i = k_i$. Na Figura 26(a) mostramos a relação resultante entre atividade e grau dos nós. Como esperamos uma relação do tipo $A_i \propto k_i^2$, normalizamos a atividade pelo

Figura 26 – Atividade do passeio aleatório enviesado, normalizada pelo grau, em função do grau dos nós. As redes utilizadas possuem duas comunidades e conectividade indicada pela Equação 4.19. Cada comunidade possui 1000 nós e topologia interna (a) ER e (b) BA.

Fonte: Elaborada pelo autor.

grau de cada nó, de forma a facilitarmos a visualização do resultado. Vemos que no caso do *fitness* correlacionado com o grau, a diferença de densidade interna das comunidades pode provocar diferentes relacionamentos entre atividade e grau. As linhas vermelhas indicam os coeficientes angulares dos relacionamentos previstos analiticamente, segundo a Equação 4.18.

Na Figura 26(b) mostramos o resultado obtido ao conectarmos comunidades criadas de acordo com o modelo BA, sendo que a conectividade entre as comunidades é dada pela matriz κ indicada na Equação 4.19. Vemos nesse caso que a separação entre as comunidades se torna muito mais sutil, podendo ser vista apenas para nós de alto grau. Verificamos que isso ocorre mesmo ao visualizarmos o resultado em escala logarítmica. A Figura 26(b) também indica que o valor analítico fornecido pela Equação 4.18 possui boa concordância com os valores experimentais, mesmo no caso de comunidades BA. Observamos porém um desvio moderado para os nós de alto grau presentes em cada comunidade.

De forma a verificarmos como a relação entre atividade e grau se modifica para o caso do *fitness* correlacionado ao grau, geramos diversas redes possuindo comunidades com topologia ER. A conectividade entre as comunidades é novamente dada pela matriz κ indicada na Equação 4.19, com a exceção de que variamos o grau médio, $\bar{x}_{\text{ext}}$, entre as comunidades. O resultado pode ser visto na Figura 27(a). Novamente, vemos que a conectividade entre as comunidades altera o relacionamento entre atividade e grau de forma não linear. Em especial, a não linearidade se torna mais relevante quando a rede é altamente modular.

Figura 27 – Eficiência do passeio aleatório enviesado em função do (a) grau médio externo das comunidades e (b) coeficiente de relacionamento entre o grau e *fitness* dos nós. Para cada ponto experimental foram utilizadas 50 realizações do modelo.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Outra questão interessante a se verificar no caso do *fitness* associado ao grau é a influência do expoente α da relação $\phi = k^\alpha$. Esse expoente ajusta a importância que o nó adquire para a dinâmica de acordo com o seu grau. Para maiores valores de α , nós de alto grau tendem desproporcionalmente a adquirir altos valores de atividade. Na Figura 27(b) mostramos a evolução da eficiência para diferentes valores de α , utilizando redes definidas pela matriz κ indicada na Equação 4.19. Vemos que há uma forte queda de eficiência com o aumento de α . Isso ocorre porque maiores valores de α provocam uma forte concentração de atividade em nós de alto grau. Por consequência, a atividade de nós de baixo e médio grau se torna muito baixa. Com isso, o valor médio de atividade das comunidades, e da rede, diminui. Adicionalmente, vemos que ambas comunidades possuem a mesma tendência de queda.

4.2 Atuação do *fitness* em redes de aeroportos

4.2.1 Rede americana de aeroportos

Um sistema interessante para aplicarmos a dinâmica de passeio aleatório enviesado é a rede americana de aeroportos, que foi apresentada na Seção 2.4. Inicialmente, utilizaremos como propriedade de *fitness* o grau dos nós, ou seja, $\phi_i = k_i$. A lógica por trás dessa decisão é que nós de alto grau representam aeroportos com um grande número de linhas aéreas para outros aeroportos, e portanto possuem maior chance de serem escolhidos como próximo destino de um agente caminhando sobre a rede.

A Figura 28(a) apresenta o resultado da atividade em relação ao grau dos nós ao executarmos a dinâmica sobre a rede. Note que a escala do gráfico é logarítmica em ambos os eixos, que se faz necessária devido à alta heterogeneidade de grau da rede de aeroportos. Observando o gráfico, vemos uma sutil separação dos nós em dois grupos distintos, especialmente para valores de grau $k > 10$. É importante lembrarmos que se os nós possuísem o mesmo valor de *fitness*, a relação entre atividade e grau seria perfeitamente linear. Ao aplicarmos um algoritmo de detecção de comunidades na rede¹, obtemos que a divisão em duas comunidades otimiza a modularidade da rede. A primeira comunidade é formada por 724 aeroportos, enquanto que a segunda possui 333 aeroportos. A interconectividade entre as comunidades é dada por

$$\kappa = \begin{bmatrix} 27.9 & 0.1 \\ 0.3 & 9.8 \end{bmatrix}. \quad (4.20)$$

Figura 28 – Atividade do passeio aleatório em função do grau dos nós para a rede de aeroportos americana. A cada nó associamos um valor de *fitness* igual ao grau do mesmo. (a) Atividade em função do grau encontrada experimentalmente. (b) O mesmo resultado experimental de (a), mas com cada ponto colorido de acordo com a comunidade à qual o respectivo nó pertence. Adicionalmente, as linhas vermelhas indicam a relação esperada de acordo com a Equação 4.18.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Através dessas propriedades, utilizamos a Equação 4.18 para descrever a atividade dos nós em função do grau para cada comunidade. O resultado pode ser visto na Figura 28(b). Vemos que as comunidades presentes na rede de fato possuem diferentes relacionamentos entre atividade e grau. Adicionalmente, notamos que as hipóteses consi-

¹ Aplicamos o método descrito em (78) utilizando o parâmetro $\gamma = 0.1$ (note que γ é o termo usado em (78) para indicar a escala de tamanho das comunidades).

deradas na dedução da Equação 4.18 proporcionam um modelo razoável da eficiência das comunidades, como indicado pelas linhas vermelhas.

Com a finalidade de melhor visualizarmos os resultados obtidos, apresentamos na Figura 29 a rede de aeroportos estudada, juntamente com o mapa dos Estados Unidos. Os nós foram coloridos de acordo com a comunidade à qual eles pertencem. Claramente, vemos que a divisão da rede em duas comunidades ocorre devido ao estado do Alasca. Quase todos os aeroportos presentes na comunidade 2 que identificamos anteriormente estão localizados no Alasca, enquanto que a comunidade 1 está relacionada com os demais aeroportos.

Intuitivamente, a separação em dois grupos na relação entre atividade e grau dos aeroportos pode parecer trivial, já que é esperado que os aeroportos do estado do Alasca possuam uma topologia e dinâmica diferentes do restante dos Estados Unidos. Mas vemos pelo gráfico mostrado na Figura 28(b) que os graus, e por consequência o *fitness*, dos nós não possuem uma divisão clara em dois grupos. Dessa forma, se a rede não possuísse duas comunidades topológicas bem definidas, não observaríamos dois grupos na relação entre atividade e dinâmica do passeio aleatório. Isso porque os valores de *fitness* estariam “misturados” entre os nós. Ao reforçarmos a estrutura de comunidades da rede, geramos uma assortatividade de *fitness* entre os nós que propicia o surgimento dos dois grupos.

No caso da rede de aeroportos estudada, podemos dizer que a comunidade formada pelos aeroportos do estado do Alasca possuem uma menor eficiência, pois um dado grau gera menos atividade da dinâmica do que nós de grau similar presentes no restante do país. Isso ocorre porque o Alasca possui uma série de regiões de difícil acesso terrestre (169), e portanto o número de aeroportos localizados na região é desproporcional à sua densidade populacional.(169)

Como descrito na Seção 2.4, a rede de aeroportos utilizada possui informação sobre o número de passageiros que passaram por cada aeroporto no ano de 2013. Podemos associar esses valores com a atividade anual dos aeroportos. Dessa forma, é possível utilizarmos os conceitos desenvolvidos sobre o passeio aleatório enviesado para produzirmos um modelo da atividade real dos aeroportos dado o grau e *fitness* dos mesmos. Para tanto, plotamos na Figura 30(a) o número de passageiros anual de cada aeroporto, que chamamos de $\mathcal{A}_{\text{real}}$, em função do grau dos nós. Note que os valores de $\mathcal{A}_{\text{real}}$ estão normalizados pela soma do número total de passageiros registrados no ano. Aplicando uma regressão linear entre os valores logarítmicos dessas variáveis, obtemos uma estimativa da relação entre as mesmas, dada por $\mathcal{A}_{\text{real}} = 2.6 \times 10^{-8} k^{2.4}$. Comparando essa expressão com a Equação 4.18, vemos que o expoente da relação entre *fitness* e grau, α , para essa rede é dado por $\alpha = 1.4$. Dessa forma, podemos definir valores de *fitness* aos nós de forma a obter a mesma atividade real observada nos aeroportos. Esses valores são dados por $\phi_i = k_i^{1.4}$. Note que essa relação representa a definição de uma regra local de transição da

Figura 29 – Visualização da rede americana de aeroportos. Os nós estão coloridos de acordo com as comunidades identificadas pelo método descrito em.(78)

Fonte: Elaborada pelo autor.

dinâmica de passeio aleatório de forma a obtermos a relação global entre atividade e grau observada.

Aplicamos a dinâmica de passeio aleatório utilizando a forma funcional do *fitness* proposta. Chamaremos a respectiva atividade obtida de $\mathcal{A}_{\text{exp}}$. Na Figura 30(b) apresentamos a comparação entre a atividade real dos aeroportos com a atividade experimental. No gráfico também estão mostrados os coeficientes de correlação de Pearson ρ e $\tilde{\rho}$ entre as duas variáveis, ao considerarmos estas na escala linear e logarítmica, respectivamente. Vemos que há uma boa concordância entre as duas variáveis em quase todo o intervalo de valores. Notamos que para valores muito altos de atividade, associados aos maiores aeroportos da rede, há um nítido desvio de comportamento entre os valores reais e experimentais. Isso porque tais aeroportos possuem uma atratividade maior do que o esperado para o agente da dinâmica, ou seja, $\alpha > 1.4$ para graus muito altos. Observamos também que se utilizarmos diferentes expoentes α para as duas comunidades da rede, o relacionamento entre $\mathcal{A}_{\text{real}}$ e $\mathcal{A}_{\text{exp}}$ pode se tornar ainda mais preciso. No entanto, para derivarmos a Equação 4.18 fixamos o mesmo expoente α para todos os nós. Pretendemos generalizar essa equação para variados α em estudos futuros.

Figura 30 – Análise da atividade real e simulada para a rede de aeroportos americanos. A atividade real é dada pelo número de passageiros que transitaram pelo aeroporto no ano de 2013. (a) Atividade real em função do grau dos nós, a linha vermelha indica a função encontrada por regressão linear dos pontos. (b) Atividade real comparada com a atividade simulada, obtida ao aplicarmos a dinâmica de passeio aleatório com uma regra apropriada dos valores de *fitness*. Os termos ρ e $\tilde{\rho}$ representam o coeficiente de correlação de Pearson ao considerarmos, respectivamente, as variáveis em escala linear e logarítmica.

Fonte: Elaborada pelo autor.

4.2.2 Rede global de aeroportos

É interessante compararmos os resultados obtidos para a rede de aeroportos americanos com outra rede também de aeroportos, mas definida em outra escala. Para tanto, a rede global de aeroportos, descrita na Seção 2.4, será utilizada. A rede está mostrada na Figura 31, onde cada nó foi colorido de acordo com o país ao qual ele pertence. Utilizamos os dados fornecidos pelo repositório *World Bank*² para obter o número de passageiros registrados no ano de 2013 em cada país presente na rede de aeroportos. Cada país representa uma comunidade esperada na rede, pois há uma tendência de aeroportos do mesmo país possuírem mais conexões entre si do que com aeroportos de outros países. Portanto, para essa rede temos informação tanto sobre as comunidades da rede quanto sobre a atividade real de cada comunidade.

Para encontrarmos novamente o *fitness* ideal para os nós, não podemos utilizar o mesmo procedimento feito anteriormente de aplicar uma regressão linear entre a atividade e grau dos nós, pois não temos a atividade dos aeroportos, e sim dos países. Ainda assim, podemos utilizar a Equação 4.17, que prevê a atividade π_{teo} de cada comunidade, para encontrarmos o expoente α que melhor descreve a atividade real π_{real} observada para cada

² Os dados foram obtidos de <<http://data.worldbank.org/indicator/IS.AIR.PSGR>>. Acesso em: 10 de Janeiro de 2016.

Figura 31 – Visualização da rede mundial de aeroportos. Cada nó foi colorido de forma a diferenciar o país ao qual ele pertence. Note que devido às limitações de visualização, nós pertencentes a diferentes países podem possuir cores similares.

Fonte: Elaborada pelo autor.

país. O expoente α ideal deve fornecer um coeficiente angular unitário ao aplicarmos uma regressão linear entre o logaritmo das variáveis π_{real} e π_{teo} . Isto é, queremos encontrar α tal que a relação entre π_{real} e π_{teo} seja linear. Da mesma forma, podemos encontrar o valor de α que melhor relaciona π_{real} com a atividade simulada π_{exp} , obtida experimentalmente ao aplicarmos a dinâmica de passeio aleatório na rede.

Os coeficientes angulares entre as variáveis π_{real} e π_{teo} e entre π_{real} e π_{exp} obtidos para diferentes valores de α são mostrados na Figura 32. Vemos que o valor $\alpha \approx 0.6$ possibilita obtermos uma boa relação entre os valores de atividade reais e os valores obtidos teoricamente e experimentalmente. Portanto, temos que o *fitness* ideal para representarmos as atividades reais através do modelo é dado pela fórmula $\phi_i = k_i^{0.6}$.

Tendo obtido a regra ideal para o *fitness* dos nós, executamos a dinâmica de passeio aleatório na rede, obtendo as atividades dos aeroportos mostradas na Figura 33(a). Indicamos também na figura os valores previstos pela Equação 4.18. Vemos uma boa concordância entre os valores obtidos numericamente e a expressão analítica. Na Figura 33(b) mostramos a relação entre a atividade real de cada país e os valores previsto pela Equação 4.17. Indicamos no gráfico os valores do coeficiente de correlação de Pearson ρ e $\tilde{\rho}$ das variáveis ao considerarmos, respectivamente, uma escala linear e logarítmica. Observamos que as atividades reais se relacionam bem com os valores encontrados analiticamente.

Figura 32 – Coeficiente angular obtido através da regressão linear entre o logaritmo das variáveis π_{real} e π_{teo} (azul) e entre π_{real} e π_{exp} (verde), para diferentes valores de α . O valor ideal de α deve fornecer um coeficiente angular unitário para ambas as relações.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Além dos valores analíticos, podemos também comparar os valores reais com as atividades obtidas ao simularmos a dinâmica na rede. Na Figura 33(c) mostramos a atividade real dos países em relação à atividade calculada numericamente. Os valores de correlação de Pearson estão novamente indicados no gráfico.

Os resultados mostram que as atividades reais, analíticas e experimentais possuem boa concordância. De certo modo isso já era esperado, já que ajustamos o parâmetro α de forma a obtermos uma relação na forma $y = x$ entre estas variáveis. O ponto mais interessante é que tal concordância foi obtida através da regra $\phi_i = k_i^{0.6}$, ou seja, utilizamos uma dinâmica de passeio aleatório que considera apenas a topologia da rede para produzir as atividades reais. Tal regra indica uma preferência não-linear do agente da dinâmica de escolher um vizinho do nó atual de acordo com o seu grau.

Como possuímos as comunidades da rede, é interessante verificarmos alguns casos específicos de desvio na predição das atividades reais. Para tanto, na Figura 34 plotamos, em escala linear, a atividade real em relação à atividade calculada numericamente. Vemos que alguns países como Estados Unidos e China possuem atividade maior do que o tipicamente esperado para a rede. Já em outros países como Reino Unido, Alemanha e Itália acontece uma situação inversa. Isso ocorre porque a regra local de transição do passeio aleatório é distinta para cada país. Em outras palavras, a atividade para receber visitas do agente, em relação ao número de linhas aéreas, é diferente para cada país. Portanto, cada país possui um diferente expoente α na relação $\phi_i = k_i^\alpha$. Note que esse

Figura 33 – Análise de atividade para a rede global de aeroportos. (a) Atividade dos nós medida numericamente em função do grau. A atividade foi encontrada aplicando-se a dinâmica de passeio aleatório enviesado na condição $\phi_i = k_i^{0.6}$. A linha vermelha indica o valor previsto analiticamente. (b) Atividade real de cada país comparada com a atividade prevista pela Equação 4.17. (c) Atividade real de cada país comparada com a respectiva atividade obtida numericamente. Os termos ρ e $\tilde{\rho}$ indicam, respectivamente, a correlação de Pearson entre as variáveis em escala linear e logarítmica.

Fonte: Elaborada pelo autor.

fato é diferente de afirmarmos que o país possui maior atratividade de visitas em geral.

Figura 34 – Número de passageiros que passaram por aeroportos de cada país no ano de 2013 (normalizados pela soma do número de passageiros total) comparado com a atividade do passeio aleatório encontrada experimentalmente.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Um ponto importante a se discutir é a diferença do parâmetro α observada para a rede de aeroportos americanos ($\alpha = 1.4$) e a rede de aeroportos global ($\alpha = 0.6$). Em parte, essa diferença ocorre porque, como podemos ver na Figura 34, aeroportos dos Estados Unidos possuem certamente $\alpha > 0.6$. Por outro lado, como a rede de aeroportos americanos é mantida pelo departamento de transporte dos Estados Unidos, ela possui uma alta confiabilidade nas informações sobre a conectividade e número de passageiros dos aeroportos. Os dados utilizados para criarmos a rede global de aeroportos são mantidos de forma colaborativa, de modo que há certamente dados não incluídos na base de dados, bem como possíveis erros sobre algumas linha aéreas. Adicionalmente, o número de passageiros anual de cada país, fornecido pelo *World Bank*, é um dado de difícil acesso em alguns países, e portanto também esperamos uma certa imprecisão nas informações.

Para mostrarmos a diferença entre as duas redes consideradas, na Figura 35 comparamos os graus dos nós presentes em ambas as redes. Consideramos apenas o sub-componente de cada rede contendo os aeroportos de mesmo código IATA (*International Air Transport Association*) em ambas as redes. O código IATA representa um identificador único global para os aeroportos. Observando a figura, está claro que há uma grande diferença de grau entre os aeroportos representados em cada rede. Apesar dos aeroportos de maior grau possuírem uma diferença razoavelmente pequena, aeroportos intermediários possuem muita linhas aéreas não incluídas na base OpenFlights.

Figura 35 – Comparação entre o grau dos nós presentes na rede de aeroportos americanos (RITA) e os mesmos aeroportos encontrados na rede de aeroportos global (OpenFlights).

Fonte: Elaborada pelo autor.

Portanto, temos que o valor $\alpha = 1.4$ encontrado para os aeroportos americanos possui maior confiabilidade do que o expoente encontrado para a rede global. Certamente

é um problema em aberto verificarmos os expoentes característicos de cada país. Infelizmente, precisamos de dados mais confiáveis para realizarmos tal estudo. Contudo, as ideias apresentadas nessa seção podem ser imediatamente aplicadas quando tais dados estiverem disponíveis. Adicionalmente, os mesmos conceitos também possuem uma extensão natural para outros domínios, como redes corticais, redes obtidas da *World Wide Web* e redes sociais.

5 Integra-e-dispara em redes modulares

Nesta seção analisaremos a relação estrutura-dinâmica em redes modulares através da dinâmica integra-e-dispara simplificada. Mostraremos que a versão simplificada da dinâmica, apresentada na Seção 2.6, pode apresentar comportamentos similares à dinâmica original. Passaremos então ao estudo analítico da dinâmica, através do qual obteremos uma expressão para o número esperado de nós disparando numa rede ER. Em seguida, realizaremos uma análise numérica sobre a relação entre a taxa de disparos dos nós com o grau dos mesmos. Consideraremos tanto casos nos quais a taxa de disparos é influenciada pela direção das arestas, quanto casos onde propriedades topológicas das comunidades atuam na dinâmica. Inicialmente, utilizaremos apenas conexões excitatórias nas análises, pois a presença de conexões inibitórias não localizadas apenas implicam na diminuição da ativação global da rede.

5.1 Comparação entre a dinâmica simplificada e original

Nosso primeiro objetivo é demonstrar que as simplificações sugeridas na Seção 2.6 podem dar origem a comportamentos dinâmicos similares aos observados na dinâmica original. Para tanto, simulamos a dinâmica integra-e-dispara original, definida pela Equação 2.21, utilizando parâmetros neuronais e de sinapse usualmente indicados em trabalhos de redes.(138, 143) Os valores dos parâmetros considerados foram $E_r = -65$ mV para o potencial de repouso, $T_o = -55$ mV para o potencial limiar de disparo, $\tau_m = 10$ ms para a constante de decaimento e $g_{ij} = 0.6$ mV para a amplitude de sinapse. Note que representamos o limiar de disparo da dinâmica original por T_o , enquanto que o mesmo parâmetro para a dinâmica simplificada será representado por T .

Na Figura 36 mostramos o comportamento da dinâmica original executada em uma rede ER com $N = 1000$ e $\bar{k} = 20$. O comportamento é comparado com a dinâmica simplificada, descrita pela Equação 2.25, utilizando um limiar $T = 20$. Na Figura 36(a) apresentamos a taxa de disparos global da rede ao longo do tempo para ambas as dinâmicas. Nos dois casos, observamos a presença de um rápido estado transiente que evolui para um estado auto-sustentado no qual R^d possui pouca variação com o tempo. Na Figura 36(b) comparamos a taxa de disparo de cada nó no estado auto-sustentado, considerando a dinâmica original e a simplificada. Na figura também indicamos o coeficiente de correlação de Pearson, ρ , entre as duas variáveis. Vemos que, para os parâmetros utilizados, há excelente concordância entre os dois modelos, tanto para o comportamento global da rede quanto em relação às taxas de disparo.

Figura 36 – Comparação entre os modelos integra-e-dispara original e simplificado. (a) Fração de nós disparando na rede em função do tempo. (b) Comparação entre a taxa de disparo dos nós ao considerarmos a dinâmica original e a sua versão simplificada. As duas dinâmicas foram aplicadas em uma rede ER possuindo $N = 1000$ e $\bar{k} = 20$. Os parâmetros dinâmicos utilizados estão descritos no texto.

Fonte: Elaborada pelo autor.

É interessante verificarmos também como o patamar de ativação da dinâmica, R , se relaciona com o grau médio da rede. Para tanto, utilizamos novamente redes ER com $N = 1000$ e variamos o grau médio das mesmas. Como vimos na Figura 36(b), a taxa de disparo está relacionada com o respectivo grau de cada nó. Portanto, esperamos que o patamar de ativação esteja fortemente relacionado com o grau médio da rede. Com isso, o aumento do grau médio trivialmente provoca o aumento do patamar de ativação da rede. Podemos obter um resultado mais interessante se variarmos algum parâmetro da dinâmica juntamente com o grau médio da rede. Decidimos por variar o limiar de disparo T , que é o parâmetro mais relevante da dinâmica integra-e-dispara simplificada. Para cada grau médio $\bar{k}$, fixamos o limiar da dinâmica simplificada em $T = \bar{k}$. No caso da dinâmica original, a correspondência entre $\bar{k}$ e o limiar T_o não é imediata, pois estes parâmetros estão em escalas física diferentes. Através de testes numéricos, determinamos que a dinâmica original apresenta valores de patamar de ativação equivalentes à dinâmica simplificada se utilizarmos a relação $T_o = 0.6\bar{k} - 66$.

Na Figura 37 mostramos o patamar de ativação das redes para diferentes valores de $\bar{k}$. Vemos que, de fato, ao variarmos apropriadamente o limiar do modelo integra-e-dispara original, temos um comportamento do patamar de ativação muito similar à versão simplificada do modelo. Os valores exibidos pelos dois modelos divergem significativamente apenas quando a rede é muito esparsa, isto é, quando $\bar{k} < 8$.

Essa breve comparação que realizamos mostra que os resultados obtidos sobre a dinâmica integra-e-dispara simplificada podem ser estendidos para a dinâmica original.

Figura 37 – Patamar de ativação da dinâmica integra-e-dispara aplicada sobre redes ER, em função do grau médio da rede. Estão plotados os valores obtidos para o modelo original e simplificado da dinâmica. Cada ponto do gráfico representa 20 realizações da rede e da dinâmica, e barras de erro indicam o desvio padrão observado nas diferentes realizações.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Adicionalmente, a comparação nos fornece as escalas das grandezas físicas a serem consideradas na dinâmica simplificada. Temos que o potencial de repouso e limiar possuem valores próximos de -60 mV, a escala de tempo é de aproximadamente 10 ms e a amplitude do potencial pós-sináptico é da ordem de 0.5 mV.

5.2 Análise teórica da dinâmica integra-e-dispara em redes Erdős-Rényi

Devido especialmente à descontinuidade da dinâmica integra-e-dispara presente no momento do disparo do neurônio, existem grandes dificuldades em se realizar um estudo analítico da dinâmica aplicada em redes. Nossa proposta nessa seção é apresentarmos alguns resultados teóricos obtidos sobre o patamar de ativação da dinâmica em redes ER. Tal estudo já foi realizado por outros autores.(143,153,170,171) Porém, a maioria dos estudos previamente realizados derivam equações auto-consistentes que necessitam de métodos numéricos para serem resolvidas. No nosso caso, derivaremos uma expressão fechada para o patamar de ativação, que revela como a atividade global da rede se relaciona com o grau médio da mesma. Apresentaremos também uma generalização dos resultados para redes com comunidades, mas mostraremos que obter uma expressão fechada na

presença de comunidades é uma difícil tarefa.

É importante observarmos que, nesta seção, utilizaremos a notação $\langle X \rangle$ para indicar a média da variável aleatória X . Essa notação difere da utilizada no restante do trabalho, na qual indicamos tal média por $\bar{x}$. A mudança de notação é necessária para facilitarmos a compreensão das derivações apresentadas.

Apesar da dinâmica integra-e-dispara ser determinística para uma dada condição inicial, utilizaremos uma abordagem probabilística para encontrar a taxa de disparos dos nós e o patamar de ativação R da rede após um tempo suficientemente longo de evolução da dinâmica. Primeiramente, supomos que o potencial C de cada nó pode ser escrito como sendo a soma de duas variáveis estocásticas, Θ e Y .

A variável Θ representa a fase que um dado nó se encontra. Iremos considerar que no estado assíncrono não há preferência para um determinado valor de potencial, e portanto a distribuição de probabilidades da variável Θ é dada por

$$P^\theta(\Theta = \theta) = \begin{cases} \frac{1}{T} & \text{se } 0 \leq \theta < T \\ 0 & \text{se } \theta < 0 \text{ ou } \theta \geq T. \end{cases} \quad (5.1)$$

Dessa forma, os valores de Θ estão distribuídos uniformemente no intervalo $[0, T)$.

A variável estocástica Y representa o ganho de carga típico dos nós a cada instante de tempo. Naturalmente, os valores de Y dependem do grau k do nó. Por brevidade de notação, representaremos o ganho de nós de grau k , Y_k , apenas por Y , e o índice k será usado ao escrevermos a distribuição de probabilidades de Y_k . Tal distribuição é dada por

$$P_k^y(Y = y) = \begin{cases} \binom{k}{y} R^y (1 - R)^{k-y} & \text{se } 0 \leq y \leq k \\ 0 & \text{se } y < 0 \text{ ou } y > k, \end{cases} \quad (5.2)$$

onde R , a variável que estamos interessados, representa a probabilidade média de um nó qualquer da rede disparar a cada instante de tempo. A distribuição P_k^y é uma binomial representando a probabilidade de que y vizinhos de um dado nó de grau k disparem simultaneamente em um dado instante de tempo. Portanto, através das distribuições P^θ e P_k^y estamos supondo que a variável estocástica C , relacionada à carga de um dado nó de grau k da rede, seja dada pela soma de um termo uniformemente aleatório, representando a carga atual do nó, com um termo de ganho típico que depende do grau do nó. Com isso, a probabilidade de um nó apresentar uma certa carga, ou potencial, $c = \theta + y$ é dada por

$$\begin{aligned}
P_k^c(C = c) &= \sum_{y=-\infty}^{+\infty} P^\theta(\Theta = c - y) P_k^y(Y = y) \\
&= \sum_{y=\max(0, c-T+1)}^{\min(k, c)} \frac{1}{T} P_k^y,
\end{aligned} \tag{5.3}$$

onde $\min(a, b)$ ($\max(a, b)$) representa o menor (maior) valor entre a e b . Por brevidade de notação, definimos $y_{\max} = \min(k, c)$, o que nos permite escrever P_k^c na forma

$$P_k^c = \begin{cases} \sum_{y=0}^{y_{\max}} \frac{1}{T} P_k^y & \text{se } c < T \\ \sum_{y=c-T+1}^{y_{\max}} \frac{1}{T} P_k^y & \text{se } c \geq T. \end{cases} \tag{5.4}$$

Dada a distribuição de grau da rede, P_k , a distribuição de cargas é então dada por

$$P^c = \sum_k P_k P_k^c. \tag{5.5}$$

Na Figura 38 plotamos a distribuição de cargas obtida experimentalmente e analiticamente para a dinâmica aplicada em redes ER. As redes possuem $N = 10000$ nós, e foram feitas 10 realizações da rede e da dinâmica para cada caso. O grau médio e limiar de disparos utilizados estão indicados sobre cada gráfico. Nas Figuras 38(a), (b) e (c) mostramos a distribuição de cargas para casos onde $\langle k \rangle = T$. Vemos que em tal situação há uma excelente concordância entre os valores experimentais e os previstos pela Equação 5.5. Nas Figuras 38(d), (e) e (f) mostramos a distribuição de cargas para os mesmos valores de grau médio dos gráficos acima, mas utilizando limiares um pouco abaixo do grau médio. Vemos que nesses casos a expressão analítica já não representa corretamente os valores experimentais. Iremos demonstrar no decorrer desta seção que o erro da expressão teórica está relacionado com o valor da taxa de disparos média, R , da rede. Para altos valores de R , existem muitos nós disparando a cada instante, e os efeitos de descontinuidade da dinâmica se tornam dominantes no comportamento do sistema. Com isso, a carga dos nós não pode ser mais escrita como a soma das variáveis Θ e Y propostas.

A princípio, o fato da expressão analítica valer apenas para $T \approx \langle k \rangle$, ou, equivalentemente, para baixos valores de R , pode ser visto como um problema do modelo. Mas o fato é que o regime $T \approx \langle k \rangle$ é justamente o que proporciona os comportamentos dinâmicos mais interessantes. Na Figura 39 mostramos os valores calculados experimentalmente para o patamar de ativação da dinâmica em função do grau médio da rede e do potencial limiar. Para obtermos os valores mostrados, utilizamos redes ER possuindo $N = 10000$ nós. A linha azul indica a fronteira na qual $R \approx 0.1$. Vemos que para $T \gg \langle k \rangle$, a topologia ER não consegue sustentar a dinâmica no estado assíncrono, e temos que $R = 0$. Nos casos onde $T \ll \langle k \rangle$, a grande maioria dos nós da rede disparam a todo momento.

Figura 38 – Comparação da distribuição de cargas (potencial) em cada neurônio, calculada experimentalmente e analiticamente utilizando a Equação 5.5. Para cada gráfico foram utilizadas 10 redes ER com $N=10000$. O grau médio e potencial limiar de disparo utilizados estão indicados sobre cada gráfico.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Portanto, existe uma região de valores $T \approx \langle k \rangle$ que possibilita o surgimento de diferenciados comportamentos dinâmicos na rede, como por exemplo oscilações, correlações ou irregularidades nos disparos dos nós. É interessante notarmos que essa região também é a que fornece os valores mais compatíveis de taxa de disparo e ativação entre a dinâmica simplificada e a completa, já que fora dessa faixa o modelo simplificado anula ou satura sua ativação.

Utilizando a expressão encontrada para P_k^c , podemos definir uma nova probabilidade, P_k^d , relacionada à taxa de disparos para nós de grau k . Tal probabilidade é dada pela chance de encontrarmos nós possuindo potencial maior ou igual a T em um dado instante, já que tais nós sempre vão disparar no instante seguinte. Para encontrar P_k^d basta calcularmos

$$P_k^d(C \geq T) = \sum_{c=T}^{T-1+k} P_k^c(C = c). \quad (5.6)$$

Note que o limite superior do somatório, $c = T - 1 + k$, indica o máximo de carga que

Figura 39 – Patamar de ativação, R , de redes ER para diferentes valores de grau médio e limiar de disparos da dinâmica integra-e-dispara. Os valores foram calculados experimentalmente utilizando redes com $N = 10000$ e 20 realizações para cada ponto da figura. A linha azul indica a fronteira de parâmetros que resultam em $R \approx 0.1$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

um nó pode adquirir. Utilizando a Equação 5.3 podemos escrever P_k^d como

$$P_k^d = \sum_{c=T}^{T-1+k} \sum_{y=c-T+1}^{y_{\max}} \frac{1}{T} P_k^y. \quad (5.7)$$

Observamos que P_k^d envolve apenas cargas no intervalo $[T, T-1+k]$. A equação pode ser interpretada da seguinte forma. Existe uma série de possibilidades para que um nó possua potencial $c = T$ no instante t . Caso o nó estivesse com potencial $c = 0$ em $t-1$, ele deve necessariamente adquirir um potencial T dos seus vizinhos no instante t . Caso o nó estivesse com potencial $c = 1$ em $t-1$ ele deve adquirir um potencial $T-1$, e assim por diante. O mesmo ocorre para outras possíveis cargas $\{T+1, T+2, \dots\}$ que o nó pode apresentar no instante t . Mas o potencial que um nó pode adquirir está limitado pelo grau do mesmo, e portanto não existem nós com potencial igual ou maior que $T+k$. Pelo mesmo motivo, nós com carga igual a, por exemplo, $c = 0$ em $t-1$ não podem apresentar potencial T no instante t caso seu grau seja menor do que T . Esses casos especiais requerem um certo cuidado ao escrevermos a expressão para P_k^d . No somatório da Equação 5.6, a menor carga a ser considerada é $c = T$. Portanto, para nós possuindo $k \leq T$, temos que $y_{\max} = \min(c, k) = k$ e P_k^d pode ser escrita como

$$P_{k \leq T}^d = \sum_{c=T}^{T-1+k} \sum_{y=c-T+1}^k \frac{1}{T} P_k^y. \quad (5.8)$$

Para nós possuindo $k > T$, precisamos considerar que $y_{\max} = c$ quando $c < k$ e $y_{\max} = k$ quando $c \geq k$. Com isso, a probabilidade de disparo para nós com grau $k > T$ pode ser escrita como

$$P_{k>T}^d = \sum_{c=T}^{k-1} \left(\sum_{y=c-T+1}^c \frac{1}{T} P_k^y \right) + \sum_{c=k}^{T-1+k} \sum_{y=c-T+1}^k \frac{1}{T} P_k^y. \quad (5.9)$$

O primeiro termo à direita da equação está relacionado com as cargas no intervalo $[T, k-1]$, enquanto que o segundo termo se relaciona com as cargas no intervalo $[k, T-1+k]$.

Note que podemos reescrever a Equação 5.9 como

$$\begin{aligned} P_{k>T}^d &= \sum_{c=T}^{k-1} \left(\sum_{y=c-T+1}^k \frac{1}{T} P_k^y - \sum_{y=c+1}^k \frac{1}{T} P_k^y \right) + \sum_{c=k}^{T-1+k} \sum_{y=c-T+1}^k \frac{1}{T} P_k^y \\ &= \sum_{c=T}^{T-1+k} \sum_{y=c-T+1}^k \frac{1}{T} P_k^y - \sum_{c=T}^{k-1} \sum_{y=c+1}^k \frac{1}{T} P_k^y. \end{aligned} \quad (5.10)$$

Com isso, a expressão completa para a probabilidade de disparos de nós de grau k é dada pelas Equações 5.8 e 5.10

$$P_k^d = \begin{cases} \sum_{c=T}^{T-1+k} \sum_{y=c-T+1}^k \frac{1}{T} P_k^y & \text{se } k \leq T \\ \sum_{c=T}^{T-1+k} \sum_{y=c-T+1}^k \frac{1}{T} P_k^y - \sum_{c=T}^{k-1} \sum_{y=c+1}^k \frac{1}{T} P_k^y & \text{se } k > T. \end{cases} \quad (5.11)$$

As equações diferem apenas pelo termo $\sum_{c=T}^{k-1} \sum_{y=c+1}^k \frac{1}{T} P_k^y$, presente para o caso $k > T$. Note que nesse termo temos sempre que $y > T$, e portanto, segundo a Equação 5.2, os valores de P_k^y tendem a ser pequenos. Para verificarmos esse fato calculamos numericamente a razão entre o primeiro e segundo termos da Equação 5.11 no caso $k > T$, dado por

$$F_k^d = \frac{\sum_{c=T}^{k-1} \sum_{y=c+1}^k \frac{1}{T} P_k^y}{\sum_{c=T}^{T-1+k} \sum_{y=c-T+1}^k \frac{1}{T} P_k^y}. \quad (5.12)$$

O resultado pode ser visto nas Figuras 40(a) e (b) ao considerarmos, respectivamente, $R = 0.1$ e $R = 0.3$. Em ambos os casos, apresentamos os valores de F_k^d calculados para diferentes k e T . As linhas azuis indicam fronteiras de valores específicos de F_k^d , de forma a provermos uma referência visual do comportamento da superfície obtida. Vemos que mesmo no caso $R = 0.3$, que corresponde a quase um terço da rede disparando a todo instante, os valores de F_k^d tendem a ser pequenos. Por outro lado, redes possuindo nós de grau muito alto, como no caso de redes com distribuição de grau em lei de potência, devem apresentar valores significativos de F_k^d . Isso ocorre porque tais nós possuem alta capacidade de adquirir cargas em curtos períodos de tempo.

Figura 40 – Verificação da magnitude do termo negativo presente na Equação 5.11. Calculamos numericamente os valores de F_k^d , definido na Equação 5.12, para diferentes valores de grau e limiar. Para cada gráfico, a ativação da rede foi mantida em (a) $R=0.1$ e (b) $R=0.3$. Notamos que a região cinza não possui valores calculados, pois F_k^d é definido apenas para $k > T$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

A região da distribuição de grau associada a altos valores de grau é usualmente chamada de *cauda* da distribuição.(94) Muitas redes reais cuja distribuição de grau é associada a leis de potência possuem na verdade comportamentos particulares na região da cauda da distribuição. É comum se observar tais redes possuindo distribuições com caudas que decaem exponencialmente com o grau.(172,173) Existem também redes que possuem um *cutoff* nos valores de grau (172–174), em tais casos há uma probabilidade significativa de se observar nós com grau imediatamente inferior a um certo valor k_0 , enquanto que o número de nós com grau acima de k_0 é quase zero. Para tais redes, F_k^d deve possuir valores insignificantes no regime $R < 0.1$, mesmo que a topologia da rede não seja descrita pelo modelo ER.

Se considerarmos $F_k^d \rightarrow 0$, podemos reescrever a Equação 5.11 como

$$P_k^d \approx \sum_{c=T}^{T-1+k} \sum_{y=c-T+1}^k \frac{1}{T} P_k^y. \quad (5.13)$$

Expandindo o primeiro somatório da Equação 5.13 e rearranjando os termos, temos que

$$\begin{aligned}
P_k^d &\approx \frac{1}{T} \left[\sum_{y=1}^k P_k^y + \sum_{y=2}^k P_k^y + \cdots + \sum_{y=k}^k P_k^y \right] \\
&= \frac{1}{T} [P_k^1 + 2P_k^2 + \cdots + kP_k^k] \\
&= \sum_{y=1}^k \frac{y}{T} P_k^y \\
&= \frac{\langle Y \rangle}{T}.
\end{aligned} \tag{5.14}$$

Lembrando que para simplificarmos a notação representamos Y_k por Y , e utilizando a Equação 5.2, temos que $\langle Y_k \rangle = kR$, e portanto

$$P_k^d \approx \frac{Rk}{T}. \tag{5.15}$$

Com isso, temos que para a dinâmica integra-e-dispara considerada neste trabalho, a taxa de disparo para nós de grau k , P_k^d , é uma função linear do grau do nó, com coeficiente angular dado pela razão entre o patamar de ativação da rede e o potencial limiar de disparo.

Outra importante propriedade que podemos calcular sobre a dinâmica, e que será utilizada adiante, é o potencial típico dos nós disparando na rede, C_k . Para nós de grau k temos que

$$C_k = \sum_{c=T}^{T-1+k} c P_k^c (C = c | C \geq T). \tag{5.16}$$

Essa equação representa a média de cargas para nós que disparam na rede, sendo que cada nó disparando possui probabilidade $P_k^c (C = c | C \geq T)$ de possuir carga c . Como $P_k^c (C = c | C \geq T) = P_k^c / P_k^d$, temos que

$$\begin{aligned}
C_k &= \sum_{c=T}^{T-1+k} c \sum_{y=c-T+1}^k \frac{1}{T} \frac{P_k^y}{P_k^d} \\
&\approx \frac{1}{kR} \sum_{c=T}^{T-1+k} c \sum_{y=c-T+1}^k P_k^y,
\end{aligned} \tag{5.17}$$

onde utilizamos novamente a aproximação discutida na dedução da Equação 5.13. Expandindo ambos somatórios e rearranjando os termos

$$\begin{aligned}
C_k &\approx \frac{1}{kR} \left\{ T \left[P_k^1 + \dots + P_k^k \right] + (T+1) \left[P_k^2 + \dots + P_k^k \right] + \dots + (T+k-1) \left[P_k^k \right] \right\} \\
&= \frac{1}{kR} \left\{ P_k^k [(T) + (T+1) + \dots + (T+k-1)] + P_k^{k-1} [(T) + (T+1) + \dots + (T+k-2)] + \dots + P_k^1 [(T)] \right\} \\
&= \frac{1}{kR} \left\{ P_k^k \left[Tk + \sum_{i=0}^{k-1} i \right] + P_k^{k-1} \left[T(k-1) + \sum_{i=0}^{k-2} i \right] + \dots + P_k^1 [T] \right\}, \tag{5.18}
\end{aligned}$$

podemos escrever C_k como

$$\begin{aligned}
C_k &\approx \frac{1}{kR} \sum_{y=1}^k P_k^y \left(yT + \sum_{i=0}^{y-1} i \right) \\
&= \frac{1}{kR} \sum_{y=1}^k P_k^y \left(yT + \frac{y^2}{2} - \frac{y}{2} \right) \\
&= \frac{1}{kR} \left[\left(T - \frac{1}{2} \right) \langle Y \rangle + \frac{1}{2} \langle Y^2 \rangle \right]. \tag{5.19}
\end{aligned}$$

Pelo fato da variável Y ser descrita por uma distribuição binomial, seu segundo momento é dado por

$$\begin{aligned}
\langle Y^2 \rangle &= \langle Y \rangle^2 + (1-R) \langle Y \rangle \\
&= (kR)^2 + kR - kR^2. \tag{5.20}
\end{aligned}$$

Substituindo esses valores na expressão para C_k , temos que

$$C_k \approx T + \frac{R(k-1)}{2}. \tag{5.21}$$

Na Figura 41 apresentamos uma comparação entre os valores de P_k^d e C_k calculados experimentalmente e analiticamente. As curvas experimentais representam a média e desvio padrão obtidos ao realizarmos a dinâmica em 50 diferentes redes geradas pelo modelo ER. As redes possuem $N = 10000$ e $\langle k \rangle = 40$, e o limiar de disparo utilizado foi $T = 40$. Notamos que, por enquanto, o valor de R , que é necessário para calcularmos P_k^d e C_k , foi medido experimentalmente. Vemos na Figura 41(a) que as taxas são bem representadas pela expressão analítica. Para nós de alto grau, e portanto altas taxas de disparo, há uma maior variância nos valores observados. Esse efeito ocorre pelos mesmos motivos apresentados ao discutirmos a Equação 5.11, já que nós de alto grau tendem a adquirir muito potencial em curtos intervalos de tempo. A expressão analítica para a carga típica de nós disparando, mostrada na Figura 41(b), também possui boa concordância com os valores experimentais. O desvio padrão observado para nós de baixo grau ocorre devido ao reduzido número de nós possuindo tais valores de grau.

Figura 41 – Comparação entre os valores experimentais e analíticos calculados para (a) P_k^d e (b) C_k . As redes possuem $N = 10000$ e $\langle k \rangle = 40$, e o limiar de disparos foi fixado em $T = 40$. Cada ponto representa 50 realizações experimentais. As barras de erro indicam o desvio padrão calculado ao longo das realizações.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Apesar de termos encontrado o comportamento típico de P_k^d e C_k através das Equações 5.15 e 5.21, ambas expressões dependem do patamar de ativação da rede R . Como dito anteriormente, encontrar uma expressão para R é o nosso principal objetivo nesta seção. Para tanto, precisamos definir uma propriedade adicional sobre a dinâmica no estado assíncrono. Tal propriedade pode ser encontrada se analisarmos a troca de energia do sistema e definirmos uma lei de conservação de energia. Chamaremos de $E_T(t)$ a energia total do sistema, dada pela soma das cargas (potencial) dos nós a cada instante de tempo. Quando um dado nó i de grau k_i atinge o limiar T e dispara sinais unitários para cada vizinho, sua carga atual c_i é convertida em uma carga k_i , que é então enviada para os vizinhos do nó. Se o grau do nó for maior do que a carga c_i , dizemos que o nó promoveu uma *geração* de carga. Caso o grau seja menor que c_i , dizemos que houve *perda* de carga. Esse conceito de geração e perda de cargas surge devido ao fato de não considerarmos o meio no qual a rede está inserida. Uma geração de carga promovida pelo nó na verdade se traduz para o uso dos recursos do ambiente de forma a enviar um potencial de ação que atinja todos os nós conectados ao nó em questão. Dessa forma, há constantemente uma troca de energia entre os elementos da rede e o ambiente na qual a rede está inserida. Como nossa análise envolve apenas o estudo da rede, utilizaremos o conceito de geração e perda de cargas para modelar a variação de energia observada.

Intuitivamente, sabemos que se a energia total da rede diminuir com o tempo, necessariamente teremos menos nós disparando, pois as cargas dos mesmos, em média, possuem menor valor. O mesmo ocorria se houvesse um aumento de energia do sistema. Portanto, para que a dinâmica atinja o estado assíncrono auto-sustentado, precisamos ter

que a variação de energia total na rede seja aproximadamente nula.

A energia total no instante t pode ser escrita como

$$E_T(t) = E_T(t-1) + N \sum_k P_k P_k^d(t-1)k - N \sum_k P_k P_k^d(t-1)C_k(t-1), \quad (5.22)$$

onde P_k é a distribuição de grau da rede. O segundo termo à direita da Equação 5.22 representa o ganho de cargas típico da rede causado por nós de grau k que disparam com probabilidade P_k^d . O terceiro termo representa a perda de cargas causada pelo disparo dos mesmos nós. Após um tempo suficientemente longo, a variação de energia total passa a ser nula. Dessa forma, temos que

$$\sum_k P_k P_k^d(k - C_k) = 0. \quad (5.23)$$

Utilizando as expressões encontradas para P_k^d e C_k , podemos escrever a Equação 5.23 como

$$\begin{aligned} \frac{R}{T} \sum_k P_k k \left(k - T - \frac{Rk}{2} + \frac{R}{2} \right) &= \\ \frac{R}{T} \sum_k P_k \left[\left(1 - \frac{R}{2} \right) k^2 + \left(\frac{R}{2} - T \right) k \right] &= \\ \frac{R}{T} \left[\left(1 - \frac{R}{2} \right) \langle k^2 \rangle + \left(\frac{R}{2} - T \right) \langle k \rangle \right] &\approx 0. \end{aligned} \quad (5.24)$$

Portanto, temos que

$$R \approx 2 \frac{\langle k^2 \rangle - T \langle k \rangle}{\langle k^2 \rangle - \langle k \rangle}. \quad (5.25)$$

Para redes seguindo o modelo ER, podemos simplificar ainda mais a Equação 5.25 se considerarmos que

$$\begin{aligned} \langle k^2 \rangle &= \langle k \rangle^2 + \left(1 - \frac{\langle k \rangle}{N} \right) \langle k \rangle \\ &\approx \langle k \rangle^2 + \langle k \rangle, \end{aligned} \quad (5.26)$$

de forma a obtermos

$$R \approx 2 \frac{\langle k \rangle + 1 - T}{\langle k \rangle}. \quad (5.27)$$

Figura 42 – Comparação entre os valores experimentais e analíticos obtidos para a ativação da dinâmica integra-e-dispara em redes ER. Cada ponto representa 50 realizações do modelo e da dinâmica. As redes possuem $N = 10000$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

De forma a testarmos a validade da Equação 5.27, na Figura 42 plotamos o patamar de ativação de redes ER em função do grau médio das mesmas. As redes utilizadas possuem $N = 10000$, e consideramos 50 realizações do modelo ER para cada grau médio. Como discutido anteriormente, estamos interessados em estudar a dinâmica no regime $T \approx \langle k \rangle$, pois, como indicado na Figura 39, nesse caso temos que $0 < R \ll 1$. Portanto, para cada grau médio fixamos o limiar da dinâmica em $T = \langle k \rangle$. Nessa condição, a ativação da rede é dada por $R \approx \frac{2}{\langle k \rangle}$. Na Figura 42 comparamos os valores experimentais com o comportamento esperado analiticamente. Vemos que há uma boa concordância entre os valores experimentais e analíticos.

O resultado encontrado indica um comportamento interessante para a dinâmica integra-e-dispara em redes ER. Para uma rede com um dado grau médio, vimos que se o limiar de ativação dos nós for maior que o grau médio teremos que $R = 0$, e portanto nenhum nó dispara na rede. Se o limiar for um pouco menor do que o grau médio, teremos $R \approx 1$, o que indica que a maioria dos nós da rede disparam a todo momento. Já se o limiar de disparo for aproximadamente igual ao grau médio da rede, o patamar de ativação passa a ser inversamente proporcional ao grau médio. Em outras palavras, nessa condição, quanto maior o grau médio da rede, menor será a taxa de disparos necessária para manter a rede ativada na ausência de estímulos externos.

Vemos que a expressão analítica não representa bem o patamar de ativação para $\langle k \rangle$ pequeno. Isso ocorre pois, como mostrado na Figura 40, para pequenos valores de

Figura 43 – Comparação entre os valores experimentais e analíticos calculados para (a) P_k^d e (b) C_k . As redes possuem $N = 10000$ e $\langle k \rangle = 5$. O limiar de disparos foi fixado em $T = 5$. Cada ponto representa 50 realizações experimentais.

Fonte: Elaborada pelo autor.

$\langle k \rangle$ e T o termo que consideramos nulo para definir a Equação 5.13 se torna relevante para nós de alto grau. Na Figura 43 mostramos os valores de P_k^d e C_k calculados para o caso $\langle k \rangle = T = 5$, onde vemos que há de fato um grande desvio dos valores esperados analiticamente.

Uma forma de analisarmos o motivo do desvio para $\langle k \rangle$ pequeno é através da energia do sistema. A energia total $E_T(t)$ do sistema no instante t pode ser dividida em três tipos de energia. O primeiro tipo é o potencial total dos nós que não dispararam no instante t , $E_N(t)$. O segundo tipo é o potencial gerado pelos nós que dispararam, $E_G(t)$, dado pelo segundo termo da Equação 5.22. O terceiro tipo é o potencial perdido pelos mesmos nós que dispararam em t , $E_P(t)$, dado pelo terceiro termo da Equação 5.22. Na Figura 44 plotamos a evolução desses três tipos de energia ao longo do tempo, juntamente com a energia total do sistema. A rede ER utilizada possui $N = 10000$ e $\langle k \rangle = 40$ no caso da Figura 44(a) e $\langle k \rangle = 5$ no caso da Figura 44(b). Em ambos os casos utilizamos $T = \langle k \rangle$. No caso $\langle k \rangle = 40$, a energia total do sistema é formada principalmente por nós que não disparam. Essa energia define um reservatório de cargas a ser utilizado pelos nós disparando a cada instante. No caso $\langle k \rangle = 5$, esse reservatório não existe mais, pois a maior parte da energia do sistema está sendo constantemente trocada entre os nós. Com a ausência de tal reservatório de cargas, a dinâmica pode se manter ativa somente se os nós estiverem constantemente disparando, o que leva a um alto valor de R e o consequente desvio de comportamento observado na Figura 42.

Com a finalidade de indicarmos os limites de validade da Equação 5.25, na Figura 45 plotamos os valores de R observados ao considerarmos $T < \langle k \rangle$. As redes pos-

Figura 44 – Energia em função do tempo para a dinâmica integra-e-dispara aplicada em redes ER com $N = 10000$. O tipo de energia que cada curva representa está descrito no texto. As redes utilizadas possuem (a) $\langle k \rangle = 40$ e (b) $\langle k \rangle = 5$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

suem novamente $N = 10000$ e foram geradas pelo modelo ER. O eixo x do gráfico indica a diferença considerada entre T e $\langle k \rangle$. Por exemplo, os símbolos azuis representam redes geradas com $\langle k \rangle = 40$, e essas redes foram submetidas à dinâmica integra-e-dispara com limiares no intervalo $[33, 40]$. As linhas vermelhas indicam os valores esperados pela Equação 5.25. Vemos que para $\langle k \rangle = 40$, a expressão analítica descreve corretamente a ativação da rede apenas no regime $\langle k \rangle \approx T$. Para graus médios muito altos, há uma excelente concordância do modelo analítico para diferentes valores de limiares. É interessante mencionarmos que redes neuronais tendem a possuir valores de grau médio ainda maiores do que os considerados na análise.(175,176)

5.3 Integra-e-dispara em redes direcionadas com comunidades

5.3.1 Integra-e-dispara em comunidades Erdős-Rényi

No Capítulo 3 apresentamos e estudamos a relação entre a atividade do passeio aleatório e o grau dos nós em redes direcionadas. Analisamos como a conectividade das comunidades dá origem ao que chamamos de comportamento específico das mesmas. Esse mesmo fenômeno estudado para o passeio aleatório ocorre na dinâmica integra-e-dispara. A diferença é que ao invés de considerarmos a probabilidade estacionária do passeio aleatório, consideramos a taxa de disparo dos nós. Na Figura 46 mostramos um exemplo de execução da dinâmica integra-e-dispara em uma rede direcionada formada por comunidades ER, onde cada comunidade possui 750 nós. A conectividade entre as comunidade é

Figura 45 – Comparação entre valores experimentais e analíticos obtidos para o patamar de ativação da dinâmica integra-e-dispara em redes ER. Os pontos estão coloridos de acordo com o grau médio da respectiva rede utilizada. A abscissa do gráfico indica a diferença entre o limiar de disparos utilizado na dinâmica e o grau médio da rede.

Fonte: Elaborada pelo autor.

dada pela matriz

$$\kappa = \begin{bmatrix} 15 & 5 \\ 1 & 15 \end{bmatrix}, \quad (5.28)$$

e o limiar de disparos foi fixado em $T = 17$. A relação entre taxa de disparos f e o grau de entrada dos nós possui um claro paralelo com o comportamento observado para o passeio aleatório. O balanço de conexões entre as comunidades novamente influencia na eficiência das mesmas, fazendo com que certos nós possuam maior taxa de disparos em relação ao esperado para o grau de entrada que o nó possui. Com isso, vemos que a dinâmica integra-e-dispara também apresenta uma relação na forma

$$f_{i|m} = \xi_m k_i^{\text{in}}. \quad (5.29)$$

Devido ao imediato paralelo com a dinâmica de passeio aleatório, realizamos o mesmo experimento apresentado na Seção 3.1, no qual definimos redes possuindo três comunidades e variamos o número de conexões entre duas dessas comunidades. Cada comunidade possui 500 nós e foi gerada segundo o modelo ER. A matriz de conectividade

Figura 46 – Relação entre taxa de disparo e grau de entrada para nós de duas comunidades direcionadas com desbalanço de conexões. A linha preta representa a função $f_{i|m} = \xi_m k_i^{\text{in}}$, onde ξ_m foi calculado através de regressão linear dos pontos.

Fonte: Elaborada pelo autor.

das comunidades é dada por

$$\kappa = \begin{bmatrix} 15 & \bar{x}_{12} & 1 \\ 4 & 15 & 1 \\ 4 & 2 & 15 \end{bmatrix}. \quad (5.30)$$

Variamos novamente o parâmetro $\bar{x}_{12}$, que indica o número médio de conexões que nós pertencentes à comunidade 1 realizam com nós da comunidade 2. Utilizamos também um potencial limiar de disparo de $T = 20$. Na Figura 47(a) mostramos a eficiência de cada comunidade, calculada através de regressão linear, ao utilizarmos os parâmetros mencionados. Vemos que a variação de eficiência entre as comunidades não possui um padrão muito claro, isso ocorre porque a taxa de disparos global da rede, R , varia com $\bar{x}_{12}$. De forma a eliminarmos a influência da variação de R , podemos trabalhar com a taxa de disparos *relativa* dos nós, definida por

$$f'_{i|m} = \frac{f_{i|m}}{R}. \quad (5.31)$$

Essa taxa representa a atividade do nó i em relação à atividade global da rede. Com essa definição, temos que

$$f'_{i|m} = \frac{\xi_m}{R} k_i^{\text{in}}. \quad (5.32)$$

Portanto, ξ_m/R representa a eficiência relativa das comunidades em relação à taxa global da rede.

Figura 47 – Eficiência de três comunidades de acordo com a conectividade entre as comunidades 1 e 2, para a dinâmica integra-e-dispara. (a) Valores calculados através da regressão linear da relação entre taxa de disparo e grau dos nós. (b) Mesmos valores mostrados em (a), mas normalizados pela taxa global de disparos da rede, R .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Na Figura 47(b) plotamos ξ_m/R para os mesmos parâmetros utilizados na Figura 47(a). Vemos que o comportamento obtido é muito similar ao observado para o passeio aleatório em redes direcionadas. Isso ocorre porque numa escala global, dinâmicas neuronais tendem a apresentar comportamentos similares à difusão. (143, 144, 177–179) Dessa forma, muitas das propriedades discutidas na Seção 3.1 também são válidas para a dinâmica integra-e-dispara. Por outro lado, devido especialmente à descontinuidade presente na dinâmica, as expressões analíticas encontradas para o passeio aleatório não descrevem corretamente os valores observados para a dinâmica integra-e-dispara. Esse fato pode ser visto na Figura 48, onde plotamos os valores experimentais obtidos para a dinâmica integra-e-dispara juntamente com os valores analíticos calculados através da Equação 3.5, que foi derivada considerando a dinâmica de passeio aleatório. O resultado mostra que há uma diferença significativa entre os valores experimentais e a previsão fornecida pela equação. Contudo, apesar de não haver uma concordância exata entre as duas dinâmicas, vemos na figura que o comportamento qualitativo das eficiências é bem descrito pela equação. Dessa forma, a Equação 3.5 pode ser utilizada para se obter uma estimativa das variações de eficiência na dinâmica integra-e-dispara.

Houve uma tentativa de derivarmos uma expressão analítica que melhor explicasse a ativação das comunidades na dinâmica integra-e-dispara. A ideia fundamental da derivação é que ao invés de separarmos os nós de acordo com o grau, agrupamos eles de

Figura 48 – Eficiência de três comunidades de acordo com a conectividade entre as comunidades 1 e 2, para a dinâmica integra-e-dispara. A linha tracejada indica os valores esperados para a atividade do passeio aleatório, dada pela Equação 3.5.

Fonte: Elaborada pelo autor.

acordo com a classe de equivalência $\mathbf{X}_m$, que foi apresentada e utilizada durante as derivações da Seção 3.1. Dessa forma, a carga típica de um nó da comunidade m dependerá da classe de equivalência na qual ele se encontra. Utilizando as mesmas considerações feitas na Seção 5.2, podemos supor que a carga $C_{\mathbf{X}_m}$ de um nó da classe $\mathbf{X}_m$ é igual à soma de uma variável Θ , seguindo a distribuição da Equação 5.1, com uma variável $Y_{\mathbf{X}_m}$ dada por

$$Y_{\mathbf{X}_m} = \sum_{h=1}^n Y_{mh}. \quad (5.33)$$

O termo Y_{mh} representa uma variável aleatória definida pela distribuição

$$P_{x_{mh}}^{y_{mh}} = \begin{cases} \binom{x_{mh}}{y_{mh}} R_h^{y_{mh}} (1 - R_h)^{x_{mh} - y_{mh}} & \text{se } 0 \leq y_{mh} \leq x_{mh} \\ 0 & \text{se } y_{mh} < 0 \text{ ou } y_{mh} > x_{mh}, \end{cases} \quad (5.34)$$

onde R_h representa o patamar de ativação da comunidade h .

Apesar da Equação 5.34 parecer complicada, ela possui uma interpretação simples. A cada instante de tempo, nós da comunidade m adquirem cargas de seus vizinhos. A quantidade de carga adquirida de cada vizinho depende da comunidade na qual o vizinho se encontra. Por exemplo, se o vizinho estiver em uma comunidade h com uma alta taxa de disparos média R_h , então o nó receberá muita carga desse vizinho. Para um nó da classe $\mathbf{X}_m$, sabemos que ele recebe x_{mh} conexões de nós da comunidade h . Portanto, estamos supondo que tal nó irá adquirir y_{mh} cargas dentre essas x_{mh} conexões, e que y_{mh} segue uma distribuição binomial.

Tendo definido as variáveis Θ e $Y_{\mathbf{x}_m}$, podemos repetir os passos da derivação feita na Seção 5.2. Infelizmente, verificamos que a obtenção de uma expressão fechada para o patamar de ativação de cada comunidade necessita de aproximações adicionais sobre a topologia da rede. Tais aproximações causam uma restrição muito grande no tipo de topologia que a expressão pode ser aplicada e, portanto, a análise analítica acaba por não fornecer um melhor entendimento do efeito de comunidades na dinâmica integra-e-dispara. Dessa forma, não iremos nos estender sobre o estudo analítico dessa dinâmica em redes com comunidades.

5.3.2 Integra-e-dispara na rede *Caenorhabditis elegans*

Uma análise interessante da dinâmica integra-e-dispara que podemos realizar é verificar o efeito da direcionalidade das arestas em redes reais. Para tanto, utilizaremos a rede neuronal do nematoide *Caenorhabditis elegans*, apresentada na Seção 2.4. É importante notar que consideramos tanto as sinapses químicas quanto as elétricas na mesma rede, ambas com as mesmas propriedades dinâmicas. Isso porque estamos interessados apenas na topologia de comunicação dos neurônios. Claramente, um estudo mais aprofundado sobre a dinâmica necessitaria de parâmetros distintos para os dois tipos de sinapses. No nosso caso, a única diferença que consideramos é que sinapses químicas possuem direção. Com a finalidade de encontrarmos comunidades nessa rede, aplicamos o algoritmo *Walktrap* (89), utilizando 5 passos para o passeio aleatório definido no algoritmo. O resultado fornecido pelo algoritmo é uma estrutura multiescala de possíveis comunidades na rede. Inicialmente, consideraremos a divisão da rede em duas comunidades, o que resulta em uma modularidade de $Q = 0.331$. A matriz de conectividade entre as comunidades é dada por

$$\kappa = \begin{bmatrix} 9.2 & 1.9 \\ 1.4 & 8.8 \end{bmatrix}. \quad (5.35)$$

Aplicamos a dinâmica integra-e-dispara nessa rede, utilizando um limiar $T = 12$. O resultado pode ser visto na Figura 49(a), onde mostramos a taxa de disparo dos nós em função do grau de entrada dos mesmos. Os pontos estão coloridos de acordo com a comunidade à qual o respectivo nó pertence. Nas Figuras 49(b) e (c) apresentamos o mesmo resultado da Figura 49(a), mas enaltecendo os nós de uma das comunidades de forma a propiciar uma melhor visualização do resultado. As linhas vermelhas representam um ajuste linear realizado sobre os valores de cada comunidade. O resultado indica a presença de dois comportamentos distintos na rede, relacionados com as duas comunidades encontradas. Os nós da comunidade 2 tendem a possuir maior taxa de disparo do que nós de grau similar presentes na comunidade 1. Portanto, vemos que as comunidades possuem

Figura 49 – (a) Taxa de disparo em relação ao grau dos nós na rede *C. elegans*. O mesmo resultado de (a) é mostrado nos gráficos (b) e (c), mas em cada gráfico destacamos uma das comunidades para fins de melhor visualização. As linhas vermelhas indicam o ajuste linear feito para os valores obtidos em cada comunidade.

Fonte: Elaborada pelo autor.

comportamentos específicos distintos, causados por diferenças topológicas existentes entre elas.

De forma a melhor compreendermos a diferença entre as duas comunidades, realizamos reconexões aleatórias das arestas da rede *C. elegans*, utilizando diferentes restrições nas propriedades topológicas a serem mantidas. Esse procedimento foi realizado para três diferentes níveis de restrições. No primeiro caso, realizamos a reconexão aleatória das arestas da rede, mas mantivemos os graus de entrada e saída dos nós. Esse processo é conhecido como modelo de configuração.⁽¹⁾ Chamaremos o procedimento de modelo CM. Na Figura 50(a) apresentamos a taxa de disparos dos nós em função do grau dos mesmos em uma execução típica da dinâmica em uma rede gerada pelo modelo CM. Vemos que nesse caso há uma forte correlação entre o grau dos nós e a taxa de disparos, e ambas propriedades possuem uma relação similar nas duas comunidades. Dessa forma, vemos que apenas o grau não é capaz de diferenciar o comportamento dos nós.

Nosso próximo experimento foi realizar a reconexão aleatória das arestas da rede *C. elegans* mantendo o grau de entrada e saída interno e externo dos nós. Em outras palavras, mantivemos o número de conexões que cada nó faz tanto com a comunidade 1 quanto com a comunidade 2, ao mesmo tempo que fixamos o número de conexões de entrada e saída do nó. Esse processo representa fixarmos quatro parâmetros para cada nó, e está relacionado com o chamado *degree corrected blockmodel*.⁽¹⁸⁰⁾ A ideia do procedimento é criar redes nas quais os nós de cada comunidade possuem os mesmos valores de grau observados na rede original, e a rede criada também possui a mesma modularidade da rede original. Chamaremos esse procedimento de modelo CMC. Após a rede ser criada, simetrizamos as arestas entre as comunidades, de forma a não haver desbalanço de conexões entre as

Figura 50 – Taxa de disparos em relação ao grau de entrada dos nós para diferentes tipos de reconexões aleatórias aplicadas na rede *C. elegans*. As reconexões foram realizadas segundo o procedimento (a) CM, (b) CMCS e (c) CMC.

Fonte: Elaborada pelo autor.

mesmas. Chamaremos essa combinação entre o procedimento CMC e a simetrização de arestas de modelo CMCS. Aplicando a dinâmica integra-e-dispara em uma rede gerada pelo modelo CMCS temos o resultado mostrado na Figura 50(b). Vemos que ao mantermos a distribuição de grau juntamente com a modularidade da rede, as duas comunidades já apresentam uma pequena separação na relação entre taxa e grau de entrada.

Finalmente, aplicamos a dinâmica integra-e-dispara em uma rede gerada pelo modelo CMC. O resultado pode ser visto na Figura 50(c). Vemos que, se além de fixarmos a distribuição de grau e a modularidade, fixarmos também o balanço de conexões entre as comunidades, temos uma separação de comportamentos ainda maior entre as comunidades.

Na Tabela 2 apresentamos a razão entre os valores de eficiência das comunidades, calculados em todas as situações apresentadas. A eficiência de cada caso foi calculada através da fórmula $\xi_m = R_m / \bar{x}_m^{\text{in}}$, onde R_m e $\bar{x}_m^{\text{in}}$ são, respectivamente, o patamar de ativação e o grau médio de entrada da comunidade m . Foram geradas 50 redes para cada caso, e os valores apresentados na tabela representam a média aplicada sobre as 50 redes geradas. O resultado confirma que tanto a modularidade quanto a direção das arestas entre as comunidades atuam na alteração do relacionamento entre taxa de disparo e grau.

Com a finalidade de verificarmos quem são os neurônios presentes em cada comunidade da rede *C. elegans*, na Figura 51 apresentamos novamente a relação entre taxa de disparo e grau de entrada entre os nós, mas agora indicando a posição de cada neurônio no corpo do animal. As três classes de posicionamento são definidas pela própria base onde obtivemos os dados. Vemos que a comunidade 2 é particularmente composta por neurônios presentes na região central do corpo do animal. Portanto, nós localizados espacialmente no centro da rede, em geral, apresentam maior eficiência topológica. Esse resultado possui

Tabela 2 – Razão entre eficiências das duas comunidades da rede *C. elegans* em diferentes situações experimentais, e também no caso da rede real.

Caso	ξ_2/ξ_1
CM	0.977
CMCS	1.240
CMC	1.731
Real	1.935

Fonte: Elaborada pelo autor

Figura 51 – Relação entre taxa de disparos e grau dos nós da rede *C. elegans*, onde colorimos os pontos de acordo com a posição do respectivo neurônio no corpo do animal.

Fonte: Elaborada pelo autor.

uma intuição clara. Devido às restrições de custo na conectividade de longo alcance entre os nós, a atividade de nós posicionados na região central da rede tende a ser maior do que no caso de nós localizados em regiões periféricas. Dessa forma, um nó central de baixo grau consegue produzir maior taxa de disparos do que nós periféricos de maior grau.

Apesar de termos particionado a rede *C. elegans* em duas comunidades, essa configuração não proporciona a maior modularidade que podemos obter para essa rede. Com a finalidade de encontrarmos um particionamento de maior modularidade, aplicamos uma série de métodos de otimização de modularidade descritos na literatura, utilizando variados parâmetros para cada método. A melhor divisão encontrada foi fornecida pelo método descrito em (181), ao fixarmos o parâmetro de escala do método em $\gamma = 1.1$. A matriz de

conectividade das comunidades encontradas é dada por

$$\kappa = \begin{bmatrix} 5.0 & 1.5 & 1.0 & 2.3 & 2.9 \\ 0.9 & 6.7 & 0.7 & 1.9 & 1.4 \\ 0.5 & 0.3 & 6.0 & 1.8 & 0.2 \\ 0.5 & 0.6 & 2.1 & 7.6 & 0.5 \\ 0.7 & 0.6 & 0.5 & 0.6 & 7.5 \end{bmatrix}. \quad (5.36)$$

Essa divisão possui modularidade $Q = 0.423$. Um número semelhante de comunidades nessa rede foi encontrado e estudado em (74,182–184)

Na Figura 52 apresentamos novamente o gráfico da taxa de disparos em função do grau de entrada dos nós para a rede *C. elegans*, mas agora colorindo os nós de acordo com as 5 comunidades encontradas. O gráfico superior esquerdo mostra o comportamento conjunto de todas as comunidades. As linhas do gráfico indicam a relação $f = (R_m/\bar{x}_m^{\text{in}})k^{\text{in}}$, obtida experimentalmente para cada comunidade. Os demais gráficos são reproduções do primeiro, mas possuem apenas uma das comunidades destacada. Observamos um comportamento muito interessante para essas 5 comunidades. Cada uma delas possui um diferente valor de eficiência, isto é, diferentes relacionamentos entre taxa e grau de entrada. Com isso, os nós pertencentes a essas comunidades estão localizados em diferentes regiões do espaço $k^{\text{in}} \times f$.

Através dos dados disponíveis no repositório WormAtlas¹, e das análises realizadas em (182–184), identificamos as principais funções associadas à cada comunidade encontrada. Para tanto, utilizamos as informações sobre funções conhecidas de muitos dos neurônios do *C. elegans*, e relacionamos as funções mais frequentes aparecendo em cada comunidade com o papel exercido pela comunidade na rede. Na Tabela 3 apresentamos as principais funções identificadas. A última coluna da tabela indica a porcentagem de neurônios em cada comunidade possuindo a função indicada. Os demais neurônios possuem funções diferenciadas ou desconhecidas.

Utilizando o algoritmo Kamada-Kawai (166), definimos posições apropriadas para os nós da rede *C. elegans*. O resultado pode ser visto na Figura 53(a). Notamos que a visualização apresentada não é puramente topológica. Isso porque consideramos no algoritmo de visualização uma maior atratividade entre nós pertencentes à mesma comunidade, de forma a enaltecermos a estrutura de comunidades da rede. Na figura também indicamos a função predominante das comunidades. Na Figura 53(b) mostramos a evolução da eficiência de cada comunidade ao longo do tempo, sendo que colorimos cada curva com a mesma cor da respectiva comunidade mostrada na Figura 53(a). Vemos que, de fato, cada comunidade evolui seguindo diferentes relações entre atividade e grau.

¹ Disponível em: <<http://www.wormatlas.org/>>. Acesso em: 10 de Janeiro de 2016.

Figura 52 – Taxa de disparos em função do grau de entrada de nós na rede *C. elegans*. Cada ponto está colorido de acordo com uma das 5 comunidades à qual ele pertence. As linhas indicam as eficiências calculadas experimentalmente para cada comunidade. O gráfico superior esquerdo apresenta o comportamento de todas as comunidades no mesmo eixo. Os demais gráficos mostram o comportamento individual de cada comunidade.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Os resultados indicam que a topologia de cada comunidade da rede *C. elegans* opera em diferentes níveis de eficiência. Esse comportamento pode estar relacionado com as diferentes funções desempenhadas por cada comunidade. Por exemplo, neurônios motores tendem a ser receptores de atividade, já que eles recebem sinais advindos de outros neurônios para executar determinadas ações. Vemos na Figura 53 que as comunidades 3 e 4, predominantemente associadas a neurônios motores, possuem maior eficiência topológica. Já as comunidades formadas principalmente por neurônios sensoriais, tendem a possuir menor eficiência. Isso ocorre porque não consideramos estímulos externos na dinâmica, sendo que estes representam a principal fonte de atividade de neurônios sensoriais.

Apesar da topologia proporcionar uma forma básica de alteração da dinâmica global das comunidades, propriedades dinâmicas dos neurônios e das sinapses certamente podem modificar os comportamentos observados. Por exemplo, uma das comunidades pode possuir neurônios apresentando um potencial limiar de disparos maior do que os neurônios das demais comunidades. Dentre as possíveis variações de parâmetros dinâmicos que podemos considerar, a alteração do potencial limiar de disparo e da eficiência das

Tabela 3 – Funções associadas às comunidades da rede *C. elegans*. A terceira coluna indica o papel desempenhado pela maioria dos neurônios presentes na respectiva comunidade. As funções estão ordenadas de acordo com o número de neurônios relacionados. A quarta coluna indica a porcentagem de neurônios da comunidade possuindo tais funções.

Comunidade	Número de neurônios	Funções predominantes dos neurônios	Predominância da função
1	24	Sensação mecânica na cabeça, sensação química na cabeça.	65%
2	58	Sensação química e térmica.	83%
3	44	Neurônios motores do corpo.	91%
4	79	Neurônios motores do corpo, interneurônios de comando.	95%
5	74	Sensação química e mecânica na cabeça, neurônios motores na cabeça.	73%

Fonte: Elaborada pelo autor

sinapses representa um particular interesse de estudos a serem realizados em trabalhos futuros.

5.4 Integra-e-dispara no modelo Watts-Strogatz

Nos Capítulos 3 e 4, estudamos o comportamento específico de comunidades ao considerarmos, respectivamente, a variação da conectividade entre as comunidades e a modificação de propriedades dinâmicas dos nós. Nesta seção, apresentaremos uma outra forma pela qual as comunidades podem se diferenciar. Estudaremos a influência de alterações topológicas internas às comunidades na dinâmica integra-e-dispara. Em particular, utilizaremos o modelo de redes Watts-Strogatz (WS), apresentado na Seção 2.3, para quantificarmos o efeito de diferentes valores do parâmetro de reconexão p na dinâmica das comunidades. Iniciaremos a análise apresentando uma breve discussão sobre a influência de p na dinâmica integra-e-dispara em redes WS sem comunidades. Na sequência, estudaremos o comportamento da dinâmica ao considerarmos a presença de comunidades na rede, com cada comunidade possuindo diferentes valores de p .

5.4.1 Integra-e-dispara em redes Watts-Strogatz sem comunidades

O modelo Watts-Strogatz (WS) possui particular relevância no estudo de dinâmicas neuronais. Isso porque redes neuronais são espacialmente restritas, o que dá origem a

Figura 53 – (a) Visualização da rede *C. elegans* através do algoritmo Kamada-Kawai.(166) As principais funções de cada comunidade estão indicadas na figura. (b) Evolução temporal da eficiência de cada comunidade na dinâmica integra-e-dispara.

Fonte: Elaborada pelo autor.

um elevado coeficiente de aglomeração na conectividade entre os neurônios.(10, 104, 185) Adicionalmente, projeções axonais de longo alcance possibilitam a criação de atalhos na comunicação entre diferentes regiões da rede.(104, 185) Como conexões de longo alcance possuem elevado custo metabólico (186), o sistema precisa se auto-organizar para proporcionar uma boa comunicação entre os neurônios, levando em conta o custo do comprimento das conexões. Isso leva a princípios de otimização da topologia que foram estudados por diversos autores (75, 187–190), e que dão origem à topologias possuindo propriedades similares às geradas pelo modelo WS. Portanto, utilizaremos o modelo WS para gerar comunidades em diferentes situações desse cenário biológico, através da variação do parâmetro p .

Primeiramente, é interessante verificarmos como o patamar de ativação da dinâmica integra-e-dispara se comporta para diferentes valores de p . Com essa finalidade, executamos 10 realizações da dinâmica integra-e-dispara em redes possuindo $N = 100000$ e $\bar{k} = 40$, para diferentes valores de p . O resultado pode ser visto na Figura 54(a). Vemos que o patamar de ativação aumenta juntamente com o parâmetro p . Ainda mais interessante é o fato da ativação da rede ser nula para $p \lesssim 0.1$. De forma a caracterizarmos melhor o que ocorre em $p \approx 0.1$, podemos calcular o coeficiente de variação, CV_R , do patamar de ativação. Essa quantia é definida pela divisão do desvio padrão de R ao longo das 10 realizações pela média de R calculada nessas mesmas realizações. Na Figura 54(b) mostramos o coeficiente de variação de R para diferentes valores de p . Vemos que as flu-

tuações de R tendem a ser cada vez mais significativas, se comparadas com a média de R , quando $p \rightarrow 0.1$. Isso pode ser um indicativo de que a dinâmica apresenta um regime de criticalidade em $p \approx 0.1$.(26, 149, 191, 192) O estudo de tal regime requer uma análise aprofundada da dinâmica para o modelo WS. Como esse estudo não envolve comunidades em rede, não iremos nos estender sobre ele. Contudo, pretendemos explorar em trabalhos futuros o motivo para esse interessante comportamento da dinâmica integra-e-dispara.

Figura 54 – Propriedades do patamar de ativação da dinâmica integra-e-dispara em redes WS. (a) Patamar de ativação, R , em função da fração de reconexões p . (b) Coeficiente de variação do patamar de ativação para diferentes p . As redes utilizadas possuem $N = 100000$, $\bar{k} = 40$. O limiar de disparos foi fixado em $T = 40$. Cada ponto representa 10 realizações da rede e da dinâmica. As barras de erro, representando o desvio padrão para as 10 realizações, estão mostradas no gráfico.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Como já discutido, o parâmetro p do modelo WS influencia principalmente em duas propriedades da rede, dadas pelo coeficiente de aglomeração e o tamanho médio dos menores caminhos. Na Figura 55(a) mostramos a evolução dessas propriedades para diferentes valores do parâmetro p . Notamos que os valores de cada propriedade estão normalizados pelo valor da propriedade para o caso $p = 0.0001$. A região demarcada em vermelho indica o regime $p > 0.1$, no qual observamos que a dinâmica integra-e-dispara apresenta estados auto-sustentados. Nessa região, o tamanho médio dos menores caminhos é pequeno e não varia de forma significativa, enquanto que o valor do coeficiente de aglomeração da rede apresenta grande variação. Na Figura 55(b) plotamos os valores do coeficiente de aglomeração contidos na região demarcada em vermelho na Figura 55(a). Vemos que, nessa região, o coeficiente de aglomeração da rede pode ser facilmente ajustado através do parâmetro p .

Apesar do modelo WS permitir ajustarmos o coeficiente de aglomeração da rede, não podemos associar comportamentos dinâmicos observados para diferentes p com os respectivos valores de coeficiente de aglomeração. Isso porque outras características da rede,

não relacionadas com o coeficiente de aglomeração, também se alteram ao modificarmos o valor de p . Em especial, o desvio padrão da distribuição de graus da rede, que é $\sigma_k = 0$ para $p = 0$, tende a $\sigma_k = \sqrt{k}$ para $p = 1$ (como discutido na Seção 2.3).

Figura 55 – Propriedades do modelo WS para diferentes frações de reconexão, p , da rede. (a) Coeficiente de aglomeração e média dos menores caminhos. Os valores de ambas propriedades foram divididos pelo valor obtido para $p = 0.0001$. (b) Valor absoluto do coeficiente de aglomeração para diferentes p . As redes utilizadas possuem $N = 10000$ e $\bar{k} = 6$. Cada ponto do gráfico representa 10 realizações do modelo.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Diversos trabalhos na literatura buscaram definir um modelo de redes com coeficiente de aglomeração ajustável. (193–197) Em especial, Newman (193) definiu um modelo no qual é possível controlarmos o número de triângulos aos quais cada nó está associado. Infelizmente, todas as abordagens definidas na literatura possuem alguma restrição na forma como os triângulos são distribuídos. Por exemplo, no modelo proposto por Newman (193), um nó de grau 4 pode se associar a no máximo 2 triângulos. No modelo proposto por Gleeson (195), os triângulos tendem a possuir sobreposição, formando cliques na rede. Portanto, é muito difícil se estudar experimentalmente a contribuição do coeficiente de aglomeração da rede no seu respectivo comportamento dinâmico. Dessa forma, focaremos nossas análises na influência do parâmetro p na dinâmica integra-e-dispara, levando em conta que ele altera principalmente o coeficiente de aglomeração, mas que também temos variações em demais propriedades da rede.

É interessante verificarmos se o patamar de ativação de redes WS podem ser explicados pela Equação 5.25. Sabemos que a equação é válida para $p \approx 1$, pois nesse caso temos uma rede ER, que já foi analisada na Seção 5.2. Portanto, é relevante analisarmos se a equação continua válida para $p < 1$. Na Figura 56 comparamos os valores obtidos pela Equação 5.25 com os resultados obtidos experimentalmente para redes geradas segundo diferentes valores de p . Notamos que o segundo momento da distribuição de grau das redes,

necessário para a aplicação da Equação 5.25, foi calculado experimentalmente. Vemos pela figura que há um grande desvio dos valores previstos para $p = 0.1$, indicando que a Equação 5.25 não pode ser utilizada em redes WS com $p \approx 0.1$. Para $p = 0.2$, os valores possuem boa concordância em redes possuindo $\bar{k} > 15$. Ao considerarmos $p = 0.5$, a expressão analítica prevê corretamente o patamar de ativação da rede.

Figura 56 – Comparação entre os valores experimentais e analíticos calculados para o patamar de ativação de redes WS. Os valores analíticos foram calculados através da Equação 5.25. As redes possuem $N = 100000$. Foram consideradas 10 realizações para cada ponto experimental, sendo que o desvio padrão dos valores calculados para as realizações é muito pequeno para ser mostrado no gráfico.

Fonte: Elaborada pelo autor.

5.4.2 Integra-e-dispara em redes com comunidades Watts-Strogatz

Nesta seção analisaremos redes compostas por comunidades geradas pelo modelo WS. O processo de criação das redes que estudaremos é similar ao utilizado em outras seções. Cada comunidade é gerada separadamente segundo o modelo WS. Na sequência, essas comunidades são conectadas entre si, sendo que cada par de nós entre duas comunidades é conectado com igual probabilidade. Isto é, as arestas entre comunidades são posicionadas de maneira uniformemente aleatória.

Como exemplo inicial, criamos uma rede contendo duas comunidades possuindo diferentes valores de p . A comunidade 1 foi gerada segundo o modelo WS com parâmetro $p = 0.1$, já os nós pertencentes à comunidade 2 foram conectados de forma aleatória

($p = 1$). A conectividade entre as comunidades é dada pela matriz

$$\kappa = \begin{bmatrix} 10 & 0.05 \\ 0.05 & 10 \end{bmatrix}, \quad (5.37)$$

e cada comunidade possui 2500 nós. Notamos que nessa configuração de conectividade, existem pouquíssimas arestas entre as duas comunidades da rede, um cenário que raramente ocorre em redes reais. Utilizamos tal conectividade apenas para melhor exemplificarmos a influência de p no comportamento dinâmico das comunidades.

Aplicamos a dinâmica integra-e-dispara na rede, utilizando um limiar $T = 10$. Um resultado típico da dinâmica é mostrado na Figura 57. Na Figura 57(a) plotamos a ativação calculada separadamente para cada comunidade. Vemos que as comunidades apresentam diferentes evoluções de R^d . A comunidade possuindo menor valor de p possui um estado transiente mais longo, e a ativação dessa comunidade no estado assíncrono é bem menor do que no caso da comunidade 2, que possui conectividade aleatória. Essa diferença de ativação global está por sua vez relacionada com as diferentes taxas de disparo apresentadas pelos nós de cada comunidade. Na Figura 57(b) plotamos a relação entre a taxa de disparo e o grau de cada nó, para ambas as comunidades. Vemos que as comunidades possuem diferentes comportamentos específicos. Na comunidade onde $p = 1$, nós possuindo um determinado grau conseguem reunir mais cargas do que nós de grau similar presentes na comunidade de menor p , o que sugere novamente uma variação na eficiência das comunidades. Uma possível consequência dessa diferença de eficiência é que há menos possibilidade de troca de informações entre os nós da comunidade mais regular.

Sabendo que o parâmetro p possui influência na eficiência das comunidades, é interessante verificarmos como essa influência varia de acordo com a conectividade entre as mesmas. Na Figura 58 apresentamos a evolução da eficiência de duas comunidades ao modificarmos o nível de conectividade entre elas. Note que as eficiências foram normalizadas por R . Ambas as comunidades consideradas possuem grau médio interno $\bar{x}_{\text{int}} = 40$. Novamente, uma das comunidades foi gerada utilizando-se $p = 0.1$, enquanto que fixamos $p = 1$ para a outra comunidade. Vemos que no regime de quase total desacoplamento entre as comunidades, isto é, quando o grau externo $\bar{x}_{\text{ext}} \approx 0$, as comunidades possuem comportamentos dinâmicos muito diferentes. Mas é interessante notarmos que, para $\bar{x}_{\text{ext}} \approx 6$, as comunidades possuem pouca diferença de eficiência. Dessa forma, vemos que mesmo quando a rede ainda possui comunidades bem definidas, já que o grau interno de cada comunidade é dado por $\bar{x}_{\text{int}} = 40$, a troca de sinais entre as comunidades é relevante o bastante para eliminar a diferença de eficiência entre as mesmas.

É interessante verificarmos também como diferentes valores de p afetam o comportamento dinâmico das comunidades perante variados níveis de modularidade da rede. Para realizar tal estudo, utilizamos novamente redes possuindo duas comunidades, cada

Figura 57 – Resultados da dinâmica integra-e-dispara aplicada numa rede possuindo comunidades WS com diferentes probabilidades de reconexão p . (a) Fração de nós disparando na rede em função do tempo, calculada separadamente para cada comunidade. (b) Taxa de disparo dos nós presentes em cada comunidade, em função do respectivo grau.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 58 – Eficiência de duas comunidades de acordo com o número de conexões entre as mesmas. As comunidades diferem topologicamente de acordo com o parâmetro p utilizado na sua geração. Cada comunidade possui 10000 nós. Utilizamos um limiar de $T = 43$ para a dinâmica. Cada ponto do gráfico representa 20 realizações da rede e da dinâmica.

Fonte: Elaborada pelo autor.

qual com grau médio interno $\bar{x}_{\text{int}} = 40$. Uma comunidade possui $p = 1$ e a fração de reconexões da outra comunidade foi variada. De forma a sumarmos os resultados, ao invés de plotarmos a eficiência das comunidades, como feito na Figura 58(a), plotaremos a diferença de eficiência entre as mesmas, dada por $\Delta\xi = \xi_1 - \xi_2$, onde ξ_1 é a eficiência da comunidade possuindo $p = 1$. O resultado dessa análise pode ser visto na Figura 59(a). Cada ponto do gráfico representa 10 realizações da rede e da dinâmica. Vemos que, para altos valores de $\bar{x}_{\text{ext}}$, o parâmetro p se torna irrelevante para a dinâmica. Dessa forma, temos que dificilmente as comunidades conseguem se diferenciar, mesmo que elas ainda estejam bem definidas nesse regime. Para pequenos valores de $\bar{x}_{\text{ext}}$, observamos que as comunidades podem facilmente ter suas eficiências alteradas através de modificações no parâmetro p .

Figura 59 – Diferença de eficiência entre duas comunidades de acordo com o número de conexões entre as mesmas. As comunidades foram geradas segundo o modelo WS, e possuem 10000 nós cada. (a) Diferença de eficiência ao considerarmos diversos valores para a fração de reconexão, p , de uma das comunidades. Nesse caso, as comunidades possuem $\bar{x}_{\text{int}} = 40$. (b) Diferença de eficiência ao variarmos o grau médio interno, $\bar{x}_{\text{int}}$, das duas comunidades. Uma comunidade possui $p = 1$, enquanto que a outra possui $p = 0.1$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Outra importante análise que podemos fazer sobre o comportamento da dinâmica é a influência da densidade interna das comunidades nas eficiências calculadas. Na Figura 59(b) mostramos a diferença de eficiência entre duas comunidades, possuindo $p = 1$ e $p = 0.1$, de acordo com o grau médio interno das mesmas. De forma a compararmos as diferentes curvas, plotamos $\Delta\xi$ em função de $\bar{x}_{\text{ext}}/\bar{x}_{\text{int}}$, que representa a razão entre o número médio de conexões externas e internas às comunidades. Notamos que em cada caso utilizamos um limiar de disparos igual ao grau médio da rede. O gráfico revela que, nessas condições, redes mais esparsas tendem a apresentar maiores diferenças dinâmicas entre as comunidades. Isso ocorre porque, ao associarmos o limiar de disparos com o grau

médio, a ativação da rede tende a ser maior para pequenos valores de grau médio (como visto, por exemplo, na Figura 56). Isso possibilita que as comunidades apresentem um maior intervalo de eficiência ao variarmos suas propriedades topológicas.

Apesar de termos analisado até aqui a influência do parâmetro p no patamar de ativação das comunidades, existem outras características da dinâmica que podem estar associadas com esse parâmetro. Uma característica de sinais neuronais muito estudada na literatura é a regularidade de disparos dos neurônios. (142,198) Tal regularidade pode ser medida através do desvio padrão dos intervalos de disparos apresentados por cada neurônio. Em outras palavras, seja $\mathcal{T}_i = (t_i^1, t_i^2, \dots, t_i^n)$ a sequência dos instantes de disparo do neurônio i , podemos definir uma sequência de intervalos $\mathcal{I}_i = (t_i^2 - t_i^1, t_i^3 - t_i^2, \dots, t_i^n - t_i^{n-1})$ associados a esse neurônio. O desvio padrão dos valores de $\mathcal{I}_i$ indica a regularidade dos disparos de i .

Figura 60 – Regularidade de disparos observada para duas comunidades geradas pelo modelo WS com diferentes parâmetros p . As comunidades possuem $\bar{x}_{\text{int}} = 20$, $\bar{x}_{\text{ext}} = 5$ e 1000 nós. O gráfico à esquerda mostra a distribuição do desvio padrão de intervalos entre disparos para cada comunidade. Os gráficos à direita mostram alguns exemplos de trem de disparos observados nas comunidades.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Na Figura 60 mostramos um exemplo da variação da regularidade de disparos entre comunidades. Novamente, utilizamos uma rede possuindo duas comunidades, sendo que uma das comunidades foi gerada pelo modelo WS com parâmetro $p = 0.1$, enquanto que a outra comunidade possui $p = 1$. Após aplicarmos a dinâmica integra-e-dispara nessa rede, calculamos o desvio padrão de intervalos para cada nó. As distribuições dos valores obtidos para cada comunidade são mostradas na figura. Adicionalmente, também mostramos na figura dois exemplos de sinais observados para cada comunidade. Vemos que a comunidade possuindo parâmetro $p = 0.1$ apresenta maior desvio padrão de intervalos. Adicionalmente, a comunidade também possui uma distribuição de desvios mais larga,

indicando que existem tantos sinais mais regulares quanto sinais altamente irregulares na comunidade. Já na comunidade com conectividade uniformemente aleatória, os sinais não são tão diversificados.

É interessante compararmos como a regularidade de disparos varia de acordo com a conectividade entre as comunidades. Uma dificuldade encontrada ao realizarmos tal comparação está relacionada à variação da taxa de disparos global da rede. Quanto maior a taxa de disparos, menores são os intervalos observados, o que causa uma diminuição natural dos respectivos valores de desvio padrão. Portanto, é mais interessante compararmos o coeficiente de variação dos intervalos, dado por $CV_I = \sigma_I / \mu_I$, onde σ_I e μ_I são o desvio padrão e média dos intervalos, respectivamente.

De forma a verificarmos a influência de p no coeficiente de variação dos intervalos, primeiramente utilizamos redes geradas pelo modelo WS sem a presença de comunidades. Para cada valor de p , foram geradas 10 redes segundo o modelo WS. A dinâmica integra-e-dispara foi aplicada nessas redes, e os valores de coeficiente de variação de intervalos foram calculados. Os resultados são mostrados na Figura 61. No gráfico mostrado na Figura 61(a), apresentamos a distribuição de CV_I para diferentes valores de p . Para gerarmos as distribuições, consideramos conjuntamente os valores calculados para as 10 realizações da rede. Vemos que o parâmetro p , de fato, pode ser usado para controlarmos a média e variância da regularidade dos sinais na rede. Esses dois momentos das distribuições obtidas são mostrados na Figura 61(b).

Figura 61 – Coeficiente de variação, CV_I , dos intervalos entre disparos calculados para a dinâmica integra-e-dispara. As redes consideradas possuem $N = 75000$ e $\bar{k} = 40$. O limiar de disparo da dinâmica foi fixado em $T = 40$. (a) Distribuição de CV_I para diferentes valores de p . (b) Média dos valores de CV_I ao longo de p . Note que as barras do gráfico indicam o desvio padrão da distribuição, e não o desvio padrão para as diferentes realizações do modelo.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Finalmente, podemos verificar como o coeficiente de variação dos intervalos se comporta em redes com comunidades. Utilizando redes possuindo duas comunidades, geradas com parâmetros $p = 1$ e $p = 0.1$, calculamos a média do coeficiente de variação de intervalos para os nós presentes em cada comunidade. O procedimento foi repetido para diferentes níveis de conectividade entre as comunidades. O resultado pode ser visto na Figura 62. Vemos que a regularidade dos sinais observados na comunidade 2, caracterizada por $p = 1$, varia quase que linearmente com a conectividade entre as comunidades. Por outro lado, a comunidade gerada com parâmetro $p = 0.1$, possuindo alto coeficiente de aglomeração, apresenta sinais cada vez mais irregulares ao aumentarmos a modularidade da rede. Dessa forma, a modularidade proporciona uma forma de diferentes comunidades presentes na rede ajustarem a regularidade de sinais apresentados pelos neurônios.

Figura 62 – Média do coeficiente de variação de intervalos entre disparos, em função do grau médio externo das comunidades. Foram utilizadas redes formadas por duas comunidades, cada qual com $\bar{x}_{\text{int}} = 40$ e 75000 nós. O potencial limiar de disparos foi variado de acordo com o grau médio da rede. Cada ponto representa 10 realizações da rede e da dinâmica. As barras de erro indicam o desvio padrão observado para as 10 realizações.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Os resultados apresentados nesta seção mostram a riqueza de comportamentos que podemos obter ao alterarmos a topologia das comunidades. Em especial, vemos que a alteração da modularidade da rede amplifica de forma não-linear as diferenças dinâmicas observadas. Como discutido, o parâmetro p do modelo WS está fortemente relacionado com o coeficiente de aglomeração da rede. Em trabalhos futuros, pretendemos verificar se as propriedades observadas estão unicamente associadas com o coeficiente de aglomeração, ou se mudanças adicionais na topologia causadas pela variação de p também atuam na

dinâmica integra-e-dispara.

5.5 Integra-e-dispara com conexões inibitórias

Apresentaremos nesta seção um breve exemplo da quarta forma de diferenciação de comunidades que discutimos na introdução deste trabalho. Nesse caso, as propriedades dinâmicas das conexões *entre* as comunidades alteram o comportamento dinâmico global do sistema. Para exemplificarmos tal caso, adicionaremos arestas inibitórias na dinâmica integra-e-dispara. Estamos interessados na influência que essas arestas possuem na dinâmica dependendo da sua localização em relação às comunidades. Para estudarmos esse efeito, consideraremos dois casos extremos. No primeiro, arestas inibitórias sempre conectam nós da mesma comunidade, isto é, a inibição é local à comunidade. No segundo caso, as arestas inibitórias sempre conectam nós de diferentes comunidades, fazendo com que a inibição ocorra entre comunidades. É interessante verificarmos como o patamar de ativação da dinâmica se comporta perante essas duas situações.

Notamos que inibição é comumente associada a tipos específicos de neurônios (199), e não às conexões entre pares de neurônios. Entretanto, estamos interessados em isolar o efeito da distribuição de inibição ao longo da rede e, portanto, consideraremos que certas arestas da rede (e não neurônios) atuam de forma inibitória. Neurônios possuindo arestas inibitórias obedecem a mesma dinâmica indicada pela Equação 2.25, com a exceção de que ao disparar, o neurônio envia um sinal unitário negativo para os vizinhos conectados através de arestas inibitórias.

Utilizando a rede do nematoide *C. elegans*, descrita na Seção 2.4, aplicamos a dinâmica integra-e-dispara com inibição interna e externa às comunidades. Para essa análise, utilizamos as mesmas 5 comunidades identificadas no final da Seção 5.3.2. De forma a verificarmos como o patamar de ativação se modifica para diferentes níveis de inibição, variamos também a fração de conexões inibitórias, f_I , presentes na rede. O resultado do experimento é mostrado na Figura 63(a). A linha azul indica a ativação da rede quando consideramos arestas inibitórias apenas internamente às comunidades. A linha verde indica a ativação ao considerarmos inibição apenas entre as comunidades. Notamos que, para a rede do *C. elegans*, uma fração de aproximadamente $f_I = 0.35$ de conexões inibitórias é o máximo que podemos considerar, pois nessa situação praticamente todas as arestas entre comunidades se tornam inibitórias.

O resultado mostra que há uma significativa variação do patamar de ativação da rede dependendo da localização das conexões inibitórias. Em especial, vemos que conexões externas às comunidades possuem um maior impacto na ativação global do sistema. Curiosamente, existe um intervalo $0.1 < f_I < 0.25$ que possibilita a maior variação da ativação

Figura 63 – Influência de conexões inibitórias internas às comunidades (Interna) e entre as comunidades (Externa) na ativação da rede *C. elegans*. (a) Patamar de ativação em função da fração de conexões inibitórias, f_I . (b) Diferença média entre as curvas mostradas em (a). Cada ponto em ambos os gráficos representa 1000 realizações da dinâmica integra-e-dispara. Barras de erro indicam o desvio padrão ao longo das realizações. O limiar de disparo utilizado foi $T=15$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

da rede através do posicionamento apropriado de conexões inibitórias. Na Figura 63(b) apresentamos a diferença média entre a ativação calculada para o caso de inibição interna R_{Interna} e externa R_{Externa} às comunidades. Vemos que há de fato um máximo na diferença de comportamento. É interessante notarmos que estudos sobre o sistema nervoso do *C. elegans* indicam que ao menos 8.5% dos neurônios do nematoide são inibitórios (104,200), o que colocaria esse sistema justamente na região de maior influência das conexões inibitórias.

De forma a melhor investigarmos a variação dinâmica observada para os diferentes posicionamentos das arestas inibitórias, consideramos duas situações de reconexão da rede *C. elegans*. Na primeira, utilizamos o modelo de partição fixa (PF) para gerar redes aleatórias possuindo a mesma matriz κ de conectividade entre as comunidades da rede real. Essa matriz está indicada na Equação 5.36. Na segunda situação, utilizamos o procedimento CMC, apresentado na Seção 5.3.2, para gerar redes possuindo a mesma matriz κ e também os mesmos valores de grau observados na rede real.

Aplicamos a dinâmica integra-e-dispara com inibição nas redes geradas através das reconexões mencionadas, posicionando novamente as arestas inibitórias internamente e externamente às comunidades. O resultado pode ser visto nas Figuras 64(a) e (b) para, respectivamente, o procedimento PF e CMC. Vemos que as redes criadas pelo procedimento PF apresentam um comportamento diferente da rede real. Nessas redes, a localização das conexões inibitórias não influencia o patamar de ativação da rede para $f_I < 0.15$.

Figura 64 – Influência de conexões inibitórias internas às comunidades (Interna) e entre as comunidades (Externa) na ativação de redes com comunidades. A topologia das redes consideradas possui (a) a mesma estrutura de comunidades e (b) a mesma estrutura de comunidades e distribuição de grau da rede *C. elegans*. Em ambos os gráficos mostramos o patamar de ativação em função da fração de conexões inibitórias. Cada ponto representa 1000 realizações da dinâmica integra-e-dispara. Barras de erro indicam o desvio padrão ao longo das realizações. O limiar de disparo utilizado foi $T=15$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Curiosamente, ao utilizarmos uma fração $f_I > 0.15$, temos um comportamento oposto ao observado para a rede real. Nesse regime, a inibição interna das comunidades provoca uma maior diminuição da ativação da rede. Por outro lado, na presença de inibição externa a dinâmica continua apresentando estados auto-sustentados mesmo para valores muito altos de f_I .

No caso de redes criadas pelo procedimento CMC, mostrado na Figura 64(b), vemos que ao considerarmos o grau dos nós além da estrutura de comunidades, temos um resultado muito similar ao obtido para a rede real. Em especial, notamos que o efeito da inibição de arestas internas às comunidades passa a ser bem menor do que no caso do procedimento PF. Portanto, vemos que a distribuição de grau da rede está intimamente relacionada com a influência de conexões inibitórias no patamar de ativação da dinâmica.

Essa breve análise mostra como propriedades dinâmicas de arestas conectando diferentes comunidades podem influenciar na dinâmica global do sistema. Em especial, vemos que a topologia das comunidades pode amplificar a atuação de conexões inibitórias na taxa de disparo dos nós. Em futuras análises, pretendemos verificar como diferentes topologias, em especial WS e BA, modificam as propriedades observadas.

6 Conclusões e trabalhos futuros

O grande potencial de redes complexas para representar os mais diversos sistemas da natureza deu origem a inúmeros trabalhos sobre o tema nas últimas duas décadas. Pelo fato de tais sistemas usualmente apresentarem certos padrões de agrupamento, o estudo sobre comunidades se tornou um dos principais assuntos abordados na área. Por outro lado, devido à grande dificuldade em se definir e identificar comunidades em redes, boa parte dos estudos desenvolvidos sobre comunidades envolvem a delimitação de algoritmos otimizados para o particionamento da rede segundo critérios predeterminados.(70, 85–90) É comum encontrarmos também trabalhos dedicados à comparação de tais algoritmos.(17, 42, 95)

Neste trabalho, desconsideramos o problema da detecção de comunidades, focando esforços na definição e caracterização de quatro diferentes classes de propriedades associadas às comunidades. Estas classes constituem propriedades da a) topologia interna das comunidades, b) dinâmica interna das comunidades, c) fronteira topológica das comunidades e d) fronteira dinâmica das comunidades. Ao longo das análises, mostramos que cada classe de propriedades possui o potencial de modificar o *inter-relacionamento* entre a topologia e a dinâmica das comunidades da rede. Particularmente, verificamos a influência da direção das arestas, de valores de *fitness*, da densidades de atalhos e de arestas inibitórias no inter-relacionamento topologia-dinâmica. Os principais estudos realizados e um resumo dos resultados mais relevantes obtidos estão apresentados na Figura 65.

Começamos nossas análises pelo estudo do passeio aleatório em redes direcionadas, onde utilizamos tipicamente redes possuindo a topologia indicada na Figura 65(a). Derivamos expressões analíticas para a probabilidade estacionária da dinâmica, sendo que tais expressões foram utilizadas para definirmos o conceito de eficiência de comunidades. Indicamos diversas estratégias aplicáveis para o aumento da eficiência de uma comunidade, sendo que a variação do balanço de conexões entre as mesmas se mostrou a estratégia mais eficaz. Verificamos que a variação de eficiência através da conectividade entre as comunidades é não-linear, isto é, no regime de alta modularidade da rede a alteração do balanço entre comunidades causa uma variação de eficiência significativamente maior do que no regime de baixa modularidade. Esse fato pode ser visto pelo resultado mostrado na Figura 65(a1), onde vemos que a eficiência possui pouca variação após um certo grau médio de conexões saindo da comunidade 1 e chegando à comunidade 2. Adicionalmente, mostramos que caso a reciprocidade de arestas das comunidades seja baixa, altas flutuações da dinâmica dificultam o estudo da eficiência.

Em se tratando de redes direcionadas, uma única aresta possui potencial de modi-

ficar a atividade do passeio aleatório em todos os nós da rede. Portanto, ao considerarmos um conjunto de arestas incluídas numa mesma comunidade, vemos a capacidade que comunidades possuem para influenciar as probabilidades estacionárias dessa dinâmica. Esse fato possui particular relevância em sistemas onde há a necessidade de otimização ou controle de atividade dinâmica, como por exemplo no caso da *World Wide Web*, da internet, da malha de transportes em cidades ou do córtex. De forma a melhor motivarmos os estudos realizados, apresentamos uma aplicação dos conceitos na rede cortical da Macaca. Mostramos que esse sistema apresenta dois diferentes relacionamentos entre atividade e grau de entrada para os nós, como indicado na Figura 65(a2). Adicionalmente, observamos que certos nós não obedecem esses dois relacionamentos, pois eles se encontram na interface entre as duas comunidades identificadas.

Comportamentos similares ao passeio aleatório tradicional em redes direcionados foram observados para o passeio aleatório enviesado em redes não direcionadas. Nesse caso, consideramos que os nós possuem diferentes valores de atratividade para o agente realizando a dinâmica, como ilustrado na Figura 65(b). Mostramos que essa dinâmica possui um tratamento analítico mais factível, dada em grande parte pela liberdade de escolhermos diferentes configurações de *fitness* para os nós. Observamos novamente uma influência não-linear da modularidade da rede na atividade das comunidades (como mostrado na Figura 65(b1)), onde vimos que a atividade relativa de uma comunidade bem definida na rede passa a ser influenciada quadraticamente pelo valor de *fitness* associado.

Ao aplicarmos a dinâmica de passeio aleatório enviesado em redes de aeroportos, ilustramos a importância do estudo de comunidades no comportamento dinâmico de redes. Isso porque indicamos uma forma de modelarmos, na escala de comunidades, medidas de nó obtidas sobre o sistema real. Isto é, mesmo que o modelo em estudo não seja capaz de representar comportamentos observados para cada nó da rede (escala local), ele ainda pode ser capaz de explicar certas características apresentadas por grupos de nós. Isso se torna especialmente verdade se a rede for modular, pois nesse caso a maioria das interações do sistema ocorrem internamente aos grupos definidos na rede. No caso da rede de aeroportos, mostramos a possibilidade de representarmos a atividade observada em diferentes países do globo através de uma regra local de transição do passeio aleatório. Adicionalmente, a análise possibilitou verificarmos quais países possuem maior desvio em relação ao modelo proposto, como visto na Figura 65(b2). Tal desvio leva à ideia de diferentes regras de transição da dinâmica associada à cada país, ou em outras palavras, diferentes relacionamentos entre os valores de *fitness* e grau para cada país. Para trabalhos futuros, indicamos a possibilidade de representarmos com maior acurácia o fluxo de passageiros em cada país, através do ajuste dessas regras de transição.

Com o objetivo de completarmos nossas análises sobre as diferentes formas de diferenciação de comunidades, consideramos também a dinâmica neuronal integra-e-dispara.

Figura 65 – Ilustração dos sistemas estudados e reprodução dos principais resultados obtidos no presente trabalho. A parte superior dessa figura, representando as quatro formas de diferenciação de comunidades, foi apresentada no Capítulo 1. (a) Rede direcionada, sobre a qual estudamos o passeio aleatório tradicional. (b) Rede possuindo nós com diferentes valores de *fitness*, onde estudamos o passeio aleatório enviesado. (c) Comunidades possuindo topologia Watts-Strogatz, e conectadas de forma uniformemente aleatória, sobre as quais estudamos a dinâmica integra-e-dispara. (d) Redes possuindo conexões inibitórias internas ou externas às comunidades para a dinâmica integra-e-dispara. Os respectivos resultados para cada caso foram apresentados e discutidos na (a1) Seção 3.1 e 3.2, (a2) Seção 3.3, (b1) Seção 4.1, (b2) Seção 4.2, (c1) Seção 5.4, (c2) Seção 5.4, (d1) Seção 5.5 e (d2) Seção 5.5.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Primeiramente, através de uma abordagem teórica derivamos uma expressão para o patamar de ativação de redes Erdős-Rényi em certas configurações paramétricas. Mostramos que o aumento do grau médio da rede facilita a manutenção de estados auto-sustentados em regimes de baixas taxas de disparo global da rede. Isso possibilita que os neurônios apresentem uma maior variabilidade de sinais na ausência de estímulos externos. Em trabalhos futuros, pretendemos estender tal análise para redes com distribuição de grau em lei de potência.

De forma a estudarmos comunidades diferenciadas de acordo com sua topologia interna, utilizamos o modelo Watts-Strogatz para gerarmos comunidades com diferentes probabilidades de reconexão. Um exemplo típico de rede utilizada é ilustrado na Figura 65(c). Mostramos que, em escala intermediária, a dinâmica integra-e-dispara apresenta comportamentos muito similares ao passeio aleatório, sendo que é possível inclusive explicarmos a taxa de disparos das comunidades através da expressão analítica encontrada para o passeio aleatório. Através da variação da probabilidade de reconexão de uma das comunidades, mostramos que a mesma pode apresentar diferentes eficiências de disparo, como indicado na Figura 65(c1). No caso, observamos que essa eficiência deve estar relacionada com o número de triângulos presentes na rede. Em trabalho futuros, pretendemos investigar mais a fundo a atuação do coeficiente de aglomeração na taxa de disparo dos nós.

Ainda sobre o estudo de comunidades com diferenciação topológica interna, consideramos também a regularidade dos sinais apresentados pelos nós de cada comunidade da rede. Mostramos que a modularidade pode ser usada para se regular a variabilidade dos sinais observados em comunidades com diferentes parâmetros de reconexão, como indicado na Figura 65(c2). Dessa forma, vimos que redes modulares possuindo comunidades com topologia Watts-Strogatz podem apresentar diferentes níveis de eficiência topológica e regularidade de sinais, dependendo da probabilidade de reconexão associada à cada comunidade, e da modularidade da rede. A diminuição da probabilidade de reconexão dá origem à comunidades com menor eficiência topológica e maior possibilidade de variação na regularidade de disparos. Notamos que tal variação de regularidade permite uma maior codificação de informações pela rede.(142,198)

Por último, estudamos o caso de diferenciação de comunidades através da variação de propriedades dinâmicas entre as mesmas. Para tanto, consideramos a presença de conexões inibitórias na dinâmica integra-e-dispara, como ilustrado na Figura 65(d). Mostramos que o posicionamento de tais conexões altera de forma não-trivial o comportamento global da dinâmica. Em especial, verificamos que conexões inibitórias entre comunidades possuem uma influência não-linear na taxa de disparos dos nós, como mostrado na Figura 65(d1). Um estudo mais sistemático da influência de inibições localizadas em diferentes modelos de redes se mostra um interessante assunto para futuras análises.

Por hora, verificamos que redes geradas pelo modelo de partição fixa, possuindo conectividade uniformemente aleatória entre comunidades, apresentam uma maior capacidade de exibir estados auto-sustentados se a inibição for externa às comunidades. Esse resultado está reproduzido na Figura 65(d2).

Ao considerarmos as diferentes formas de diferenciação de comunidades estudadas neste trabalho, observamos diversos casos onde a modelagem do sistema se torna mais precisa ao associarmos diferentes parâmetros topológicos e dinâmicos para as comunidades da rede. Adicionalmente, observamos a presença de comportamentos dinâmicos que não podem ser encontrados na escala local ou global da rede. Os resultados obtidos mostram a riqueza de relacionamentos entre topologia e dinâmica que podem ser observados em redes com comunidades. Em especial, vimos que existem classes de parâmetros de comunidades, como direção, *fitness* e reconexão que dão origem a diferentes comportamentos específicos para as comunidades do sistema.

Em resumo, consideramos que nossas principais contribuições sobre o tema são as seguintes:

- Definição e integração das diferentes classes de propriedades que podem ser utilizadas para a caracterização de comunidades;
- Obtenção de expressões analíticas que possibilitam a análise do passeio aleatório tradicional em redes direcionadas com comunidades;
- Definição e análise de um modelo computacional que possibilita a criação de redes direcionadas com comunidades possuindo reciprocidades predeterminadas;
- Descrição analítica do relacionamento entre a atividade do passeio aleatório enviesado e o grau dos nós em redes com comunidades, para diferentes distribuições de *fitness*;
- Derivação de uma expressão que relaciona o patamar de ativação da dinâmica integra-e-dispara com o grau médio de redes Erdős-Rényi;
- Verificação da influência da densidade de atalhos na taxa de disparos e regularidade de sinais neuronais, em redes possuindo comunidades geradas segundo o modelo Watts-Strogatz;
- Definição e estudo do conceito de comportamento específico de comunidades;
- Demonstração de que as propriedades acima mencionadas se relacionam com a modularidade da rede de forma não-linear.

Apesar de termos considerado ao longo do trabalho o comportamento específico de comunidades, poderíamos também considerar os mesmos conceitos aplicados sobre grupos de nós definidos segundo outros critérios. Por exemplo, em (201, 202) os autores

definem uma metodologia de aglomeração de nós em redes. Tal aglomeração dá origem a uma nova rede contendo informações sobre a conectividade em outra escala topológica. Essa aglomeração pode ser repetida diversas vezes, até que a rede vire um único nó. É interessante se verificar como o relacionamento entre topologia e dinâmica é modificado ao longo das diversas escalas de aglomeração.

Além de outras metodologias de aglomeração, também temos grande interesse em aplicar os conceitos desenvolvidos em outros sistemas reais. Em especial, a *World Wide Web* se mostra uma excelente candidata para tal aplicação. Isso porque além desse sistema possuir uma divisão natural de comunidades em diversas escalas (países, domínios, assuntos, etc), a dinâmica de passeio aleatório é tradicionalmente utilizada para se modelar a atividade esperada sobre essa classe de redes.(157) No caso de dinâmicas neuronais, dados sobre a conectividade neuronal em larga escala são muito escassos na literatura. Por outro lado, diversas iniciativas têm obtido moderado sucesso na criação de modelos factíveis de conectividade entre neurônios.(82, 131, 132, 203) Tais modelos podem ser utilizados para a realização de estudos iniciais sobre o tema.

Como já discutido, o comportamento específico de comunidades representa a observação de diferentes relacionamentos entre topologia e dinâmica em redes. É de grande interesse estudarmos um conceito, de certa forma, inverso ao apresentado neste trabalho. Seria interessante definirmos uma metodologia para a detecção de grupos de nós apresentando diferentes comportamentos específicos. Tal metodologia possui o potencial de revelar diferentes regiões de eficiência da rede. Esse conceito poderia, por sua vez, ser utilizado para a definição de um modelo de crescimento de redes. Comunidades mais eficientes tenderiam a receber mais conexões de novos nós adicionados à rede, mas tais conexões causariam uma diminuição de eficiência da comunidade (como observado para o passeio aleatório em redes direcionadas). Com isso, o crescimento da rede levaria em conta não apenas o interesse do nó adicionado à rede, mas também o benefício obtido pelas comunidades sujeitas a receber conexões desse nó.

Referências

- 1 NEWMAN, M. E. J. *Networks: an introduction*. Oxford: Oxford University Press, 2010.
- 2 ESTRADA, E. *The structure of complex networks: theory and applications*. Oxford: Oxford University Press, 2011.
- 3 SPORNS, O. *Networks of the brain*. Cambridge: The MIT Press, 2010.
- 4 COHEN, R.; HAVLIN, S. *Complex networks: structure, robustness and function*. New York: Cambridge University Press, 2010.
- 5 BARRAT, A.; BARTHELEMY, M.; VESPIGNANI, A. *Dynamical processes on complex networks*. Cambridge: Cambridge University Press, 2008.
- 6 EASLEY, D.; KLEINBERG, J. *Networks, crowds, and markets*. Cambridge: Cambridge University Press, 2010.
- 7 BARABÁSI, A. L.; ALBERT, R. Emergence of scaling in random networks. *Science*, v. 286, n. 5439, p. 509–512, 1999. doi: 10.1126/science.286.5439.509.
- 8 BARABÁSI, A. L.; ALBERT, R.; JEONG, H. Mean-field theory for scale-free random networks. *Physica A*, v. 272, p. 173–187, 1999. doi: 10.1016/S0378-4371(99)00291-5.
- 9 FALOUTSOS, M.; FALOUTSOS, P.; FALOUTSOS, C. On power-law relationships of the internet topology. In: ACM SIGCOMM COMPUTER COMMUNICATION REVIEW, v. 29, n. 4, p. 251–262, 1999. doi: 10.1145/316194.316229.
- 10 WATTS, D. J.; STROGATZ, S. H. Collective dynamics of small-world networks. *Nature*, v. 393, p. 440–442, 1998. doi: 10.1038/30918.
- 11 HOLME, P.; SARAMÄKI, J. Temporal networks. *Physics Reports*, v. 519, n. 3, p. 97–125, 2012. doi: 10.1016/j.physrep.2012.03.001.
- 12 BATTISTON, F.; NICOSIA, V.; LATORA, V. Structural measures for multiplex networks. *Physical Review E*, v. 89, p. 032804, 2014. doi: 10.1103/PhysRevE.89.032804.
- 13 BOCCALETTI, S.; BIANCONI, G.; CRIADO, R.; GENIO, C. D.; GÓMEZ-GARDEÑES, J.; ROMANCE, M.; SENDIÑA-NADAL, I.; WANG, Z.; ZANIN, M. The structure and dynamics of multilayer networks. *Physics Reports*, v. 544, p. 1–122, 2014. doi: 10.1016/j.physrep.2014.07.001.
- 14 ARENAS, A.; GUILERA, A. D.; KURTHS, J.; MORENO, Y.; ZHOU, C. Synchronization in complex networks. *Physics Reports*, v. 469, n. 3, p. 93–153, 2008. doi: 10.1016/j.physrep.2008.09.002.
- 15 WATTS, D. J. *Small worlds: the dynamics of networks between order and randomness*. Princeton: Princeton University Press, 2003.
- 16 ALBERT, R.; BARABÁSI, A. L. Statistical mechanics of complex network. *Reviews of Modern Physics*, v. 74, p. 47–97, 2002. doi: 10.1103/RevModPhys.74.47.

- 17 FORTUNATO, S. Community detection in graphs. *Physics Reports*, v. 486, p. 75–174, 2010. doi: 10.1016/j.physrep.2009.11.002.
- 18 MALLIAROS, F. D.; VAZIRGIANNIS, M. Clustering and community detection in directed networks: a survey. *Physics Reports*, v. 533, n. 4, p. 95–142, 2013. doi: 10.1016/j.physrep.2013.08.002.
- 19 NEWMAN, M. E. J.; GIRVAN, M. Finding and evaluating community structure in networks. *Physical Review E*, v. 69, p. 026113, 2004. doi: 10.1103/PhysRevE.69.026113.
- 20 ALBERT, R.; JEONG, H.; BARABÁSI, A. L. Error and attack tolerance of complex networks. *Nature*, v. 406, n. 6794, p. 378–382, 2000. doi: 10.1038/35019019.
- 21 COHEN, R.; EREZ, K.; AVRAHAM, D. ben; HAVLIN, S. Resilience of the internet to random breakdowns. *Physical Review Letters*, v. 85, p. 4626–4628, 2000. doi: 10.1103/PhysRevLett.85.4626.
- 22 COHEN, R.; EREZ, K.; AVRAHAM, D. ben; HAVLIN, S. Breakdown of the internet under intentional attack. *Physical Review Letters*, v. 86, p. 3682–3685, 2001. doi: 10.1103/PhysRevLett.86.3682.
- 23 PASTOR-SATORRAS, R.; VÁZQUEZ, A.; VESPIGNANI, A. Dynamical and correlation properties of the internet. *Physical Review Letters*, v. 87, p. 258701, 2001. doi: 10.1103/PhysRevLett.87.258701.
- 24 BOGUÑÁ, M.; PASTOR-SATORRAS, R. Epidemic spreading in correlated complex networks. *Physical Review E*, v. 66, p. 047104, 2002. doi: 10.1103/PhysRevE.66.047104.
- 25 NEWMAN, M. E. J. The structure and function of complex networks. *SIAM Review*, v. 45, p. 167, 2003. doi: 10.1137/S003614450342480.
- 26 DOROGOVTSSEV, S. N.; GOLTSEV, A. V. Critical phenomena in complex networks. *Reviews of Modern Physics*, v. 80, n. 4, p. 1275–1335, 2008. doi: 10.1103/RevModPhys.80.1275.
- 27 BOCCALETTI, S.; LATORA, V.; MORENO, Y.; CHAVEZ, M.; HWANG, D. U. Complex networks: structure and dynamics. *Physics Reports*, v. 424, n. 4-5, p. 175–308, 2006. doi: 10.1016/j.physrep.2005.10.009.
- 28 COSTA, L. F.; RODRIGUES, F. A.; TRAVIESO, G.; BOAS, P. R. V. Characterization of complex networks: a survey of measurements. *Advances in Physics*, v. 56, n. 1, p. 167–242, 2007. doi: 10.1080/00018730601170527.
- 29 PASTOR-SATORRAS, R.; CASTELLANO, C.; MIEGHEM, P. V.; VESPIGNANI, A. Epidemic processes in complex networks. *Reviews of Modern Physics*, v. 87, n. 3, p. 925, 2015. doi: 10.1103/RevModPhys.87.925.
- 30 BARAHONA, M.; PECORA, L. M. Synchronization in small-world systems. *Physical Review Letters*, v. 89, p. 054101, 2002. doi: 10.1103/PhysRevLett.89.054101.
- 31 PERC, M.; SZOLNOKI, A. Coevolutionary games - a mini review. *BioSystems*, v. 99, n. 2, p. 109–125, 2010. doi: 10.1016/j.biosystems.2009.10.003.

- 32 PERC, M.; GÓMEZ-GARDEÑES, J.; SZOLNOKI, A.; FLORÍA, L. M.; MORENO, Y. Evolutionary dynamics of group interactions on structured populations: a review. *Journal of the Royal Society Interface*, v. 10, p. 20120997, 2013. doi: 10.1098/rsif.2012.0997.
- 33 ROXIN, A.; RIECKE, H.; SOLLA, S. A. Self-sustained activity in a small-world network of excitable neurons. *Physical Review Letters*, v. 92, p. 198101, 2004. doi: 10.1103/PhysRevLett.92.198101.
- 34 KAISER, M.; HILGETAG, C. C. Optimal hierarchical modular topologies for producing limited sustained activation of neural networks. *Frontiers in Neuroinformatics*, v. 4, n. 8, p. 1–14, 2010. doi: 10.3389/fninf.2010.00008.
- 35 COMIN, C. H.; COSTA, L. da F. Shape, connectedness and dynamics in neuronal networks. *Journal of Neuroscience Methods*, v. 220, n. 2, p. 100–115, 2013. doi: 10.1016/j.jneumeth.2013.08.002.
- 36 ADAMIC, L. A.; LUKOSE, R. M.; PUNIYANI, A. R.; HUBERMAN, B. A. Search in power-law networks. *Physical Review E*, v. 64, n. 4, p. 046135, 2001. doi: 10.1103/PhysRevE.64.046135.
- 37 SINATRA, R.; GÓMEZ-GARDEÑES, J.; LAMBIOTTE, R.; NICOSIA, V.; LATORA, V. Maximal-entropy random walks in complex networks with limited information. *Physical Review E*, v. 83, p. 030103, 2011. doi: 10.1103/PhysRevE.83.030103.
- 38 ECHENIQUE, P.; GÓMEZ-GARDEÑES, J.; MORENO, Y. Dynamics of jamming transitions in complex networks. *Europhysics Letters*, v. 71, n. 2, p. 325, 2005. doi: 10.1209/epl/i2005-10080-8.
- 39 CASTELLANO, C.; FORTUNATO, S.; LORETO, V. Statistical physics of social dynamics. *Reviews of Modern Physics*, v. 81, n. 2, p. 591, 2009. doi: 10.1103/RevModPhys.81.591.
- 40 GIRVAN, M.; NEWMAN, M. E. J. Community structure in social and biological networks. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, v. 99, n. 12, p. 7821–7826, 2002. doi: 10.1073/pnas.122653799.
- 41 WASSERMAN, S.; FAUST, K. *Social network analysis: methods and applications*. Cambridge: Cambridge University Press, 1994.
- 42 LANCICHINETTI, A.; FORTUNATO, S. Benchmarks for testing community detection algorithms on directed and weighted graphs with overlapping communities. *Physical Review E*, v. 80, p. 016118, 2009. doi: 10.1103/PhysRevE.80.016118.
- 43 GÓMEZ, S.; JENSEN, P.; ARENAS, A. Analysis of community structure in networks of correlated data. *Physical Review E*, v. 80, p. 016114, 2009. doi: 10.1103/PhysRevE.80.016114.
- 44 FARKAS, I.; ÁBEL, D.; PALLA, G.; VICSEK, T. Weighted network modules. *New Journal of Physics*, v. 9, n. 6, p. 180, 2007. doi: 10.1088/1367-2630/9/6/180.
- 45 RIVES, A. W.; GALITSKI, T. Modular organization of cellular networks. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, v. 100, n. 3, p. 1128–1133, 2003. doi: 10.1073/pnas.0237338100.

- 46 SPIRIN, V.; MIRNY, L. A. Protein complexes and functional modules in molecular networks. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, v. 100, n. 21, p. 12123–12128, 2003. doi: 10.1073/pnas.2032324100.
- 47 CHEN, J.; YUAN, B. Detecting functional modules in the yeast protein–protein interaction network. *Bioinformatics*, v. 22, n. 18, p. 2283–2290, 2006. doi: 10.1093/bioinformatics/btl370.
- 48 LEWIS, A. C.; JONES, N. S.; PORTER, M. A.; DEANE, C. M. The function of communities in protein interaction networks at multiple scales. *BMC Systems Biology*, v. 4, n. 1, p. 1, 2010. doi: 10.1186/1752-0509-4-100.
- 49 SPORNS, O.; BETZEL, R. F. Modular brain networks. *Annual Review of Psychology*, v. 67, p. 613–640, 2016. doi: 10.1146/annurev-psych-122414-033634.
- 50 MEUNIER, D.; LAMBIOTTE, R.; BULLMORE, E. T. Modular and hierarchically modular organization of brain networks. *Frontiers in Neuroscience*, v. 4, p. 200, 2010. doi: 10.3389/fnins.2010.00200.
- 51 GALLOS, L. K.; MAKSE, H. A.; SIGMAN, M. A small world of weak ties provides optimal global integration of self-similar modules in functional brain networks. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, v. 109, p. 2825–2830, 2012. doi: 10.1073/pnas.1106612109.
- 52 BULLMORE, E.; SPORNS, O. The economy of brain network organization. *Nature Reviews Neuroscience*, v. 13, p. 336–349, 2012. doi: doi:10.1038/nrn3214.
- 53 RAVASZ, E.; SOMERA, A. L.; MONGRU, D. A.; OLTVAI, Z. N.; BARABÁSI, A.-L. Hierarchical organization of modularity in metabolic networks. *Science*, v. 297, n. 5586, p. 1551–1555, 2002. doi: 10.1126/science.1073374.
- 54 GUIMERA, R.; AMARAL, L. A. N. Functional cartography of complex metabolic networks. *Nature*, v. 433, n. 7028, p. 895–900, 2005. doi: 10.1038/nature03288.
- 55 GUIMERA, R.; AMARAL, L. A. N. Cartography of complex networks: modules and universal roles. *Journal of Statistical Mechanics*, v. 2005, n. 02, p. P02001, 2005. doi: 10.1088/1742-5468/2005/02/P02001.
- 56 HOLME, P.; HUSS, M.; JEONG, H. Subnetwork hierarchies of biochemical pathways. *Bioinformatics*, v. 19, n. 4, p. 532–538, 2003. doi: 10.1093/bioinformatics/btg033.
- 57 BLONDEL, V. D.; GUILLAUME, J.-L.; LAMBIOTTE, R.; LEFEBVRE, E. Fast unfolding of communities in large networks. *Journal of Statistical Mechanics*, v. 2008, n. 10, p. P10008, 2008. doi: 10.1088/1742-5468/2008/10/P10008.
- 58 TRAUD, A. L.; KELSIC, E. D.; MUCHA, P. J.; PORTER, M. A. Comparing community structure to characteristics in online collegiate social networks. *SIAM Review*, v. 53, n. 3, p. 526–543, 2011. doi: 10.1137/080734315.
- 59 GUIMERA, R.; DANON, L.; DIAZ-GUILERA, A.; GIRALT, F.; ARENAS, A. Self-similar community structure in a network of human interactions. *Physical Review E*, v. 68, n. 6, p. 065103, 2003. doi: 10.1103/PhysRevE.68.065103.

- 60 LIU, Z.; HU, B. Epidemic spreading in community networks. *Europhysics Letters*, v. 72, n. 2, p. 315, 2005. doi: 10.1209/epl/i2004-10550-5.
- 61 SALATHÉ, M.; JONES, J. H. Dynamics and control of diseases in networks with community structure. *PLoS Computational Biology*, v. 6, n. 4, p. e1000736, 2010. doi: 10.1371/journal.pcbi.1000736.
- 62 BONACCORSI, S.; OTTAVIANO, S.; PELLEGRINI, F. D.; SOCIEVOLE, A.; MIEGHEM, P. V. Epidemic outbreaks in two-scale community networks. *Physical Review E*, v. 90, n. 1, p. 012810, 2014. doi: 10.1103/PhysRevE.90.012810.
- 63 HUANG, W.; LI, C. Epidemic spreading in scale-free networks with community structure. *Journal of Statistical Mechanics*, v. 2007, n. 01, p. P01014, 2007. doi: 10.1088/1742-5468/2007/01/P01014.
- 64 ARENAS, A.; DÍAZ-GUILERA, A.; PÉREZ-VICENTE, C. J. Synchronization reveals topological scales in complex networks. *Physical Review Letters*, v. 96, n. 11, p. 114102, 2006. doi: 10.1103/PhysRevLett.96.114102.
- 65 OH, E.; CHOI, C.; KAHNG, B.; KIM, D. Modular synchronization in complex networks with a gauge kuramoto model. *Europhysics Letters*, v. 83, n. 6, p. 68003, 2008. doi: 10.1209/0295-5075/83/68003.
- 66 ARENAS, A.; DIAZ-GUILERA, A.; PÉREZ-VICENTE, C. J. Synchronization processes in complex networks. *Physica D*, v. 224, n. 1, p. 27–34, 2006. doi: 10.1016/j.physd.2006.09.029.
- 67 YAN, G.; FU, Z.-Q.; REN, J.; WANG, W.-X. Collective synchronization induced by epidemic dynamics on complex networks with communities. *Physical Review E*, v. 75, n. 1, p. 016108, 2007. doi: 10.1103/PhysRevE.75.016108.
- 68 GOMEZ, S.; DIAZ-GUILERA, A.; GOMEZ-GARDEÑES, J.; PEREZ-VICENTE, C. J.; MORENO, Y.; ARENAS, A. Diffusion dynamics on multiplex networks. *Physical Review Letters*, v. 110, n. 2, p. 028701, 2013. doi: 10.1103/PhysRevLett.110.028701.
- 69 ONNELA, J.-P.; SARAMÄKI, J.; HYVÖNEN, J.; SZABÓ, G.; LAZER, D.; KASKI, K.; KERTÉSZ, J.; BARABÁSI, A.-L. Structure and tie strengths in mobile communication networks. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, v. 104, n. 18, p. 7332–7336, 2007. doi: 10.1073/pnas.0610245104.
- 70 ROSVALL, M.; BERGSTROM, C. T. Maps of random walks on complex networks reveal community structure. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, v. 105, n. 4, p. 1118–1123, 2008. doi: 10.1073/pnas.0706851105.
- 71 DELVENNE, J.-C.; YALIRAKI, S. N.; BARAHONA, M. Stability of graph communities across time scales. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, v. 107, n. 29, p. 12755–12760, 2010. doi: 10.1073/pnas.0903215107.
- 72 WANG, S.-J.; HILGETAG, C. C.; ZHOU, C. Sustained activity in hierarchical modular neural networks: self-organized criticality and oscillations. *Frontiers in Computational Neuroscience*, v. 5, p. 30, 2011. doi: 10.3389/fncom.2011.00030.

- 73 HÜTT, M.; LESNE, A. Interplay between topology and dynamics in excitation patterns on hierarchical graphs. *Frontiers in Neuroinformatics*, v. 3, p. 28, 2009. doi: 10.3389/neuro.11.028.2009.
- 74 HIZANIDIS, J.; KOUVARIS, N. E.; GORKA, Z.-L.; DÍAZ-GUILERA, A.; ANTONOPOULOS, C. G. Chimera-like states in modular neural networks. *Scientific Reports*, v. 6, p. 19845, 2016. doi: 10.1038/srep19845.
- 75 KAISER, M.; HILGETAG, C. C. Nonoptimal component placement, but short processing paths, due to long-distance projections in neural systems. *PLoS Computational Biology*, v. 2, n. 7, p. 95, 2006. doi: 10.1371/journal.pcbi.0020095.
- 76 CHEN, Y.; WANG, S.; HILGETAG, C. C.; ZHOU, C. Trade-off between multiple constraints enables simultaneous formation of modules and hubs in neural systems. *PLoS Computational Biology*, v. 9, n. 3, p. e1002937, 2013. doi: 10.1371/journal.pcbi.1002937.
- 77 LOVÁSZ, L. *Random walks on graphs: a survey*. Hungary: Janos Bolyai Mathematical Society, 1993. v. 1. (Combinatorics, Paul Erdos is Eighty, v. 1).
- 78 REICHARDT, J.; BORNHOLDT, S. Statistical mechanics of community detection. *Physical Review E*, v. 74, n. 1, p. 016110, 2006. doi: 10.1103/PhysRevE.74.016110.
- 79 GERSTNER, W.; KISTLER, W. M. *Spiking neuron models*. Cambridge: Cambridge University Press, 2002.
- 80 NEWMAN, M. E.; FORREST, S.; BALTHROP, J. Email networks and the spread of computer viruses. *Physical Review E*, v. 66, n. 3, p. 035101, 2002. doi: 10.1103/PhysRevE.66.035101.
- 81 GARLASCHELLI, D.; LOFFREDO, M. I. Patterns of link reciprocity in directed networks. *Physical Review Letters*, v. 93, n. 26, p. 268701, 2004. doi: 10.1103/PhysRevLett.93.268701.
- 82 MARKRAM, H.; MULLER, E.; RAMASWAMY, S.; REIMANN, M. W.; ABDELLAH, M.; SANCHEZ, C. A.; AILAMAKI, A.; ALONSO-NANCLARES, L.; ANTILLE, N.; ARSEVER, S. et al. Reconstruction and simulation of neocortical microcircuitry. *Cell*, v. 163, n. 2, p. 456–492, 2015. doi: 10.1016/j.cell.2015.09.029.
- 83 WHITE, H. C.; BOORMAN, S. A.; BREIGER, R. L. Social structure from multiple networks. i. blockmodels of roles and positions. *American Journal of Sociology*, v. 81, n. 4, p. 730–780, 1976. doi: 10.1086/226141.
- 84 HOLLAND, P. W.; LASKEY, K. B.; LEINHARDT, S. Stochastic blockmodels: first steps. *Social Networks*, v. 5, n. 2, p. 109–137, 1983. doi: 10.1016/0378-8733(83)90021-7.
- 85 NEWMAN, M. E.; LEICHT, E. A. Mixture models and exploratory analysis in networks. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, v. 104, n. 23, p. 9564–9569, 2007. doi: 10.1073/pnas.0610537104.
- 86 RADICCHI, F.; CASTELLANO, C.; CECCONI, F.; LORETO, V.; PARISI, D. Defining and identifying communities in networks. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, v. 101, n. 9, p. 2658–2663, 2004. doi: 10.1073/pnas.0400054101.

- 87 REICHARDT, J.; WHITE, D. R. Role models for complex networks. *European Physical Journal B*, v. 60, n. 2, p. 217–224, 2007. doi: 10.1140/epjb/e2007-00340-y.
- 88 NEWMAN, M.; PEIXOTO, T. P. Generalized communities in networks. *Physical Review Letters*, v. 115, n. 8, p. 088701, 2015. doi: 10.1103/PhysRevLett.115.088701.
- 89 PONS, P.; LATAPY, M. Computing communities in large networks using random walks. In: YOLUM, P. et al. (Ed.) *Computer and information sciences-ISCIS 2005*. Berlin: Springer, 2005. p. 284–293. doi: 10.1007/11569596_31. (Lecture notes in computer science, v. 3733).
- 90 MITROVIĆ, M.; TADIĆ, B. Spectral and dynamical properties in classes of sparse networks with mesoscopic inhomogeneities. *Physical Review E*, v. 80, n. 2, p. 026123, 2009. doi: 10.1103/PhysRevE.80.026123.
- 91 ERDŐS, P.; RÉNYI, A. On the evolution of random graphs. *Publications of the Mathematical Institute of the Hungarian Academy of Sciences*, v. 5, p. 17–61, 1960.
- 92 CONDON, A.; KARP, R. M. Algorithms for graph partitioning on the planted partition model. *Random Structures and Algorithms*, v. 18, n. 2, p. 116–140, 2001. doi: 10.1002/1098-2418(200103)18:2<116::AID-RSA1001>3.0.CO;2-2.
- 93 CLAUSET, A.; SHALIZI, C. R.; NEWMAN, M. E. J. Power-law distributions in empirical data. *SIAM Review*, v. 51, n. 4, p. 661–703, 2009. doi: 10.1137/070710111.
- 94 NEWMAN, M. E. J. Power laws, pareto distributions and zipf’s law. *Contemporary Physics*, v. 46, p. 323–351, 2005. doi: 10.1080/00107510500052444.
- 95 LANCICHINETTI, A.; FORTUNATO, S.; RADICCHI, F. Benchmark graphs for testing community detection algorithms. *Physical Review E*, v. 78, n. 4, p. 046110, 2008. doi: 10.1103/PhysRevE.78.046110.
- 96 BARTHÉLEMY, M. Spatial networks. *Physics Reports*, v. 499, n. 1-3, p. 1–101, 2011. doi: 10.1016/j.physrep.2010.11.002.
- 97 KÖTTER, R. Online retrieval, processing, and visualization of primate connectivity data from the cocomac database. *Neuroinformatics*, v. 2, n. 2, p. 127–144, 2004. doi: 10.1385/NI:2:2:127.
- 98 FELLEMAN, D. J.; ESSEN, D. C. V. Distributed hierarchical processing in the primate cerebral cortex. *Cerebral Cortex*, v. 1, n. 1, p. 1–47, 1991. doi: 10.1093/cercor/1.1.1.
- 99 CARMICHAEL, S. T.; PRICE, J. L. Architectonic subdivision of the orbital and medial prefrontal cortex in the macaque monkey. *Journal of Comparative Neurology*, v. 346, n. 3, p. 366–402, 1994. doi: 10.1002/cne.903460305.
- 100 LEWIS, J. W.; ESSEN, D. C. V. Mapping of architectonic subdivisions in the macaque monkey, with emphasis on parieto-occipital cortex. *Journal of Comparative Neurology*, v. 428, n. 1, p. 79–111, 2000. doi: 10.1002/1096-9861(20001204)428:1<79::AID-CNE7>3.0.CO;2-Q.

- 101 WHITE, J.; SOUTHGATE, E.; THOMSON, J.; BRENNER, S. The structure of the nervous system of the nematode *caenorhabditis elegans*: the mind of a worm. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, v. 314, p. 1–340, 1986. doi: 10.1098/rstb.1986.0056.
- 102 HALL, D. H.; RUSSELL, R. The posterior nervous system of the nematode *caenorhabditis elegans*: serial reconstruction of identified neurons and complete pattern of synaptic interactions. *Journal of Neuroscience*, v. 11, n. 1, p. 1–22, 1991.
- 103 CHEN, B. L.; HALL, D. H.; CHKLOVSKII, D. B. Wiring optimization can relate neuronal structure and function. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, v. 103, n. 12, p. 4723–4728, 2006. doi: 10.1073/pnas.0506806103.
- 104 VARSHNEY, L. R.; CHEN, B. L.; PANIAGUA, E.; HALL, D. H.; CHKLOVSKII, D. B. Structural properties of the *c. elegans* neuronal network. *PLoS Computational Biology*, v. 7, n. 2, p. 1–21, 2011. doi: 10.1371/journal.pcbi.1001066.
- 105 HIDA, T. *Brownian motion*. New York: Springer, 1980.
- 106 KAMPEN, N. G. V. *Stochastic processes in physics and chemistry*. Netherlands: Elsevier, 1992.
- 107 BEN-AVRAHAM, D.; HAVLIN, S. *Diffusion and reactions in fractals and disordered systems*. Cambridge: Cambridge University Press, 2000.
- 108 HUGHES, B. D. *Random walks and random environments*: random walks. Oxford: Clarendon Press, 1996. v. 1.
- 109 BERG, H. C. *Random walks in biology*. Princeton: Princeton University Press, 1993.
- 110 CODLING, E. A.; PLANK, M. J.; BENHAMOU, S. Random walk models in biology. *Journal of the Royal Society Interface*, v. 5, n. 25, p. 813–834, 2008. doi: 10.1098/rsif.2008.0014.
- 111 ALDOUS, D.; FILL, J. Reversible Markov chains and random walks on graphs. 2002. Disponível em: <<https://www.stat.berkeley.edu/~aldous/RWG/book.html>>. Acesso em: 16 de Janeiro de 2016.
- 112 NOH, J. D.; RIEGER, H. Random walks on complex networks. *Physical Review Letters*, v. 92, p. 118701, 2004. doi: 10.1103/PhysRevLett.92.118701.
- 113 SAMUKHIN, A. N.; DOROGOVTSSEV, S. N.; MENDES, J. F. F. Laplacian spectra of, and random walks on, complex networks: are scale-free architectures really important? *Physical Review E*, v. 77, p. 036115, 2008. doi: 10.1103/PhysRevE.77.036115.
- 114 BRAY, A. J.; RODGERS, G. J. Diffusion in a sparsely connected space: a model for glassy relaxation. *Physical Review B*, v. 38, p. 11461–11470, 1988. doi: 10.1103/PhysRevB.38.11461.
- 115 LAMBIOTTE, R.; DELVENNE, J.-C.; BARAHONA, M. Random walks, markov processes and the multiscale modular organization of complex networks. *IEEE Transactions on Network Science and Engineering*, v. 1, n. 2, p. 76–90, 2014. doi: 10.1109/TNSE.2015.2391998.

- 116 CONDAMIN, S.; BÉNICHOU, O.; TEJEDOR, V.; VOITURIEZ, R.; KLAFTER, J. First-passage times in complex scale-invariant media. *Nature*, v. 450, n. 7166, p. 77–80, 2007. doi: 10.1038/nature06201.
- 117 GFELLER, D.; RIOS, P. D. L. Spectral coarse graining of complex networks. *Physical Review Letters*, v. 99, p. 038701, 2007. doi: 10.1103/PhysRevLett.99.038701.
- 118 JESPERSEN, S.; SOKOLOV, I. M.; BLUMEN, A. Relaxation properties of small-world networks. *Physical Review E*, v. 62, p. 4405–4408, 2000. doi: 10.1103/PhysRevE.62.4405.
- 119 BURDA, Z.; DUDA, J.; LUCK, J. M.; WACLAW, B. Localization of the maximal entropy random walk. *Physical Review Letters*, v. 102, p. 160602, 2009. doi: 10.1103/PhysRevLett.102.160602.
- 120 PERKINS, T. J.; FOXALL, E.; GLASS, L.; EDWARDS, R. A scaling law for random walks on networks. *Nature Communications*, v. 5, p. 5121, 2014. doi: 10.1038/ncomms6121.
- 121 NORRIS, J. R. *Markov chains*. Cambridge: Cambridge University Press, 1998.
- 122 MEYER, C. D. *Matrix analysis and applied linear algebra*. Philadelphia: Siam, 2000.
- 123 PRESS, W. H. *Numerical recipes: the art of scientific computing*. 3rd ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2007.
- 124 FORTUNATO, S.; BOGUÑÁ, M.; FLAMMINI, A.; MENCZER, F. On local estimations of pagerank: a mean field approach. *Internet Mathematics*, v. 4, p. 245–266, 2009. doi: 10.1080/15427951.2007.10129294.
- 125 ZLATIC, V.; GABRIELLI, A.; CALDARELLI, G. Topologically biased random walk and community finding in networks. *Physical Review E*, v. 82, n. 6, p. 066109, 2010. doi: 10.1103/PhysRevE.82.066109.
- 126 GÓMEZ-GARDEÑES, J.; LATORA, V. Entropy rate of diffusion processes on complex networks. *Physical Review E*, v. 78, n. 6, p. 065102, 2008. doi: 10.1103/PhysRevE.78.065102.
- 127 BIANCONI, G.; BARABÁSI, A.-L. Competition and multiscaling in evolving networks. *Europhysics Letters*, v. 54, n. 4, p. 436, 2001. doi: 10.1209/epl/i2001-00260-6.
- 128 CALDARELLI, G.; CAPOCCI, A.; RIOS, P. D. L.; MUNOZ, M. A. Scale-free networks from varying vertex intrinsic fitness. *Physical Review Letters*, v. 89, n. 25, p. 258702, 2002. doi: 10.1103/PhysRevLett.89.258702.
- 129 LEE, S.; YOOK, S.-H.; KIM, Y. Centrality measure of complex networks using biased random walks. *European Physical Journal B*, v. 68, n. 2, p. 277–281, 2009. doi: 10.1140/epjb/e2009-00095-5.
- 130 BONAVENTURA, M.; NICOSIA, V.; LATORA, V. Characteristic times of biased random walks on complex networks. *Physical Review E*, v. 89, n. 1, p. 012803, 2014. doi: 10.1103/PhysRevE.89.012803.

- 131 ELIASMITH, C.; STEWART, T. C.; CHOO, X.; BEKOLAY, T.; DEWOLF, T.; TANG, Y.; RASMUSSEN, D. A large-scale model of the functioning brain. *Science*, v. 338, n. 6111, p. 1202–1205, 2012. doi: 10.1126/science.1225266.
- 132 SHARP, T.; PETERSEN, R.; FURBER, S. Real-time million-synapse simulation of rat barrel cortex. *Frontiers in Neuroscience*, v. 8, p. 131, 2014. doi: 10.3389/fnins.2014.00131.
- 133 YUSTE, R. From the neuron doctrine to neural networks. *Nature Reviews Neuroscience*, v. 16, n. 8, p. 487–497, 2015. doi: 10.1038/nrn3962.
- 134 HODGKIN, A. L.; HUXLEY, A. F. A quantitative description of ion currents and its applications to conduction and excitation in nerve membranes. *Journal of Physiology*, v. 117, n. 4, p. 500–544, 1952.
- 135 ROSE, R. M.; HINDMARSH, J. L. The assembly of ionic currents in a thalamic neuron. i the three-dimensional model. *Proceedings of the Royal Society B*, v. 237, n. 1288, p. 267–288, 1989. doi: 10.1098/rspb.1989.0049.
- 136 MORRIS, C.; LECAR, H. Voltage oscillations in the barnacle giant muscle fiber. *Biophysical Journal*, v. 35, n. 1, p. 193–213, 1981. doi: 10.1016/S0006-3495(81)84782-0.
- 137 FITZHUGH, R. Impulses and physiological states in theoretical models of nerve membrane. *Biophysical Journal*, v. 1, n. 6, p. 445–466, 1961. doi: 10.1016/S0006-3495(61)86902-6.
- 138 IZHIKEVICH, E. M. et al. Simple model of spiking neurons. *IEEE Transactions on Neural Networks*, v. 14, n. 6, p. 1569–1572, 2003. doi: 10.1109/TNN.2003.820440.
- 139 IZHIKEVICH, E. M. Which model to use for cortical spiking neurons? *IEEE Transactions on Neural Networks*, v. 15, n. 5, p. 1063–1070, 2004. doi: 10.1109/TNN.2004.832719.
- 140 LAPICQUE, L. Recherches quantitatives sur l’excitation électrique des nerfs traitée comme une polarization. *Journal de Physiologie et de Pathologie Générale*, v. 9, n. 6, p. 620–635, 1907.
- 141 BRUNEL, N.; ROSSUM, M. C. W. V. Quantitative investigations of electrical nerve excitation treated as polarization. *Biological Cybernetics*, v. 97, n. 5, p. 341–349, 2007. doi: 10.1007/s00422-007-0189-6.
- 142 RIEKE, F.; WARLAND, D.; STEVENINCK, R. d. R. van; BIALEK, W. *Spikes: exploring the neural code*. Cambridge: The MIT Press, 1999.
- 143 BRUNEL, N. Dynamics of sparsely connected networks of excitatory and inhibitory spiking neurons. *Journal of Computational Neuroscience*, v. 8, n. 3, p. 183–208, 2000. doi: 10.1023/A:1008925309027.
- 144 BRUNEL, N.; HAKIM, V. Fast global oscillations in networks of integrate-and-fire neurons with low firing rates. *Neural Computation*, v. 11, n. 7, p. 1621–1671, 1999. doi: 10.1162/089976699300016179.

- 145 VOGELS, T. P.; RAJAN, K.; ABBOTT, L. Neural network dynamics. *Annual Review of Neuroscience*, v. 28, p. 357–376, 2005. doi: 10.1146/annu-rev.neuro.28.061604.135637.
- 146 ROXIN, A. The role of degree distribution in shaping the dynamics in networks of sparsely connected spiking neurons. *Frontiers in Computational Neuroscience*, v. 5, n. 8, p. 10–3389, 2011. doi: 10.3389/fncom.2011.00008.
- 147 ROXIN, A.; BRUNEL, N.; HANSEL, D.; MONGILLO, G.; VREESWIJK, C. van. On the distribution of firing rates in networks of cortical neurons. *Journal of Neuroscience*, v. 31, n. 45, p. 16217–16226, 2011. doi: 10.1523/JNEUROSCI.1677-11.2011.
- 148 COMIN, C. H.; BATISTA, J. L. B.; VIANA, M. P.; COSTA, L. D. F.; TRAVENCOLO, B. A. N.; KAISER, M. Structure and dynamics: the transition from nonequilibrium to equilibrium in integrate-and-fire dynamics. *International Journal of Bifurcation and Chaos*, v. 22, n. 07, p. 1250174, 2012. doi: 10.1142/S021812741250174X.
- 149 KINOUCI, O.; COPELLI, M. Optimal dynamical range of excitable networks at criticality. *Nature Physics*, v. 2, n. 5, p. 348–351, 2006. doi: 10.1038/nphys289.
- 150 WANG, X.-J. Persistent neural activity: experiments and theory. *Cerebral Cortex*, v. 13, n. 11, p. 1123–1123, 2003. doi: 10.1093/cercor/bhg112.
- 151 WANG, Q.; DUAN, Z.; PERC, M.; CHEN, G. Synchronization transitions on small-world neuronal networks: effects of information transmission delay and rewiring probability. *Europhysics Letters*, v. 83, n. 5, p. 50008, 2008. doi: 10.1209/0295-5075/83/50008.
- 152 PERC, M. Stochastic resonance on excitable small-world networks via a pacemaker. *Physical Review E*, v. 76, p. 066203, 2007. doi: 10.1103/PhysRevE.76.066203.
- 153 MONTBRIÓ, E.; PAZÓ, D.; ROXIN, A. Macroscopic description for networks of spiking neurons. *Physical Review X*, v. 5, n. 2, p. 021028, 2015. doi: 10.1103/PhysRevX.5.021028.
- 154 COSTA, L. F. *Avalanches of activation and spikes in neuronal complex networks*. 2008. Disponível em: <<http://arxiv.org/pdf/0802.0421v1.pdf>>. Acesso em: 15 mar. 2015.
- 155 MCCULLOCH, W.; PITTS, W. A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity. *Bulletin of Mathematical Biology*, v. 5, n. 4, p. 115–133, 1943. doi: 10.1007/BF02478259.
- 156 COMIN, C. H.; VIANA, M. P.; ANTIQUEIRA, L.; COSTA, L. da F. Random walks in directed modular networks. *Journal of Statistical Mechanics*, v. 2014, n. 12, p. P12003, 2014. doi: 10.1088/1742-5468/2014/12/P12003.
- 157 LANGVILLE, A. N.; MEYER, C. D. *Google's PageRank and beyond: the science of search engine rankings*. Princeton: Princeton University Press, 2006.
- 158 RAJ, A.; KUČEYESKI, A.; WEINER, M. A network diffusion model of disease progression in dementia. *Neuron*, v. 73, n. 6, p. 1204–1215, 2012. doi: 10.1016/j.neuron.2011.12.040.

- 159 RAJ, A.; LOCASTRO, E.; KUCEYESKI, A.; TOSUN, D.; RELKIN, N.; WEINER, M. Network diffusion model of progression predicts longitudinal patterns of atrophy and metabolism in alzheimer s disease. *Cell Reports*, v. 10, n. 3, p. 359–369, 2015. doi: 10.1016/j.celrep.2014.12.034.
- 160 ABDELNOUR, F.; MUELLER, S.; RAJ, A. Relating cortical atrophy in temporal lobe epilepsy with graph diffusion-based network models. *PLoS Computational Biology*, v. 11, n. 10, p. e1004564, 2015. doi: 10.1371/journal.pcbi.1004564.
- 161 ABDELNOUR, F.; VOSS, H. U.; RAJ, A. Network diffusion accurately models the relationship between structural and functional brain connectivity networks. *Neuroimage*, v. 90, p. 335–347, 2014. doi: 10.1016/j.neuroimage.2013.12.039.
- 162 FRISTON, K. J.; HARRISON, L.; PENNY, W. Dynamic causal modelling. *Neuroimage*, v. 19, n. 4, p. 1273–1302, 2003. doi: doi:10.1016/S1053-8119(03)00202-7.
- 163 SMITH, S. M.; MILLER, K. L.; SALIMI-KHORSHIDI, G.; WEBSTER, M.; BECKMANN, C. F.; NICHOLS, T. E.; RAMSEY, J. D.; WOOLRICH, M. W. Network modelling methods for fmri. *Neuroimage*, v. 54, n. 2, p. 875–891, 2011. doi: 10.1016/j.neuroimage.2010.08.063.
- 164 LEICHT, E. A.; NEWMAN, M. E. J. Community structure in directed networks. *Physical Review Letters*, v. 100, p. 118703, 2008. doi: 10.1103/PhysRevLett.100.118703.
- 165 SUGRUE, L. P.; CORRADO, G. S.; NEWSOME, W. T. Choosing the greater of two goods: neural currencies for valuation and decision making. *Nature Reviews Neuroscience*, v. 6, n. 5, p. 363–375, 2005. doi: 10.1038/nrn1666.
- 166 KAMADA, T.; KAWAI, S. An algorithm for drawing general undirected graphs. *Information Processing Letters*, v. 31, n. 1, p. 7–15, 1989. doi: 10.1016/0020-0190(89)90102-6.
- 167 THADAKAMALLA, H.; ALBERT, R.; KUMARA, S. Search in spatial scale-free networks. *New Journal of Physics*, v. 9, n. 6, p. 190, 2007. doi: 10.1088/1367-2630/9/6/190.
- 168 BOGUNA, M.; KRIOUKOV, D.; CLAFFY, K. C. Navigability of complex networks. *Nature Physics*, v. 5, n. 1, p. 74–80, 2009. doi: 10.1038/nphys1130.
- 169 GUIMERÀ, R.; MOSSA, S.; TURTSCHI, A.; AMARAL, L. N. The worldwide air transportation network: anomalous centrality, community structure, and cities' global roles. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, v. 102, n. 22, p. 7794–7799, 2005. doi: 10.1073/pnas.0407994102.
- 170 AMIT, D. J.; BRUNEL, N. Model of global spontaneous activity and local structured activity during delay periods in the cerebral cortex. *Cerebral Cortex*, v. 7, n. 3, p. 237–252, 1997. doi: 10.1093/cercor/7.3.237.
- 171 HANSEL, D.; MATO, G. Existence and stability of persistent states in large neuronal networks. *Physical Review Letters*, v. 86, n. 18, p. 4175, 2001. doi: 10.1103/PhysRevLett.86.4175.

- 172 AMARAL, L. A. N.; SCALA, A.; BARTHELEMY, M.; STANLEY, H. E. Classes of small-world networks. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, v. 97, n. 21, p. 11149–11152, 2000. doi: 10.1073/pnas.200327197.
- 173 MOSSA, S.; BARTHELEMY, M.; STANLEY, H. E.; AMARAL, L. A. N. Truncation of power law behavior in scale-free network models due to information filtering. *Physical Review Letters*, v. 88, n. 13, p. 138701, 2002. doi: 10.1103/PhysRevLett.88.138701.
- 174 BOGUNÁ, M.; PASTOR-SATORRAS, R.; VESPIGNANI, A. Cut-offs and finite size effects in scale-free networks. *European Physical Journal B*, v. 38, n. 2, p. 205–209, 2004. doi: 10.1140/epjb/e2004-00038-8.
- 175 KOCH, C. *Biophysics of computation: information processing in single neurons*. New York: Oxford University Press, 1999.
- 176 SCHÜZ, A.; PALM, G. Density of neurons and synapses in the cerebral cortex of the mouse. *Journal of Comparative Neurology*, v. 286, n. 4, p. 442–455, 1989. doi: 10.1002/cne.902860404.
- 177 ABBOTT, L. F.; VREESWIJK, C. V. Asynchronous states in networks of pulse-coupled oscillators. *Physical Review E*, v. 48, p. 1483–1490, 1993. doi: 10.1103/PhysRevE.48.1483.
- 178 FUSI, S.; MATTIA, M. Collective behavior of networks with linear (vlsi) integrate-and-fire neurons. *Neural Computation*, v. 11, n. 3, p. 633–652, 1999. doi: 10.1162/089976699300016601.
- 179 NYKAMP, D. Q.; TRANCHINA, D. A population density approach that facilitates large-scale modeling of neural networks: analysis and an application to orientation tuning. *Journal of Computational Neuroscience*, v. 8, n. 1, p. 19–50, 2000. doi: 10.1023/A:1008912914816.
- 180 KARRER, B.; NEWMAN, M. E. Stochastic blockmodels and community structure in networks. *Physical Review E*, v. 83, n. 1, p. 016107, 2011. doi: 10.1103/PhysRevE.83.016107.
- 181 REICHARDT, J.; BORNHOLDT, S. Detecting fuzzy community structures in complex networks with a potts model. *Physical Review Letters*, v. 93, n. 21, p. 218701, 2004. doi: 10.1103/PhysRevLett.93.218701.
- 182 SOHN, Y.; CHOI, M.-K.; AHN, Y.-Y.; LEE, J.; JEONG, J. Topological cluster analysis reveals the systemic organization of the caenorhabditis elegans connectome. *PLoS Computational Biology*, v. 7, n. 5, p. e1001139, 2011. doi: 10.1371/journal.pcbi.1001139.
- 183 ARENAS, A.; FERNÁNDEZ, A.; GÓMEZ, S. A complex network approach to the determination of functional groups in the neural system of c. elegans. In: LIÒ, P. et al (Ed.) *Bio-inspired computing and communication*. Cambridge: Springer, 2008. p. 9–18. doi: 10.1007/978-3-540-92191-2_2. (Lecture notes in computer science, v. 5151).
- 184 PAVLOVIC, D. M.; VÉRTES, P. E.; BULLMORE, E. T.; SCHAFER, W. R.; NICHOLS, T. E. Stochastic blockmodeling of the modules and core of the caenorhabditis elegans connectome. *PloS One*, v. 9, n. 7, p. e97584, 2014. doi: 10.1371/journal.pone.0097584.

- 185 HUMPHRIES, M. D.; GURNEY, K.; PRESCOTT, T. J. The brainstem reticular formation is a small-world, not scale-free, network. *Proceedings of the Royal Society of London B*, v. 273, n. 1585, p. 503–511, 2006. doi: 10.1098/rspb.2005.3354.
- 186 LAUGHLIN, S. B.; SEJNOWSKI, T. J. Communication in neuronal networks. *Science*, v. 301, n. 5641, p. 1870–1874, 2003. doi: 10.1126/science.1089662.
- 187 CHKLOVSKII, D. B.; SCHIKORSKI, T.; STEVENS, C. F. Wiring optimization in cortical circuits. *Neuron*, v. 34, n. 3, p. 341–347, 2002. doi: 10.1016/S0896-6273(02)00679-7.
- 188 BUZSÁKI, G.; GEISLER, C.; HENZE, D. A.; WANG, X.-J. Interneuron diversity series: circuit complexity and axon wiring economy of cortical interneurons. *Trends in Neurosciences*, v. 27, n. 4, p. 186–193, 2004. doi: 10.1016/j.tins.2004.02.007.
- 189 KAISER, M.; HILGETAG, C. C. Modelling the development of cortical systems networks. *Neurocomputing*, v. 58, p. 297–302, 2004. doi: 10.1016/j.neucom.2004.01.059.
- 190 CHERNIAK, C.; MOKHTARZADA, Z.; RODRIGUEZ-ESTEBAN, R.; CHANGIZI, K. Global optimization of cerebral cortex layout. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, v. 101, n. 4, p. 1081–1086, 2004. doi: 10.1073/pnas.0305212101.
- 191 LANGTON, C. G. Computation at the edge of chaos: phase transitions and emergent computation. *Physica D*, v. 42, n. 1, p. 12–37, 1990. doi: 10.1016/0167-2789(90)90064-V.
- 192 BEGGS, J. M.; PLENZ, D. Neuronal avalanches in neocortical circuits. *Journal of Neuroscience*, v. 23, n. 35, p. 11167–11177, 2003.
- 193 NEWMAN, M. E. J. Random graphs with clustering. *Physical Review Letters*, v. 103, n. 5, p. 058701, 2009. doi: 10.1103/PhysRevLett.103.058701.
- 194 MILLER, J. C. Percolation and epidemics in random clustered networks. *Physical Review E*, v. 80, n. 2, p. 020901, 2009. doi: 10.1103/PhysRevE.80.020901.
- 195 GLEESON, J. P. Bond percolation on a class of clustered random networks. *Physical Review E*, v. 80, n. 3, p. 036107, 2009. doi: 10.1103/PhysRevE.80.036107.
- 196 GLEESON, J. P.; MELNIK, S.; HACKETT, A. How clustering affects the bond percolation threshold in complex networks. *Physical Review E*, v. 81, n. 6, p. 066114, 2010. doi: 10.1103/PhysRevE.81.066114.
- 197 HACKETT, A.; MELNIK, S.; GLEESON, J. P. Cascades on a class of clustered random networks. *Physical Review E*, v. 83, n. 5, p. 056107, 2011. doi: 10.1103/PhysRevE.83.056107.
- 198 STEIN, R. B.; GOSSEN, E. R.; JONES, K. E. Neuronal variability: noise or part of the signal? *Nature Reviews Neuroscience*, v. 6, n. 5, p. 389–397, 2005. doi: 10.1038/nrn1668.
- 199 MARKRAM, H.; TOLEDO-RODRIGUEZ, M.; WANG, Y.; GUPTA, A.; SILBERBERG, G.; WU, C. Interneurons of the neocortical inhibitory system. *Nature Reviews Neuroscience*, v. 5, n. 10, p. 793–807, 2004. doi: 10.1038/nrn1519.

-
- 200 SCHUSKE, K.; BEG, A. A.; JORGENSEN, E. M. The gaba nervous system in *c. elegans*. *Trends in Neurosciences*, v. 27, n. 7, p. 407–414, 2004. doi: 10.1016/j.tins.2004.05.005.
- 201 SONG, C.; HAVLIN, S.; MAKSE, H. A. Self-similarity of complex networks. *Nature*, v. 433, n. 7024, p. 392–395, 2005. doi: 10.1038/nature03248.
- 202 KIM, J.; GOH, K.-I.; SALVI, G.; OH, E.; KAHNG, B.; KIM, D. Fractality in complex networks: critical and supercritical skeletons. *Physical Review E*, v. 75, n. 1, p. 016110, 2007. doi: 10.1103/PhysRevE.75.016110.
- 203 KOENE, R. A.; TIJMS, B.; HEES, P. van; POSTMA, F.; RIDDER, A. de; RAMAKERS, G. J.; PELT, J. van; OUYEN, A. van. Netmorph: a framework for the stochastic generation of large scale neuronal networks with realistic neuron morphologies. *Neuroinformatics*, v. 7, n. 3, p. 195–210, 2009. doi: 10.1007/s12021-009-9052-3.

APÊNDICE A – Recursos computacionais

Para o desenvolvimento do trabalho, utilizamos a linguagem de programação Python na sua versão 2.7. Foram produzidos 1306 *scripts* para a simulação e análise dos dados, totalizando 207024 linhas de código. Na Tabela A4 apresentamos os principais pacotes Python utilizados nos estudos.

Tabela A4 – Principais pacotes Python utilizados no desenvolvimento das análises.

Pacote	Versão	<i>website</i>
NumPy	1.9.2	< http://www.numpy.org/ >
SciPy	0.16.1	< http://www.scipy.org/ >
Matplotlib	1.4.3	< http://www.matplotlib.org/ >
igraph	0.7.1	< http://www.igraph.org/python/ >
NetworkX	1.9.1	< http://www.networkx.github.io/ >
Brian	1.3.1	< http://www.briansimulator.org/ >

Fonte: Elaborada pelo autor