

Construindo Modelos de Redes Complexas

Maria Teodora Ferreira¹ e Elbert Einstein Nehrer Macau²

¹Programa de Doutorado em Computação Aplicada – CAP
Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais – INPE

²Laboratório Associado de Computação e Matemática Aplicada – LAC
Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais – INPE

mteodoraf25@gmail.com, elbert@lac.inpe.br

Abstract. *Significant advances in the area of complex networks have been witnessed in recent years. In this work we revise up some important concepts of the theory of complex networks, as well as some techniques for the construction of the main models of complex networks.*

Resumo. *Avanços significativos na área de redes complexas têm sido testemunhados nos últimos anos. Neste trabalho revisam-se alguns conceitos importantes da teoria de redes complexas, bem como algumas técnicas para a construção dos principais modelos de redes complexas.*

Palavras-chave: *redes complexas, medidas estruturais e modelos de redes complexas.*

1. Introdução

O mundo está cercado por sistemas complexos, desde células compostas por milhares de moléculas até a sociedade, uma coleção de bilhões de indivíduos interagindo. Compreender, modelar e quantificar esse tipo de sistema é um grande desafio para a ciência [Barabasi 2007].

Entende-se por sistemas complexos aqueles que são formados por um grande número de constituintes que interagem de forma não linear e se relacionam entre si e com o meio ambiente [Barabasi 2007, Mendes 2005]. A modelagem desses sistemas utilizando a teoria de redes complexas é realizada de forma natural e eficiente, devido ao fato de que são formados por partes discretas que se conectam [Rodrigues 2007].

O estudo das redes complexas teve início por volta de 1735 quando Leonard Euler apresentou uma solução para o famoso problema das “Pontes de Königsberg” [Mendes 2005, Rodrigues 2007]. Desde então, a teoria de redes complexas utiliza conceitos provenientes da teoria dos grafos, estatística e sistemas complexos [Amaral and Ottino 2004, Boccaletti et al. 2006, Costa et al. 2007].

Devido a generalidade e o caráter multidisciplinar, a teoria de redes complexas oferece suporte para caracterização, análise e modelagem dos mais variados sistemas complexos sendo utilizada em muitas áreas de pesquisa e podendo ser identificada nas mais diversas situações, como por exemplo, no cérebro o qual é uma enorme rede de neurônios ligados por sinapses [Watts and Strogatz 1998], nas células as quais são redes de moléculas conectadas por reações bioquímicas [Dorogovtsev and Mendes 2003], no controle da atividade genética a qual é devido a uma complexa rede de genes ligadas por proteínas reguladoras [Barabasi and Albert 1999], nas sociedades, em que os vértices da rede são as pessoas (ou organizações de pessoas) entre as quais existem diferentes tipos de relações; Em

maior escala, nas redes de energia, redes de sistemas de transporte [Barabási et al. 2000] e mesmo a linguagem usada para transmitir o pensamento é uma rede de palavras conectadas por relações sintáticas [Barabasi 2007].

Neste trabalho revisam-se alguns conceitos importantes da teoria de redes complexas, bem como apresentam-se algumas técnicas para a construção dos principais modelos de redes complexas.

2. Conceitos Básicos de Redes Complexas

Uma rede complexa é um tipo de grafo que apresenta uma estrutura topológica não-trivial de conexão, composta por um conjunto extremamente elevado de vértices (nós) que são conectados por meio de arestas (conexões, ligações ou *links*) [Barabasi 2007]. A Figura 1 ilustra exemplos de redes complexas.

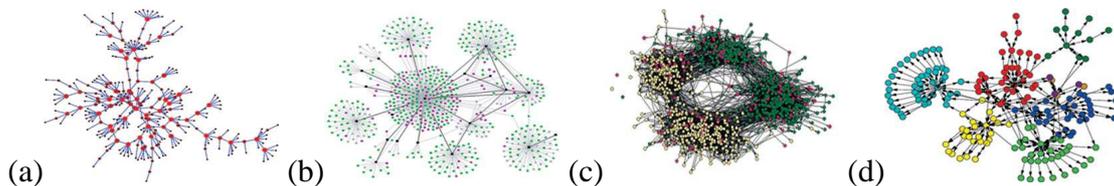


Figura 1. Exemplos de redes complexas: a) rede de contatos sexuais entre indivíduos; b) rede de contágios entre pessoas; c) rede dos amigos numa escola dos Estados Unidos; d) rede de documentos num sítio da Web e ligações entre eles. Figuras retiradas de [Mendes 2005]

A Figura 2 apresenta uma representação esquemática de uma rede composta por 9 vértices e 10 arestas não direcionadas e não ponderadas.

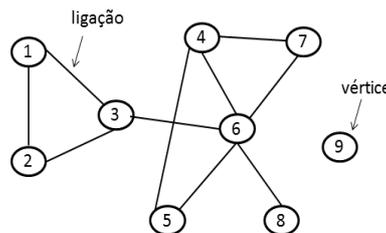


Figura 2. Representação esquemática de uma rede complexa simples.

Matematicamente, uma rede $R = (V, A)$ é formada por um conjunto de N vértices, $V = v_1, v_2, \dots, v_N$ e um conjunto de M arestas, $A = a_1, a_2, \dots, a_M$. O vértice representa uma característica local da rede, podendo ser um documento (web), um computador (internet), um ator (filmes), um gene (biologia) e até mesmo um agente que apresenta uma dinâmica própria (um oscilador, por exemplo).

As arestas estabelecem algum tipo de relação entre dois vértices de acordo com o problema modelado, podendo ser de vários tipos ou intensidades. Podem-se ter arestas direcionadas - quando o sentido de ligação é considerado; não-direcionadas - quando o sentido de ligação não é considerado e, caso as arestas possuam intensidade, a cada aresta é associado um peso w , denominado peso da aresta.

Em uma rede complexa não-direcionada e sem peso, cada aresta é definida por uma par de vértices sendo que dois vértices conectados por uma aresta são chamados de vértices adjacentes.

Pode-se representar matricialmente a estrutura de uma rede complexa através da matriz de adjacência, a qual armazena informações sobre todas as relações de adjacência de uma rede, sendo construída da seguinte forma:

$$(Adj)_{ij} = \begin{cases} 1, & d(v_i, v_j) = 1 \\ 0, & d(v_i, v_j) = 0 \end{cases} \quad (1)$$

Quando $d(v_i, v_j) = 1$ tem-se uma aresta conectando os vértices v_i e v_j , cuja distância d entre esses vértices é normalizada e igual a 1.

A matriz de adjacência da rede da Figura 2 é dada por:

$$Adj = \begin{pmatrix} & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 \\ \begin{array}{l} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \\ 7 \\ 8 \\ 9 \end{array} & \begin{array}{l} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{array} & \begin{array}{l} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{array} & \begin{array}{l} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{array} & \begin{array}{l} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{array} & \begin{array}{l} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{array} & \begin{array}{l} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{array} & \begin{array}{l} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{array} & \begin{array}{l} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{array} & \begin{array}{l} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{array} \end{pmatrix}$$

3. Medidas Estruturais em Redes Complexas

A caracterização da estrutura de uma rede complexa, a partir do cálculo de medidas de análise, é fundamental em diversos ramos da ciência e fornece informações relevantes com relação aos mecanismos da rede, bem como do problema modelado. Essa caracterização é fundamental não só para a descrição da estrutura das ligações e interrelações entre seus elementos, mas também para a compreensão dos mecanismos evolutivos que governam o crescimento da rede. A seguir, apresenta-se algumas das principais medidas quando considera-se uma rede não direcionada e sem peso.

3.1. Grau

O grau k_i de um vértice v_i é o número de arestas incidentes a esse vértice, e é definido em termos da matriz de adjacência como:

$$k_i = \sum_{j=1}^N a_{ij}. \quad (2)$$

O grau médio de uma rede é a média de k_i para todos vértices na rede, sendo pois uma medida global da conectividade da rede.

A sequência de graus da rede da Figura 2 é dada por $k_i = (2 \ 2 \ 3 \ 3 \ 2 \ 5 \ 2 \ 1 \ 0)$ e o grau médio é dado por $\langle k \rangle = 2.2222$.

3.2. Coeficiente de Agrupamento

Uma forma de caracterizar a presença de loops de ordem três. Dois coeficientes de agrupamento diferentes são frequentemente calculados. O primeiro, também conhecido como transitividade, baseia-se na seguinte equação:

$$T = \frac{3N_{\Delta}}{N_3}, \quad (3)$$

onde N_{Δ} é o número de triângulos na rede e N_3 é o número de conectividades triplas. O fator três ocorre devido ao fato de que cada triângulo pode ser visto como consistindo de três diferentes conectividades triplas, um com cada um dos vértices como vértice central, e assegura que $0 \leq T \leq 1$.

O outro coeficiente é o coeficiente de agrupamento local, dado por:

$$C_i = \frac{N_{\Delta}(i)}{N_3(i)}, \quad (4)$$

onde $N_{\Delta}(i)$ é o número de triângulos envolvendo o vértice i e $N_3(i)$ é o número de conexões triplas tendo i como o vértice central. Para os vértices com grau 0 ou 1, para o qual tanto o numerador e o denominador são zero, considera-se $C_i = 0$.

O coeficiente de agrupamento médio é dado por:

$$C = \frac{1}{N} \sum_i C_i. \quad (5)$$

A transitividade e o coeficiente de agrupamento médio da rede da Figura 2 são dados por $T = 0.2143$ e $C = 0.5778$, respectivamente.

3.3. Medidas relacionadas com distância

A distância entre os vértices é um fator importante que está relacionado ao transporte e comunicação em redes, sendo pois fundamentais no estudo da estrutura e dinâmica de redes reais.

Um caminho entre dois vértices v_i e v_j em uma rede é uma sequência de v_k vértices v_1, \dots, v_k tal que

- $v_i = 1$ e $v_k = v_j$;
- existe uma aresta entre o vértice v_l e o vértice v_{l+1} , tal que $1 \leq v_l \leq v_k$;
- não há repetição de vértices nesta sequência, nem de arestas entre esses vértices.

Pode-se construir uma matriz de distâncias D , cujos elementos d_{ij} expressam o valor do menor caminho entre os vértices v_i e v_j . O valor $d_{max} = \max d_{ij}$ é chamado o diâmetro da rede. A média entre os valores na matriz D exprime o caminho característico da rede (menor caminho médio), sendo calculada por

$$l = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{i \neq j} d_{ij}. \quad (6)$$

A matriz de distância D da rede da Figura 2 é dada por:

$$D = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 3 & 3 & 2 & 3 & 3 & \infty \\ 1 & 0 & 1 & 3 & 3 & 2 & 3 & 3 & \infty \\ 1 & 1 & 0 & 2 & 2 & 1 & 2 & 2 & \infty \\ 3 & 3 & 2 & 0 & 1 & 1 & 1 & 2 & \infty \\ 3 & 3 & 2 & 1 & 0 & 1 & 2 & 2 & \infty \\ 2 & 2 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & \infty \\ 3 & 3 & 2 & 1 & 2 & 1 & 0 & 2 & \infty \\ 3 & 3 & 2 & 0 & 2 & 1 & 2 & 0 & \infty \\ \infty & 0 \end{pmatrix}$$

Um problema na definição de l é que se há vértices desconectados seu valor diverge ($l = \infty$) devido ao fato de que a rede apresenta algum v_i e v_j tal que $d(i, j) = \infty$. Uma possível solução é calcular l para os vértices no qual há um caminho.

Note que a rede da Figura 2 é uma rede não conectada com comprimento do caminho médio $l = 1.9286$ o qual é calculado apenas na parte do componente conectado, sendo que existem dois componentes conectados e diâmetro $d = 3$.

3.4. Medidas de Centralidade

Em redes complexas, quanto maior o número de caminhos em que um vértice ou aresta participa, maior a importância desse vértice ou dessa aresta para a rede.

Assim, assumindo que as interações seguem os caminhos mais curtos entre dois vértices, é possível quantificar a importância de um vértice ou de uma aresta em termos da centralidade de intermediação

$$B_u = \sum_{ij} \frac{\sigma(v_i, v_u, v_j)}{\sigma(v_i, v_j)}, \quad (7)$$

onde $\sigma(v_i, v_u, v_j)$ é o número de caminhos mais curtos entre os vértices v_i e v_j que passam através do vértice ou aresta v_u , $\sigma(v_i, v_j)$ é o número total de caminhos mais curtos entre v_i e v_j , e a soma é sobre todos os pares (v_i, v_j) de vértices distintos.

4. Construindo Redes Complexas

A seguir, apresenta-se a construção dos principais modelos de redes complexas.

4.1. Redes Regulares

O modelo de redes regulares é o mais simples, o qual serve de base para a evolução de modelos mais elaborados. Neste modelo todos os vértices tem o mesmo número de arestas, ou seja, tem o mesmo grau k .

Neste modelo, constrói-se um anel de N vértices, cada um ligado a seus k vizinhos mais próximos por arestas sem direção. A Figura 3 ilustra o modelo de rede regular considerando 10 vértices e alterando-se o grau k .

4.2. Redes Aleatórias

Redes complexas foram pensadas originalmente como sendo completamente aleatórias. Basicamente uma rede aleatória é construída iniciando-se com um conjunto de N vértices

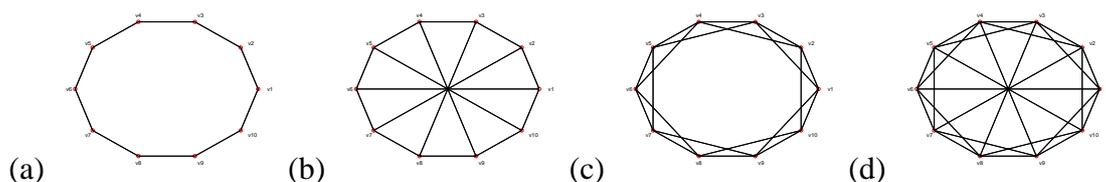


Figura 3. Rede regular considerando 10 vértices e alterando-se o grau k : (a) $k = 2$; (b) $k = 3$; (c) $k = 4$ e (d) $k = 5$.

totalmente desconectados e a cada passo de tempo dois vértices são escolhidos aleatoriamente e conectados com uma probabilidade fixa p ou de acordo com o número m de arestas que se deseja ter na rede.

No modelo de Erdős e Rényi, constrói-se uma rede aleatória tendo N vértices e m arestas. As m arestas são escolhidas uniformemente e aleatoriamente dentre o conjunto de todas as $0 \leq m \leq \frac{N(N-1)}{2}$ arestas equiprováveis possíveis [Erdos and Rényi 1961]. Naturalmente m não deve ser maior do que o número possível de arestas dado por $\frac{N(N-1)}{2}$. A Figura 4 ilustra o modelo de rede aleatória de Erdős e Rényi considerando 10 vértices e alterando-se a quantidade de arestas presentes na rede.

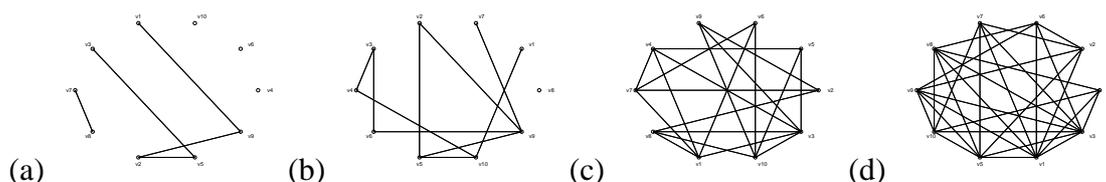


Figura 4. Rede de Erdős e Rényi considerando 10 vértices e alterando-se o número de arestas presentes na rede: (a) $m = 5$; (b) $m = 10$; (c) $m = 20$ e (d) $m = 30$.

No modelo de Gilbert, as arestas possíveis $\frac{N(N-1)}{2}$ de um grafo não-direcionado simples $G(N, p)$ com N vértices são incluídas independentemente com probabilidade $0 < p < 1$. A Figura 5 ilustra o modelo de rede aleatória de Gilbert considerando 10 vértices e alterando-se a probabilidade p .

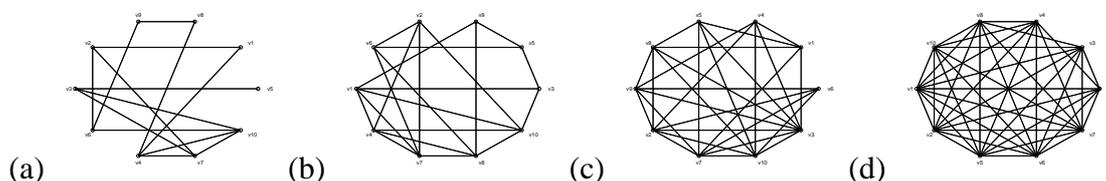


Figura 5. Modelo de Gilbert considerando 10 vértices e alterando-se a probabilidade p : (a) $p = 0.3$; (b) $p = 0.5$; (c) $p = 0.7$ e (d) $p = 0.9$.

4.3. Redes de Pequeno Mundo

Em 1998, Duncan Watts e Steven Strogatz observaram que a estrutura de algumas redes reais apresentam caminhos fechados de comprimento três. Essa descoberta foi o primeiro indício de que as redes reais não são completamente regulares e nem completamente aleatórias, todavia situam-se entre esses dois extremos [Watts and Strogatz 1998].

Eles sugeriram um modelo chamado modelo de pequeno mundo, no qual a rede é construída através de um processo de interpolação entre uma rede regular e uma rede aleatória, ou seja, esse modelo de rede pode ser altamente agrupada, como as redes regulares, mas com características de caminho médio pequeno, como nas redes aleatórias.

A idéia por trás da geração de redes de pequeno mundo é bastante simples e intuitiva: inicia-se com uma rede regular, a qual apresenta um agrupamento alto, e adiciona-se aleatoriedade aos poucos, obtendo-se um comprimento de caminho médio pequeno.

Embora o trabalho original utiliza reLigações entre arestas, atualmente é mais comum introduzir aleatoriedade via a adição de caminhos curtos, ou seja, via adição de atalhos na rede.

A Figura 6 ilustra o modelo de rede de pequeno mundo considerando 10 vértices e reLigação das arestas com probabilidade p .

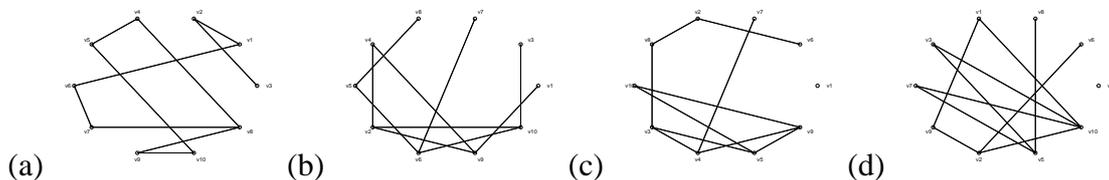


Figura 6. Rede de pequeno mundo considerando 10 vértices e alterando-se a probabilidade p de reLigação: (a) $p = 0.3$; (b) $p = 0.5$; (c) $p = 0.7$ e (d) $p = 0.9$.

A Figura 7 ilustra o modelo de rede de pequeno mundo considerando 10 vértices e a adição das arestas com probabilidade p por meio de atalhos na rede.

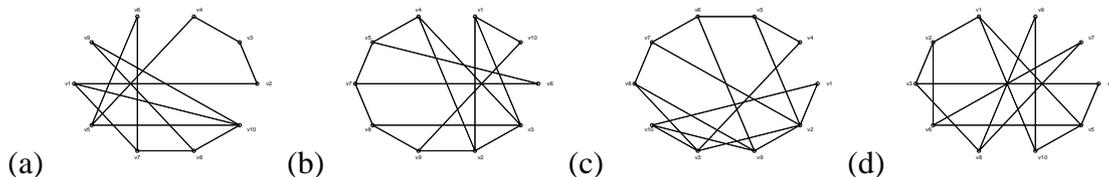


Figura 7. Rede de pequeno mundo construída através da adição de atalhos. Considera-se 10 vértices e altera-se a probabilidade p : (a) $p = 0.3$; (b) $p = 0.5$; (c) $p = 0.7$ e (d) $p = 0.9$.

4.4. Redes Livre de Escala

Há dois aspectos encontrados em redes reais que não são incorporados nos modelos aleatórios e de pequeno mundo. Primeiramente, ambos os modelos assumem que inicia-se com um número fixo de N vértices que são então conectados aleatoriamente ou reconectados, sem modificar N . Em contraste, as redes do mundo real são abertas e formadas pela adição contínua de novos vértices ao sistema, portanto, o número de vértices N aumenta durante toda a vida da rede. Em segundo lugar, os modelos de rede aleatória assumem que a probabilidade de que dois vértices sejam conectados é aleatória e uniforme. Em contraste, a maioria das redes reais apresentam conectividade preferencial.

Em 1999, Barabási e Albert [Barabasi and Albert 1999], decidiram verificar se a característica de pequeno mundo estava presente na *world wide web*. Para isto, mapearam a

topologia das conexões entre as páginas da web e descobriram que além da mesma apresentar o fenômeno de pequeno mundo, a distribuição de conexões era do tipo livre de escala (*scale-free*), ou seja, seguiam uma lei de potência da forma $P(k) \approx k^{-\gamma}$.

Em uma rede livre de escala, a probabilidade de que um novo vértice conecte-se aos vértices já existentes na rede não é uniforme, há uma maior probabilidade do novo vértice conectar-se a um vértice que já tem um grande número de conexões. O modelo de construção que gera redes livres de escala é baseado em dois passos, a saber: crescimento e ligação preferencial.

A Figura 8 ilustra o modelo de rede livre de escala considerando 10 vértices e alterando-se o grau mínimo do vértice.

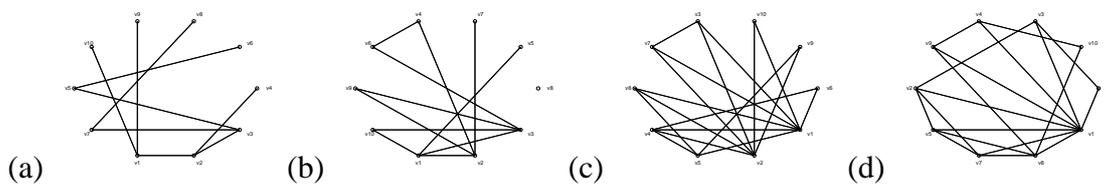


Figura 8. Rede livre de escala. Considera-se 10 vértices e altera-se o grau mínimo do vértice d : (a) $d = 1$; (b) $d = 2$; (c) $d = 3$ e (d) $d = 4$.

5. Discussões e Trabalhos Futuros

Compreender as relações entre a topologia de uma dada rede complexa e sua dinâmica, de forma a se conseguir inferir a estrutura topológica da rede a partir de observações das dinâmicas que cada um dos vértices produz e que são registradas na forma de séries temporais individuais, é uma das questões mais relevantes e atuais no estudo de redes complexas e que merecem ser estudadas.

Assim, vários métodos têm sido propostos para inferir a estrutura topológica de uma dada rede complexa a partir da observação de sua dinâmica.

O presente trabalho apresentou um estudo sobre a teoria de redes complexas a fim de posteriormente conceber um método que permita recuperar a estrutura topológica de uma dada rede complexa a partir das séries temporais medidas as quais representam os vértices da rede. Tem-se por hipótese que os vértices são constituídos de osciladores não lineares e em evolução caótica, mas não se tem acesso *a priori* à forma como esses osciladores se encontram interconectados formando a rede. O método a ser desenvolvido se baseia no fenômeno de sincronização de fase entre osciladores caóticos, cuja dinâmica se pretende capturar com o uso da transformada *wavelet*.

Um estudo preliminar em uma rede de dois osciladores de Rössler mostrou que a utilização da transformada wavelet é viável para a concepção do método a ser proposto futuramente.

Referências

- Amaral, L. and Ottino, J. (2004). Complex networks. *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems*, 38:147–162.
- Barabasi, A. (2007). The architecture of complexity: From network structure to human dynamics. *IEEE Control Systems Magazine*, pages 33–42.

- Barabasi, A. and Albert, R. (1999). Emergence of scaling in random networks. *Science*, Vol. 286, pages 509–512.
- Barabási, A., Albert, R., and Jeong, H. (2000). Scale-free characteristics of random networks: the topology of the world wide web. *Physica A*, 281:69–77.
- Boccaletti, S., Latora, V., Moreno, Y., Chavez, M., and Hwang, D. (2006). Complex networks: Structure and dynamics. *Physics Reports*, Vol. 424, No. 4-5, pages 175–308.
- Costa, L., Oliveira Jr, O., Travieso, G., Rodrigues, F., Boas, P. V., Antiqueira, L., Viana, M., and da Rocha, L. (2007). Analyzing and modeling real-world phenomena with complex networks: A survey of applications.
- Dorogovtsev, S. and Mendes, J. (2003). *Evolution of Networks: From Biological Nets to the Internet and WWW (Physics)*. Oxford University Press, Inc., New York, NY, USA.
- Erdos, P. and Rényi, A. (1961). On the strength of connectedness of a random graph. *Acta Mathematica Scientia Hungary*, Vol. 12, pages 261–267.
- Mendes, J. (2005). Física de redes complexas. *Gazeta de Física*.
- Rodrigues, F. (2007). Caracterização, classificação e análise de redes complexas.
- Watts, D. and Strogatz, S. (1998). Collective dynamics of small-world networks. *Nature*, Vol. 393.