

### UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

### FACULTAD DE CIENCIAS

### MAPEO DE SERIES DE TIEMPO A REDES: UN MÉTODO PARA LA DETECCIÓN DE ALERTAS TEMPRANAS DE TRANSICIONES DE FASE

Т		Ε		S	]	[	S	
QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:								
FÍSICO								
Р	R	Ε	S	Ε	Ν	Т	A :	

JESÚS DANIEL GÓMEZ HERNÁNDEZ



DIRECTOR DE TESIS: DR. IRVING OMAR MORALES AGISS 2018



Universidad Nacional Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

#### DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

## Resumen

Con el propósito de hallar nuevos métodos para la detección de alertas tempranas, en este trabajo se propone el uso de los algoritmos de visibilidad [41]-[44], los cuales mapean series de tiempo a redes. Asimismo, se pone a prueba la utilidad y efectividad de este novedoso método de análisis de series de tiempo. Para ello se estudiaron dos importantes modelos de la física que presentan transiciones de fase: el modelo de Ising en dos dimensiones y el modelo de Kuramoto. Se analizaron algunas de las propiedades topológicas de las redes resultantes mediante los algoritmos de visibilidad natural y horizontal de las series de tiempo obtenidas mediante simulaciones computacionales, tales como la distribución de grado, el grado promedio, la longitud de camino más corto promedio, la transitividad y la detección de comunidades mediante el algoritmo infomap. Lo anterior con la finalidad de presentar un estudio comparativo entre ambos sistemas que muestre los cambios cualitativos y cuantitativos de las redes ante las transiciones de fase, y así poner a prueba la versatilidad de dicho método.

Se halló que para las series de tiempo cercanas a la transición de fase, la distribución de tamaños de comunidad de las redes obtenidas mediante el algoritmo de visibilidad natural cumplen una ley de potencias. Por otra parte, en el algoritmo de visibilidad horizontal, únicamente la longitud de camino más corto promedio resultó de utilidad como alerta temprana, sin embargo, algunos valores como el grado promedio resultaron de utilidad para describir la dinámica de ambos sistemas.

# Índice

### Resumen

In	trod	ucción		1			
1	Los	dos m	odelos y sus transiciones	<b>5</b>			
	1.1	Modelo de Kuramoto					
	o de Ising	13					
		1.2.1	Algoritmo de Metrópolis	19			
<b>2</b>	De	series	de tiempo a redes	<b>21</b>			
	2.1	Detección de alertas tempranas en series de tiempo					
	2.2	Teoría de redes					
	2.3	Algoritmos de visibilidad					
		2.3.1	Algoritmo de visibilidad natural (AVN)	36			
		2.3.2	Algoritmos de visibilidad horizontal (AVH)	37			
3	Des	arrollo	, resultados y análisis	41			
	3.1 Descripción de resultados			46			
		3.1.1	Algoritmo de visibilidad natural en ambos modelos	46			
		3.1.2	Algoritmo de visibilidad horizontal en ambos modelos .	62			
	3.2	Result	ados generales y un análisis comparativo	78			

4	Cor	nclusiones	85
	3.4	El algoritmo de visibilidad horizontal para	82
	3.3	El algoritmo de visibilidad natural para	79

## Introducción

Si bien, las transiciones de fase entre los estados de agregación de la materia o entre el estado de materiales ferromagnéticos son de interés y han sido profundamente estudiados por la física, fenómenos tales como extinciones de especies[18], cambios en el clima[19], ataques epilépticos[20], etc. son de alto impacto y pueden entrar en la categoría de sistemas que presentan transiciones de fase. Por ello, recientemente, se ha mostrado un gran interés en el estudio de alertas tempranas, para desarrollar métodos que ayuden a prever cuándo una transición de fase se encuentra próxima a ocurrir, empleando principalmente técnicas como el análisis de series de tiempo o análisis de imágenes[22].

En el presente trabajo se estudiaron en particular dos modelos clásicos de la física que presentan transición de fase: el modelo de Ising en dos dimensiones y el modelo de Kuramoto, pues ambos son modelos muy estudiados y recientemente se ha investigado detalladamente sobre las alertas tempranas que presentan ambos modelos mediante el análisis de series de tiempo [23]-[13], así como con el uso del algoritmo de visibilidad natural[45] en el caso del modelo de Ising. Sin embargo, en el presente trabajo se pone a prueba la efectividad del algoritmo de visibilidad natural en el modelo de Kuramoto y también se empleará el de visibilidad horizontal para comprobar su utilidad.

Cabe mencionar que tanto el modelo de Ising como el de Kuramoto han

sido empleados para modelar diversos sistemas que son campo de estudio de áreas de conocimiento como la biología y la sociología, de hecho, el modelo de Kuramoto tiene sus orígenes en el modelado de la sincronización de luciérnagas [5]. Por ello, en este trabajo no sólo se pretende probar la efectividad de las alertas tempranas en sistemas físicos, sino que se sugiere la implementación de éstas para diversos sistemas, de diversas ramas del conocimiento, incluyendo los sistemas complejos. Dicho lo anterior, esta investigación tiene como objetivo principal, mediante un estudio comparativo entre ambos modelos, brindar herramientas generales para la predicción de transiciones de fase para aquellos casos en los cuales el comportamiento dinámico del sistema se pueda describir a través series de tiempo.

Este trabajo se divide en cuatro capítulos:

- Modelo de Kuramoto, modelo de Ising y sus transiciones de fase: En este capítulo se describirán los dos modelos que presentan transición de fase y se darán las bases para el desarrollo de las simulaciones computacionales que serán indispensables para la obtención de las series de tiempo.
- 2. De series de tiempo a redes: En esta sección se proporcionarán los conceptos necesarios para el análisis que se hará sobre los modelos descritos en la primera parte, se hablará sobre los métodos convencionales para la detección de alertas tempranas, así como su fundamento. Posteriormente se hará un breve estudio de teoría de redes a modo de repaso, en donde se describirán algunos conceptos y definiciones básicos incluyendo el algoritmo infomap para la detección de comunidades y se concluirá el capítulo con la descripción de los algoritmos de visibilidad natural y horizontal.

- 3. Desarrollo, resultados y análisis: En este apartado se describe el procedimiento con el cual se aplicaron las herramientas de análisis del segundo capítulo, así como la implementación de los modelos, en donde se presentan y se describen los resultados.
- 4. **Conclusiones:** Finalmente, en este capítulo se presenta una síntesis de la investigación, se evalúa la efectividad de los métodos propuestos como alertas tempranas y se proponen posibles líneas de investigación a futuro sobre el tema.

## Capítulo 1

# Los dos modelos y sus transiciones de fase

Existe una basta cantidad de sistemas que presentan cambios cualitativos abruptos cuando uno de sus parámetro varía ligeramente. En física, a dichos cambios se les denomina "transiciones de fase", están relacionadas con un fenómeno propio de los sistemas dinámicos llamado bifurcaciones[1] y ocurren cuando se presenta una singularidad en la energía libre y por lo tanto la primera derivada es discontinua, sin embargo, dicho término se puede extender a objetos de estudio de diversas áreas del conocimiento, los cuales pueden ser campo de investigación de las ciencias de la complejidad, que estudian sistemas compuestos de un gran número de elementos que interactúan entre sí, presentando una dinámica global no lineal.

En este capítulo se describirán dos modelos esenciales de la física; el primero de ellos es el modelo de Kuramoto, el cual trata el problema de un gran número de osciladores armónicos acoplados en donde la transición de fase se presenta al variar la constante de acoplamiento entre los osciladores, y como se verá más adelante, al incrementar dicho valor, el sistema se sincronizará pasando del "desorden" al "orden" en el sentido temporal. Por otra parte, el modelo de Ising describe la dinámica de un material ferromagnético, y en dos dimensiones consiste en una red cuadrada en donde cada celda puede ocupar dos estados distintos, y resulta que al incrementar la temperatura, el sistema transita del "orden" al "desorden" en un sentido espacial.

Se eligieron estos dos modelos como objeto de estudio ya que ambos se han empleado para investigar otro tipo de sistemas relevantes además de los físicos. Vale la pena consultar las fuentes [5]-[12] si el lector desea algunos de estos ejemplos de aplicaciones de los modelos, y particularmente [6]-[7], ya que en éstos se aplica el modelo de Kuramoto y el de Ising, respectivamente, para describir el mismo sistema. Por otro lado, los dos modelos han sido profundamente estudiados desde el campo de la física y son relativamente fáciles de resolver y simular, lo cual nos permitirá centrarnos en la detección de las alertas tempranas empleando algoritmos de visibilidad. En las siguientes secciones se describirán con mayor detalle ambos modelos y se retomarán las aplicaciones.

### 1.1 Modelo de Kuramoto

En la década de 1960, Arthur Winfree estudió el comportamiento de un gran número de ciclos límite de osciladores interactuando para estudiar la sincronización colectiva de las luciérnagas, en donde propuso un modelo bajo los supuestos de que los osciladores son cercanamente idénticos y el acoplamiento entre estos es pequeño, así, el sistema se puede describir mediante una aproximación de campo medio, en donde la evolución de la fase  $\dot{\theta}_i$  de cada oscilador i está dada por una combinación lineal de la frecuencia natural  $\omega_i$  de dicho oscilador y el estado de todos los osciladores acoplados entre sí, el cual se puede describir si se considera que la sensibilidad de cada oscilador con el ritmo colectivo está determinada por una función  $Z(\theta_i)$  y la contribución de tal oscilador con el ritmo colectivo por una función  $X(\theta_i)$  en donde  $\theta_i$  es la fase del oscilador *i*, de manera que dicha combinación lineal puede escribirse como

$$\dot{\theta}_i = \omega_i + \left(\sum_{j=1}^N X(\theta_j)\right) Z(\theta_i).$$
(1.1)

La ecuación 1.1 describe el modelo de Winfree para N osciladores acoplados, y mediantes aproximaciones analíticas y simulaciones computacionales, Winfree halló que para un reducido rango de frecuencias naturales y un valor de acoplamiento suficientemente grande, el sistema se sincroniza y además presenta una transición de fase, en la cual, si los osciladores del sistema tienen frecuencias en un amplio rango, de manera que se encuentre desincronizado, y se reduce dicho espectro, repentinamente un conjunto de osciladores se sincronizarán.

Yoshiki Kuramoto comenzó a estudiar el trabajo de Winfree y probó que la dinámica a largo plazo de un conjunto de osciladores débilmente acoplados, en donde la interacción entre éstos es igualmente pesada, puede estar descrita por los senos de la diferencia de las fases

$$\dot{\theta}_i = \omega_i + \frac{K}{N} \sum_{j=1}^N \sin(\theta_j - \theta_i), \qquad (1.2)$$

en donde K es la constante de acoplamiento entre los osciladores en unidades de frecuencia [2] <sup>1</sup> y los valores de las frecuencias naturales están distribuidos con una densidad de probabilidad  $g(\omega)$  simétrica con respecto a alguna frecuencia  $\Omega$ , de tal forma que se cumple  $g(\Omega - \omega) = g(\Omega + \omega)$  y mediante el cambio  $\theta_i \to \theta_i + \Omega t$  se puede transformar el sistema descrito en la ecuación 1.2 a uno equivalente en donde el promedio de las frecuencias naturales es cero y  $g(-\omega) = g(\omega)$ .

A continuación se describirá un desarrollo del modelo que nos permite describir la sincronía en el modelo, así como el valor de K en el cual ocurre la transición. Dicho desarrollo se basa en las referencias [3] y [4], las cuales pueden consultarse para mayores detalles.

Se define el parámetro de orden

$$re^{i\psi} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} e^{i\theta_j},\tag{1.3}$$

en donde  $\psi$  es la fase promedio en el sistema, y r es una cantidad del comportamiento colectivo, la cual representa la coherencia de las fases de los osciladores (la imágen 1.1 puede ayudar a esclarecer el significado de r y  $\psi$ ). Si se multiplica la ecuación 1.3 por  $e^{-i\theta_i}$ , la parte imaginaría está dada por

$$rsin(\psi - \theta_i) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} sin(\theta_j - \theta_i).$$
(1.4)

La ecuación 1.4 se puede sustituir en 1.2, y así, el modelo puede expresarse en términos de las variables de campo medio r y  $\psi$  de la siguiente forma:

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>En general, se puede definir una matriz de acoplamiento, en donde cada elemento  $K_{ij}$  represente la constante de acoplamiento entre los osciladores  $i \ge j$ , las cuales pueden ser no necesariamente iguales para todos los osciladores. Sin embargo, los cálculos en estos modelos se vuelven sumamente complicados, por ello se considera  $K_{ij} = K/N$ 



Figura 1.1: La magnitud del parámetro de orden incrementa conforme se concentran más las fases de los osciladores en un sólo punto, mientras que la dirección del vector indica la fase promedio (Imágen tomada de la referencia [3])

$$\dot{\theta}_i = \omega_i + Krsin(\psi - \theta_i), i = 1, 2, \dots, N.$$

$$(1.5)$$

Por otra parte, el parámetro de orden descrito en la ecuación 1.3 puede reescribirse como

$$re^{i\psi} = \int_{-\pi}^{\pi} e^{\theta} \left( \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} \delta(\theta - \theta_j) \right) d\theta, \qquad (1.6)$$

y en el límite cuando  $N \to \infty$ , la distribución de las fases de los osciladores se puede describir por una distribución de densidad de probabilidad  $\rho(\theta, \omega, t)$ en lugar de las funciones delta de Dirac de la ecuación 1.6, y así, se puede expresar el parámetro de orden como

$$re^{i\psi} = \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\theta} \rho(\theta, \omega, t) g(\omega) d\omega d\theta.$$
(1.7)

Dado que la ecuación 1.5 describe la velocidad angular de los osciladores  $v = \omega + Krsin(\psi - \theta)$ , se puede usar la ecuación de continuidad para la densidad  $\rho$ 

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \theta} \{ [\omega + Krsin(\psi - \theta)]\rho \} = 0, \qquad (1.8)$$

la cual se puede resolver con la condición de normalización

$$\int_{-\pi}^{\pi} \rho(\theta, \omega, t) d\theta = 1, \qquad (1.9)$$

en donde  $\rho = 1/(2\pi)$  y r = 0 es una solución trivial, llamada solución incoherente debido a que describe un estado en donde la distribución de las fases es igualmente probable en el intervalo  $[-\pi, \pi]$  y dado que r = 0, no hay coherencia entre las fases, mientras que la solución r = 1 y  $\theta_i = \psi$  para todas las fases  $i \in 1, ..., N$  es aquella en donde la coherencia es global.

Para analizar un estado en donde 0 < r < 1 basta notar que la fase de cada oscilador se desplaza con una velocidad  $v = \omega - Krsin(\theta - \psi)$ , y que ésta se vuelve estable cuando  $\omega = Krsin(\theta - \psi)$  con  $-\pi/2 \leq \theta - \psi \leq \pi/2$ , mientras que la rapidez con la que cambia la fase de aquellos osciladores con frecuencias naturales  $|\omega| > Kr$  no se mantiene fija y por lo tanto el movimiento no será uniforme, sin embargo, si consideramos la ecuación de continuidad 1.8 en el caso estático, suponiendo r y  $\psi$  constantes, se obtiene que el producto  $\rho v$  es constante, lo cual implica que la densidad de osciladores en un punto del círculo unitario, independiente del tiempo, es inversamente proporcional a la velocidad de osciladores en dicho punto, y por lo tanto se puede calcular la densidad de osciladores

$$\rho(\theta,\omega) = \begin{cases} \delta(\theta - \psi - \sin^{-1}(\frac{\omega}{Kr}))H(\cos\theta) & |\omega| < Kr, \\ \frac{C}{|\omega - Kr\sin(\theta - \psi)|} & |\omega| \ge Kr, \end{cases}$$
(1.10)

en donde H es la función de Heaviside y C es la constante que se puede calcular mediante la condición de normalización y resulta  $C = \sqrt{\omega^2 - (Kr)^2}/2\pi$ . Contar con una descripción de la densidad de osciladores, nos permite calcular r mediante la ecuación 1.7, en donde, a pesar de que se puede observar que dicho valor se descompone en la suma de dos integrales correspondientes a la contribución de los osciladores que se mantienen estables más la contribución de aquellos cuyo dinámica está fuera de sincronía, la contribución de estos últimos es nula. Para mostrar lo anterior, basta hacer el cálculo

$$r = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \int_{|\omega| < Kr} e^{i(\theta - \psi)} \delta(\theta - \psi - \sin - 1[\omega/(Kr)]) g(\omega) d\omega d\theta + \int_{-\pi}^{\pi} \int_{|\omega| > Kr} e^{i(\theta - \psi)} \frac{Cg(\omega)}{|\omega - Kr\sin(\theta - \psi)|} d\omega d\theta.$$
(1.11)

En la ecuación 1.11 se observa que en la segunda integral, la función de densidad cumple la propiedad de simetría  $\rho(\theta, \omega) = \rho(\theta + \pi, -\omega)$  y añadiendo que  $g(\omega) = g(-\omega)$ , se obtiene que la integral es nula. Por otra parte, en la primer integral el dominio  $\theta$  ha sido reducido debido a las propiedades de la función de Heaviside y se obtiene

$$r = \int_{|\omega| > Kr} \cos\left(\sin^{-1}\left(\frac{\omega}{Kr}\right)\right) g(\omega) d\omega, \qquad (1.12)$$

dado que la integral corresponde a los osciladores estables, se puede hacer el cambio de variable  $\omega \to Krsin\theta$ , con  $-\pi/2 \le \theta \le \pi/2$  y  $d\omega \to Krcos\theta d\theta$ , de modo que la integral 1.12 puede escribirse como

$$r = Kr \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos^2\theta g(Krsin\theta) d\omega, \qquad (1.13)$$

en donde se observa que, además de la solución incoherente r = 0, existen otros valores 0 < r < 1 que representan estados en donde las fases de los osciladores se encuentran parcialmente sincronizadas, y dividiendo la ecuación 1.13 entre r, se encuentra que dichos estados cumplen la ecuación

$$1 = K \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos^2\theta g(Krsin\theta) d\theta.$$
(1.14)

El modelo puede presentar una transición de fase en donde la coherencia global entre las fases de osciladores, determinada por el parámetro de orden r, cambia de ser nula (r = 0) a un estado de sincronización parcial (r > 0). Si consideramos la aproximación  $r \to 0^+$  en la ecuación 1.13, se puede encontrar el valor crítico  $K_c$  del acoplamiento para el cual ocurre dicha transición y resolviendo la integral, resulta

$$K_c = \frac{2}{\pi g(0)}.$$
 (1.15)

Para conocer el comportamiento de r en función de K, al menos en una región cercana al valor crítico  $K_c$ , se puede expandir  $g(Krsin\theta)$  mediante una serie de Taylor alrededor de r = 0 y la aproximación a segundo orden estaría dada por

$$g(Krsin\theta) \approx g(0) + \frac{1}{2}g''(0)(Krsin\theta)^2, \qquad (1.16)$$

en donde el término de primer orden ha sido omitido debido a que la distribución de frecuencias tiene su máximo en  $\omega = 0$  y por lo tanto g'(0) = 0.

Sustituyendo 1.16 en la ecuación 1.14 se obtiene

$$1 = K \left[ g(0) \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos^2\theta d\theta + \frac{K^2 r^2 g''(0)}{2} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos^2\theta sen^2\theta d\theta \right], \qquad (1.17)$$

calculando las integrales y sustituyendo la ecuación 1.15, se encuentra

$$1 = \frac{K}{K_c} + \frac{\pi K^3 r^2 g''(0)}{16},$$
(1.18)

en donde es posible encontrar como depende r de K, y si consideramos que la constante de acoplamiento es mayor al valor crítico, pero son suficientemente cercanos como para considerar que  $K^3 \approx K_c^3$ , se puede deducir el valor aproximado de r, dado por

$$r = \sqrt{\frac{(K_c - K)16}{K_c^4 \pi g''(0)}}.$$
(1.19)

La ecuación 1.19 muestra que al aumentar la constante de acoplamiento de su valor crítico, el parámetro de orden que describe la sincronía entre estos, crecerá de manera proporcional a la raíz cuadrada de la diferencia entre la constante de acoplamiento y su valor crítico. En la figura 1.2 se observan los resultados obtenidos mediante simulaciones computacionales comparados con la curva teórica.

### 1.2 Modelo de Ising

Uno de los ejemplos clásicos de transición de fase en física es el modelo de Ising, el cual describe la magnetización en materiales ferromagnéticos. Su importancia radica en que es un modelo que tiene solución exacta en dos dimensiones y presenta una transición de fase analítica, la cual se logró describir con el desarrollo de la física estadística; además, ha sido profundamente estudiado y modificado con algunas variantes para modelar sistemas de diversos campos de estudio, como en la neurología[7] [8], sociología [9] [10], cardiología [11] y desarrollo de cáncer [12]. Cabe mencionar que el presente trabajo en un principio surgió como una continuación de la referencia [13] en donde se estudia exclusivamente el modelo de Ising, por lo que se puede encontrar un análisis más especializado en él. A continuación se dará una descripción del modelo basado en [14], sin embargo el análisis que se hará continuación no



Figura 1.2: Imágen obtenida de [3], en donde se muestran los valores de r obtenidos mediante una simulación computacional en función de K, empleando una distribución Lorentziana de frecuencias naturales, comparados con la curva teórica para dicha distribución

es el único, por lo cual se sugiere consultar [15] si el lector desea un texto más especializado en el tema.

Supongamos que se tiene un material ferromagnético a una temperatura T = 0K, en donde todos los de los espines atómicos se encuentran alineados en una misma dirección, de modo que el material tenga una magnetización  $M \neq 0$ . Si el parámetro T se incrementa, las fluctuaciones térmicas irán cobrando mayor importancia, provocando que algunos espines comiencen a adquirir orientaciones aleatorias, sin embargo, como se explicará más adelante, por cuestiones de minimización de la energía y debido a la interacción entre las partículas vecinas, el sistema tiende a orientar los espines en la di-

rección predominante a pesar de las fluctuaciones. Cuando la temperatura supera el valor crítico  $T_c$ , las configuraciones aleatorias de los espines serán predominantes y el sistema perderá su magnetización.

t	+	1	1	1	+	1	+	1	1
t	4	1	4	1	1	+	1	4	Ļ
t	1	4	1	+	1	+	4	1	1
Ļ	1	4	4	1	4	4	1	1	Ļ
1	4	1	+	+	Ļ	1	1	4	1
1	1	4	+	+	4	1	1	1	Ļ
Ļ	Ļ	1	4	1	4	1	+	1	¥
1	+	4	1	1	Ļ	Ļ	1	1	4
Ļ	4	1	1	1	4	1	4	1	Ļ
t	+	1	4	+	1	+	1	1	1

Figura 1.3: Representación del modelo de Ising en dos dimensiones, en donde los dos posibles estados de cada celda están representados con una flecha que puede estar orientado hacia arriba o hacia abajo (imágen tomada de [13])

El modelo en dos dimensiones consiste en una retícula cuadrada de  $N = L \times L$  celdas, en donde cada una representa a una partícula y se puede encontrar en los dos posibles estados s = +1 o s = -1 según la orientación del espín de dicha partícula (figura 1.3). De este modo, la magnetización total del sistema queda descrita por la suma de los espines de cada celda y se escribe de forma normalizada como

$$M = \frac{1}{N} \sum_{i}^{N} S_i, \qquad (1.20)$$

mientras que la energía del sistema, sin campo magnético externo, está dada por el hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} J S_i S_j, \qquad (1.21)$$

en donde J > 0 es la constante de acoplamiento,  $\sum_{\langle i,j \rangle}$  indica que la suma es sobre los primeros vecinos y se multiplica por 1/2 para eliminar la contribución de los índices repetidos. Se puede notar que cuando todos los espines tienen el mismo valor +1 o -1 la energía será mínima, y debido a que el sistema minimiza su energía, cada espín tenderá a alinearse en el mismo sentido en el que se encuentre la mayoría de sus primeros vecinos.

Con la finalidad de estudiar la transición de fase que presenta el modelo, se puede hacer un análisis de éste empleando teoría de campo medio, en donde se considerará el valor global de los espines como si se tratara de un "campo" [14], y se ignorarán fluctuaciones temporales así como espaciales. Aunque estas suposiciones se alejan un poco de los materiales ferromagnéticos reales, la simplificación que se hará a continuación resulta útil y clara cuando se pretende obtener información sobre el comportamiento global del sistema, así como de su transición de fase.

Dada una celda i del sistema, la probabilidad de que ésta se encuentre en el estado  $S_i = -1$  o  $S_i = +1$  se puede calcular usando una distribución de Boltzmann

$$P(S_i) = \frac{exp\left[-\beta\left(JS_i\sum_j S_j\right)\right]}{\sum_{S_i=-1,+1}exp\left[-\beta\left(JS_i\sum_j S_j\right)\right]},$$
(1.22)

en donde el denominador es la función de partición Z de los dos posibles estados en los que se pueden encontrar  $S_i$ , y  $\beta$  es igual a  $1/(k_B T)$ , en donde  $k_B$  es la constante de Boltzmann.

El valor promedio del espín correspondiente a la celda i se puede calcular

empleando la ecuación 1.22

$$\langle S_i \rangle = \sum_{S_i = -1, +1} S_i P(S_i)$$

$$= \frac{exp \left[ -\beta \left( J \sum_j S_j \right) \right] - exp \left[ \beta \left( J \sum_j S_j \right) \right]}{exp \left[ -\beta \left( J \sum_j S_j \right) \right] + exp \left[ \beta \left( J \sum_j S_j \right) \right]},$$
(1.23)

empleando la propiedad trigonométrica  $tanh(x) = (e^x - e^{-x})/(e^x + e^{-x})$  se puede simplificar 1.23 en

$$\langle S_i \rangle = -tanh\left[-\beta\left(J\sum_j S_j\right)\right].$$
 (1.24)

Obsérvese que  $H_i = (\sum_j JS_j)S_i$  no es más que la energía de interacción del espín  $S_i$  con sus vecinos; si suponemos que dicha energía se puede expresar en términos del promedio de espines que hay en la red, podríamos reescribir la energía como  $H_i = \langle S_j \rangle S_i \sum J$ , en donde la suma corre sobre los primeros q vecinos dependiendo de la dimensión de la red, de modo que  $\sum_j J = qJ$ con q = 4 en el modelo de dos dimensiones.

La suposición anterior de teoría de campo medio en el modelo, nos permite escribir la ecuación 1.24 como

$$\langle S_i \rangle = -tanh \left[ -\beta \left( qJ \langle S_j \rangle \right) \right].$$
 (1.25)

Sabemos que la magnetización es el promedio de los espines, por lo cual, con un simple cambio de índices, la ecuación 1.25 resulta en la ecuación

$$M = tanh\left[\frac{qJM}{kT}\right].$$
(1.26)

Como es de esperar, el valor de M en la ecuación 1.26 se encuentra aco-

tado entre ±1 (figura 1.4), lo cual es consistente con el modelo descrito, sin embargo, buscamos encontrar los valores de M para los cuales se cumple la ecuación 1.26, en donde M = 0 resulta claramente una solución. Emplear la aproximación  $tanh(x) \approx x - x^3/3$  nos permite encontrar el valor de  $T_c = qJ/k_B$  para el cual, al usar valores de temperatura mayores a éste, existen dos soluciones más de M dadas por

$$M = \pm \frac{\sqrt{3}T}{q} \sqrt{1 - \frac{T}{q}}.$$
(1.27)



Figura 1.4: en a se muestran las soluciones a la ecuación  $M = tanh[\mu M]$ para distintos valores de temperatura, en donde  $\mu = T_c/T$  y en b se muestra el diagrama de la transición

Lo anterior nos ilustra que el modelo, haciendo una suposición de campo medio, presenta una transición de fase, en donde el sistema presenta campo magnético nulo, y al aumentar la temperatura y superar el valor crítico  $T_c$ , el sistema se encontrará en alguno de los dos estados de M.

#### 1.2.1 Algoritmo de Metrópolis

Dado que cada espín puede encontrarse en dos posibles estados, el sistema de N celdas se puede encontrar en  $2^N$  estados distintos y la probabilidad  $P(\{S_i\})$  de observar una configuración de espines  $\{S_i\}$  está determinada por la ecuación

$$P(\{S_i\}) = \frac{exp[-\frac{E(\{S_i\})}{k_BT}]}{\sum_{S_j}^{2^N} exp[-\frac{E(\{S_j\})}{k_BT}]},$$
(1.28)

en donde se puede observar que si la temperatura es muy alta  $E({S_i}) << k_B T$ , el numerador es cercano a 1 sin importar cual sea la configuración de espines y por lo tanto las posibles configuraciones que puede presentar el sistema serán mayormente equiprobables cuando  $T \to \infty$ , en donde una configuración típica será aquella con espines aleatorios; por otra parte, el denominador es la función de partición Z, la cual es difícil de calcular, por ello es conveniente realizar una simulación empleando cadenas de Markov, en donde las probabilidades de transición cumplan la forma del Hamiltoniano, así como la ley de minimización de la energía, de modo que el estado presente del sistema esté determinado únicamente por su estado inmediato anterior.

En la referencia [16] se muestra que el sistema cumple con la ecuación de balance detallado

$$P(\{S_i\})W_{i\to j} = P(\{S_j\})W_{j\to i}, \tag{1.29}$$

en donde  $W_{n\to m}$  representa la probabilidad de que el sistema transite del estado n al m, de modo que la función de partición se cancela y la probabilidad de transición queda únicamente determinada por la diferencia de energía  $\Delta E = E(\{S_m\}) - E(\{S_n\})$ , esto es

$$W_{i \to j} = \begin{cases} exp\left(-\frac{\Delta E}{k_B T}\right) & \text{si } \Delta E > 0, \\ 1 & \text{si } \Delta E < 0, \end{cases}$$
(1.30)

Por otra parte, se pide que el sistema cumple con el teorema ergódico, de modo que todos los estados posibles son accesibles al sistema.

El algoritmo de Metrópolis es uno de los más famosos, ha sido utilizado en física estadística con éxito y cumple con las propiedades anteriormente descritas, además resulta fácil de programar y es computacionalmente rápido. Para un sistema de espines, el algoritmo es el siguiente

- 1. Se inicia con una configuración de espines.
- 2. Se selecciona una celda i.
- 3. Se calcula la diferencia de energía  $\Delta E$  obtenida al invertir el estado del espín de dicha celda.
- Si ΔE < 0 se invierte el sentido del espín y se regresa al paso 2. Si ΔE > 0, se genera un número aleatorio r con una distribución uniforme con 0 < r < 1.</li>
- 5. Si  $r < exp(-\Delta E/k_BT)$  se invierte el espín. De otro modo el sistema no se modifica.
- 6. Se selecciona otra celda y se repite el algoritmo a partir del paso 3.

El algoritmo permite obtener datos de la evolución temporal de la magnetización del sistema para diferentes valores de la temperatura tomando en cuenta el comportamiento determinista dado por el hamiltoniano, así como las variaciones estocásticas dadas por las fluctuaciones térmicas.

## Capítulo 2

## De series de tiempo a redes

Una serie de tiempo es la colección de una secuencia de observables en el tiempo [17]. Su uso comprende un amplio campo de investigación tanto en ciencias sociales como naturales, y principalmente utiliza técnicas de estadística. La importancia del desarrollo del análisis de series de tiempo (AST) radica en la utilidad que tiene para estudiar, controlar y explicar el comportamiento de fenómenos dinámicos, así como su predicción.

Los sistemas descritos en el capítulo 1 son sólo un par de modelos físicos que presentan transiciones de fase; sin embargo, muchos de los sistemas, tanto reales como modelados, presentan cambios abruptos al variar ligeramente uno de sus parámetros, algunos ejemplos son extinciones de especies[18], el clima[19], ataques epilépticos[20] o cambios de estado de agregación de la materia; y debido a que algunos de estos cambios son irreversibles o perjudiciales, resulta de sumo interés desarrollar métodos para prever con suficiente anticipación cuando un sistema se aproxima a una transición, y aunque no se ha podido predecir el momento exacto en el que estas ocurren, recientemente se han encontrado patrones temporales y espaciales<sup>1</sup> en el comportamiento

 $<sup>^1\</sup>mathrm{En}$ el presente trabajo se estudiará exclusivamente la evolución temporal del sistema,

de los sistemas cuando se encuentra próximo a una transición. A este tipo de señales observables se les conoce como alertas tempranas[22].

Existe mucha literatura en donde se describen los métodos de AST para la detección de alertas tempranas convencionales [22][21]; en [13] y [24] se describen algunos de estos conceptos enfocados en el modelo de Ising, mientras que en este trabajo se describirá un reciente método para el AST, el cual se propondrá como alerta temprana y ya ha sido probado en el modelo de Ising [45]: Los algoritmos de visibilidad[40].

Se describirán brevemente los métodos convencionales, pues son de gran importancia, ya que son *demostrables* en el sentido en que se pueden explicar desde el punto de vista de los sistemas dinámicos.

## 2.1 Detección de alertas tempranas en series de tiempo

En general se pueden clasificar las alertas tempranas en dos categorías: las basadas en mediciones y las basadas en modelos[21]; las primeras cuantifican cambios en las propiedades estadísticas de la serie de tiempo, mientras que las segundas constan en ajustar modelos a los datos. Con ambos métodos se pretende detectar cambios en la memoria del sistema, así como la variación de los datos de la serie de tiempo.

Cuando un sistema dinámico se encuentra próximo a una bifurcación, ocurre un fenómeno conocido como ralentización crítica(*critical slowing down* en inglés), en el cual el sistema tarda más tiempo en retornar a su estado estable ante pequeñas perturbaciones. A continuación se expondrá un ejemplo

sin embargo, se sugiere consultar [22] como introducción a aquellos lectores con interés en las alertas tempranas espaciales

basado en [14] y [22].

Consideremos el sistema dinámico con el parámetro de control  $\mu$ 

$$f(x) = \frac{dx}{dt} = \mu x - x^3, \qquad (2.1)$$

el cual tiene el punto de equilibrio inestable  $x_0^* = 0$  y los dos puntos de equilibrio estable  $x_{\pm}^* = \pm \sqrt{\mu}$  cuando  $\mu > 0$ , mientras que cuando  $\mu \le 0$  el único valor de equilibrio es  $x^* = 0$ , es decir, el sistema experimenta una bifurcación en  $\mu_c = 0$ . Si añadimos una pequeña perturbación  $\epsilon$  al estado del sistema se obtiene

$$f(x+\epsilon) = f(x) + \frac{d\epsilon}{dt}.$$
(2.2)

Haciendo una aproximación a primer orden alrededor de los puntos de equilibrio mediante una serie de Taylor resulta

$$f(x^* + \epsilon) \approx f(x^*) + \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x^*} \epsilon,$$
 (2.3)

y de las ecuaciones 2.2 y 2.3 se encuentran las ecuaciones de eigenvalores

$$\frac{d\epsilon}{dt} = \lambda(x*)\epsilon, \qquad (2.4)$$

en donde  $\lambda(x^*) = \partial f/\partial x|_{x^*}$  se puede calcular para los tres distintos valores de equilibrio haciendo uso de la ecuación 2.1 y se obtiene que  $\lambda(x_0^*) = \mu$ , mientras que  $\lambda(x_{\pm}^*) = -2\mu$ . La ecuación 2.4 aporta información sobre la rapidez, directamente relacionada con  $\lambda$ , con la que el sistema retorna a sus valores estables, o bien, se aleja de su punto de equilibrio inestable ante una perturbación. El resultado anterior permite observar que la razón de cambio de la perturbación se aproxima a 0, de manera aproximadamente lineal, cuando el parámetro de control se aproxima al valor crítico, es decir, el tiempo en el que el sistema retorna a su valor estable diverge cuando  $\mu = \mu_0$ 

Este fenómeno se relaciona también con el tiempo de relajación del sistema cerca de la criticalidad. Otra forma de ilustrar el fenómeno es calculando la variación del tiempo transitorio que le toma al sistema ir de un estado inicial x(0) a  $x(t_{\mu})$  en función del parámetro  $\mu$ , el cual se puede calcular mediante la integral

$$\int_{0}^{t_{\mu}} dt = \int_{x(0)}^{x(t_{\mu})} [f_{\mu}(x)]^{-1} dx, \qquad (2.5)$$

en donde  $f_{\mu}$  representa a la función de la ecuación 2.1 dependiente del parámetro de control. Separando los dominios de la integral cerca de  $\mu_c = 0$ se obtiene

$$t_{\mu}^{-}(\varepsilon) = \int_{x(0)}^{\varepsilon} \frac{dx}{x(\mu - x^{2})},$$

$$t_{\mu}^{+}(\varepsilon) = \int_{\varepsilon}^{\sqrt{\mu} - \varepsilon} \frac{dx}{x(\mu - x^{2})},$$
(2.6)

para  $\mu < 0$  y  $\mu > 0$  respectivamente. El significado de las integrales 2.6 es, para  $t^-_{\mu}(\varepsilon)$ , el tiempo que le toma al sistema ir de un punto x(0) a un valor de  $\varepsilon$  muy próximo al único punto estable  $x^*_0 \approx \varepsilon$ ; mientras que para  $\mu > 0$ ,  $t^+_{\mu}(\varepsilon)$  es el tiempo que le toma al sistema ir de un punto cercano al punto de equilibrio inestable a alguno de sus valores estables  $x^*_{\pm} = \pm \sqrt{\mu}$ .

Los cálculos resultan en estimaciones analíticas del tiempo transitorio:

$$t_{\mu}^{-}(\varepsilon) = \frac{1}{2\mu} ln \left[ \frac{\varepsilon^{2}(\mu - x(0)^{2})}{x(0)^{2}(\mu - \varepsilon^{2})} \right],$$

$$t_{\mu}^{+}(\varepsilon) = \frac{1}{2\mu} ln \left[ \frac{(\mu - \varepsilon^{2})(\sqrt{\mu} - \varepsilon^{2})}{\varepsilon^{2}(\mu - (\sqrt{\mu} - \varepsilon)^{2})} \right].$$
(2.7)

Ambas funciones divergen en  $\mu_c = 0$ , de hecho, para valores muy cercanos a  $\mu_c$ , el tiempo transitorio tiene la forma  $t_{\mu}(\varepsilon) \sim 1/\mu$ .

Qué el tiempo de relajación incremente cuando al encontrarse próximo a la bifurcación tiene consecuencias en las series de tiempo del sistema, las cuales son fáciles de medir y sirven como alertas tempranas de transiciones de fase. En [25] se muestra de manera general el aumento en el tiempo de retorno.

Intuitivamente se puede esperar un aumento en la autocorrelación entre observaciones adyacentes  $x_t$  y  $x_{t+1}$ , ya que la ralentización provocará que el sistema se parezca más a su estado anterior, lo cual se puede interpretar como un aumento en la "memoria" del sistema. Lo anterior se puede ilustrar con el siguiente ejemplo tomado de [22]:

Supongamos que la variable de estado de un sistema es perturbado repetidamente durante periodos de tiempo  $\Delta t$ , de modo que el sistema retorna a su estado de equilibrio de forma aproximadamente exponencial con una rapidez  $\lambda$ . Un modelo simple autoregresivo se puede describir como

$$x_{n+1} - x^* = e^{\lambda \Delta t} (x_n - x^*) + \sigma \epsilon_n,$$
(2.8)

 $y_{n+1} = e^{\lambda \Delta t} y_n + \sigma \epsilon_n,$ 

en donde  $y_n$  es la desviación de la variable de estado de su punto de equilibrio,  $\epsilon$  es un número aleatorio de una distribución normal y  $\sigma$  es la desviación estándar.

Si consideramos que  $\lambda$  y  $\Delta t$  son independientes de  $y_n$ , el modelo puede ser descrito con un proceso autorregresivo de primer orden (AR(1))

$$y_{n+1} = \alpha y_n + \sigma \epsilon_n, \tag{2.9}$$

en donde la autocorrelación  $\alpha$  es cero para ruido blanco y cercano a 1 cuando la autocorrelación es grande. Si calculamos el valor esperado del proceso AR(1) de ambos lados obtenemos

$$E(y_{n+1}) = \alpha E(y_n) + \sigma E(\epsilon_n), \eta = \alpha \eta + 0 \Rightarrow \eta = 0.$$
(2.10)

En donde  $\eta$  es el valor esperado de y y calculando la varianza se encuentra

$$Var(y_{n+1}) = E(y_n) - 0^2 = \frac{\sigma^2}{1 - \alpha^2}.$$
 (2.11)

Como ya se mencionó, cerca de la bifurcación, la rapidez con la que el sistema retorna a su punto de equilibrio tiende a cero, y como consecuencia, la autocorrelación tiende a uno lo que implica que la varianza diverge en el valor crítico. Es por ello que la medición de varianza y la autocorrelación en series de tiempo son buenas alertas tempranas de transiciones de fase, resultado de la ralentización crítica.

Cuando el sistema se aproxima a un bifurcación catastrófica, aumenta la probabilidad de que éste transite a estados que anteriormente eran poco probables de visitar debido a que las cuencas de atracción se aproximan y el sistema presenta una alternancia entre ambas cuencas antes de que ocurra la transición; este fenómeno se le denomina *flickering*[22]. La asimetría estadística (*skewness* en inglés) se puede medir mediante el tercer momento de la distribución dando lugar a un buen indicador de alerta temprana, mientras que la curtosis, la cual está relacionada con el cuarto momento de la distribución y mide la cercanía de los datos a la media, funciona también como alerta temprana, pues el sistema puede encontrarse en más estados conforme se aproxima la transición y por lo tanto la dispersión de los datos en torno a la media será mayor[21].

### 2.2 Teoría de redes

Como se ha mencionado previamente, el estudio de los sistemas complejos ha adquirido gran interés en diversas disciplinas; por lo general, estos se componen de un gran número de elementos que interactúan entre sí para dar origen a una dinámica no lineal. Por ello, resulta de interés definir cuales son las relaciones entre los los elementos, así como el tipo de interacciones. Una herramienta muy poderosa para dichos fines es el estudio de la redes complejas, que tiene su origen y fundamento matemático en la teoría de grafos, y cuyas aplicaciones son muy variadas y pueden ir desde redes de transporte, transmisión de enfermedades, redes neuronales, redes sociales, o como se verá más adelante, en el análisis de series de tiempo, entre muchos otros ejemplos. A continuación se describirán algunos de los fundamentos matemáticos básicos de la teoría de redes, sin embargo, se recomienda consultar las referencias [28] y [29] si el lector desea mayores detalles.

La teoría de grafos tuvo su origen cuando, en 1735, Euler resolvió el problema de los siete puentes de Königsberg, y a partir de entonces se desarrolló una sólida teoría matemática, empleando, principalmente, elementos de probabilidad, estadística y topología.

Una red se compone de N nodos, los cuales se pueden etiquetar por i = 1, 2, ..., N, y L conexiones entre los nodos, las cuales se representarán por

parejas ordenadas (i, j) indicando que el nodo i está conectado con el nodo j.

La información contenida en una red se puede sintetizar en la matriz de adyacencia A, definida como una matriz de  $N \times N$ , en donde los elementos de matriz se definen, en el caso general, como  $A_{ij} = \alpha_{ij}$  en donde  $\alpha_{ij}$  es un valor proporcional a la interacción del nodo i con el j, mientras que para el caso más simple en donde la interacción entre pares de nodos es igual, se acostumbra asignar el valor  $_{ij} = 1$ , de modo que la matriz de adyacencia de una red con interacciones equivalentes entre nodos se define como[29]

$$A_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si hay un eje que apunta del nodo } j \text{ al } i \\ 0 & \text{si los nodos } i \text{ y } j \text{ no están conectados entre si} \end{cases}$$
(2.12)

Observamos en la ecuación 2.12 que cuando  $A_{ij} = 1$  se habla de una dirección, por ello, es preciso mencionar que se pueden clasificar dos tipos de redes; las redes dirigidas son aquellas en las que el enlace entre pares de nodos i y j tiene un sentido, es decir uno es la fuente y el otro es el receptor y las conexiones no son necesariamente reflexivas. Por otro lado están las redes no dirigidas, en donde la relación es reflexiva y la matriz de adyacencia es simétrica, *i.e.*  $A_{ij} = A_{ji}$ .

Se define el grado  $k_i$  de un nodo *i* como el número de enlaces que tiene con otros nodos y se puede calcular de manera fácil en términos de los elementos de la matriz de adyacencia. Para redes no dirigidas y no pesadas, el grado de un nodo es

$$k_i = \sum_{j=1}^{N} A_{ij} = \sum_{i=1}^{N} A_{ij}, \qquad (2.13)$$
mientras que para redes dirigidas se define el grado de entrada  $k_i^{in}$  como el número de enlaces provenientes de otros nodos y que inciden en *i*, mientras que el grado de salida  $k_i^{out}$  es el número de conexiones que van de *i* a otros nodos, de esta manera, el grado total de un nodo es

$$k_i = k_i^{in} + k_i^{out}, (2.14)$$

y tanto  $k_i^{in}$  com<br/>o $k_i^{out}$ también se pueden calcular en término de la matriz de adyacencia como

$$k_{i}^{in} = \sum_{j=1}^{N} A_{ij},$$

$$k_{i}^{out} = \sum_{i=1}^{N} A_{ij}.$$
(2.15)

Para obtener información general de qué tan conectada es la red es conveniente calcular en promedio que grado tienen los nodos. Se puede calcular el grado promedio para redes no dirigidas mediante la ecuación

$$\langle k \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i}^{N} k_{i}$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{i,j}^{N} A_{ij}.$$
(2.16)

Basta observar que, en una red dirigida, el número total de conexiones de entrada en toda la red será igual que el total de salida para obtener, empleando la ecuación 2.14, que

$$\langle k^{in} \rangle = \langle k^{out}, \rangle = \frac{1}{2} \langle k \rangle.$$
 (2.17)

La distribución de grado p(k) es una función que indica cual es la probabilidad de que un nodo de la red, seleccionado al azar, tenga grado k, y puede pensarse como un histograma normalizado dado por

$$p(k) = \frac{N_k}{N},\tag{2.18}$$

en donde  $N_k$  es el número de de nodos con grado k en la red y el denominador es el factor de normalización, de modo que  $\sum_{k=0}^{\infty} p(k) = 1$ . Conocer la forma de la distribución de grado es de gran importancia cuando se quiere caracterizar a la red, pues para redes aleatorias, p(k) usualmente tiene forma de distribución de Poisson, mientras que en las redes complejas reales, tales como la red de WWW (World Wide Web)[32] o la red de interacciones entre proteínas[31] por mencionar algunos ejemplos, se suelen observar distribuciones de grado que cumplen ley de potencias  $p(k) k^{-\gamma}$ , en donde  $\gamma >= 2$ . A dichas redes se les llama invariantes de escala<sup>[30]</sup> y tienen la propiedad de que al agregar nodos a la red, estos se enlazan de manera preferencial con aquellos que tienen mayor grado, es decir, al agregar un nuevo nodo a la red, la probabilidad de que éste se relacione con un nodo i está dada por  $\Pi(k_i) = k_i / \sum_j k_j$ . Se puede probar que una red construida con estas características, en donde a cada instante de tiempo t se le agrega un nodo con un enlace preferencia como se definió anteriormente, tenderá a una distribución de grado  $p(k) k^{-\gamma}$  que eventualmente será la misma sin importar el tiempo y, por lo tanto, el tamaño de la red.

Entre dos nodos de una red se puede encontrar uno o varios caminos que

los conecten siguiendo una ruta entre nodos conectados. El camino más corto entre los nodos i y j, también llamada distancia  $d_{ij}$ . En redes no dirigidas  $d_{ij} = d_{ji}$ , sin embargo en las dirigidas el camino se recorre en el sentido determinado por las conexiones y por lo general no es reflexivo. Se define la distancia promedio entre todos los pares de nodos de una red no dirigida como

$$\langle d \rangle = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{i \neq j}^{N} d_{ij}.$$
(2.19)

 $\langle d \rangle$  se puede interpretar como una medida de qué tan óptima es la red en cuanto al flujo de información entre los nodos.

Otra medida que nos ayuda a describir la estructura de las redes es el coeficiente de agrupamiento, también conocido como transitividad. Suponiendo que un nodo i de una red no dirigida tiene  $k_i$  vecinos en total, de los cuales,  $l_i$  nodos vecinos están conectados entre sí, el coeficiente de agrupamiento se define como

$$C_i = \frac{l_i}{\binom{k_i}{2}} = \frac{2l_i}{k_i(k_i - 1)}.$$
(2.20)

Gráficamente,  $C_i$  se puede interpretar como la razón del número de triángulos centrados en *i* entre el número de posibles triángulos que se pueden formar centrados en *i*, y se le denomina transitividad porque representa la proporción en la que las parejas de nodos *B* y *C* están conectados, dado que ambos están conectados con un nodo *A*.

Se puede calcular la transitividad promedio sobre todos los nodos de la red mediante

$$\langle C \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} C_i. \tag{2.21}$$

Una red puede dividirse en grupos, en donde los nodos que integran a cada uno de los grupos compartan una característica en común. Existen dos tipos de algoritmos computacionales con los cuales se puede realizar una división de la red en grupos[29], en donde la principal diferencia radica en que el número y tamaño de los grupos está fijado por el experimentador cuando se implementan algoritmos de "partición de red" (graph partition en inglés), en los cuales, el objetivo es minimizar el número de de enlaces entre grupos. Por otra parte, cuando se implementan algoritmos del tipo "detección de comunidades", la red también se divide en grupos con pocos enlaces entre sí, sin embargo el número de grupos no es fijo.

Recientemente se ha desarrollado un algoritmo para la detección de comunidades, llamado algoritmo infomap[36], el cual sigue un procedimiento similar al algoritmo desarrollado por Blondel[33], del cual se hablará primero para posteriormente hacer una analogía con el algoritmo infomap.

Supongamos que  $c_i$  representa el grupo al que pertenece el nodo i, el cual se denota por algún número  $1, ..., n_c$ , en donde  $n_c$  es el número de clases que hay en la red, de modo que el número de enlaces entre los nodos del mismo tipo estará dado por

$$\sum_{nlaces(i,j)} \delta c_i, c_j = \frac{1}{2} \sum_{ij} A_{ij} \delta c_i, c_j, \qquad (2.22)$$

en donde  $\delta$  es la delta de Kronecker y la suma es dividida entre dos para eliminar los valores repetidos[29]. Suponiendo que los enlaces están conectados aleatoriamente, el número de conexiones esperado entre los nodos i y j con grados  $k_i$  y  $k_j$  respectivamente es  $k_i k_j/2L$ , en donde L es el total de conexiones en la red y, por lo tanto, el número esperado de enlaces entre nodos del mismo tipo es

$$\frac{1}{2}\sum_{ij}\frac{k_ik_j}{2L}\delta c_i, c_j.$$
(2.23)

Calculando la diferencia entre las ecuaciones 2.22 y 2.23 se obtiene la diferencia entre el número real y el esperado de ejes en la red de la misma clase. Por convención, dicha diferencia se expresa dividida entre el número de conexiones L

$$Q = \frac{1}{2L} \sum_{ij} \left( A_{ij} - \frac{k_i k_j}{2L} \right) \delta c_i, c_j.$$
(2.24)

La expresión 2.24 es la definición de modularidad, denotada por Q, la cual toma valores estrictamente menores a 1, es positiva si hay más conexiones entre nodos del mismo tipo de los que pueden ser esperados con una distribución aleatoria, y negativa si hay menos.

El algoritmo de detección de comunidades descrito en [33] tiene como objetivo maximizar Q, el cual se divide en dos etapas, la primera inicia asignando una comunidad a cada nodo de la red, de modo que en este primer paso haya tantas comunidades como nodos. Posteriormente, para cada nodo i se consideran sus vecinos i y se calcula el cambio en la modularidad asociada al remover el nodo i de su comunidad y reubicada en la comunidad de j, de modo que si la modularidad aumenta, el nodo i se deja en la comunidad de j, y si no, se queda en su comunidad original. El proceso se ejecuta secuencial y repetidamente para todos los nodos de la red hasta no obtener ningún incremento en la modularidad. La segunda etapa del algoritmo consiste en construir una nueva red, reemplazando cada comunidad por un nuevo nodo, en donde el peso de las conexiones entre estos esté dado por la suma de los pesos de las conexiones originales entre los nodos de las dos comunidades, mientras que cada nuevo nodo estará auto-conectado a sí mismo con un enlace cuyo peso sea igual a la suma de los pesos de las conexiones de los nodos en el interior de la comunidad correspondiente. Una vez que la nueva red ha sido creada, se repite el procedimiento descrito en el primer paso.

El algoritmo descrito anteriormente no es el único, existen diferentes métodos para detectar comunidades y cada uno puede dar distintos resultados. En las referencias [34] y [37] se dan un par de ejemplos en dónde el algoritmo infomap, el cual será descrito a continuación, logra una mejor descripción en términos del flujo de un caminante aleatorio en redes dirigidas, además de que en [38] se calcula el límite del algoritmo que se describió anteriormente, el cual establece que las comunidades más frecuentes tendrán un número de enlaces del orden de  $\sqrt{2L}$  o menor. Si el lector desea leer un estudio comparativo entre diversos algoritmos de detección de comunidades, se recomienda consultar [39].

Supongamos que se tiene una partición de una red no pesada, e introducimos un caminante aleatorio. Después de una considerable cantidad de pasos, se puede estimar que cada nodo *i* será visitado con una frecuencia  $p_i$ . Si se obtiene el código de Huffman[35] asociado al proceso, se puede obtener una descripción completa de la trayectoria del caminante aleatorio. Si se divide cada módulo en una subred, y se obtiene el código de Huffman para cada subred, dicha la longitud de la descripción completa se reduce significativamente, sin perder información siempre y cuando se obtenga un código específico de entrada y salida de cada uno de los módulos<sup>2</sup>.

Dada una partición M de una red de N nodos en  $n_c$  grupos, el algoritmo infomap busca minimizar la longitud esperada del código fuente  $L(M)^3$  de la

 $<sup>^2 \</sup>mathrm{Se}$ recomienda consultar [34] si el lector dese<br/>a una descripción completa y con ejemplos sobre el algoritmo infom<br/>ap

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>Un código fuente C de una variable aleatoria X es un mapeo de  $X = \{x\}$  a  $D^* = \{$ conjunto de cadenas infinitas de un D-alfabeto $\}$ . C(x) denota el código correspondiente a x y l(x) denota la longitud de C(x).

descripción de un caminante aleatorio en la red[34]. Para ello se calcula la entropía de Shannon H asociada al proceso, en donde, para una variable aleatoria X con frecuencias  $p_i$ , la entropía está dada por  $H(X) = -\sum_{1}^{n} p_i log(p_i)$ . Dicha cantidad provee el límite inferior que puede alcanzar L [35], es decir, la entropía de Shannon establece el límite en el cual el código fuente asignado al proceso es óptimo. La longitud esperada de código fuente para la partición M está dada por

$$L(M) = q_{\frown} H(\mathcal{Q}) + \sum_{i=1}^{n_c} p_{i \circlearrowright} H(\mathcal{P}_i).$$
(2.25)

La ecuación 2.25 es llamada map equation en la literatura en inglés;  $q_{\sim}$  es la probabilidad de cambiar de módulo en cada paso  $(\sum_{i=1}^{n_c} q_i \curvearrowright), H(Q)$  es la entropía de los códigos de entrada de cada módulo. Si la frecuencia con la que se visita un nodo  $\alpha$  está dada por  $p_{\alpha}$ , el término  $p_{i\odot} = \sum_{\alpha ini} p_{\alpha} + q_i \curvearrowright$  y  $H(\mathcal{P}_i)$  es la entropía del código de los nodos que componen al módulo i, incluyendo el código de salida.[34]

El algoritmo infomap busca minimizar el valor de la ecuación 2.25 sobre las posibles particiones de una red[36], para ello sigue un procedimiento similar al de Blondel[33], el cual ya se ha mencionado brevemente, con la diferencia de que la selección de los nodos se lleva en orden aleatorio y en lugar de buscar incrementos en la modularidad, se busca disminuir 2.25. En [37] se pueden encontrar algunos ejemplos en donde el algoritmo infomap ha logrado obtener una modularidad mayor en comparación con el algoritmo de Blondel.

Por otra parte, la longitud esperada de un código fuente está dada por  $L(c) = \sum_{x \in X} p(x)l(x)$ , en donde p(x) es la probabilidad de la variable x.

Las definiciones anteriormente mencionadas fueron obtenidas en la referencia [35], la cual se recomienda consultar para mayores detalles

## 2.3 Algoritmos de visibilidad

Recientemente se han desarrollado métodos para mapear series de tiempo a redes, tales como los que se mencionan en [40], entre los que destacan los algoritmos de visibilidad por ser de bajo costo computacional y fáciles de programar, además de que heredan algunas propiedades de las series en las redes obtenidas. Muchos de los resultados al aplicar tales algoritmos parecieran ser poco justificados, sin embargo, haciendo un análogo con otro tipo de transformaciones, como la transformada de Fourier, la cual se define en el dominio de frecuencias, dichos algoritmos pueden ser entendidos como una transformación de las series, definidas en el dominio del tiempo, a un grafo definido en el dominio de visibilidad[40]. Sin embargo, es importante mencionar que a diferencia de la transformada de Fourier, aún no se ha encontrado un método que transforme la red resultante a la serie de tiempo original, es decir, no tiene transformación inversa.

Se han definido varias clases de algoritmos de visibilidad; entre éstos destacan el natural, el horizontal y el horizontal dirigido. el primero es el más general, mientras que el horizontal es una subred del natural cuya construcción geométrica permite demostrar diversos teoremas para series de tiempo aleatorias.

### 2.3.1 Algoritmo de visibilidad natural (AVN)

A pesar de que no se han demostrado teoremas con rigor matemático para los AVN, se ha mostrado que éstos preservan propiedades de las series de tiempo en las redes resultantes, tales como mapear series aleatorias a redes aleatorias, o periódicas a redes regulares, así como series fractales a redes invariantes de escala[41]. Dado  $\{x(t_i)\}_{i=1,...,N}$  una serie de tiempo de N datos, el criterio de visibilidad natural establece que cada valor  $x(t_i)$  estará asociado a un nodo i y dos nodos arbitrarios a y b estarán conectados si para cualquier  $t_c$  tal que  $t_a < t_c < t_b$  ocurre:

$$x(t_c) < x(t_b) + (x(t_a) - x(t_b)) \frac{t_b - t_c}{t_b - t_a}.$$

(2.26)

En la figura 2.1 se muestra un ejemplo de la construcción de la red mediante el algoritmo de visibilidad natural, en donde se observa que todos los nodos, a excepción quizá de  $x(t_1)$  y  $x(t_N)$ , tendrán grado  $k \ge 2$ , ya que tienen visibilidad al menos con sus dos datos adyacentes. Obsérvese que los grafos resultantes son conectados, no dirigidos e invariantes bajo transformaciones afines<sup>4</sup>, lo cual tiene cierta importancia, debido a que series de tiempo cuantitativamente distintas pueden mapear a grafos iguales, sin embargo, si se usaran redes pesadas, en donde el peso de cada enlace fuera proporcional a la pendiente de la recta que une a los datos, se podría preservar información cuantitativa en la matriz de adyacencia.

### 2.3.2 Algoritmos de visibilidad horizontal (AVH)

El criterio de visibilidad horizontal[42] establece que para una serie de tiempo  $\{x(t_i)\}_{i=1,\dots,N}$ , en donde cada  $x(t_i)$  está asociado a un nodo *i* conectado con sus primeros vecinos, los nodos arbitrarios *a* y *b* están conectados si para

 $<sup>^4{\</sup>rm Si}$ se reescalan y/o trasladan los valores de la serie de tiempo tanto horizontal como verticalmente, la red resultante se mantiene igual.



0.71, 0.53, 0.58, 0.29, 0.30, 0.77, 0.01, 0.76, 0.81, 0.71, 0.05, 0.41, 0.86, 0.79, 0.37, 0.96, 0.87, 0.06, 0.95, 0.36

0.71, 0.53, 0.58, 0.29, 0.30, 0.77, 0.01, 0.76, 0.81, 0.71, 0.05, 0.41, 0.86, 0.79, 0.37, 0.96, 0.87, 0.06, 0.95, 0.36



Figura 2.1: En la imágen superior se muestra una representación del algoritmo de visibilidad natural, mientras que en la inferior se ilustra la construcción de la red mediante el algoritmo de visibilidad horizontal.

todo  $t_c$ , tal que  $t_a < t_c < t_b$ , se cumple:

$$x(t_c) < x(t_a), \ x(t_b),$$
 (2.27)

el criterio 2.27 luce mucho más simple que el de la desigualdad 2.26, y como ya se mencionó, la red obtenida de una serie de tiempo mediante el AVH es una subred de la que se obtendría usando el AVN. La construcción geométrica del AVH permite demostrar algunos teoremas y propiedades de la topología de las redes, además de que ha sido usado para caracterizar y distinguir series caóticas y aleatorias[43][44]. A continuación se mencionarán las más importantes para fines de este trabajo, en donde se omitirán las demostraciones, la cuales se pueden consultar en [42]

**Teorema 2.3.1** El grado promedio de un grafo de visibilidad horizontal asociado a una serie periódica infinita de periodo T es

$$\langle k(T) \rangle = 4 \left( 1 - \frac{1}{2T} \right). \tag{2.28}$$

un resultado inmediato es que toda serie de tiempo infinita de un sistema dinámico tendrá asociada una red con distribución de grado promedio  $2 \leq \langle k(T) \rangle \leq 4$ , en donde  $\langle k(T) \rangle = 4$  corresponde a la serie de un sistema caótico aperiódico o a una serie aleatoria, mientras que  $\langle k(T) = 2 \rangle$  corresponde a una serie constante.

**Teorema 2.3.2** Dada una serie de tiempo bi-infinita  $\{x(t_i)\}_{i=-\infty,...,\infty}$  de variables independiente e idénticamente distribuidas con una densidad de probabilidad continua f(x), tendrá asociado un grafo con distribución de grado

$$P(k) = \frac{1}{3} \left(\frac{2}{3}\right)^{k-2}.$$
 (2.29)

El teorema 2.29 es de gran utilidad, ya que sin importar cual sea la densidad de probabilidad con la cual se distribuye la serie de tiempo, permite distinguir procesos aleatorios de caóticos, lo cual es de suma importancia,

pues un proceso caótico se rige por una dinámica determinista, mientras que uno aleatorio, no.

# Capítulo 3

# Desarrollo, resultados y análisis

Se implementó el algoritmo de metrópolis con una malla de  $100 \times 100$  celdas y condiciones a la frontera periódicas para realizar una simulación del modelo de Ising, la cual se implementó en Python. Se obtuvieron 100 series de tiempo para 34 valores distintos de temperatura, expresadas en unidades de  $J/k_B$ , entre T = 1.42 y T = 3.12 con intervalos de 0.05, en donde se consideró que cada paso de tiempo se llevaba a cabo una vez que el algoritmo de metrópolis seleccionaba, en orden aleatorio, a cada una de las 10000 celadas. Se obtuvieron series de tiempo de 5000 datos cada una, en donde se descartaron los primeros 1000 debido a que es el tiempo que, en promedio, es necesario para que la temperatura más baja que se considera en este trabajo alcance una magnetización  $M = \pm 1$  [13].

Se obtuvieron 100 series de tiempo para cada temperatura con las características que se especificaron anteriormente para poder realizar un análisis estadístico y obtener las propiedades de ensamble de los resultados obtenidos. Se aplicaron los algoritmos de visibilidad natural y visibilidad horizontal a cada serie de tiempo y se calculó el grado promedio, la longitud de camino más corto promedio, la transitividad promedio, las distribución de grado, de cada una de las redes, así como también se aplicó el algoritmo infomap para detectar comunidades en la red y posteriormente se obtuvo la distribución de tamaño de comunidades, lo anterior con las librerías NetworkX e infomap, disponibles para Python. Finalmente, para cada temperatura se promediaron los 100 valores de cada una de las cantidades anteriormente mencionadas y descritas en el capítulo 2.

Las series de tiempo del modelo de Kuramoto se obtuvieron mediante una simulación en donde se consideró una distribución de frecuencias gausseana. El análisis fue análogo al de Ising, sin embargo, en este caso se consideraron series de tiempo con valores de la constante de acoplamiento entre el intervalo 0.05 y 3.50, con espacios de 0.05, es decir, 70 valores de K.

Cabe mencionar que en el modelo de Ising el valor crítico de temperatura es aproximadamente  $T_c\approx$  2.27, mientras que la constante de acoplamiento en el caso del modelo de Kuramoto se encuentra cercano a  $K_c \approx 1.65$ , sin embargo, el efecto de finitud y periodicidad de la malla, así como el efecto de osciladores finitos, pueden causar que el valor crítico se encuentre ligeramente desplazado, es por ello que se han considerado tres regiones en cada uno de los modelos, las cuales se determinaron bajo un juicio personal, resultado de observar el comportamiento que se describe en las gráficas que se mostrarán en este capítulo; en el de Ising tomaremos el intervalo de T entre 1.42 y 2.17 como aquél en el que el sistema tiene magnetización, T entre 2.22 y 2.32como el intervalo en el cual el sistema transita entre tener una magnetización  $M\,\approx\,1$ y $M\,\approx\,0$ y finalmente el intervalo de 2.37 a 3.12 en el cual el sistema pierde su magnetización. En la figura 3.1 se pueden observar series de tiempo correspondientes a cada una de las tres regiones descritas, en donde el lector puede observar diferencias notables en los valores de M. Por otro lado, en el modelo de Kuramoto consideraremos el intervalo de constantes

de acoplamiento de 0.05 a 1.50 como aquellos valores en los cuales el sistema está desincronizado, el intervalo de 1.80 a 3.50 correspondiente al estado en el cual es sistema se encuentra sincronizado, y el intervalo entre 1.55 a 1.75 como aquél en el que el sistema transita entre ambos estados. En este caso las series de tiempo de la figura 3.2 resultan ilustrativas



Figura 3.1: Series de tiempo del modelo de Ising para distintas temperaturas. Obsérvese que los valores de la magnetización cambian drásticamente dependiendo del valor de  ${\cal T}$ 



Figura 3.2: Series de tiempo del modelo de Kuramoto para distintos valores de acoplamiento K. La magnitud de |r| cambia notoriamente en los tres valores de K

## **3.1** Descripción de resultados

Este apartado se divide en dos partes. En la primera se estudian únicamente las propiedades topológicas expuestas en el capítulo 2 de las redes obtenidas mediante el algoritmo de visibilidad natural (AVN), mientras que en la segunda se analizan las redes resultantes del algoritmo de visibilidad horizontal (AVH), en donde se presentarán los resultados de ambos modelos juntos con la finalidad de hacer un análisis comparativo en ambas secciones.

## 3.1.1 Algoritmo de visibilidad natural en ambos modelos

Se desarrolló un código en python para implementar el AVN (ecuación 2.26) y generar una red de 4000 nodos. Las figuras 3.3 y 3.4 muestran ejemplos de las visualizaciones de las redes para ambos modelos en las tres regiones que se definieron previamente. Dichas visualizaciones se hicieron, en la primer figura, implementando el algoritmo de Fruchterman y Reingold, mientras que la segunda se visualizó acomodando los nodos en orden de aparición según la serie de tiempo en un arreglo circular, empezando desde los 90 en sentido contrario a las manecillas del reloj, ambas visualizaciones se hicieron con el software Gephi. A simple vista se puede observar que la topología de las redes es distinta entre los dos modelos, y que, en ambos, la red sufre cambios notables para la series de tiempo en el valor crítico. Lo visual ayuda a identificar rápidamente que el AVN detecta cambios en la zona crítica, entre éstos, resulta evidente un aumento en el número de enlaces y es de esperarse un aumento en el grado promedio, así como un cambio en la distribución de grado. En los siguientes apartados se cuantificarán diversas propiedades topológicas de las redes, las cuales fueron descritas en el capítulo 2.





(b)  $K < K_c$ 





(c)  $T \approx T_c$ 

(d)  $K \approx K_c$ 



Figura 3.3: Ejemplo redes obtenidas mediante el algoritmo de visibilidad natural del modelo de Ising ((a), (c) y (e)) y de Kuramoto ((b), (d) y (f)) para las tres regiones del parámetro de control empleando el algoritmo de Fruchterman y Reingold.



Figura 3.4: Ejemplo redes obtenidas mediante el algoritmo de visibilidad natural del modelo de Ising ((a), (c) y (e)) y de Kuramoto ((b), (d) y (f)) para las tres regiones del parámetro de control en un arreglo circular y ordenado.

#### Distribución de grado

Se promediaron las 100 distribuciones de grado de cada red, obtenidas por la ecuación 2.18, con el mismo valor de parámetro de control. Las figuras 3.5 y 3.6 muestran, cada una, tres distribuciones de grado para tres distintos valores del parámetro de control en escalas logarítmicas. Ambas tienen en común que la "cola" de la distribución correspondiente al valor crítico es mucho más larga que en las regiones no críticas, sin embargo, puede observarse que, cuantitativamente, son diferentes.



Figura 3.5: Distribuciones de grado en el modelo de Ising obtenidas por el AVN. En gris observamos una de las distribuciones para  $T < T_c$ , en negro para  $T > T_c$  y en rojo para  $T \approx T_c$ . La gráfica muestra las distribuciones a partir de k = 2, ya que los nodos correspondientes a los datos iniciales y finales con visibilidad de su único vecino ha sido omitido, pues una de las propiedades del AV es que todos los nodos tienen al menos k = 2



Figura 3.6: Distribuciones de grado en el modelo de Kuramoto obtenidas por el AVN. En gris se muestra una de las distribuciones para  $K < K_c$ , en negro para  $K > K_c$  y en rojo para  $K \approx K_c$ . En este caso también se ha omitido k = 1 de la distribución.

En el modelo de Ising se puede notar que el grado más frecuente es  $P_{max}(k) = P(3)$ , mientras que en el de Kuramoto varía entre 12 y 36 dependiendo del valor de la constante de acoplamiento. Por otra parte, el grado máximo  $k_{max}$  se duplica en ambos modelos cuando el parámetro de control se encuentra en su valor crítico, con respecto a los valores de  $k_{max}$  en las regiones no críticas.

#### Grado promedio

Se empleó la ecuación 2.16 para obtener el grado promedio de cada red y se obtuvo el promedio del ensamble de los promedios de los grados para cada valor del parámetro de control. Los resultados de los modelos de Ising y Kuramoto se muestran en las figuras 3.7 y 3.8 respectivamente.



Figura 3.7: Grado promedio de redes obtenidas mediante el AVN en función de la temperatura en el modelo de Ising. Obsérvese que conforme  $T \to T_c$ , la desviación estándar de la media, representada por las barras de error, aumenta.

En la figura 3.7 observamos que hay una incremento abrupto en el grado promedio al aumentar la temperatura a  $T \approx T_c$ , y al incrementar más la temperatura a la región  $T > T_c$ , se encuentra que el valor de  $\langle k \rangle$  decae de manera más abrupta que en la primer zona. Observando la figura 3.7 se encuentra un comportamiento semejante al anterior, pero reflejado; es decir, en este caso, es la tercer zona ( $K > K_c$ ) en donde la caída entre la zona crítica y ésta es más abrupta en comparación a la caída entre la zona intermedia y la primera  $K < K_c$ . El incremento del grado promedio en el la zona crítica de ambos modelos era de esperarse a partir de ver las distribuciones de grado.



Figura 3.8: Grado promedio de redes obtenidas mediante el AVN en función del acoplamiento K en el modelo de Kuramoto. Observamos un comportamiento simétrico que resulta muy similar al que se observa en la figura 3.7 en términos cualitativos

#### Longitud de camino más corto promedio

El cálculo de la longitud de camino más corto promedio fue la operación que requirió más tiempo de cómputo debido a que primero se calcula el camino más corto entre todas las combinaciones posibles de nodos y posteriormente se hace el promedio (alrededor de un minuto por red). En las figuras 3.9 y 3.10 se muestra  $\langle d \rangle$ , dado por la ecuación 2.19, en función de los parámetros de control.



Figura 3.9: Promedio de camino más corto en redes obtenidas mediante el AVN en el modelo de Ising.

Resulta evidente que la desviación estándar de la media es significativamente mayor en comparación a la del grado y la transitividad promedio, sin embargo, se observa en ambas gráficas una tendencia en la que disminuye  $\langle d \rangle$ a medida que el parámetro de control se aproxima al valor crítico por ambos sentidos y que el valor mínimo del ensamble se encuentra dentro de la región de transición.



Figura 3.10: Promedio de camino más corto en redes obtenidas mediante el AVN en el modelo de Kuramoto. Al igual que en la figura 3.9, la desviación estándar de los datos es grande; sin embargo, las semejanzas cualitativas entre ambos modelos no son tan notorias entre ambas figuras.

#### Transitividad promedio

La transitividad o también llamado coeficiente de agrupamiento (*clustering coefficient* en inglés), definida por la ecuación 2.21, se muestra en las gráficas 3.11 y 3.12 para los modelos de Ising y de Kuramoto respectivamente. En el de Ising se observa que para  $T < T_c$ ,  $\langle C \rangle$  aumenta sutilmente conforme Tse aumenta hasta un punto en el cual  $\langle C \rangle$  comienza a decaer cada vez más rápido hasta entrar en la zona crítica con  $T \approx T_c$ , y en la tercer zona  $\langle C \rangle$ comienza a crecer más lentamente. El comportamiento de  $\langle C \rangle$  en función de la temperatura en el modelo de Kuramoto es en sentido inverso al de Ising.



Figura 3.11: Transitividad (*clustering coefficient*) promedio de redes obtenidas mediante AVN en el modelo de Ising. Obsérvese que en la región  $T < T_c$  el valor de  $\langle C \rangle$  comienza a aumentar de forma constante al incrementar T hasta cierto valor de temperatura a partir del cual  $\langle C \rangle$  cae rápidamente.



Figura 3.12: Transitividad (*clustering coefficient*) promedio de redes obtenidas mediante AVN en el modelo de Kuramoto. Observamos que cerca de la zona crítica se preserva cierta simetría con respecto a la figura 3.11

#### Detección de comunidades

Para la detección de comunidades se implementó el algoritmo infomap, descrito en el capítulo 2 a cada una de las redes. En las figuras 3.13 y 3.14 se observan ejemplos de la visualización de las comunidades en las redes para distintos valores del parámetro de control en el modelo de Ising y de Kuramoto respectivamente, así como la representación de dichas comunidades en la serie de tiempo. Dichas figuras nos ayudan a ver el tipo de estructuras en la serie de tiempo que forma comunidades. Por otra parte, se puede observar que la diferencia entre los tamaños de las comunidades en las zonas no críticas no es tan drástica como en las zonas críticas.



Figura 3.13: Detección de comunidades con el algoritmo infomap en redes obtenidas mediante el AVN en el modelo de Ising. Se eligió la gama de colores del espectro visible de modo que el violeta corresponde a las comunidades más grandes y las más pequeñas tienden al rojo. Arriba podemos observar la serie de tiempo y la red asociada a  $T < T_c$ , y en medio y abajo, las correspondientes a  $T \approx T_c$  y  $T > T_c$  respectivamente. Obsérvese que, en  $T \approx T_c$ , los valles en la serie de tiempo, a diferentes escalas, forman comunidades.



Figura 3.14: Detección de comunidades mediante el algoritmo infomap en redes obtenidas mediante el AVN correspondientes al modelo de Kuramoto. El código de colores es el mismo que el que se usó en 3.13. Arriba podemos observar la serie de tiempo y la red asociada a  $K < K_c$ , y en medio y abajo, las correspondientes a  $K \approx K_c$  y  $K > K_c$  respectivamente.

Para obtener información sobre el comportamiento de las comunidades de las redes obtenidas mediante el AVN cuando los modelos se aproximan

58

a la transición de fase, se procedió a calcular las distribuciones de tamaño de comunidad. Para ello se calculó la distribución de tamaño de comunidad asociado a la red, es decir, un "histograma normalizado" de la frecuencia de aparición de comunidades conformadas por X número de nodos. Dicho procedimiento se hizo para cada una de las 100 redes con el mismo valor del parámetro de control y se obtuvo un promedio de dicha distribución.



Figura 3.15: Distribución de tamaños de comunidad en el modelo de Ising en las tres regiones. En esta figura se muestra una comparación entre las distribuciones correspondientes a las tres zonas de T y se observa que, en una amplia región de tamaños de comunidad, la distribución correspondiente a  $T_c = 2.27$  sigue una recta en escalas logarítmicas.

Las figuras 3.15 y 3.16 muestran la distribución de tamaño de comunidad en cada una de las tres distintas regiones del modelo de Ising y de Kuramoto respectivamente. En ambas se puede notar que la cola de la distribución correspondiente al valor crítico es más larga en comparación con las distribuciones de las dos regiones no críticas.



Figura 3.16: Distribución de tamaños de comunidad en el modelo de Kuramoto en las tres regiones. En esta imágen, la forma que recta que toma la distribución de tamaños en  $K \approx K_c$  no se encuentra tan definida como en la figura 3.15, sin embargo, en comparación a las distribuciones de las zonas no críticas, es la distribución que mas se ajusta a una recta en escalas logarítmicas.

Además, podemos observar que mientras las distribuciones de las dos regiones no críticas tienen una forma curva que cae rápidamente en escalas logarítmicas, la distribución correspondiente al valor crítico toma la forma de una recta con pendiente negativa a partir de la comunidades de tamaños chicos (de 21 nodos para el modelo de Ising y 49 nodos para el de Kuramoto), considerando que en el de Ising se llegan a detectar comunidades de 300 nodos y en el de Kuramoto de hasta 900 aproximadamente.



Figura 3.17: Regresión logarítmica de la distribución de tamaños de comunidad en el modelo de Ising. La presente gráfica muestra una comparación de los datos con la regresión logarítmica, la cual se obtuvo tomando en cuenta la distribución de tamaños de comunidad de 21 a 177 nodos.

Una vez que se observó que las distribuciones de tamaños de comunidad siguen una ley de potencias, se obtuvieron las ecuaciones de las curvas que describen a las distribuciones mediante una regresión logarítmica, tomando el segmento de tamaños de comunidad que más representa una recta en escalas logarítmica. El intervalo de tamaños de comunidades para hacer dicho ajuste se consideró bajo un criterio personal, resultado de la observación de las gráficas y se obtuvieron las distribuciones  $P(x) = (26.16 \pm 6.882)x^{-2.26\pm0.058}$ y  $P(x) = (4.77 \pm 1.7999)x^{-1.59\pm0.078}$  para los modelos de Ising y Kuramoto respectivamente. En las figuras 3.17 y 3.18 se muestran las distribuciones en la zona crítica de ambos modelos comparados con el ajuste.



Figura 3.18: Regresión logarítmica de la distribución de tamaños de comunidad en el modelo de Kuramoto. En esta gráfica se comparan los datos con la regresión logarítmica, la cual se obtuvo tomando en cuenta la distribución de tamaños de comunidad de 49 a 213 nodos.

## 3.1.2 Algoritmo de visibilidad horizontal en ambos modelos

Se implementó el AVH en python para obtener redes de 4000 nodos y se hizo el mismo análisis que se hizo para las redes obtenidas mediante el AVN. Las figuras 3.19 y 3.20 muestran algunos ejemplos de las redes obtenidas, en donde no se observan cambios drásticos para los parámetros T y K en sus valores críticos en comparación a los que se notan mediante el AVN.



Figura 3.19: Ejemplo redes obtenidas mediante el algoritmo de visibilidad horizontal del modelo de Ising ((a), (c) y (e)) y de Kuramoto ((b), (d) y (f)) para las tres regiones del parámetro de control empleando el algoritmo de Fruchterman y Reingold.



Figura 3.20: Ejemplo redes obtenidas mediante el algoritmo de visibilidad horizontal del modelo de Ising ((a), (c) y (e)) y de Kuramoto ((b), (d) y (f)) para las tres regiones del parámetro de control con los nodos ordenados en un arreglo circular.
#### Distribución de grado

Se obtuvieron las distribuciones de grado para ambos modelos, las cuales mostraron variaciones muy sutiles entre las tres regiones. Además, éstas mostraron tener un grado máximo considerablemente menor con respecto a los obtenidos mediante el AVN (figuras 3.21 y 3.22).



Figura 3.21: Distribuciones de grado en el modelo de Ising obtenidas por el AVH. Además de que el grado máximo es mucho menor al del AVN, se puede observar que no hay diferencias tan importantes entre las distribuciones de las tres regiones

A pesar de ello se procederá a medir el grado promedio y el resto de las propiedades topológicas que se midieron en la sección anterior,



Figura 3.22: Distribuciones de grado en el modelo de Kuramoto obtenidas mediante el AVH. Al igual que en el modelo de Ising, el AVH crea nodos con grado máximo mucho menor a los creados con el AVN, Además de que las distribuciones son muy similares para distintos valores del parámetro de control

### Grado promedio

Las figuras 3.23 y 3.24 muestran los resultados obtenidos al calcular el grado promedio para el modelo de Ising y de Kuramoto respectivamente. En 3.23 observamos que, en la región  $T < T_c$ , el grado promedio crece conforme aumenta T hasta llegar a la región  $T \approx T_c$ , en donde, disminuye el valor del grado promedio repentinamente para recuperarse en la zona  $T > T_c$ , en la cual el grado promedio sigue aumentando pero de asintótica. En la figura 3.24 se observa un comportamiento análogo al que ocurre en el modelo de Ising, pero recorrido en sentido contrario.

Es importante resaltar que la mayoría de las gráficas presentadas han preservado cierta simetría axial con respecto al valor crítico entre ambos

66

modelos; sin embargo, las del grado promedio de las redes obtenidas mediante el AVH nos permite obtener ciertas interpretaciones.



Figura 3.23: Grado promedio de redes obtenidas mediante el AVH en el modelo de Ising. Obsérvese que el valor de  $\langle k \rangle$  va en aumento conforme el sistema transita de la zona estática a aquella en la que predominan las fluctuaciones estocásticas, mientras que en la zóna crítica hay una caida en dicho valor.



Figura 3.24: Grado promedio de redes obtenidas mediante el AVH en el modelo de Kuramoto. En este caso observamos el mismo comportamiento culitativo que en la figura3.23, en donde se preserva la simetría axial con respecto al valor crítico

Por una parte, en el algoritmo de metrópolis con el cual se obtuvo la serie de modelo de Ising, podemos observar que en uno de los casos extremos cuando  $T \rightarrow 0 \Rightarrow exp(-\Delta E/kT) \rightarrow 0$ , y por lo tanto, el número aleatorio 0 < r < 1 no podrá generar cambios en el sistema, y despues de un determinado número de iteraciones, el sistema minimizará su energía hasta mantenerla fija obteniendo como resultado una serie de tiempo constante. Si se considera el caso opuesto en el cual  $T \rightarrow \infty$ , el sistema se encontrará en constante cambio de modo que la aleatoriedad del sistema se haga presente en la serie de tiempo.

Por otra parte, un análisis análogo en el modelo de Kuramoto permite ver que en el límite cuando  $K \to 0$ , se desprende de la ecuación 1.5 que  $\theta_i(t) = \omega_i t + c_i$ , en donde  $c_i$  es la fase inicial del oscilador *i*. Sustituyendo en la ecuación 1.3 se obtiene

$$re^{i\psi} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} e^{i(\omega_j t + c_j)}.$$
 (3.1)

Si consideramos que la distribución de de frecuencias naturales de vibración es simétrica con respecto a  $\Omega = 0$  y que la fase inicial de todos los osciladores es la misma (los cuales cambiarán su fase rápidamente, pues el acoplamiento es nulo), se puede escribir la ecuación 3.1 como

$$re^{i\psi} = \frac{e^{ic}}{N} \sum_{\omega_i \in \{0,\dots,\omega_{max}\}} e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}.$$
(3.2)

Calculando la magnitud de r y empleando la propiedad  $2cos(z) = e^{iz} + e^{-iz}$ , se obtiene de la ecuación 3.2

$$r(t) = \frac{2}{N} \sum_{\omega_i \in \{0, \dots, \omega_{max}\}} \cos(\omega_i t).$$
(3.3)

Lo anterior se ha hecho para mostrar que cuando  $K \to 0$ , |r(t)| no se mantiene constante en el tiempo, pues al calcular la derivada resulta

$$\frac{dr(t)}{dt} = \frac{-2}{N} \sum_{\omega_i \in \{0, \dots, \omega_{max}\}} \omega_i \sin(\omega_i t), \qquad (3.4)$$

lo cual no necesariamente se anula.

Por otro lado, si consideramos el caso extremo en el cual  $K \to \infty$ , se obtiene  $\theta_i = \psi$  para todos los osciladores, lo cual implica que r = 1 no tiene dependencia temporal y por lo tanto se mantiene constante.

Las características mencionadas anteriormente se relacionan con el grado promedio mediante el teorema 2.3.1, el cual implica que para series de tiempo constantes bi-infinitas,  $\langle k \rangle = 2$ , que es la tendencia que siguen los sistemas cuando el parámetro de control se aproxima al valor en el cual las series de tiempo se vuelven constantes, mientras que para las aperiódicas  $\langle k \rangle = 4$ , lo cual se relaciona con el crecimiento asintótico en la región en donde el parámetro de control se aproxima al valor en el cual predominan la fluctuaciones estocásticas o caóticas en las series de tiempo. Finalmente, la disminución del grado promedio en la región de la zona crítica, se relaciona con que el sistema se encuentra en un umbral entre ambas dinámicas.

#### Longitud de camino más corto promedio

En las figuras 3.25 y 3.26 se muestra el promedio de las longitudes de camino más corto. En éstas se observa que al tener menos enlaces que las redes obtenidas mediante AVN, la magnitud de  $\langle d \rangle$  es mayor, pero a diferencia del AVN en donde  $\langle d \rangle$  disminuía en el valor crítico y se presentaba una amplia desviación de  $\langle d \rangle$  para todos los valores de T y de K, en el AVH,  $\langle d \rangle$ aumenta abruptamente en el valor crítico y la desviación que se presenta es mucho menor. Obsérvese que una vez más se presenta simetría axial entre las gráficas de ambos modelos.



Figura 3.25: Promedio de longitud de camino más corto en AVH en el modelo de Ising.



Figura 3.26: Promedio de longitud de camino más corto en AVN en el modelo de Kuramoto

#### Transitividad promedio

La transitividad guarda una relación muy estrecha con el grado promedio cuando se trata de series de tiempo aleatorias. De hecho se ha demostrado para series de tiempo aleatorias que el coeficiente de agrupamiento local se puede escribir en función del grado  $k \operatorname{como} C(k) = 2/k$  [42]. Las figuras 3.27 y 3.27 muestran el coeficiente de agrupamiento de las redes de ambos modelos a distintos valores del parámetro de control. Una comparación cualitativa con las gráficas del grado promedio resulta muy similar principalmente en el modelo de Kuramoto, mientras que en el de Ising se puede observar que en la región  $T > T_c$ , el coeficiente de agrupamiento promedio aumenta en función de la temperatura de manera aproximadamente lineal.



Figura 3.27: Transitividad (*clustering coefficient*) promedio en AVH en el modelo de Ising



Figura 3.28: Transitividad (*clustering coefficient*) promedio en AVH en el modelo de Kuramoto.

#### Detección de comunidades

Finalmente, se implementó el algoritmo infomap para detectar comunidades en las redes obtenidas mediante el AVH y comprobar si la distribución de tamaños cumple o no alguna ley de potencias en el valor crítico, así como averiguar el tipo de estructuras en la serie de tiempo que conforman las comunidades.

Las figuras 3.29 y 3.30 muestran ejemplos de las visualizaciones de las comunidades detectadas para las tres distintas regiones del parámetro control en el modelo de Ising y de Kuramoto respectivamente. En éstas se puede notar que los grupos se componen de un número de nodos mucho menor que los que se alcanzaban a formar en el caso del AVN y por consecuencia, el número de comunidades detectadas se duplicó (300 comunidades detectadas en ambos modelos aproximadamente para todos los valores del parámetro de control). También se observa que no se detecta ningún patrón particular en la serie de tiempo correspondientes al valor crítico como ocurría con el AVN. Para obtener mayor información sobre las comunidades en el AVH se calcularon las distribuciones de tamaño de comunidad. Las figuras 3.31 y 3.32 muestran la distribución para un valor en cada una de las tres zonas del parámetro de control en el modelo de Ising y de Kuramoto respectivamente. El resultado es que a diferencia del AVN, no se encuentra ninguna ley de potencias y las distribuciones son muy similares en los tres casos.



Figura 3.29: Detección de comunidades mediante el algoritmo infomap en redes obtenidas mediante el AVH correspondientes al modelo de Ising. Se empleó el código de colores descrito en la figura 3.13.



76

Figura 3.30: Detección de comunidades mediante el algoritmo infomap en redes obtenidas mediante el AVH correspondientes al modelo de Kuramoto. Se empleó el código de colores descrito en la figura 3.13.



Figura 3.31: Distribución de tamaños de comunidad en el modelo de Ising en las tres regiones con el AVH



Figura 3.32: Distribución de tamaños de comunidad en el modelo de Kuramoto en las tres regiones con el AVH.

# 3.2 Resultados generales y un análisis comparativo

Varias de las gráficas que han sido exhibidas presentan diferencias entre las tres regiones que se definieron previamente para los parámetros de control  $T \neq K$ . Aunque no todas funcionan como alertas tempranas, algunas nos sirven para obtener información sobre el comportamiento del sistema como es el caso del grado promedio en el AVH. Cabe destacar que en el modelo de Ising resulta que en la primer región  $T < T_c$  el sistema presenta cierto orden espacial en el cual la gran mayoría de los espines se encuentran alineados en una misma dirección, y más aún, si se considera el caso T = 0, la serie de tiempo se vuelve constante. En el modelo de Kuramoto ocurre algo similar en la tercera región  $K > K_c$ , sin embargo, en este caso el orden se presenta en un sentido temporal, en donde la gran mayoría de los osciladores se encontrarán en sincronía, además de que si se considera  $K \to \infty$ , la serie de tiempo resultante será constante. Por otra parte, la tercera región en el modelo de Ising  $T > T_c$  presenta "desorden" espacial, ya que, debido a que las fluctuaciones térmicas se vuelven predominantes en el sistema, la configuración de los espines es aleatoria para dichos valores de temperatura, mientras que algo análogo sucede en el modelo de Kuramoto en la primera región  $K < K_c$ , en donde los osciladores vibran a distintas fases, completamente fuera de sincronía. Por último, en ambos modelos se presenta la transición de fase en la segunda región  $T \approx T_c$  y  $K \approx K_c$ . Las similitudes que presentan ambos modelos en las tres regiones justifican la simetría axial que se observa entre las gráficas de las propiedades topológicas de las redes en función del parámetro de control (grado promedio, transitividad promedio y longitud de camino más corto promedio).

A continuación se expondrá la efectividad de cada uno de los algoritmos como alerta temprana, en donde se considerará que son útiles si la misma propiedad topológica tiene el mismo comportamiento cualitativo en ambos sistemas cuando éste se encuentra próximo a la transición de fase.

### 3.3 El algoritmo de visibilidad natural para la detección de alertas tempranas

El AVN mostró detectar cambios en las redes incluso en la visualización de éstas al variar el parámetro de control en ambos modelos. Las distribuciones de grado tuvieron un dominio mucho más amplio en los valores críticos, sin embargo, resulta más cómodo usar una magnitud como alerta temprana en lugar de una distribución.

En primer lugar, el grado promedio funciona como alerta temprana en ambos modelos tanto para valores del parámetro de control menor al valor crítico como para valores mayores, pues un incremento de dicha magnitud significa que el parámetro de control se aproxima a su valor crítico en ambos sentidos. Dicho valor está relacionado con el número de conexiones en la red, lo cual indica que conforme el sistema se aproxima a la transición de fase, Laumenta significativamente. Considerando que los algoritmos de visibilidad son invariantes bajo transformaciones afines, el incremento en la varianza en las series de tiempo de un sistema próximo a una transición de fase no justifica el comportamiento de  $\langle k \rangle$ , sin embargo, el incremento en la autocorrelación si lo hace, pues si suponemos que un valor  $x_i$  está conectado con  $x_j$ , la probabilidad de que  $x_i$  esté conectado también con  $x_{j-1}$  y  $x_{j+1}$  será mayor conforme la auto-correlación de la serie de tiempo aumenta.

Debido a que el aumento en la auto-correlación genera que un elemento

 $x_i$  logre ver a una mayor cantidad de datos, la longitud de camino más corto promedio se reducirá en las redes cuando el sistema se aproxime a la transición de fase, lo cual significa que el flujo de información en la red es óptimo en el valor crítico. Cabe mencionar que las gráficas 3.9 y 3.10 muestran que la desviación de  $\langle d(T) \rangle$  es mucho mayor en comparación a todas las demás gráficas, sin embargo, en [45] se calcula la longitud de camino más corto promedio para el modelo de Ising empleando redes desde 100 × 100 nodos hasta 300 × 300 nodos y se logra reducir la desviación, además de que es el valor que más varía según el número de nodos que se consideren en la red. Es por esto que  $\langle d \rangle$  funciona como alerta temprana en ambos sentidos siempre y cuando se consideren series de tiempo suficientemente grandes, de al menos 10,000 nodos, sin embargo el tiempo de cómputo que toma realizar dicho cálculo y contar con series de tiempo tan grandes no siempre será lo más práctico.

El coeficiente de agrupamiento promedio también funciona como alerta temprana en ambos modelos. En el de Ising se puede observar que en la primer región  $T < T_c$  al principio,  $\langle C \rangle$  aumenta ligeramente de manera uniforme hasta cierto valor de temperatura en el cual  $\langle C \rangle$  comienza a disminuir drásticamente conforme la temperatura se aproxima al valor crítico. En este sentido, la transitividad promedio funciona mejor en la región de temperaturas mayores a la crítica en el modelo de Ising, mientras que en el modelo de Kuramoto funciona bien de ambos lados.

Cabe destacar que a pesar de que el número de conexiones y el grado promedio aumenta en las redes correspondientes a los valores críticos de ambos modelos, la transitividad toma su valor mínimo en la transición de fase.

La distribución de tamaños de comunidades obtenida mediante el algo-

ritmo infomap resultó ser otra alerta temprana, ya que cerca del valor crítico, dicha distribución tomaba la forma de una ley de potencias.

AVN en modelo de Ising.				
Región efectiva Alerta temprana	$T < T_c$	$T > T_c$	Simétrico	
$\langle k \rangle$			Х	
$\langle d \rangle$			×	
$\langle C \rangle$		×		
P(X)			×	

Tabla 3.1: Tabla de utilidad de grado promedio, camino más corto promedio, transitividad promedio y distribución de tamaños de comunidad (P(X))como alertas tempranas dependiendo de la región por la cual se aproxima la temperatura al valor crítico en las redes de visibilidad natural en el modelo de Ising.

A modo de resumen, las tablas 3.1 y 3.2 muestran las regiones de efectividad del grado promedio, camino más corto promedio, transitividad promedio y distribución de tamaños de comunidad como alertas tempranas de las redes que se obtuvieron por el algoritmo de visibilidad natural. La mayoría resultaron ser efectivas en las dos regiones de los extremos.

AVN en modelo de Kuramoto.				
Región efectiva Alerta temprana	$K < K_c$	$K > K_c$	Simétrico	
$\langle k \rangle$			×	
$\langle d \rangle$			Х	
$\langle C \rangle$			×	
P(X)			×	

Tabla 3.2: Tabla de utilidad de grado promedio, camino más corto promedio, transitividad promedio y distribución de tamaños de comunidad de las redes obtenidas mediante el AVN como alertas tempranas dependiendo de la región por la cual se aproxima la constante de acoplamiento al valor crítico en el modelo de Kuramoto .

## 3.4 El algoritmo de visibilidad horizontal para la detección de alertas tempranas

La visualización de las redes obtenidas mediante el AVH no mostró cambios tan notables en comparación al AVN, sin embargo, las redes si mostraron cambios importantes cuando se trataba de la región crítica.

Al obtener las distribuciones de grado no se detectó demasiada diferencia en función del parámetro de control, sin embargo, al calcular el grado promedio se obtuvo un comportamiento análogo en ambos modelos, el cual refleja la naturaleza de éstos, y aunque no necesariamente funciona como alerta temprana, si puede ser útil para entender la dinámica de diversos modelos, y en el mejor de los casos, de sistemas reales.

La longitud de camino promedio resultó ser la alerta temprana más efectiva para el AVH, pues los valores de  $\langle d \rangle$  crecen a más del doble en el valor crítico y es útil en la región de los valores de parámetro de control mayor y menor al valor crítico. Cabe observar que lo que sucede con  $\langle d \rangle$  en el AVH es opuesto a lo que ocurre con el AVN, y que para nuestros fines, la medición de  $\langle d \rangle$  resulta más útil como alerta temprana en el AVH que en el AVN.

Por otra parte, el uso de la transitividad promedio en el AVH como alerta temprana es bastante limitado, pues el comportamiento en las regiones  $T < T_c$  y en  $K > K_c$  en los modelos de Ising y de Kuramoto respectivamente, a pesar de ser análogo, tiene distintos comportamientos y en  $T > T_c$  y en  $K < K_c$  el comportamiento no es análogo, por lo cual su efectividad como alerta temprana es nulo en dichas regiones.

La detección de comunidades en el AVH resultó de poca utilidad, pues la distribución de tamaños de comunidad no mostró cambios importantes para los valores críticos, además de que no se detectaron comunidades con una estructura tan evidente como en el caso de las redes del AVN.

### Capítulo 4

### Conclusiones

Esta investigación brinda un estudio comparativo entre el modelo de Ising y el de Kuramoto, en donde se ha utilizado el AVN y el AVH para contrastar la utilidad que ofrece cada uno para la predicción de transiciones de fase.

Para el AVN, el grado promedio resultó ser una buena alertas temprana en ambos modelos, mientras que la transitividad promedio resulta efectiva en el de Kuramoto, más no así en el de Ising, pues a pesar de que dicho indicador muestra una discontinuidad en los dos modelos en la zona de transición, resulta que en la primera y tercera región hay intervalos en los que la pendiente es positiva. Aún así, la transitividad es un indicador que vale la pena continuar investigando, pues la pendiente positiva m que se aprecia en la región en donde  $T < T_c$  se obtiene que m < 0.01, es decir, la pendiente es muy cercana a cero, además de que cuando T se aproxima a  $T_c$  se puede observar un comportamiento simétrico.

En el caso de la longitud de camino más corto promedio, a pesar de que el valor mínimo del ensamble se encuentra en la zona de transición, no resulta tan efectivo debido a que la desviación de los datos obtenidos mediante este método es considerablemente mayor en comparación con el caso del grado y la transitividad promedio. Para disminuir la desviación de la longitud de camino más corto promedio se podrían tomar en cuenta series de tiempo más grande y quizá un ensamble mayor, no obstante, el tiempo de cómputo para realizar dicho cálculo aumenta considerablemente de manera no lineal al incrementar el tamaño de las redes, por lo que sugiero que este indicador sea tomado en cuenta por el lector bajo las consideraciones que aquí se mencionan. Por otra parte, la detección de comunidades funcionó no sólo como alerta temprana al hallar que la distribución de tamaños de comunidad en ambos modelos cumple una ley de potencia, sino que nos permite visualizar el tipo de estructuras en la serie de tiempo que forman dichas comunidades: valles con formas similares y a distintas escalas; además, el hecho de que la distribución de tamaños de comunidad cumpla con una ley de potencias en el valor crítico está relacionado con la invariancia de escala que presenta el sistema en la transición de fase. Si bien, se ha observado que algunos sistemas presentan leves de potencia en los patrones espaciales [22] o en la distribución de frecuencias, mostrando invariancia de escala temporal [13] cuando el sistema sufre una transición de fase, en este trabajo se ha mostrado que las series de tiempo presentan patrones que se repiten en la serie de tiempo a diversas escalas temporales mediante el AVN.



Figura 4.1: Derivada numérica de los indicadores en ambos modelos mediante el AVN



Figura 4.2: Derivada numérica de los indicadores en ambos modelos mediante el AVH

Por otro lado, a pesar de que la longitud de camino más corto resultó ser

88

el único indicador que funcionó como alerta temprana en el caso del AVH, la transitividad promedio proporcionó información valiosa para la descripción de los sistemas. Una disminución de dicho valor indica que una transición de fase se aproxima o que el sistema adquiere cada vez una configuración más ordenada y con menos fluctuaciones.

En las figuras 4.1 y 4.2 se muestra la derivada numérica del grado, la transitividad y el camino más corto promedio. En estas gráficas se puede observar claramente, a excepción del camino más corto promedio mediante el AVN, que estos indicadores presentan un cambio abrupto en su tendencia cuando se aproxima la transición, por lo que se puede concluir que los algoritmos que se emplearon como alertas tempranas detectan la transición en los dos modelos que se estudiaron. Uno podría preguntarse ¿con cuánta anticipación se podría inferir que alguno de estos modelos sufrirá una transición de fase empleando los algoritmos de visibilidad?. En este trabajo se muestra que, mediante el AVN, en cuanto se detecte que el grado promedio presenta un incremento, o bien, mediante el AVH si la longitud de camino aumenta se puede afirmar que una transición se aproxima.

Dado que ambos algoritmos resultaron de utilidad en los dos modelos tanto para la descripción del sistema, como para la alerta de transiciones de fase, además de que tanto el modelo de Ising como el de Kuramoto se han empleado para estudiar sistemas reales en las áreas de la ciencias sociales, medicina o biología [5]-[12], se propone como líneas de investigación a futuro comprobar su efectividad en más modelos que presenten cambios de fase, incluyendo series de tiempo de sistemas reales y de diversas disciplinas. Comprobar la efectividad en diversas disciplinas tendría diversas utilidades prácticas, cómo prever cuando va a ocurrir un ataque epiléptico con mayor certeza al usar un nuevo indicador por ejemplo. Por otro lado, también se propone implementar el algoritmo de detección de comunidades para investigar sobre la generalidad de la ley de potencias en la distribución de tamaños de comunidad en las series de tiempo (obtenidas de datos reales como de modelos de diversas disciplinas) durante la transición de fase e implementar el AVH para verificar que el comportamiento de la transitividad promedio es el esperado y comprender la dinámica de los estados en los que se pueden encontrar los sistemas.

### Bibliografía

- KUZNETSOV, YURI A. Elements of applied Bifurcation Theory, Second Edition, Springer, New York, 1998.
- [2] KURAMOTO, Y., 1975 Int. Symp. on Mathematical problems in theoretical physics, edited by H. Araki (Springer, New York), volume 39 of Lect. N. Phys., pp. 420-422.
- [3] DANIELS, BRYAN C. Synchronization of Globally Coupled Nonlinear Oscillators: the Rich Behavior of the Kuramoto Model, May 6, 2005
- [4] ACEBRÓN, JUAN A. BONILLA, L. et. añ. The Kuramoto modell: A simple paradigm for synchronization phenomena, Reviews of modern physics, volume 77 N.1, 2005
- [5] A. WINFREE Biological rhythms and the behavior of populations of coupled oscillators, Journal of Theoretical Biology, 16(1):15-42, July 1967
- [6] CABRAL J, LUCKHOO H, WOOLRICH M, JOENSSON M, MOHSENI H, BAKER A, KRINGELBACH ML, DECO G (2014) Exploring mechanisms of spontaneous functional connectivity in MEG: How delayed network interactions lead to structured amplitude envelopes of band-pass filtered oscillations, NeuroImage (90) 423-435

- [7] MARINAZZO D, ET. AL. (2014), Information transfer and criticality in the Ising model on the human coennectome, PLoS ONE 9(4): e93616.
- [8] DAST TK, ADEYASINGHE PM, CRONE JS, ET. AL. (2014) Highlighting the structure-function relationship of the brain with the ising model and graph theory., Biomed Res Int:237898
- [9] JARMAN, M ET. AL. (2015) The Critical Few: Anticonformist at the Crossroads of Minority Opinion Survival and CollapseJ. Artificial Sci. and Soc. Sim.18(1): 6
- [10] CASTELLANO C, FORTUNATO S, LORETO V (2009) Statistical physics of social dynamics. Rev Mod Phys 81: 591-646
- [11] RICE JJ, STOLOVITZKY G, TU Y, TOMBE PP (2003). Ising Model of cardiac filament activation with neares-neighbor cooperative interactions. Biophys J 84:897-909
- [12] TORQUATO S (2011) Toward an Ising model of cancer and beyond.Phys Biol 8(1): 015017
- [13] CALDERÓN A., CARLOS ANÁLISIS DE EARLY WARNINGS EN EL MODELO DE ISING EN 2D, 2016
- [14] SOLÉ, RICHARD V (2011) Phase Transitions. Princeton University Press
- [15] YEOMANS, J.M. Statistical Mechanics of Phase Transitions, Oxford University Press, 1992
- [16] LANDAU DAVID P., BLINDER KURT A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics, Cambridge University Press, 2009

- [17] CHATFIELD, CRISTOPHER, The analysis of time series : an introduction, 6th ed, Chapman and Hall/CRC.
- [18] DRAKE JOHN M. AND GRIFFEN BLAINE D.(2010) Early warning signals of extinction in deteriorating environments Nature 467(7314) (September 2010) 456-9
- [19] LENTON, T.M. et. al. Tipping elements in the Earth's climate system, Proc. Natl Acad. Sci. USA 105, 1786-1793 (2008)
- [20] LITT, B. ET AL Epileptic seizures may begin hours in advance of clinical onset: a report of five patients Neuron 30, 51-64 (2001).
- [21] DAKOS V, CARPENTER SR, BROCK WA, ELLISON AM, GUTTAL V, ET AL. (2012) Methods for Detecting Early Warnings of Critical Transitions in Time Series Illustrated Using Simulated Ecological Data. PLoS ONE 7(7): e41010. doi:10.1371/journal.pone.0041010
- [22] SCHEFER M, BASCOMPTE J, BROCK WA, ET. AL.(2009) Early warning signals for critical transitions, Nature 461: 53-59
- [23] GARCÍA-GUDIÑO D, LANDA E, MENDOZA-TEMIS J, ALBARADO-IBAÑEZ A, TOLEDO-ROY JC, MORALES IO, ET AL. (2017) Enhancement of early warning properties in the Kuramoto model and in an atrial fibrillation model due to an external perturbation of the system. PLoS ONE 12(7): e0181953. https://doi.org/10.1371/journal.pone.0181953
- [24] MORALES I.O., LANDA E, ANGELES CC, TOLEDO JC, RIVERA AL, TEMIS JM, ET AL. (2015) Behavior of Early Warnings near the Critical Temperature in the Two-Dimensional Ising Model. PLoS ONE 10(6): e0130751. doi:10.1371/journal.pone.0130751

- [25] WISSEL C (1984) A universal law of the characteristic return time near threshols. Oecologia 65: 101-107.
- [26] VAN NES, E. H. y SCHEFFER, M. Slow Recovery from Perturbations as a Generic Indicator of a Nearby Catastrophic Shift, The American Naturalist, The American Naturalis 169, 738-747 (2007).
- [27] DAKOS, V. et. al. Slowing down as an early warning signal for abruptclimate change Proc. Natl Acad. Sci. USA 105, 14308-14312 (2008)
- [28] BARABÁSI AL Network Science, PDF Version: November 2012
- [29] NEWMAN M.E.J. Networks An Introduction, Oxford University Press Inc., New York, 2010
- [30] BARABÁSI AL, ALBERT R Emergence of scaling in random networks.
   Science 286(5439):509-512 (1999)
- [31] S. MASLOV & K. SNEPPEN Specificity and stability in topology of protein networks. Science, 296:910-913 (2002)
- [32] H. JEONG, R.ALBERT, & A.L. BARABÁSI. Internet: Diameter of the world-wide web. Nature, 401:130-131, 1999.
- [33] V. BLONDEL, J. GUILLAUME, R. LAMBIOTTE, E. MECH, J. Stat Mech.: Teory Exp. 2008, P10008 (2008)
- [34] ROSVALL M, AXELSSON D, BERGSTROM CT The map equation, The European Physical Journal Special Topics, 178 (1), 13-23 (2009)
- [35] COVER TM, THOMAS JA, Elements of Information Theory (Wiley Series in Telecommunications and Signal Processing), Wiley-Interscience, 2006

- [36] BOHLIN L., EDLER D., LANCICHINETTI A., ROSVALL M Community detection and visualization of networks with the map equation framework, Measuring Scholarly Impact. Springer, 2014.
- [37] ROSVALL M., BERGSTROM C.T. Maps of random walks on complex networks reveal community structure. Proceedings of the National Academy of Sciences 105.4 (2008): 1118-1123.
- [38] FORTUNATO, S. AND BARTHÉLEMY, M. Resolution limit in community detection, PNAS 2007 104 (1) 36-41
- [39] YANG, Z., ALGESHEIMER, R., & TESSONE, C.J. A Comparative Analysis of Community Detection Algorithms on Artificial Networks, Scientific Reports. 2016; 6
- [40] NÚÑEZ, A.M., L. LACASA, J.P. GOMEZ, & B. LUQUE (2012), Visibility algorithms: A short review., In: Y. Zhang (ed.), New Frontiers in Graph Theory, InTech, Rijeka, 119-152.
- [41] LACASA L., LUQUE B., BALLESTEROS F., LUQUE J. & NUÑO J.C.
  (2008) From time series to complex networks: the visibility graph. Proc. Natl. Acad. Sci. USA 105, 13, 4972-4975.
- [42] LUQUE B., LACASA L., BALLETEROS F., & LUQUE J. (2009) Horizontal visibility graphs: exact results for random time series. Phys Rev E 80, 046103 (2009).
- [43] LUQUE B, LACASA L, BALLESTEROS F.J. & ROBLEDO A (2012) Analytical properties of horizontal visibility graphs in the Feigenbaum scenario, CHAOS 22, 013109 (2012)

- [44] LACASA, L. & TORAL, R (2010) Description of stochastic and chaotic series using visibility graphs, Phys. Rev. E 82, 036120 (2010).
- [45] ZHAO L, LI W, YANG C, HAN J, SU Z, ZOU Y (2017) Multifractality and Network Analysis of Phase Transition. PLoS ONE 12(1): e0170467. doi:10.1371/journal.pone.0170467