Universidade de São Paulo
Instituto de Física

Simulações Numéricas da Percolação Dinâmica

Alexander Hideki Oniwa Wada

Orientador: Prof. Dr. Mário José de Oliveira

Dissertação apresentada ao Instituto de Física da Universidade de São Paulo, para a obtenção de Título de Mestre em Ciências.

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Mário José de Oliveira (Instituto de Física da USP)

Prof. Dr. Carlos Eduardo Fiore dos Santos (Instituto de Física da USP)

Prof. Dr. Gabriel Teixeira Landi (Universidade Federal do ABC)

São Paulo
2015

FICHA CATALOGRÁFICA
Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação
do Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Wada, Alexander Hideki Oniwa

Simulações Numéricas da Percolação Dinâmica. São Paulo, 2015

Dissertação (Mestrado) – Universidade de São Paulo. Instituto de Física – Depto. de Física Geral

Orientador: Prof. Dr. Mário José de Oliveira

Área de Concentração: Física Geral

Unitermos: 1. Física; 2. Física da Matéria Condensada; 3. Mecânica Estatística; 4. Mudança de Fase.

USP/IF/SBI-014/2015

Agradecimentos

Agradeço ao meu orientador, Mário José de Oliveira, aos meus amigos e família. Também agradeço à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP, processo:2012/24207-0) pelo apoio financeiro.

Resumo

Estudamos o modelo epidemiológico denominado susceptível-exposto-infectado (SEI) na rede quadrada por meio de simulações numéricas. Nesse modelo, cada sítio da rede pode estar susceptível, exposto ou infectado. Um sítio susceptível nas vizinhanças de um infectado se torna infectado com uma certa probabilidade e exposto com probabilidade complementar. Sítios infectados ou expostos permanecem para sempre nessa condição. Mostramos que os aglomerados gerados a partir de um único infectado numa rede repleta de suscetíveis são os mesmos aglomerados presentes na percolação isotrópica. Calculamos os expoentes críticos dinâmicos com bastante precisão permitindo colocar o modelo SEI na classe de universalidade da percolação dinâmica.

Palavras-chave: Percolação Dinâmica, Propagação de Epidemia, Expoentes Críticos

Abstract

We have studied the epidemiologic model called susceptible-exposed-infected (SEI) on a square lattice by numerical simulations. In this model, each site of the lattice may be susceptible, exposed or infected. A susceptible site in the neighborhood of an infected site becomes infected with a given probability, or exposed with a complementary probability. Infected and exposed sites remain forever in these states. We have shown that clusters generated by a single infected site in a lattice full of susceptible are the same clusters as in the isotropic percolation. The critical dynamic exponents were calculated with large precision allowing to put the SEI model into the dynamical percolation universality class.

Keywords: Dynamical Percolation, Epidemic propagation, Critical Exponents

Lista de Figuras

2.1	Exemplo de aglomerados na rede linear. Círculos pretos representam sítios ocupados, enquanto que os cinzas vazios.	4
2.2	Exemplo de aglomerados na rede quadrada. Círculos pretos representam sítios ocupados, enquanto que os cinzas vazios.	5
2.3	Formas distintas de 3-aglomerados. Os sítios pertencentes ao perímetro são apenas os primeiros vizinhos vazios ao aglomerado	9
2.4	Exemplo da árvore de Cayley com 3 gerações e número de coordenação 3. Os círculos pretos indicam os sítios, enquanto que as linhas a ligação entre os sítios.	11
4.1	Exemplo de um aglomerado gerado pelo modelo SEI. Os quadrados pretos, azuis, vermelhos e cinzas indicam sítios suscetíveis, expostos, infectados e ativos respectivamente. Um sítio ativo também é um sítio suscetível.	44
4.2	Gráfico da densidade de infectados em função de p	50
4.3	Gráfico da densidade do segundo momento de infectados em função de p	51
4.4	Gráfico da densidade de expostos em função de p	52
4.5	Gráfico da densidade do segundo momento de expostos em função de p	53
4.6	Gráfico do parâmetro de ordem em função de p	54

4.7	Gráfico da densidade de infectados e expostos em função de p . As cores indicam o tamanho da rede.	55
4.8	Produto UP próximo ao ponto crítico	56
4.9	Gráfico de $\ln(S)$ em função de $\ln(p)$	57
4.10	Ajuste linear de ρ_I próximo ao ponto crítico. As retas vermelhas representam os ajustes lineares	58
4.11	Ajuste linear de $\rho_I^{(2)}$ próximo ao ponto crítico. As retas vermelhas representam os ajustes lineares	59
4.12	Ajuste linear de P próximo ao ponto crítico. As retas vermelhas representam os ajustes lineares	60
4.13	Extrapolação de p_c para ρ_I . A reta vermelha representa o ajuste linear	61
4.14	Extrapolação de p_c para $\rho_I^{(2)}$. A reta vermelha representa o ajuste linear	62
4.15	Extrapolação de p_c para P . A reta vermelha representa o ajuste linear .	62
4.16	Extrapolação de p_c para UP . As retas vermelhas representam os ajustes lineares	63
4.17	Extrapolação de UP em $p = 0.592756010$. A reta vermelha representa o ajuste linear	63
4.18	Colapso de ρ_I	64
4.19	Colapso de $\rho_I^{(2)}$	64
4.20	Colapso de P	65
4.21	Colapso de UP	65
4.22	Gráfico de $\ln(N'_I)$ em função de $\ln(t)$	66
4.23	Gráfico de $\ln(N'_E)$ em função de $\ln(t)$	66
4.24	Gráfico de $\ln(N'_{IS})$ em função de $\ln(t)$	67
4.25	Gráfico de $\ln(P)$ em função de $\ln(t)$	67
4.26	Gráfico de $\ln(R^2)$ em função de $\ln(t)$	68

4.27	Exemplificação do método para determinar os expoentes críticos dinâmicos com $\Delta = 5$. Os ajustes são realizados na região interior dos quadrados, cujo lado paralelo à abscissa tem tamanho Δ	68
4.28	Valores ajustados de η em função de Δ . A região circulada está ampliada na figura (4.32)	69
4.29	Valores ajustados de θ em função de Δ . A região circulada está ampliada na figura (4.33)	69
4.30	Valores ajustados de δ em função de Δ . A região circulada está ampliada na figura (4.34)	70
4.31	Valores ajustados de η em função de Δ . A região circulada está ampliada na figura (4.35)	70
4.32	Ampliação da região circulada em (4.28). As linhas azuis e vermelha indicam a distância de um desvio padrão da média e a média dos valores com $\Delta = 7$ e $\Delta = 8$ respectivamente.	71
4.33	Ampliação da região circulada em (4.29).As linhas azuis e vermelha indicam a distância de um desvio padrão da média e a média dos valores com $\Delta = 7$ e $\Delta = 8$ respectivamente.	71
4.34	Ampliação da região circulada em (4.30).As linhas azuis e vermelha indicam a distância de um desvio padrão da média e a média dos valores com $\Delta = 7$ e $\Delta = 8$ respectivamente.	72
4.35	Ampliação da região circulada em (4.31).As linhas azuis e vermelha indicam a distância de um desvio padrão da média e a média dos valores com $\Delta = 7$ e $\Delta = 8$ respectivamente.	72

Lista de Tabelas

2.1	Tabela dos expoentes críticos estáticos . Valores retirados de [28]. A coluna CM indica os valores obtidos para campo médio.	25
4.1	Estimativa de p_c para diversos tamanhos de rede através das grandezas $\rho_I, \rho_I^{(2)}$ e P	51
4.2	Valores de p_c do cruzamento das curvas da grandeza UP, L_{min}	52
4.3	Extrapolações do ponto crítico.	53
4.4	Valores dos expoentes críticos dinâmicos	60

Sumário

1	Introdução	1
2	Percolação por Sítio	3
2.1	Introdução	3
2.2	Modelo Unidimensional	5
2.3	Generalizações e grandezas de interesse	8
2.4	Árvore de Cayley	11
2.4.1	Cálculo de S e F	12
2.4.2	Coeficientes configuracionais	16
2.4.3	Parâmetro de Ordem	17
2.4.4	Comportamento crítico	17
2.5	Expoentes Críticos Estáticos	20
2.5.1	Relação entre β , τ e σ	22
2.5.2	Relação entre γ , τ e σ	23
2.5.3	Dimensão fractal	23
2.5.4	Expoentes críticos exatos	24
3	Modelo Suscetível-Exposto-Infectado	27
3.1	Modelo	27
3.1.1	Algoritmo	28

3.1.2	Conexão com a percolação	29
3.1.3	Equação Mestra e Dinâmica de um Sítio	30
3.2	Solução na Árvore de Cayley	31
3.2.1	Equações diferenciais	32
3.2.2	Solução com a Equação Mestra	33
4	SEI - Simulações na rede quadrada	43
4.1	Expoentes Críticos Dinâmicos	43
4.1.1	Relação com os Expoentes Estáticos	45
4.2	Simulações no estado estacionário	46
4.2.1	Finite Size Scaling	54
4.3	Simulações dependentes do tempo	56
5	Conclusão	73
	Referências Bibliográficas	74

Capítulo 1

Introdução

A propagação de epidemias tem sido abordada por vários tipos de modelos, sejam eles determinísticos ou estocásticos [7, 14, 17, 20, 22, 23, 25]. A abordagem que nos interessa é aquela relacionada com processos estocásticos em que a evolução temporal do sistema em consideração é descrita por um processo markoviano a tempo contínuo ou, equivalentemente, por uma equação mestra [29]. O estado global do sistema é formado pelo conjunto dos estados de cada elemento constituinte. Essa descrição, que denominamos de microscópica, deve ser distinguida daquela em que uma variável estocástica é identificada como sendo o número de indivíduos que se encontram num determinado estado [6]. A abordagem estocástica microscópica que adotamos aqui tem sido utilizada na descrição de dinâmica de populações e em propagação de epidemias [2, 3, 4, 5, 9, 10, 12, 16, 26].

Mais especificamente, a abordagem que adotamos é aquela em que os estados são discretos e definidos num reticulado. Em particular, analisaremos o modelo Suscetível-Infectado-Exposto (SEI), introduzido por Tânia Tomé e Mário J. de Oliveira [11], numa rede quadrada de lado L . Cada sítio da rede pode ser encontrado em um entre três estados, suscetível (S), infectado (I) ou exposto (E). A dinâmica que adotamos é aquela em que apenas um sítio têm seu estado modificado em cada intervalo de tempo, que

denominamos de dinâmica de um sítio.

A dinâmica do modelo SEI é composta por duas reações, uma autocatalítica, $I + S \rightarrow I + I$, e outra catalítica $I + S \rightarrow I + E$. A primeira reação é de infecção e ocorre com taxa β , a outra é de exposição com taxa α . Partindo de uma condição inicial no qual todos os sítios são suscetíveis, exceto por um único sítio infectado no centro da rede, o modelo SEI gera um aglomerado de sítios inativos contendo infectados e expostos. A dinâmica prossegue até um estado absorvente, caso em que não há pares de sítios vizinhos IS.

Outras interpretações são possíveis para o modelo SEI além daquela que estamos usando. Como exemplo, citamos a propagação de incêndios em florestas. Nesse exemplo, sítios S, I e E são respectivamente árvore intacta, árvore em chamas e árvore queimada.

Se a taxa de infecção for suficientemente pequena, esperamos que a doença seja local, ao passo que uma taxa alta de infecção fará com que a doença se propague através da rede. Sendo assim, esperamos uma transição de fase em uma taxa crítica de infecção β_c . De fato, mostraremos que os aglomerados gerados pelo modelo SEI, no estado estacionário, são os mesmos presentes na percolação isotrópica em que cada sítio está ocupado com probabilidade p . A conexão se obtém por meio da relação $p = \beta/(\alpha + \beta)$. A transição de fase ocorre em $p_c = \beta_c/(\alpha + \beta_c)$ com os mesmos expoentes críticos estáticos da percolação. Devido a esta relação com a percolação, dedicaremos o capítulo 2 ao estudo da percolação por sítio na rede unidimensional e na árvore de Cayley, onde introduziremos os expoentes críticos.

Além disso, calcularemos os expoentes críticos dinâmicos η , θ , δ e z , associados ao crescimento do número de infectados, o crescimento dos sítios ativos, a probabilidade de sobrevivência e ao comprimento de correlação respectivamente, por meio de simulações na rede quadrada. Comparando estes expoentes com aqueles relativos à percolação dinâmica, obtido por outros autores, concluiremos que o modelo SEI faz parte da classe de universalidade da percolação dinâmica.

Capítulo 2

Percolação por Sítio

2.1 Introdução

Para ilustrar o problema da percolação utilizaremos um clássico exemplo no qual existe um meio poroso impedindo que um líquido se espalhe. Se o meio for pouco poroso o líquido será retido, caso contrário o líquido irá esvair pelo material. Dessa forma podemos formular a seguinte pergunta: quão poroso deve ser o meio para que o líquido comece a esvair? Para que o líquido passe através do material basta que exista um caminho de poros ligando um lado do material ao outro, caso tal caminho ocorra dizemos que o sistema percola. Em seguida faremos a definição da percolação por sítio em redes regulares e consideramos as grandezas mais importantes que caracterizam a percolação. A abordagem que usamos é baseada em [15, 28, 29].

Considere uma rede de sítios interligados na qual cada sítio pode estar ocupado ou vazio com uma probabilidade p ou $q = 1 - p$ respectivamente. Dizemos que dois sítios pertencem ao mesmo aglomerado se ambos estão ocupados e se é possível, a partir de um dos sítios ocupados, chegar ao outro através de um caminho de sítios ocupados vizinhos, ademais um aglomerado tem tamanho s se contém exatamente s sítios ocupados. Denominamos s -aglomerado um aglomerado com tamanho s .

Figura 2.1: Exemplo de aglomerados na rede linear. Círculos pretos representam sítios ocupados, enquanto que os cinzas vazios.

O exemplo mais simples é o caso da rede linear unidimensional, como se vê na figura 2.1, que é uma cadeia de sítios e cada sítio tem como vizinho seus dois sítios mais próximos. Em outras palavras o estado global da rede é definido pela coleção de variáveis σ_i , cada uma podendo ter o valor 0 (desocupado) com probabilidade q ou 1 (ocupado) com probabilidade p . Em muitos casos é comum aplicarmos condições periódicas de contorno para tornar o problema mais simples; nesta rede as condições periódicas fazem com que os sítios σ_1 e σ_N sejam vizinhos.

Em duas dimensões (ver figura 2.2) podemos imaginar uma rede quadrada de sítios $\sigma_{i,j}$ assumindo os mesmos valores dos sítios da rede linear unidimensional, porém com vizinhança $\sigma_{i,j+1}$, $\sigma_{i,j-1}$, $\sigma_{i+1,j}$ e $\sigma_{i-1,j}$. As condições periódicas transformam a rede quadrada num toro.

Voltando ao exemplo do meio poroso, dizemos que este material pode ser descrito por uma rede cúbica $\sigma_{i,j,k}$ com ligações entre primeiros vizinhos ($\sigma_{i,j,k}$ é ligado à $\sigma_{i+1,j,k}$, $\sigma_{i,j+1,k}$, $\sigma_{i,j,k+1}$, $\sigma_{i-1,j,k}$, $\sigma_{i,j-1,k}$ e $\sigma_{i,j,k-1}$) e cada sítio pode ter um poro (estado ocupado) com probabilidade p ou não contê-lo com probabilidade $1 - p$ (não ocupado). Se $p = 0$ o material é impermeável enquanto que, para $p = 1$, não há resistência à passagem do fluido. Dessa forma deve existir uma probabilidade crítica p_c separando a fase percolante da não percolante. É interessante notar que neste caso o comportamento do líquido é determinístico enquanto que o meio é aleatório em contraste com o processo de difusão.

Para redes finitas dizemos que há percolação se existe um aglomerado de sítios ocupados ligando dois lados opostos da rede; caso a rede seja infinita há percolação se houver algum aglomerado com infinitos sítios ocupados.

Figura 2.2: Exemplo de aglomerados na rede quadrada. Círculos pretos representam sítios ocupados, enquanto que os cinzas vazios.

Nas próximas seções, ao mesmo tempo em que introduzimos os conceitos fundamentais da percolação, estudaremos a percolação numa rede unidimensional e na árvore de Cayley. Um dos propósitos do estudo nessas redes é que poderemos obter soluções exatas do modelo. O estudo na árvore de Cayley é particularmente interessante, pois, diferentemente do caso unidimensional, ela possui uma transição de fase.

2.2 Modelo Unidimensional

Definimos o estado em uma rede unidimensional com N sítios como o vetor $\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$, no qual σ_i é a variável aleatória assumindo o valor 1 com probabilidade p (ocupado) ou 0 com probabilidade $q = 1 - p$ (desocupado). Um sítio σ_i , $i = 2, 3, \dots, N - 1$, tem como vizinhos seus dois sítios mais próximos σ_{i+1} e σ_{i-1} . Estamos interessados no caso em que N é muito grande.

O problema da percolação nesta rede pode ser resolvido exatamente. A seguir resolveremos em três situações, $p = 0$, $0 < p < 1$ e $p = 1$.

a) caso $p = 0$

Este é o caso trivial, o número de sítios ocupados é nulo, logo não há aglomerados de sítios ocupados e portanto não há percolação.

b) caso $0 < p < 1$

Na percolação usual cada variável aleatória σ_i é independente e a probabilidade de encontrar uma sequência arbitrária com t sítios desocupados e s sítios ocupados é simplesmente dada por $q^t p^s$.

Na cadeia linear, os aglomerados finitos são sequências de sítios ocupados delimitados por 2 sítios desocupados, um em cada lado, de forma que entre dois aglomerados há no mínimo um sítio desocupado. Em vista disso um s -aglomerado é caracterizado por conter s sítios ocupados com dois desocupados em sua borda, de modo que este aglomerado ocorre com probabilidade $q^2 p^s$.

Um sítio pertence a um s -aglomerado se é ocupado e se é possível encontrar exatamente mais $s - 1$ sítios ocupados no mesmo aglomerado. Se escolhermos o m -ésimo sítio ocupado do aglomerado (probabilidade p) devemos encontrar em um dos seus lados $m - 1$ ($m < s$) sítios ocupados seguido de um desocupado (qp^{m-1}) e no outro $s - m$ sítios ocupados seguido de mais um desocupado ($p^{s-m}q$), logo a probabilidade de escolher um sítio ocupado em um s -aglomerado é $pqp^{m-1}p^{s-m}q = q^2 p^s$ e depende apenas do tamanho do aglomerado. Por conseguinte, a probabilidade de um sítio pertencer a um s -aglomerado é s vezes (dado que podemos escolher qualquer sítio ocupado no aglomerado) a probabilidade de escolher um sítio e é dada por

$$\Lambda_s = sq^2 p^s. \quad (2.1)$$

O número médio de sítios em aglomerados com tamanho s é $Nsq^2 p^s$. Se dividirmos $Nsq^2 p^s$ por s devemos obter o número médio de s -aglomerados, n_s

$$n_s = Nq^2p^s \quad (2.2)$$

Numa cadeia infinita, n_s diverge e portanto é conveniente usar a densidade de aglomerados por sítio $\rho_s = n_s/N$ que coincide com a probabilidade de ocorrência deste aglomerado.

$$\rho_s = q^2p^s \quad (2.3)$$

Efetuando a soma sobre todos os possíveis valores de Λ_s temos a probabilidade de um sítio pertencer a um aglomerado finito

$$\begin{aligned} \sum_{s=0}^{\infty} \Lambda_s &= \sum_{s=0}^{\infty} sq^2p^s = q^2p \sum_{s=0}^{\infty} sp^{s-1} \\ &= q^2p \sum_{s=0}^{\infty} \frac{d}{dp} p^s = q^2p \frac{d}{dp} \sum_{s=0}^{\infty} p^s \end{aligned}$$

usando a fórmula de soma de uma progressão geométrica infinita, vemos que

$$\sum_{s=0}^{\infty} \Lambda_s = \sum_{s=0}^{\infty} sq^2p^s = p \quad (2.4)$$

assim todos os sítios ocupados estão contidos em aglomerados finitos com a forma proposta. É importante salientar a inexistência de um aglomerado percolante construído com a sequência "desocupado, ocupado, desocupado" já que, se $0 \leq p < 1$

$$\lim_{s \rightarrow \infty} q^2p^s = 0$$

Como todos os aglomerados são finitos e têm a forma proposta, podemos calcular S , o tamanho médio, por sítio, de um aglomerado no qual um sítio arbitrário pertence.

$$\begin{aligned}
S &= p \sum_{s=1}^{\infty} s \frac{sq^2 p^s}{p} = pq^2 \sum_{s=1}^{\infty} s^2 p^{s-1} \\
&= pq^2 \sum_{s=1}^{\infty} s \frac{dp^s}{dp} = pq^2 \sum_{s=1}^{\infty} \frac{d}{dp} [sp^s] \\
&= pq^2 \sum_{s=1}^{\infty} \frac{d}{dp} [psp^{s-1}] = pq^2 \sum_{s=1}^{\infty} \frac{d}{dp} \left[p \frac{dp^s}{dp} \right] \\
&= qp^2 \frac{d}{dp} \left[p \frac{d}{dp} \left[\sum_{s=1}^{\infty} p^s \right] \right]
\end{aligned}$$

logo

$$S = p \frac{1+p}{1-p} \quad (2.5)$$

Podemos ver que S diverge em $p = 1$.

c) caso $p = 1$

Todos os sítios estão ocupados e não há sítios desocupados separando a rede em aglomerados; a densidade de s -aglomerados ρ_s é nula ($q = 0$) e a probabilidade de encontrar uma sequência infinita de sítios ocupados é unitária pois neste caso

$$\lim_{s \rightarrow \infty} p^s = 1$$

de onde concluímos que existe apenas um aglomerado e este aglomerado é o percolante.

2.3 Generalizações e grandezas de interesse

Um sítio pertence ao perímetro de um s -aglomerado se é vazio e têm em sua vizinhança ao menos um sítio deste aglomerado. O número de sítio no perímetro deste aglomerado será denotado t .

Figura 2.3: Formas distintas de 3-aglomerados. Os sítios pertencentes ao perímetro são apenas os primeiros vizinhos vazios ao aglomerado

No caso unidimensional todos os aglomerados têm o mesmo perímetro (igual a dois), contudo isto não é verdade para todas as redes. Considerando 3-aglomerados numa rede quadrada podemos agrupar os 3 sítios ocupados em seis formas distintas, duas com $t = 8$ e quatro com $t = 7$, como se vê na figura 2.3.

Portando a probabilidade de ocorrência dos 3-aglomerados na rede quadrada deve ser a soma sobre todas as seis possibilidades dada por $2p^3q^8 + 4p^3q^7$.

O raciocínio usado no modelo unidimensional vale para cada uma das formas de um s -aglomerado, sendo necessário somar sobre todas as possíveis configurações a fim de obter o resultados correto. Se $b_{t,s}$ é o número de s -aglomerados com perímetro t , então a densidade de s -aglomerados é dada por

$$\rho_s = \sum_t b_{t,s} p^s q^t, \quad (2.6)$$

e a probabilidade de um sítio pertencer a um s -aglomerado vale

$$\Lambda_s = \sum_t b_{t,s} s p^s q^t = s \rho_s \quad (2.7)$$

Por vezes é mais interessante analisar a soma dessas grandezas, como a densidade de aglomerados finitos,

$$f = \sum_{s=1}^{\infty} \rho_s, \quad (2.8)$$

a densidade de sítios em aglomerados finitos

$$F = \sum_{s=1}^{\infty} \Lambda_s \quad (2.9)$$

e a grandeza

$$S = \sum_{s=1}^{\infty} s \Lambda_s = \sum_{s=1}^{\infty} s^2 \rho_s \quad (2.10)$$

que é interpretada como o tamanho médio de um aglomerado.

Considere um ponto qualquer da rede e todas os possíveis aglomerados de tamanho s e perímetro t que contém esse ponto. Denotamos por $sb_{t,s}$ o número desses aglomerados. A grandeza $b_{t,s}$ é denominada número de configurações.

É importante perceber que S diverge no ponto crítico. Como S é o tamanho médio dos s -aglomerados podemos dizer que: conforme p aumenta e se aproxima de p_c , o tamanho médio dos s -aglomerados cresce, fazendo S divergir em $p = p_c$. Na fase percolante ($p > p_c$), os maiores s -clusters tornam-se parte do aglomerado infinito (percolante), fazendo S diminuir, pois S não leva em consideração o aglomerado infinito, mas apenas os finitos.

Parâmetro de Ordem

Em sistemas com transição de fase é conveniente introduzir o parâmetro de ordem (P) que assume valor nulo na fase desordenada e não nulo na ordenada. No problema da percolação usaremos a densidade de sítios no aglomerado infinito como P ; abaixo de p_c $P = 0$, pois o aglomerado percolante não existe, acima de p_c $P > 0$ dado que existem sítios no aglomerado infinito.

Figura 2.4: Exemplo da árvore de Cayley com 3 gerações e número de coordenação 3. Os círculos pretos indicam os sítios, enquanto que as linhas a ligação entre os sítios.

Um sítio ocupado sempre pertence a um aglomerado, seja ele finito ou não. Assim devemos ter

$$P + F = p \quad (2.11)$$

Abaixo do ponto crítico, todos os aglomerados são finitos e $P = 0$, logo

$$F = p \quad p < p_c. \quad (2.12)$$

2.4 Árvore de Cayley

Para construir a árvore de Cayley com número de coordenação z e n gerações (ou camadas) partimos de um sítio raiz ($n = 0$) e o ligamos a outros z sítios. A partir da $(m - 1)$ -ésima ($m \geq 1$) geração podemos construir a seguinte ligando cada um dos sítios na $m - 1$ camada a novos $z - 1$ sítios. Estamos interessados no caso em que o número de camadas é muito grande. A figura 2.4 mostra um exemplo da árvore de Cayley com $z = 3$.

Lembramos que em árvores não há ciclos fechados, logo não é possível voltar ao mesmo sítio sem visitar os mesmos sítios.

Como o evento de ocupação dos sítios é independente, todo aglomerado pode ser

construído recursivamente: qualquer s -aglomerado pode ser criado ocupando um sítio no perímetro de um $(s - 1)$ -aglomerado. Ao ocupar um sítio no perímetro do aglomerado perdemos um sítio no perímetro e, invocando a inexistência de ciclos fechados na árvore de Cayley para garantir a existência de apenas um sítio ocupado como vizinho, ganhamos outros $z - 1$ sítios, logo $t_s = t_{s-1} + z - 1 - 1 = t_{s-1} + z - 2$. Se $t_1 = z$

$$t_s = t(s - 1) + z - 2 = (s - 2)(z - 2) + z - 2 + t_1$$

portanto

$$t_s = (z - 2)s + 2 \quad (2.13)$$

O algoritmo usado para calcular t_s é muito semelhante ao da percolação dinâmica e pode ser usado para gerar quaisquer s -aglomerado, em vista disso, qualquer s -aglomerado na árvore de Cayley tem perímetro t_s que depende apenas de s . As equações (2.6), (2.10), (2.8) e (2.9) tomam a forma

$$\rho_s = q^2 b_s p^s q^{(z-2)s} \quad (2.14)$$

$$S = q^2 \sum_{s=1}^{\infty} s^2 b_s p^s q^{(z-2)s}, \quad (2.15)$$

$$f = q^2 \sum_{s=1}^{\infty} b_s p^s q^{(z-2)s}, \quad (2.16)$$

$$F = q^2 \sum_{s=1}^{\infty} s b_s p^s q^{(z-2)s}. \quad (2.17)$$

Sendo que $b_{t,s} = b_s$, visto que o perímetro depende apenas de s .

2.4.1 Cálculo de S e F

Definindo a função geratriz $G(x)$

$$G(x) = \sum_{s=1}^{\infty} b_s x^s \quad (2.18)$$

com

$$x = pq^{(z-2)} \quad (2.19)$$

podemos reescrever (2.15), (2.16) e (2.17) na forma

$$S = q^2 \sum_{s=1}^{\infty} s^2 b_s x^s \quad (2.20)$$

$$f = q^2 \sum_{s=1}^{\infty} b_s x^s \quad (2.21)$$

$$F = q^2 \sum_{s=1}^{\infty} s b_s x^s \quad (2.22)$$

derivando (2.18)

$$\frac{dG}{dx} = \sum_{s=1}^{\infty} s b_s x^{s-1} \quad (2.23)$$

$$\frac{d^2G}{dx^2} = \sum_{s=1}^{\infty} s(s-1) b_s x^{s-2} = \sum_{s=1}^{\infty} s^2 b_s x^{s-2} - \sum_{s=1}^{\infty} s b_s x^{s-2} \quad (2.24)$$

multiplicando (2.23) por x e (2.24) por x^2

$$x \frac{dG}{dx} = \sum_{s=1}^{\infty} s b_s x^s \quad (2.25)$$

$$x^2 \frac{d^2G}{dx^2} = \sum_{s=1}^{\infty} s^2 b_s x^s - \sum_{s=1}^{\infty} s b_s x^s \Rightarrow \quad (2.26)$$

logo

$$\sum_{s=1}^{\infty} s^2 b_s x^s = x^2 \frac{d^2G}{dx^2} + x \frac{dG}{dx} \quad (2.27)$$

portanto

$$f = q^2 G(x) \quad (2.28)$$

$$F = q^2 x \frac{dG}{dx} \quad (2.29)$$

$$S = q^2 \left[x^2 \frac{d^2 G}{dx^2} + x \frac{dG}{dx} \right] \quad (2.30)$$

No intervalo $[0, p_c]$ devemos ter $F = p$, por conseguinte a partir de (2.29)

$$\frac{dG}{dx} = \frac{1}{q^z} \quad (2.31)$$

derivando novamente

$$\frac{d^2 G}{dx^2} = -zq^{-z-1} \frac{dq}{dx} = \frac{-zq^{-z-1}}{(z-2)q^{z-3} - (z-1)q^{z-2}} \quad (2.32)$$

$$= \frac{-zq^{-2z+2}}{z-2-(z-1)q} \quad (2.33)$$

Substituindo (2.31) e (2.33) em (2.30)

$$\begin{aligned} S &= q^2 \left[\frac{p}{q^2} - p^2 q^{2z-4} \frac{zq^{-2z+2}}{z-2-(z-1)q} \right] = p - \frac{zp^2}{(z-1)p-1} \\ &= \frac{(z-1)p^2 - p - zp^2}{(z-1)p-1} = -p \frac{p+1}{(z-1)p-1} \end{aligned}$$

podemos ver que S diverge se $p = \frac{1}{z-1}$, assim

$$p_c = \frac{1}{z-1} \quad (2.34)$$

$$S = p_c p \frac{p+1}{p_c - p} \quad p < p_c \quad (2.35)$$

Para encontrar S no intervalo $[p_c, 1]$ devemos notar que $x(p)$ é monotônica crescente no intervalo $[0, p_c)$ tendo derivada nula em p_c e monotônica decrescente em $(p_c, 1]$, logo dado um valor de x em $[0, x(p_c))$ sempre há dois valores possíveis para p , um abaixo e

outro acima de p_c . Invertendo (2.19) devemos ter

$$x = p(1-p)^{z-2} \Leftrightarrow \begin{cases} p = p_1(x) & p \leq p_c \\ p = p_2(x) & p \geq p_c \end{cases} \quad (2.36)$$

Caso tenhamos uma solução $u(p)$, em $[0, p_c]$, de uma função válida em todo domínio de p , podemos substituir $p = p_1(x) = p_1(p(1-p)^{z-2})$

$$u(p) = u(p_1(x)) = u(p_1(p(1-p)^{z-2})) \quad (2.37)$$

sendo que (2.37) está definida para qualquer p . Denominando $p^* = p_1(p(1-p)^{z-2})$

$$u(p) = u(p^*(p)) \quad (2.38)$$

portanto, se as condições acima forem satisfeitas, basta trocar p por uma função $p^*(p)$ se queremos encontrar a resposta em todo o domínio de p . Além disso $p^* = p$ na fase não percolante.

Exemplos de funções definidas em todo domínio de p são (2.18), (2.19), (2.29), (2.30) além de todas as derivadas de $G(x)$. Em particular, se $u(p) = x(p)$, devemos ter $x(p) = p^*(1-p^*)^{z-2}$ ($p \geq p_c$), todavia (2.19) é sempre válida, então p^* é a raiz de

$$x(p) = p(1-p)^{z-2} = p^*(1-p^*)^{z-2} \quad (2.39)$$

Analogamente podemos calcular $\frac{dG}{dx}$, $\frac{d^2G}{dx^2}$, S , e F

$$\frac{dG}{dx} = \frac{1}{(1-p^*)^z} \quad (2.40)$$

$$\frac{d^2G}{dx^2} = \frac{-z(1-p^*)^{-2z+2}}{z-2-(z-1)(1-p^*)} \quad (2.41)$$

$$S = p_c p^* \frac{(1-p)^2}{(1-p^*)^2} \frac{1+p^*}{p_c - p^*} \quad (2.42)$$

$$F = \frac{p(1-p)^z}{(1-p^*)^z} = p^* \frac{(1-p)^2}{(1-p^*)^2} \quad (2.43)$$

2.4.2 Coeficientes configuracionais

A partir de (2.31) podemos usar a fórmula de Cauchy para encontrar sb_s .

$$sb_s = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\gamma'} \frac{dx}{q^z x^s} \quad (2.44)$$

Onde γ' é uma curva ao redor de $p = 0$. Usando $x = (1-q)q^{z-2}$

$$sb_s = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\gamma'} dq \frac{(z-2)q^{z-3} - (z-1)q^{z-2}}{q^{z+(z-2)s}(1-q)^s} = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\gamma'} dq \frac{(z-2) - (z-1)q}{q^{(z-2)s+3}(1-q)^s}$$

efetuando $p = 1 - q$ para integrar ao redor de $q = 1$

$$sb_s = -\frac{1}{2\pi i} \oint_{\gamma'} dp \frac{(z-2) - (z-1)(1-p)}{(1-p)^{(z-2)s+3}p^s} = -\frac{1}{2\pi i} \oint_{\gamma'} dp \frac{(z-1)p - 1}{p^s(1-p)^{(z-2)s+3}}$$

como $\frac{1}{(1-y)^r} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(r+l-1)!}{l!(r-1)!} p^l$

$$\begin{aligned} sb_s &= \frac{1}{2\pi i} \oint_{\gamma'} dp \frac{1 - (z-1)p}{p^s} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{((z-2)s + 3 + l - 1)!}{l!((z-2)s + 3 - 1)!} p^l \\ &= \frac{1}{2\pi i} \sum_{l=0}^{\infty} \oint_{\gamma'} \frac{((z-2)s + 2 + l)!}{l!((z-2)s + 2)!} p^{l-s} [1 - (z-1)p] \end{aligned}$$

as únicas integrais não nulas são aquelas com o termo p^{-1} , dessa forma

$$b_s = \frac{z[(z-1)s]!}{s![(z-2)s+2]!} \quad (2.45)$$

$$G(x) = \sum_{s=1}^{\infty} \frac{z[(z-1)s]!}{s![(z-2)s+2]!} x^s \quad (2.46)$$

válidas qualquer que seja p dado que o número de configurações deve ser sempre igual.

2.4.3 Parâmetro de Ordem

O parâmetro de ordem P é a probabilidade de um sítio pertencer ao aglomerado infinito. Um sítio arbitrário, na árvore de Cayley, pode percolar através de qualquer um dos seus z vizinhos e, como não há um centro, a probabilidade Q de um sítio não ter um vizinho pertencente ao aglomerado infinito é a mesma. Abaixo do ponto crítico, $Q = 1$

Um sítio, ou pertence ao aglomerado infinito, ou é ocupado e não pertence ou é desocupado, por conseguinte

$$P + pQ^z + q = 1$$

isolando Q

$$Q = \left[1 - \frac{P}{p}\right]^{\frac{1}{z}} \quad (2.47)$$

Além disso se um vizinho não pertence ao aglomerado percolante ou ele é desocupado ou é ocupado e tem $z - 1$ outros vizinhos que também não percolam

$$Q = q + pQ^{z-1} \quad (2.48)$$

Substituindo (2.47) em (2.48)

$$\left[1 - \frac{P}{p}\right]^{\frac{1}{z}} = 1 - p + p \left[1 - \frac{P}{p}\right]^{\frac{z-1}{z}} \quad (2.49)$$

temos uma equação implícita para P .

2.4.4 Comportamento crítico

A fim de obter os expoentes críticos expandiremos b_s , P e S para valores próximos ao ponto crítico.

Usando a aproximação de Stirling $n! = \sqrt{2\pi n} \left(\frac{n}{e}\right)^n$ para s grande em b_s

$$\begin{aligned} b_s &= z \frac{\sqrt{2\pi(z-1)s} (z-1)^{(z-1)s} s^{(z-1)s} e^{-(z-1)s}}{\sqrt{2\pi s s^s e^{-s}} \sqrt{2\pi[(z-2)s+2]} [(z-2)s+2]^{(z-2)s+2} e^{-(z-2)s-2}} \\ &= z \frac{e^2 (z-1)^{(z-1)s+\frac{1}{2}} s^{(z-2)s}}{\sqrt{2\pi} [(z-2)s+2]^{(z-2)s+2+\frac{1}{2}}} \\ &= z \frac{e^2 (z-1)^{(z-1)s+\frac{1}{2}} s^{(z-2)s}}{\sqrt{2\pi} (z-2)^{(z-2)s+\frac{5}{2}} s^{(z-2)s+\frac{5}{2}}} \frac{1}{\left[1 + \frac{2}{(z-2)s}\right]^{(z-2)s} \left[1 + \frac{2}{(z-2)s}\right]^{\frac{5}{2}}} \end{aligned}$$

quando $s \rightarrow \infty$, $\left[1 + \frac{2}{(z-2)s}\right]^{(z-2)s} \rightarrow e^2$ e $\left[1 + \frac{2}{(z-2)s}\right]^{\frac{5}{2}} \rightarrow 1$

$$b_s = \frac{z}{\sqrt{2\pi}} \frac{(z-1)^{(z-1)s+\frac{1}{2}}}{(z-2)^{(z-2)s+\frac{5}{2}}} s^{-\frac{5}{2}} \quad (2.50)$$

Substituindo (2.50) em (2.14)

$$\rho_s = \frac{z q^2 (z-1)^{(z-1)s+\frac{1}{2}}}{\sqrt{2\pi} (z-2)^{(z-2)s+\frac{5}{2}}} s^{-\frac{5}{2}} p^s q^{(z-2)s}. \quad (2.51)$$

Ou ainda

$$\rho_s = \frac{z q^2}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{(z-1)}{(z-2)^5}} s^{-\frac{5}{2}} e^{\ln \left[\frac{(z-1)^{z-1}}{(z-2)^{z-2}} p q^{z-2} \right] s}. \quad (2.52)$$

Próximo à p_c podemos expandir $p q^{z-2}$ até a segunda ordem

$$p_c q_c^{z-2} = \frac{(z-2)^{z-2}}{(z-1)^{z-1}}$$

$$\begin{aligned} \frac{d[p q^{z-2}]}{dp} &= q^{z-2} - (z-2) p q^{z-3} \Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{d[p q^{z-2}]}{dp}(p_c) &= \left[1 - \frac{1}{z-1}\right]^{z-2} - \frac{z-2}{z-1} \left[1 - \frac{1}{z-1}\right]^{z-3} = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d^2[pq^{z-2}]}{dp^2} &= -2(z-2)q^{z-3} + (z-2)(z-3)pq^{z-4} \Rightarrow \\
\Rightarrow \frac{d^2[pq^{z-2}]}{dp^2}(p_c) &= -2(z-2) \left[\frac{z-2}{z-1} \right]^{z-3} + \frac{(z-2)(z-3)}{z-1} \left[\frac{z-2}{z-1} \right]^{z-4} \\
&= -(z-1) \left[\frac{z-2}{z-1} \right]^{z-3}
\end{aligned}$$

assim

$$\frac{(z-1)^{z-1}}{(z-2)^{z-2}} pq^{z-2} \simeq 1 - \frac{(z-1)^3}{2(z-2)} (p-p_c)^2 \quad (2.53)$$

$$\ln \left[\frac{(z-1)^{z-1}}{(z-2)^{z-2}} pq^{z-2} \right] \simeq \ln \left[1 - \frac{(z-1)^3}{2(z-2)} (p-p_c)^2 \right] \simeq -\frac{(z-1)^3}{2(z-2)} (p-p_c)^2$$

para s grande e próximo à p_c temos

$$\rho_s \simeq \frac{z}{\sqrt{2\pi}} \frac{s^{-\frac{5}{2}} e^{-\frac{1}{2} \frac{(z-1)^3}{z-2} (p-p_c)^2 s}}{\sqrt{(z-1)^3 (z-2)}} \quad (2.54)$$

sendo que em $p = p_c$, $\rho_s \sim s^{-\frac{5}{2}}$. Usando (2.53) podemos expandir ambos os membros de (2.39) obtendo

$$p^* - p_c \simeq \pm(p - p_c)$$

de onde inferimos

$$p^* \simeq \begin{cases} p & p^* \text{ se } \rightarrow p_c^- \\ 2p_c - p & p^* \text{ se } \rightarrow p_c^+ \end{cases}$$

ou simplesmente

$$p^* \simeq p_c - |p - p_c| \quad (2.55)$$

Substituindo a aproximação (2.55) em (2.42) e retendo apenas o termo da divergência

$$S \simeq \frac{z}{(z-1)^3} \frac{1}{|p-p_c|} \quad (2.56)$$

vemos que $S \sim |p-p_c|^{-1}$. Caso $\frac{P}{p} \ll 1$ ($p \approx p_c$) podemos expandir (2.49) até a segunda ordem

$$\begin{aligned} 1 - \frac{P}{zp} + \frac{1}{2z} \left[\frac{1}{z} - 1 \right] \frac{P^2}{p^2} &= 1 - p + p + p \left[1 - \frac{1}{z} \right] \frac{-1}{2z} \frac{P^2}{p^2} - p \left[1 - \frac{1}{z} \right] \frac{P}{p} \\ 2z \frac{p}{q} [p-p_c] P &= P^2 \end{aligned}$$

logo

$$P^2 - 2z \frac{p}{q} [p-p_c] P = 0 \quad (2.57)$$

cuja solução não trivial nos dá o comportamento de P próximo e acima do ponto crítico

$$P = 2z \frac{p}{q} [p-p_c] \quad (2.58)$$

ou ainda

$$P = \frac{2z}{z-2} [p-p_c] \quad (2.59)$$

de onde vemos que $P \sim |p-p_c|^1$

2.5 Expoentes Críticos Estáticos

Vimos que diversas grandezas comportam-se como uma lei de potência ϵ^μ , com $\epsilon = |p-p_c|$. Nesta seção definiremos os expoentes críticos e mostraremos algumas relações entre eles.

Os expoentes β , γ , σ e τ , na vizinhança de p_c , são definidos por:

$$P \sim \epsilon^\beta, \quad (2.60)$$

$$S \sim \epsilon^{-\gamma}, \quad (2.61)$$

$$\rho_s \sim s^{-\tau} U(\epsilon s^\sigma). \quad (2.62)$$

Em que U é chamada função de escala. A exemplo, na árvore de Cayley, podemos comparar as equações (2.59) e (2.56) com (2.60) e (2.61), respectivamente, além de reescrever (2.54), obtendo $\beta = 1$, $\gamma = 1$ e

$$\rho_s \sim s^{-\frac{5}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \frac{(z-1)^3}{z-2} [(p-p_c)\sqrt{s}]^2 \right\}. \quad (2.63)$$

A comparação da equação (2.62) com (2.63) nos mostra que $\tau = 5/2$ e $\sigma = 1/2$. Também podemos observar que a exponencial decrescente nos mostra s_{max} , o tamanho máximo característico de um aglomerado finito. Se

$$\rho_s \sim s^{-\frac{5}{2}} \exp \left\{ -\frac{s}{s_{max}} \right\} \quad (2.64)$$

devemos ter $s_{max} \sim \epsilon^{-2}$.

Mais genericamente, devemos ter

$$s_{max} \sim \epsilon^{-\frac{1}{\sigma}}. \quad (2.65)$$

Sendo possível reescrever (2.62) na forma

$$\rho_s \sim s^{-\tau} U' \left(\frac{s^\sigma}{s_{max}^\sigma} \right). \quad (2.66)$$

2.5.1 Relação entre β , τ e σ

Isolando P na equação (2.11) e substituindo a F pela sua definição (2.9) temos

$$P = p - \sum_{s=0}^{\infty} s \rho_s$$

Nas vizinhanças do ponto crítico e s grande, podemos substituir a relação (2.62). Também usaremos que $p_c = F(p_c)$ e A é uma constante

$$P \sim p - p_c + A \sum_{s=0}^{\infty} s^{1-\tau} [U(0) - U(\epsilon s^\sigma)]$$

Aproximando a soma por uma integral

$$\sum_{s=0}^{\infty} s^{1-\tau} [U(0) - U(\epsilon s^\sigma)] = \int_0^{\infty} s^{1-\tau} [U(0) - U(\epsilon s^\sigma)] ds$$

Efetuando $w = \epsilon s^\sigma$

$$\begin{aligned} P &\sim \epsilon + \frac{A}{\sigma} \int_0^{\infty} \left[\frac{w}{\epsilon} \right]^{\frac{1-\tau}{\sigma}} \left[\frac{\epsilon}{w} \right]^{\frac{\sigma-1}{\sigma}} \frac{1}{\epsilon} [U(0) - U(w)] dw \\ &\sim \epsilon + \frac{A}{\sigma} \epsilon^{\frac{\tau-2}{\sigma}} \int_0^{\infty} w^{\frac{2-\sigma-\tau}{\sigma}} [U(0) - U(w)] dw \end{aligned}$$

O expoente crítico será dado pelo menor expoente, ou 1 ou $(\tau - 2)/\sigma$, desde que a integral não divirja. Comparando com (2.60) e como em geral temos $(\tau - 2)/\sigma \leq 1$

$$\beta = \frac{\tau - 2}{\sigma} \tag{2.67}$$

2.5.2 Relação entre γ , τ e σ

Usando a definição de S , dada por (2.10), faremos a mesma análise da seção anterior, válida nas vizinhanças de p_c e aglomerados grandes

$$\begin{aligned} S &= \sum_{s=0}^{\infty} s^2 \rho_s \\ &\sim \int_0^{\infty} s^{\frac{2-\tau}{\sigma}} U(\epsilon s^{\sigma}) ds \\ &\sim \epsilon^{\frac{3-\tau}{\sigma}} \int_0^{\infty} w^{\frac{2-\tau-\sigma}{\sigma}} U(w) dw \end{aligned}$$

Se a integral convergir e comparando com (2.61)

$$\gamma = \frac{\tau - 3}{\sigma} \quad (2.68)$$

2.5.3 Dimensão fractal

Seja r_0 o centro do aglomerado

$$r_o = \frac{\sum_i \vec{r}_i}{N} \quad (2.69)$$

O comprimento de correlação ξ

$$\xi = \frac{\sum_i \vec{r}_i - r_0}{N} \quad (2.70)$$

é associado ao raio médio dos clusters finitos. No ponto crítico, s_{max} diverge, logo esperamos que o raio médio também divirja

$$\xi \sim \epsilon^{-\nu_{\perp}} \quad (2.71)$$

Assim como o volume de um sólido é proporcional ao cubo de um comprimento característico do mesmo, esperamos que o volume do cluster seja proporcional a alguma

potência de ξ . Numa rede de dimensão d e comprimento L , a massa do cluster percolante é dada por $L^d P$. Ao redor do ponto crítico e, se o volume for proporcional à ξ^{d_F}

$$PL^d \sim \xi^{d_F} \quad (2.72)$$

O raio do cluster não pode ultrapassar o comprimento L da rede, porém, na vizinhança de p_c , ξ deve ser tão grande quanto possível. Assim devemos ter

$$\xi \sim L \quad (2.73)$$

Substituindo (2.60), (2.71), (2.73) em (2.72)

$$\epsilon^{\beta - \nu_\perp d} = \epsilon^{-\nu_\perp d_F}$$

logo

$$\beta = \nu_\perp (d - d_F) \quad (2.74)$$

O volume do cluster percolante também deve ser proporcional à s_{max} , logo

$$s_{max} \sim \xi^{d_F} \quad (2.75)$$

portanto

$$\nu_\perp d_F = \frac{1}{\sigma} \quad (2.76)$$

2.5.4 Expoentes críticos exatos

Os expoentes críticos em duas dimensões são conhecidos exatamente e são mostrados na tabela 2.1. Nesta tabela apresentamos os expoentes obtidos na árvore de Cayley que são conhecidos como expoentes clássicos ou expoentes de campo médio (CM).

Tabela 2.1: Tabela dos expoentes críticos estáticos . Valores retirados de [28]. A coluna CM indica os valores obtidos para campo médio.

	$d = 2$	CM
β	$5/36$	1
γ	$43/18$	1
$\nu_{\perp}$	$4/3$	$1/2$
σ	$36/91$	$1/2$
τ	$187/91$	$5/2$
d_F	$91/48$	4

Capítulo 3

Modelo

Suscetível-Exposto-Infectado

3.1 Modelo

O modelo suscetível-exposto-infectado (SEI) foi introduzido por T. Tomé e Oliveira [11] e inspirado num artigo publicado por Alexandrowicz [1] em 1980 onde descreve um algoritmo para gerar aglomerados da percolação isotrópica dinamicamente. O algoritmo de Alexandrowicz é muito semelhante à dinâmica de um autômato celular e gera aglomerados da percolação a partir de um único sítio.

No modelo SEI, cada sítio da rede pode estar em um dos três estados: suscetível (S), exposto (E) ou infectado (I) e a evolução temporal é dada por duas reações, uma autocatalítica $I + S \rightarrow I + I$ e a outra catalítica $I + S \rightarrow I + E$. Partindo de uma condição inicial com todos os sítios suscetíveis exceto por um infectado no centro da rede, a dinâmica prossegue até um estado absorvente sem pares de sítios vizinhos I e S (sítios ativos). O aglomerado de infectados gerado deve ser rodeado de sítios expostos assim como um aglomerado de sítios ocupados da percolação é rodeado de sítios vazios. Interpretando sítios infectados como ocupados e expostos como desocupados argumen-

taremos mais adiante que o aglomerado de infectados têm as mesmas propriedades de um aglomerado gerado na percolação e, por conseguinte, esperamos uma transição de fase contínua numa taxa crítica de infecção abaixo do qual a doença é local e acima a doença se propaga ao longo da rede.

Diferente do modelo susceptível, infectado e recuperado (SIR) [11] os sítios I e E em SEI permanecem eternamente em seus estados, sendo necessário supor que a propagação da doença é muito mais rápida que a mortalidade ou recuperação.

3.1.1 Algoritmo

Para melhor compreensão da dinâmica do modelo SEI, apresentamos o algoritmo que define o modelo. Se N é o número de sítios na rede:

1. tempo = tempo + $1/N$,
2. sorteamos um sítio aleatoriamente,
3. caso o sítio seja I ou E retornamos à regra 1,
4. caso contrário o sítio, que é S, mudará de estado com probabilidade igual a fração de primeiros vizinhos infectados,
5. se ocorrer mudança de estado, o sítio S se torna I com probabilidade p ou E com $1-p$
6. retornamos à regra 1.

As regras acima mostram que qualquer configuração da rede em que pares de sítios vizinhos IS estejam ausentes é um estado absorvente. Partindo de uma condição inicial com ao menos um sítio I numa rede repleta de sítios S, há dois possíveis tipos de estado absorvente: o primeiro, no qual todos os sítios são infectados e, o segundo, que também

é o mais típico, no qual todos os aglomerados de sítios infectados estão rodeados por sítios expostos.

Também podemos observar que o algoritmo do modelo SEI gera apenas um aglomerado de sítios infectados se houver apenas um sítio I em $t = 0$. Isso ocorre pois só há infecção em pares de primeiros vizinhos IS, de forma que sempre há um sítio I ao redor de outro sítio I.

3.1.2 Conexão com a percolação

Imaginemos duas redes com sítios identicamente enumerados, rede 1 e rede 2. A cada sítio i associamos um número, ξ_i , sorteado com densidade de probabilidade constante no intervalo $[0, 1)$. Sítios correspondentes (com mesmo i) têm o mesmo número sorteado. Além disso, todos os sítios da rede 1 serão S exceto pelo sítio central, que será I, enquanto que na rede 2 apenas o sítio central será ocupado.

Usando o algoritmo do modelo SEI na rede 1, podemos usar os valores ξ_i para decidir se há infecção ou exposição, ou seja, na regra 5 do algoritmo, se $\xi_i < p$ há infecção e, caso contrário, exposição. Após a regra 5, podemos olhar para o mesmo sítio na rede 2 e torná-lo ocupado, se $\xi_i < p$, ou vazio com probabilidade complementar. Esse procedimento será executado até a chegada do estado absorvente do modelo SEI.

De acordo com o parágrafo anterior, cada sítio infectado na rede 1 irá corresponder a um sítio ocupado na rede 2, assim como cada sítio exposto na rede 1 também corresponde a um sítio vazio na rede 2. Além disso, os aglomerados na rede 2 são aglomerados da percolação por sítio, visto que um sítio é ocupado com probabilidade p e vazio com $1 - p$. Portanto os aglomerados do modelo SEI são os aglomerados da percolação por sítio através da associação infectado $\rightarrow$ ocupado, exposto $\rightarrow$ vazio.

3.1.3 Equação Mestra e Dinâmica de um Sítio

A partir da equação mestra

$$\frac{\partial P(\eta)}{\partial t} = \sum_{\eta' \neq \eta} [W_{\eta' \rightarrow \eta} P(\eta') - W_{\eta \rightarrow \eta'} P(\eta)] \quad (3.1)$$

em que $P(\eta)$ e $W_{\eta' \rightarrow \eta}$ denotam a probabilidade de estar num estado η e a taxa de transição do estado η' para o η respectivamente; podemos introduzir a dinâmica de um sítio, na qual apenas um sítio muda a cada iteração. Se N é o número de sítios na rede e σ_i a variável estocástica associada ao sítio i , um estado é definido por

$$\eta = \{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_i, \dots, \sigma_{N-1}, \sigma_N\} \quad (3.2)$$

para auxiliar os cálculos também definimos

$$\eta' = \{\sigma'_1, \sigma'_2, \dots, \sigma'_i, \dots, \sigma'_{N-1}, \sigma'_N\} \quad (3.3)$$

A dinâmica de um sítio impõe $\delta_i(\eta, \eta') w_{\sigma'_i \rightarrow \sigma_i}(\eta')$ como a taxa da transição $\sigma'_i \rightarrow \sigma_i$, sendo que

$$\delta_i(\eta, \eta') = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \delta_{\sigma_j, \sigma'_j}. \quad (3.4)$$

Durante a evolução do sistema muitos sítios podem mudar seu estado, consequentemente a taxa de mudança de estado deve ser uma soma sobre a taxa de todos os sítios

$$W_{\eta' \rightarrow \eta} = \sum_{i=1}^N \delta_i(\eta, \eta') w_{\sigma'_i \rightarrow \sigma_i}(\eta'). \quad (3.5)$$

Substituindo (3.5) e (3.4) em (3.1)

$$\begin{aligned}
\frac{\partial P(\eta)}{\partial t} &= \sum_{\eta' \neq \eta} \sum_{i=1}^N \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \delta_{\sigma_j, \sigma'_j} \left[w_{\sigma'_i \rightarrow \sigma_i}(\eta') P(\eta') - w_{\sigma'_i \rightarrow \sigma_i}(\eta) P(\eta) \right] \\
&= \sum_{i=1}^N \sum_{\eta' \neq \eta} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \delta_{\sigma_j, \sigma'_j} \left[w_{\sigma'_i \rightarrow \sigma_i}(\eta') P(\eta') - w_{\sigma'_i \rightarrow \sigma_i}(\eta) P(\eta) \right]
\end{aligned}$$

porém somar sobre todos os valores de η' é equivalente a somar sobre todos os sítios de η' com a restrição de que ao menos um sítio (σ_k) seja diferente: $\sum_{\eta' \neq \eta} = \sum_{k=1}^N \sum_{\sigma'_1} \cdots \sum_{\sigma'_k \neq \sigma_k} \cdots \sum_{\sigma'_N}$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^N \sum_{\sigma'_1} \cdots \sum_{\substack{\sigma'_k \neq \sigma_k \\ \sigma'_N}} \cdots \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \delta_{\sigma_j, \sigma'_j} \left[w_{\sigma'_i \rightarrow \sigma_i}(\eta') P(\eta') - w_{\sigma'_i \rightarrow \sigma_i}(\eta) P(\eta) \right]$$

Quando $k \neq i$ o termo $\sum_{\sigma'_k \neq \sigma_k} \delta_{\sigma_k, \sigma'_k}$ anula uma parcela da soma, restando apenas $k = i$. A sobre os outros sítios transformam o vetor η' no vetor η_i^*

$$\eta_i^* = \{\sigma_1, \dots, \sigma_{i-1}, \sigma_i^*, \sigma_{i+1}, \dots, \sigma_N\} \quad (3.6)$$

logo

$$\frac{\partial P(\eta)}{\partial t} = \sum_{i=1}^N \sum_{\sigma^* \neq \sigma_i} \left[w_{\sigma_i^* \rightarrow \sigma_i}(\eta_i^*) P(\eta_i^*) - w_{\sigma_i \rightarrow \sigma_i^*}(\eta) P(\eta) \right] \quad (3.7)$$

3.2 Solução na Árvore de Cayley

Um dos propósitos do estudo do modelo SEI na árvore de Cayley é que poderemos obter soluções exatas do modelo. Como vimos anteriormente, o modelo de percolação na árvore de Cayley tem uma transição de fase, portanto o modelo SEI também apresenta uma transição de fase. Resolveremos o modelo SEI na árvore de Cayley utilizando o

método introduzido na referência [11]. Resolveremos para o caso que em $t = 0$ temos apenas um sítio infectado. Devido à existência de apenas um aglomerado crescendo e de que árvores não têm ciclos fechados, os sítios expostos e ativos ficam localizados apenas na periferia com apenas um vizinho infectado. Se z , β e α são a coordenação e taxas de infecção e exposição, um sítio ativo torna-se infectado ou exposto com taxas β/z ou α/z .

3.2.1 Equações diferenciais

Num determinado instante t estamos interessados em saber o número de sítios I (n_I), E (n_E) e ativos (m). Se β e α são as taxas de infecção e exposição, podemos resolver o modelo através do método de equações diferenciais: o número de sítios infectados e expostos aumentam em uma unidade linearmente com o número de sítios ativos vezes suas respectivas taxas à medida que o número de sítios ativos aumentam de $z - 2$ a cada infecção e é reduzido em 1 a cada exposição.

$$\frac{dn_I}{dt} = \frac{\beta}{z}m \quad (3.8)$$

$$\frac{dn_E}{dt} = \frac{\alpha}{z}m \quad (3.9)$$

$$\frac{dm}{dt} = \frac{\beta}{z}(z - 2)m - \frac{\alpha}{z}m \quad (3.10)$$

Resolvendo estas equações:

$$m = m(0)e^{[\beta(z-2)-\alpha]\frac{t}{z}} \quad (3.11)$$

$$n_I = \frac{\beta}{\beta(z - 2) - \alpha}m(0)e^{[\beta(z-2)-\alpha]\frac{t}{z}} + C_I \quad (3.12)$$

$$n_E = \frac{\alpha}{\beta(z-2) - \alpha} m(0) e^{[\beta(z-2) - \alpha] \frac{t}{z}} + C_E \quad (3.13)$$

Observando (3.11) concluímos que se $\beta(z-2) - \alpha$ for positivo, há um crescimento desenfreado de sítios ativos, ao passo que se $\beta(z-2) - \alpha$ for negativo m decai exponencialmente, portanto podemos encontrar uma taxa crítica β_c quando $\beta_c(z-2) - \alpha = 0$. Definindo $p = \beta/(\beta + \alpha)$ e $q = 1 - p = \alpha/(\beta + \alpha)$

$$\begin{aligned} \beta_c(z-2) - \alpha &= 0 \Rightarrow \\ \Rightarrow (z-1)p_c &= 1 \end{aligned}$$

$$p_c = \frac{1}{z-1} \quad (3.14)$$

Comparando (2.34) com (3.14) reparamos que esta simples aproximação nos mostra corretamente o valor do ponto crítico.

3.2.2 Solução com a Equação Mestra

Ao iniciar com apenas um sítio infectado e todos os outros suscetíveis, os sítios E e ativos são encontrados somente na periferia do aglomerado, pois a árvore de Cayley não têm ciclos fechados; usando a relação (2.13)

$$m + n_E = (z-2)n_I + 2 \quad (3.15)$$

logo dado m e n_I podemos calcular n_E .

Caracterizamos uma determinada configuração do modelo SEI, numa rede contendo N sítios, através do número de sítio infectados, expostos e ativos. A equação (3.15) nos possibilita escolher dois, ao invés dos três, números citados para identificar um estado

da rede, por conveniência escolheremos n_I e m de forma que $P(\eta) = P_{n_I, m}$.

Deixemos σ_i assumir os valores 0, 1 e 2, associando-os aos estados S , I e E respectivamente. Com esta convenção a taxa $w_{\sigma_i^* \rightarrow \sigma_i}$ na equação (3.7) é escrita na forma

$$w_{\sigma_i^* \rightarrow \sigma_i} = (\beta\delta_{\sigma_i, 1} + \alpha\delta_{\sigma_i, 2})\delta_{\sigma_i^*, 0} \frac{\sum_{\epsilon} \delta_{\sigma_{i+\epsilon}, 1}}{z} \quad (3.16)$$

a soma $\sum_{\epsilon} \delta_{\sigma_{i+\epsilon}, 1}$ se estende à todos os sítios vizinhos ao sítio σ_i . Substituindo em (3.7)

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_{n_I, m}}{\partial t} = & \sum_{i=1}^N \sum_{\sigma_i^* \neq \sigma_i} (\beta\delta_{\sigma_i, 1} + \alpha\delta_{\sigma_i, 2})\delta_{\sigma_i^*, 0} \frac{\sum_{\epsilon} \delta_{\sigma_{i+\epsilon}, 1}}{z} P_{n_I^*, m^*} - \\ & - (\beta\delta_{\sigma_i^*, 1} + \alpha\delta_{\sigma_i^*, 2})\delta_{\sigma_i, 0} \frac{\sum_{\epsilon} \delta_{\sigma_{i+\epsilon}^*, 1}}{z} P_{n_I, m} \end{aligned}$$

Somando sobre $\sigma_i^* \neq \sigma_i$

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_{n_I, m}}{\partial t} = & \sum_{i=1}^N \left[(\beta\delta_{\sigma_i, 1} + \alpha\delta_{\sigma_i, 2}) \frac{\sum_{\epsilon} \delta_{\sigma_{i+\epsilon}, 1}}{z} P_{n_I^*, m^*} \right]_{\sigma_i^*=0} - \\ & - \sum_{i=1}^N \left[(\beta + \alpha)\delta_{\sigma_i, 0} \frac{\sum_{\epsilon} \delta_{\sigma_{i+\epsilon}^*, 1}}{z} P_{n_I, m} \right]_{\sigma_i^* \neq 0} \end{aligned} \quad (3.17)$$

O termo

$$\left[\delta_{\sigma_i, 1} \frac{\sum_{\epsilon} \delta_{\sigma_{i+\epsilon}, 1}}{z} \right]_{\sigma_i^*=0}$$

nos leva a um estado η_i^I no qual o i -ésimo sítio era suscetível e ativo, ademais se $\sigma_i^* \rightarrow I$ então $\eta_i^I \rightarrow \eta$. A cada infecção o número de sítios infectados e ativos aumenta em 1 e $z - 2$, portanto o estado η_i^I contém $n_I - 1$ sítios infectados e $m - z + 2$ ativos. Por fim, como a taxa de infecção na árvore de Cayley é constante, a soma sobre todos os sítios

acrescenta um fator multiplicativo igual ao número de sítios ativos do estado η_i^*

$$\beta \sum_{i=1}^N \left[\delta_{\sigma_i,1} \frac{\sum_{\epsilon} \delta_{\sigma_i+\epsilon,1}}{z} P_{n_I^*,m^*} \right]_{\sigma_i^*=0} = \frac{\beta}{z} (m - z + 2) P_{n_I-1, m-z+2} \quad (3.18)$$

Analogamente

$$\left[\delta_{\sigma_i,2} \frac{\sum_{\epsilon} \delta_{\sigma_i+\epsilon,1}}{z} \right]_{\sigma_i^*=0}$$

mostra que η provém do estado η_i^E , diferente de η_i^I . É importante notar que se $\sigma_i^* \rightarrow E$ então $\eta_i^E \rightarrow \eta$, além do que η_i^E contém n_I e $m + 1$ sítio infectados e expostos respectivamente.

$$\alpha \sum_{i=1}^N \left[\delta_{\sigma_i,2} \frac{\sum_{\epsilon} \delta_{\sigma_i+\epsilon,1}}{z} P_{n_I^*,m^*} \right]_{\sigma_i^*=0} = \frac{\alpha}{z} (m + 1) P_{n_I, m+1} \quad (3.19)$$

O termo negativo na equação mestra (3.17) resulta em

$$(\beta + \alpha) \sum_{i=1}^N \left[\delta_{\sigma_i,0} \frac{\sum_{\epsilon} \delta_{\sigma_i+\epsilon,1}}{z} P_{n_I, m} \right]_{\sigma_i^*=0} = \frac{\beta + \alpha}{z} (m) P_{n_I, m} \quad (3.20)$$

A equação mestra têm a forma

$$\frac{\partial P_{n_I, m}}{\partial t} = \frac{\beta}{z} (m - z + 2) P_{n_I-1, m-z+2} + \frac{\alpha}{z} (m + 1) P_{n_I, m+1} - \frac{(\beta + \alpha)}{z} m P_{n_I, m} \quad (3.21)$$

Ou ainda, se usarmos as definições $p = \frac{\beta}{\alpha + \beta}$, $q = 1 - p$ e $t \rightarrow \frac{t(\alpha + \beta)}{z}$

$$\frac{\partial P_{n_I, m}}{\partial t} = p(m - z + 2) P_{n_I-1, m-z+2} + q(m + 1) P_{n_I, m+1} - m P_{n_I, m} \quad (3.22)$$

Função Geratriz

Definindo a função geratriz $G(x, y)$

$$G(x, y) = \sum_{n_I=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{(z-2)n_I+2} x^{n_I} y^m P_{n_I, m} \quad (3.23)$$

onde $P_{n_I, m}$ é a probabilidade de um sítio pertencer a um n_I -aglomerado com m sítios ativos, desejamos escrever uma equação para $\frac{\partial G}{\partial t}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial G}{\partial t} = \sum_{n_I=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{(z-2)n_I+2} x^{n_I} y^m [p(m-z+2)P_{n_I-1, m-z+2} + \\ + q(m+1)P_{n_I, m+1} - mP_{n_I, m}] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial G}{\partial t} = xy^{z-1} \sum_{n_I=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{(z-2)n_I+2} x^{n_I-1} y^{m-z+1} p(m-z+2)P_{n_I-1, m-z+2} + \\ + \sum_{n_I=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{(z-2)n_I+2} x^{n_I} y^m q(m+1)P_{n_I, m+1} - \\ - y \sum_{n_I=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{(z-2)n_I+2} x^{n_I} y^{m-1} mP_{n_I, m} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial G}{\partial t} = xy^{z-1} \frac{\partial}{\partial y} \sum_{n_I=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{(z-2)n_I+2} x^{n_I-1} y^{m-z+2} pP_{n_I-1, m-z+2} + \\ + \frac{\partial}{\partial y} \sum_{n_I=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{(z-2)n_I+2} x^{n_I} y^{m+1} qP_{n_I, m+1} - \\ - y \frac{\partial}{\partial y} \sum_{n_I=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{(z-2)n_I+2} x^{n_I} y^m P_{n_I, m} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial G}{\partial t} = & pxy^{z-1} \frac{\partial}{\partial y} \sum_{n'_I=0}^{\infty} \sum_{m'=-z+2}^{(z-2)(n'_I-1)+2-z+2} x^{n'_I} y^{m'} P_{n'_I, m'} + \\
& + \frac{\partial}{\partial y} \sum_{n_I=1}^{\infty} \sum_{m'=1}^{(z-2)n_I+3} x^{n_I} y^{m'} q P_{n_I, m'} - \\
& - y \frac{\partial}{\partial y} \sum_{n_I=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{(z-2)n_I+2} x^{n_I} y^m P_{n_I, m}
\end{aligned}$$

$P_{n_I, m} = 0$ se $m < 0$, $m > (z-2)n_I + 2$ ou $n_I < 1$, além disso podemos acrescentar, no termo referente à exposição, $m = 0$, pois sua derivada em relação à y é nula.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial G}{\partial t} = & pxy^{z-1} \frac{\partial}{\partial y} \sum_{n_I=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{(z-2)n_I+2} x^{n_I} y^m P_{n_I, m} + \\
& + q \frac{\partial}{\partial y} \sum_{n_I=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{(z-2)n_I+2} x^{n_I} y^m P_{n_I, m} - \\
& - y \frac{\partial}{\partial y} \sum_{n_I=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{(z-2)n_I+2} x^{n_I} y^m P_{n_I, m}
\end{aligned}$$

$$\frac{\partial G}{\partial t} - (pxy^{z-1} + q - y) \frac{\partial G}{\partial y} = 0 \tag{3.24}$$

Solução exata para $z = 3$

Quando $z = 3$ é possível resolver (3.24) exatamente por meio do método das características. Este método supõe $G(x, y, t) = \Phi(t)$ com as restrições $x = x(t)$ e $y = y(t)$ encontrando soluções constantes no parâmetro t ($\frac{dG}{dt} = 0$).

$$\frac{d\Phi}{dt} = \frac{dx}{dt} \frac{\partial \Phi}{\partial x} + \frac{dy}{dt} \frac{\partial \Phi}{\partial y} + \frac{\partial \Phi}{\partial t} = 0 \tag{3.25}$$

Comparando (3.25) com (3.24)

$$\frac{dx}{dt} = 0 \quad (3.26)$$

$$\frac{dy}{dt} = -(pxy^{z-1} + q - y) \quad (3.27)$$

(3.26) nos mostra a independência de x com t , por conseguinte é possível integrar (3.27) diretamente

$$t - t_0 = - \int_{y_0}^y \frac{dy'}{pxy'^{z-1} + q - y'} \quad (3.28)$$

quando $z = 3$

$$t - t_0 = - \int_{y_0}^y \frac{dy'}{pxy'^2 + q - y'} \quad (3.29)$$

O polinômio $pxy^2 - y + q$ também pode ser escrito como

$$px \left(y - \frac{1 + \sqrt{1 - 4pqx}}{2px} \right) \left(y - \frac{1 - \sqrt{1 - 4pqx}}{2px} \right)$$

Definindo

$$f_1 = \frac{1 + \sqrt{1 - 4pqx}}{2px} \quad (3.30)$$

$$f_2 = \frac{1 - \sqrt{1 - 4pqx}}{2px} \quad (3.31)$$

(3.29) toma a forma

$$t - t_0 = -\frac{1}{px} \int^y \frac{dy'}{(y - f_1)(y - f_2)}$$

usando frações parciais

$$t - t_0 = -\frac{1}{g} \int^y dy' \left[\frac{1}{(y' - f_1)} - \frac{1}{(y' - f_2)} \right]$$

com

$$g = \sqrt{1 - 4pqx}$$

assim

$$-g(t - t_0) = \ln \left[\frac{y - f_1}{y - f_2} \right] - \ln \left[\frac{y_0 - f_1}{y_0 - f_2} \right] \quad (3.32)$$

exponenciando

$$\epsilon = \left[\frac{y - f_1}{y - f_2} \right] \left[\frac{y_0 - f_2}{y_0 - f_1} \right]$$

sendo

$$\epsilon = e^{-g(t-t_0)} \quad (3.33)$$

isolando y_0

$$y_0 = \frac{y(f_2 - f_1\epsilon) - f_1f_2(1 - \epsilon)}{(1 - \epsilon)y - (f_1 - f_2\epsilon)} \quad (3.34)$$

Quando $t = t_0 = 0$ há apenas um sítio infectado e z sítios ativos, portanto devemos ter $G = xy_0^3$ e a função geratriz é dada por

$$G = x \left[\frac{y(f_2 - f_1\epsilon) - f_1f_2(1 - \epsilon)}{(1 - \epsilon)y - (f_1 - f_2\epsilon)} \right]^3 \quad (3.35)$$

No estado estacionário $\lim_{t \rightarrow \infty} G$ obtemos

$$G = x \left[\frac{yf_2 - f_1f_2}{y - f_1} \right]^3 = x[f_2]^3 = \frac{[1 - \sqrt{1 - 4pqx}]^3}{8p^3x^2} \quad (3.36)$$

que, como esperado, não depende de y

Através da definição de G podemos calcular $G(x, 1)$

$$G(x, 1) = \sum_{n=1}^{\infty} x^n \sum_{m=0}^{(z-2)n+2} P_{n,m} \quad (3.37)$$

$\sum_{m=0}^{(z-2)n+2} P_{n,m}$ é a probabilidade do sítio inicial pertencer à um n -aglomerado, dado que é infectado/ocupado, que por sua vez é igual à probabilidade condicional de um sítio pertencer a um n aglomerado dado que é ocupado, Λ_n/p

$$\frac{\Lambda_s}{p} = \sum_{m=0}^{(z-2)n+2} P_{n,m} \quad (3.38)$$

$$G(x, 1) = \sum_{n=1}^{\infty} x^n \frac{\Lambda_n}{p} \quad (3.39)$$

(3.39) não depende de m , logo deve ser igual à função geratriz estacionária (3.36).

Manipulando (3.36)

$$G = \frac{1 - 3pqx - (1 - pqx)\sqrt{1 - 4pqx}}{2p^3x^2}$$

expandindo $\sqrt{1 - 4pqx}$

$$\sqrt{1 - 4pqx} = 1 - 2pqx - \sum_{m=2}^{\infty} a_m x^m \quad a_m = (2pq)^n \frac{(2n-3)!!}{n!} \quad (3.40)$$

substituindo em G

$$\begin{aligned} G &= \frac{1}{2p^3x^2} \left[1 - 3pqx - (1 - pqx) \left(1 - 2pqx - \sum_{m=2}^{\infty} a_m x^m \right) \right] \\ &= \frac{1}{2p^3x^2} \left[-2p^2q^2x^2 + \sum_{m=2}^{\infty} a_m x^m - pq \sum_{m=2}^{\infty} a_m x^{m+1} \right] \\ &= \frac{1}{2p^3x^2} \left[\sum_{m=3}^{\infty} a_m x^m - pq \sum_{m=3}^{\infty} a_{m-1} x^m \right] \\ &= \frac{1}{2p^3} \sum_{m=1}^{\infty} [a_{m+2}x^m - pqa_{m+1}x^m] \end{aligned}$$

assim

$$\sum_{s=1}^{\infty} \Lambda_s x^s = \frac{1}{2p^2} \sum_{m=1}^{\infty} [a_{m+2}x^m - pqa_{m+1}x^m] \quad (3.41)$$

logo

$$\Lambda_s = \frac{a_{s+2} - pqa_{s+1}}{2p^2}$$

ou ainda

$$\Lambda_s = \frac{3s}{4p^2} \frac{(2pq)^{s+2} (2s-1)!!}{(s+2)!}$$

com a identidade $(2s-1)!! = \frac{(2s)!}{2^s s!}$

$$\Lambda_s = 3q^2 \frac{(2s)!}{(s-1)!(s+2)!} (pq)^s \quad (3.42)$$

comparando (3.42) com (2.45), (2.7) quando $z = 3$ vemos que as duas equações são idênticas.

Capítulo 4

SEI - Simulações na rede quadrada

4.1 Expoentes Críticos Dinâmicos

Estudaremos neste capítulo o modelo SEI na rede quadrada ($N = L \times L$), através de simulações de Monte Carlo, com a finalidade de determinar a classe de universalidade a qual este modelo pertence, estimando seus expoentes críticos dinâmicos. Também compararemos os resultados estáticos com os da percolação usual via expoentes críticos estáticos exatamente calculados. As técnicas usadas neste capítulo são baseadas em [13, 18, 21, 27, 30].

O comportamento crítico é caracterizado, não apenas por expoentes estáticos, associados ao comportamento crítico no estado estacionário, mas também pelos expoentes dinâmicos, associados ao comportamento para tempos longos ao redor do ponto crítico. A seguir consideraremos o comportamento temporal e na seção seguinte o comportamento estático.

Para observar o comportamento crítico, é necessário utilizar um tempo de simulação da ordem de grandeza do comprimento de correlação temporal, o qual diverge, no ponto

Figura 4.1: Exemplo de um aglomerado gerado pelo modelo SEI. Os quadrados pretos, azuis, vermelhos e cinzas indicam sítios suscetíveis, expostos, infectados e ativos respectivamente. Um sítio ativo também é um sítio suscetível.

crítico, de acordo com

$$t \sim \epsilon^{-\nu_{\parallel}} \quad (4.1)$$

onde $\epsilon = |p - p_c|$. A relação (4.1) é extremamente importante, pois através dela é possível relacionar os expoentes dinâmicos, definidos abaixo, com os expoentes estáticos.

Um aglomerado é denominado ativo se contém ao menos um sítio ativo, um sítio ativo é o sítio S ao lado de um I. A figura (4.1) mostra um exemplo de um aglomerado gerado pelo modelo SEI com sítios ativos. No ponto crítico, o número médio (sobre todas as simulações) de infectados nos clusters ativos no instante t , que denominamos N'_I , deve divergir de acordo com

$$N'_I \sim t^{\eta} \quad p = p_c \quad (4.2)$$

O número de pares IS (N_{IS}), ou sítios ativos, também deve divergir de acordo com

$$N_{IS} \sim t^{\theta} \quad p = p_c \quad (4.3)$$

A probabilidade de sobrevivência, P , é a fração de aglomerados sobreviventes/ativos no instante t e é identificada como o parâmetro de ordem no estado estacionário.

Lembramos que cada simulação do modelo SEI com um único infectado em $t = 0$ gera um cluster por simulação, de forma que o número de clusters é igual ao número de simulações. Em $p = p_c$

$$P \sim t^{-\delta} \quad p = p_c \quad (4.4)$$

Cada par IS torna-se II com taxa $\frac{\beta}{z}$, então devemos esperar

$$\frac{dN'_I}{dt} \sim N_{IS} \quad (4.5)$$

dessa forma

$$\eta = 1 + \theta \quad (4.6)$$

É importante ressaltar que em alguns modelos os expoentes η e θ são iguais. O expoente η está associado ao crescimento do cluster, enquanto que θ ao dos sítios ativos. A exemplo, no modelo de contato, todos os sítios no aglomerado são ativos e todos os ativos pertencem ao cluster, por consequência os dois expoentes são iguais.

4.1.1 Relação com os Expoentes Estáticos

O número de sítios no aglomerado percolante é definido como

$$N_s = \frac{\text{número de I em clusters ativos}}{\text{número de clusters ativos}}$$

Para tempos longos, N_s é o número médio de sítios no cluster percolante, logo devemos ter

$$N_s \sim \xi^{d_F} \quad (4.7)$$

Porém temos

$$PN_s \sim N'_I \quad (4.8)$$

logo

$$z(\eta + \delta) = d_F \quad (4.9)$$

com

$$z = \frac{\nu_{\parallel}}{\nu_{\perp}} \quad (4.10)$$

Substituindo (4.1) em (2.71)

$$\xi \sim t^{\frac{1}{z}} \quad p = p_c \quad (4.11)$$

Com as relações (2.60), (4.1) e (4.4)

$$\nu_{\parallel} \delta = \beta \quad (4.12)$$

Isolando γ , $\nu_{\parallel}$ e η nas equações (2.67), (2.68), (2.76), (4.12) e (4.9)

$$\frac{\gamma}{\nu_{\parallel}} = \eta \quad (4.13)$$

Mas

$$S \sim \epsilon^{-\gamma} \sim t^{\gamma/\nu_{\parallel}}$$

logo o aglomerado percolante diverge com o mesmo expoente η que os clusters finitos ao redor do ponto crítico, portanto somar sobre todos os clusters ou apenas os ativos são formas equivalentes de avaliar os expoentes críticos.

4.2 Simulações no estado estacionário

O algoritmo da percolação dinâmica é computacionalmente ineficiente, pois na maior parte das iterações os sítios não mudam seu estado. Por conveniência usaremos um algoritmo equivalente, porém muito mais eficiente.

Seja n dado por

$$n = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta_{\sigma_i,0} \sum_{\epsilon} \delta_{\sigma_{i+\epsilon},1}, \quad (4.14)$$

o número médio de sítios I ao redor de sítios S por sítio. Em uma iteração da percolação dinâmica o tempo é incrementado de $1/N$ e a probabilidade média de um sítio mudar seu estado é dado por $n/4$. Em ξ iterações o incremento no tempo deve ser de ξ/N e a probabilidade de um sítio mudar seu estado é dada por $\xi n/4$. Escolhendo um número de iterações igual à $\xi = 4/n$ a probabilidade de um sítio mudar seu estado é 1 e o tempo deve ser incrementado em $4/nN$. Segundo a equação (4.14) temos

$$N_{IS} = nN = \sum_{i=1}^N \delta_{\sigma_i,0} \sum_{\epsilon} \delta_{\sigma_{i+\epsilon},1}, \quad (4.15)$$

que conta o número de sítios suscetíveis ponderados pelo número de vizinhos infectados na sua vizinhança, ou seja, se o sítio i for S, contamos 0 se não houver I na vizinhança, 1 se houver apenas 1, 2 se houver 2 e assim por diante. N_{IS} pode ser interpretado como o número de pares IS. Assim, em ξ iterações, se a probabilidade de um sítio mudar seu estado tender a 1, então o tempo deve ser acrescido em $4/N_{IS}$. É importante notar que o sítio S de um par IS é sempre um sítio ativo, porém contamos pares IS e sítios ativos de formas distintas: um sítio S com dois vizinhos I equivale a um sítio ativo, contudo, por conta de ter dois vizinhos I, têm-se dois pares IS.

Consideremos o seguinte algoritmo numa rede com N sítios e uma lista dos possíveis sítios S de pares IS contendo N'_{IS} elementos.

1. se $N'_{IS} = 0$, fim da simulação
2. tempo = tempo + $\frac{1}{N'_{IS}}$
3. sorteamos um sítio aleatoriamente na lista, se for I ou E retiramos o sítio da lista e voltamos ao passo 1

4. o sítio selecionado torna-se exposto com probabilidade q e infectado com probabilidade p . Removemos o sítio da lista e, caso haja exposição, voltamos para 1
5. Adicionamos na lista todos os sítios suscetíveis ao redor do sítio recém infectado e retornamos para 1.

Este algoritmo difere do explicado por duas razões: não há o fator 4 no incremento do tempo e a a probabilidade de um sítio mudar não é exatamente 1.

Nas simulações contidas nesta dissertação estamos interessados ou no estado estacionário ou no comportamento crítico. No estado estacionário $t \rightarrow \infty$ e o fator 4 desaparece, enquanto que no ponto crítico muitas grandezas comportam-se como uma lei de potência t^α e escalar o tempo com uma constante é irrelevante.

A probabilidade de um sítio mudar seu estado não é exatamente 1, pois a lista no novo algoritmo pode conter sítios que foram ativos. De acordo com o algoritmo, a cada infecção adicionamos todos os sítios suscetíveis ao seu redor na lista, portanto um sítio ativo aparece tantas vezes na lista quanto o número de vizinhos infectados, ou melhor, a lista armazena os sítios S dos pares IS . Quando este sítio for selecionado e mudar seu estado, apenas um dos pares é removido da lista, sendo necessário selecionar os outros pares para removê-los, caso em que nenhum sítio muda seu estado.

Diferente do caso ideal, usamos $\xi = 4/n'$ com $n' \geq n$ e $N'_{IS} \geq N_{IS}$, todavia este procedimento ainda é consistente, pois quanto mais desiguais forem as inequações o incremento no tempo e a probabilidade de um sítio mudar seu estado diminuem.

As grandezas medidas são as seguintes: a densidade média de infectados

$$\rho_I = \frac{N_I}{L^2}, \quad (4.16)$$

onde $N_I = \langle n_I \rangle$ e n_I é o número de infectados; a densidade média de expostos,

$$\rho_E = \frac{N_E}{L^2} \quad (4.17)$$

onde $N_E = \langle n_E \rangle$ e n_E é o número de expostos; a densidade do segundo momento de infectados,

$$\rho_I^{(2)} = \frac{\langle n_I^2 \rangle}{L^4} \quad (4.18)$$

a densidade do segundo momento de expostos,

$$\rho_E^{(2)} = \frac{\langle n_E^2 \rangle}{L^4} \quad (4.19)$$

e o parâmetro de ordem P

$$P = \frac{\text{número de simulações percolantes}}{\text{número de simulações}}, \quad (4.20)$$

sendo que uma simulação é percolante se algum infectado atinge a borda da rede.

A partir da relação (4.8)

$$\rho_I = \frac{N_I}{L^2} = \frac{N_s}{L^2} P$$

contudo N_s/L^2 é a densidade de sítios no cluster percolante, logo proporcional a P e

$$\rho_I \sim \epsilon^{2\beta} \quad (4.21)$$

Analogamente

$$\rho_I^{(2)} \sim \epsilon^{3\beta} \quad (4.22)$$

Definindo

$$U = \frac{\rho_I^{(2)}}{(\rho_I)^2} \quad (4.23)$$

concluimos que

$$U \sim \epsilon^{-\beta} \quad (4.24)$$

De onde vemos que o produto UP deve ser uma constante no ponto crítico [13].

As figuras (4.2), (4.3), (4.4), (4.5), (4.6), (4.7) e (4.9) mostram os resultados das simulações com condições periódicas de contorno. O valor de S foi estimado através da relação $S \sim (1 - P)\rho_I L^2$. Vemos que as simulações dependem muito do tamanho da rede, sendo que os resultados devem ser tão melhores quanto maior o tamanho da rede.

Figura 4.2: Gráfico da densidade de infectados em função de p

Próximo ao ponto crítico, a equação (4.21) pode ser escrita na forma

$$\rho_I^{1/2\beta} = a(p - p_c) \quad (4.25)$$

sendo possível estimar p_c através de um fit linear. O mesmo pode ser feito para $\rho_I^{(2)}$ e P . A tabela (4.1) sumariza os valores estimados do ponto crítico através dos ajustes lineares

Figura 4.3: Gráfico da densidade do segundo momento de infectados em função de p

para diversos valores de L , ao passo que as figuras (4.10), (4.11) e (4.12) mostram os ajustes perto do ponto crítico. Usamos $\beta = 5/36$, vide tabela 2.1.

Tabela 4.1: Estimativa de p_c para diversos tamanhos de rede através das grandezas ρ_I , $\rho_I^{(2)}$ e P

L	p_c		
	ρ_I	$\rho_I^{(2)}$	P
64	0.584(1)	0.584(1)	0.582(1)
128	0.588(1)	0.588(1)	0.5872(4)
256	0.5905(6)	0.5905(7)	0.5899(3)
512	0.5917(2)	0.5923(1)	0.5913(2)
1024	0.5922(1)	0.5917(3)	0.5919(4)

Observamos que os valores estimados para p_c crescem conforme a rede aumenta, sendo necessário extrapolá-los a fim de obter o resultado para uma rede muito grande. As extrapolações, nas figuras (4.13), (4.14) e (4.15), foram efetuadas obtendo o coeficiente linear de um ajuste linear de $p_c \times 1/L$.

Figura 4.4: Gráfico da densidade de expostos em função de p Tabela 4.2: Valores de p_c do cruzamento das curvas da grandeza UP . L_{min}

L_{min}	L_{Max}	p_c
64	128	0.59198(6)
128	256	0.59261(7)
256	512	0.59268(5)
512	1024	0.59279(4)

Também estimamos o valor do ponto crítico através do cruzamento das curvas com diferentes valores de L da grandeza UP . A intersecção entre as curvas foi tomada entre tamanhos sucessivos de rede, $L = 64$ com $L = 128$, $L = 128$ com $L = 256$, $L = 256$ com $L = 512$ e $L = 512$ com $L = 1024$. Duas extrapolações foram feitas em função de $1/L^2$, uma levando em conta o menor L das duas curvas e outra o maior. A tabela (4.2) mostra os valores das intersecções e a figura (4.16) a extrapolação de UP .

Os resultados de todas as extrapolações estão na tabela (4.3). Podemos notar que todos os valores extrapolados de p_c são compatíveis com 0.592746010(2) [19].

Acreditamos que o valor UP também é universal no ponto crítico. Simulações foram

Figura 4.5: Gráfico da densidade do segundo momento de expostos em função de p

feitas em $p = 0.592746010$, para vários L , com o fim de obter $UP(p_c)$. O valor obtido, através da extrapolação em função de $1/L^2$, foi $UP(p_c) = 1.01658(4)$ em concordância com $1.0167(1)$ [13], obtido para o modelo SIR. A figura (4.17) mostra o fit de UP para redes com tamanho $L = 1024$, $L = 512$, $L = 256$ e $L = 128$. Outros tamanhos foram descartados por não serem colineares.

Tabela 4.3: Extrapolações do ponto crítico.

	p_c
ρ_I	0.5927(1)
$\rho_I^{(2)}$	0.5927(1)
P	0.5926(2)
$UP(L_{min})$	0.5928(2)
$UP(L_{Max})$	0.5928(2)
Média	0.59272(4)

Figura 4.6: Gráfico do parâmetro de ordem em função de p

4.2.1 Finite Size Scaling

Em redes finitas, todavia suficientemente grandes, supomos que uma grandeza Q , tal que

$$Q \sim \epsilon^{-\alpha} \quad p = p_c$$

ou ainda

$$Q \sim \xi^{\alpha/\nu_\perp}$$

dependa de ξ e L de acordo com [8, 24]

$$Q = \xi^{\frac{\alpha}{\nu_\perp}} \Phi_2 \left(\frac{\xi}{L} \right) \quad (4.26)$$

Figura 4.7: Gráfico da densidade de infectados e expostos em função de p . As cores indicam o tamanho da rede.

sendo que $\Phi_2(0) = \text{constante}$.

Próximo ao ponto crítico, podemos substituir $\xi \sim \epsilon^{-\nu_\perp}$

$$Q \sim \epsilon^{-\alpha} \Phi_2 \left(\frac{\epsilon^{-\nu_\perp}}{L} \right) = L^{\frac{\alpha}{\nu_\perp}} (\epsilon L^{\frac{1}{\nu_\perp}})^{-\alpha} \Phi_2 \left(\left[\epsilon L^{\frac{1}{\nu_\perp}} \right]^{-\nu_\perp} \right)$$

logo

$$Q \sim L^{\frac{\alpha}{\nu_\perp}} \Phi(\epsilon L^{\frac{1}{\nu_\perp}}) \quad (4.27)$$

A função Φ deve ser a mesma para Q qualquer que seja o tamanho da rede, portanto um gráfico de $QL^{\frac{-\alpha}{\nu_\perp}}$ por $\epsilon L^{\frac{1}{\nu_\perp}}$ deve colapsar os dados numa única curva para qualquer L suficientemente grande. As figuras (4.18), (4.19), (4.20) e (4.21) mostram o colapso de algumas curvas.

Figura 4.8: Produto UP próximo ao ponto crítico

4.3 Simulações dependentes do tempo

Nesta seção estimaremos os expoentes dinâmicos definidos pelas equações (4.2), (4.3), (4.4) e (4.11).

Para obtê-los, precisamos explorar o crescimento de aglomerados em tempos longos no ponto crítico. Vimos que o tempo está relacionado com o comprimento de correlação, que por sua vez se escala com o comprimento da rede (em $p = p_c$). Portanto o tempo de simulação está diretamente relacionado com L , ou seja, quanto maior L , maior será t .

Para evitar outros efeitos de tamanho finito, a simulação prossegue até que um infectado atinja a borda da rede, caso em que o cluster percola. Um aglomerado pára de crescer se não há sítios ativos, ou se atinge a borda da rede.

O algoritmo utilizado é o mesmo descrito nas simulações estacionárias, porém tomamos médias em vários intervalos fixos de tempo e a simulação é encerrada se um

Figura 4.9: Gráfico de $\ln(S)$ em função de $\ln(p)$

infectado atinge a borda da rede (para evitar efeitos de tamanho finito). As grandezas medidas foram N'_I , N'_E, N_{IS} , P e R^2 definido por

$$R^2 = \frac{1}{N'_I} \left\langle \sum (x_i - x_0)^2 + (y_i - y_0)^2 \right\rangle \quad (4.28)$$

sendo (x_0, y_0) a posição do sítio infectado inicial e (x_i, y_i) as coordenadas do i -ésimo sítio infectado. A soma é feita sobre todos os infectados.

As figuras (4.22), (4.23), (4.24), (4.25) e (4.26) mostram os gráficos obtidos com 10^6 médias para diversos valores de L . Vemos que quanto maior L , maior o tempo de simulação e que as curvas são praticamente lineares. As discrepâncias no fim das curvas são devidas ao tamanho finito da rede e não foram levadas em consideração nos cálculos.

Para obter os expoentes críticos, poderíamos ajustar retas num gráfico log-log. Porém ajustaremos uma função mais complexa que envolve uma correção para tempos finitos.

Figura 4.10: Ajuste linear de ρ_I próximo ao ponto crítico. As retas vermelhas representam os ajustes lineares

Se $Q \sim t^\alpha$, então a correção é dada por [21]

$$Q \sim t^\alpha \left[1 + \frac{a}{t^{\alpha_2}} \right] \quad (4.29)$$

sendo a e α_2 constantes a serem ajustadas.

Em todos os ajustes, α_2 é compatível com 1, então usamos a função

$$Q \sim t^\alpha \left[1 + \frac{a}{t} \right] \quad (4.30)$$

O desafio em realizar o ajuste está em determinar o intervalo ideal. Se ajustarmos no início, estamos fora da região de validade das equações, pois t é pequeno; se usarmos o fim das curvas, podemos obter erros devido ao tamanho finito do sistema; se o intervalo de ajuste é pequeno, o número de pontos é pequeno e as flutuações são grandes o suficiente para obter valores muito imprecisos.

Figura 4.11: Ajuste linear de $\rho_I^{(2)}$ próximo ao ponto crítico. As retas vermelhas representam os ajustes lineares

Para contornar esse problema, realizamos diversos ajustes em intervalos $[\ln(t_{min}), \ln(t_{max})]$. Para redes com $L = 16384$, os valores usados para $\ln(t_{min})$ e $\ln(t_{max})$ foram 8.5, 7.5, 6.5, 5.5, 4.5, 3.5, 2.5 e 9.5, 8.5, 7.5, 6.5, 5.5, 4.5, 3.5 respectivamente; ao passo que se $L = 32768$ os valores foram 9.3, 8.3, 7.3, 6.3, 5.3, 4.3, 3.3, 2.3 e 10.3, 9.3, 8.3, 7.3, 6.3, 5.3, 4.3, 3.3. Além disso, definimos $\Delta = \ln(t_{max}) - \ln(t_{min})$, o tamanho do intervalo onde será realizado o ajuste. É importante notar que, ao fixar um valor de Δ , existem vários possíveis intervalos. A figura (4.27) exemplifica o procedimento com $\Delta = 5$.

Os gráficos (4.28), (4.29), (4.30) e (4.31) mostram os expoentes ajustados com todos os possíveis valores de Δ e com todas as possíveis combinações de $\ln(t_{min})$ e $\ln(t_{max})$, em doze conjuntos de simulações com $L = 16384$ e duas com $L = 32768$. Todos os conjuntos de simulações são médias de 10^6 simulações. As figuras (4.32), (4.33), (4.34) e (4.35) mostram uma região ampliada das figuras anteriores.

Podemos observar que, quando $\Delta = 1$, a dispersão dos valores é imensa e, a medida

Figura 4.12: Ajuste linear de P próximo ao ponto crítico. As retas vermelhas representam os ajustes lineares

η	1.5846(3)
θ	0.5846(4)
δ	0.0923(2)
z	1.1313(5)

Tabela 4.4: Valores dos expoentes críticos dinâmicos

que Δ aumenta, os resultados tendem a colapsar. Assim, estimaremos o valor dos expoentes através dos dados com $\Delta = 7$ e $\Delta = 8$. A tabela (4.4) mostra os valores obtidos.

Podemos checar a compatibilidade dos dados através da relação com os expoentes estáticos. Das equações (4.12) e (4.13) obtemos

$$z\delta = \frac{\beta}{\nu_{\perp}} = 0.104166 \dots \quad (4.31)$$

Figura 4.13: Extrapolação de p_c para ρ_I . A reta vermelha representa o ajuste linear

$$z\eta = \frac{\gamma}{\nu_{\perp}} = 1.79166 \dots \quad (4.32)$$

De acordo com os valores em (4.4), $\delta z = 0.1044(3)$ e $\eta z = 1.7927(7)$, que são compatíveis com os resultados exatos.

Também podemos comparar estes valores com os expoentes da classe de universalidade da percolação dinâmica. Segundo [18] $\theta = 0.586$ e $\delta = 0.092$ com incerteza no último algarismo. Podemos ver que os valores obtidos para θ e δ são compatíveis e enquadram o modelo SEI na classe de universalidade da percolação dinâmica.

Figura 4.14: Extrapolação de p_c para $\rho_I^{(2)}$. A reta vermelha representa o ajuste linear

Figura 4.15: Extrapolação de p_c para P . A reta vermelha representa o ajuste linear

Figura 4.16: Extrapolação de p_c para UP . As retas vermelhas representam os ajustes lineares

Figura 4.17: Extrapolação de UP em $p = 0.592756010$. A reta vermelha representa o ajuste linear

Figura 4.18: Colapso de ρ_I

Figura 4.19: Colapso de $\rho_I^{(2)}$

Figura 4.20: Colapso de P Figura 4.21: Colapso de UP

Figura 4.22: Gráfico de $\ln(N'_I)$ em função de $\ln(t)$

Figura 4.23: Gráfico de $\ln(N'_E)$ em função de $\ln(t)$

Figura 4.24: Gráfico de $\ln(N'_{IS})$ em função de $\ln(t)$

Figura 4.25: Gráfico de $\ln(P)$ em função de $\ln(t)$

Figura 4.26: Gráfico de $\ln(R^2)$ em função de $\ln(t)$ Figura 4.27: Exemplificação do método para determinar os expoentes críticos dinâmicos com $\Delta = 5$. Os ajustes são realizados na região interior dos quadrados, cujo lado paralelo à abscissa tem tamanho Δ .

Figura 4.28: Valores ajustados de η em função de Δ . A região circulada está ampliada na figura (4.32)

Figura 4.29: Valores ajustados de θ em função de Δ . A região circulada está ampliada na figura (4.33)

Figura 4.30: Valores ajustados de δ em função de Δ . A região circulada está ampliada na figura (4.34)

Figura 4.31: Valores ajustados de η em função de Δ . A região circulada está ampliada na figura (4.35)

Figura 4.32: Ampliação da região circulada em (4.28). As linhas azuis e vermelha indicam a distância de um desvio padrão da média e a média dos valores com $\Delta = 7$ e $\Delta = 8$ respectivamente.

Figura 4.33: Ampliação da região circulada em (4.29). As linhas azuis e vermelha indicam a distância de um desvio padrão da média e a média dos valores com $\Delta = 7$ e $\Delta = 8$ respectivamente.

Figura 4.34: Ampliação da região circulada em (4.30). As linhas azuis e vermelha indicam a distância de um desvio padrão da média e a média dos valores com $\Delta = 7$ e $\Delta = 8$ respectivamente.

Figura 4.35: Ampliação da região circulada em (4.31). As linhas azuis e vermelha indicam a distância de um desvio padrão da média e a média dos valores com $\Delta = 7$ e $\Delta = 8$ respectivamente.

Capítulo 5

Conclusão

Começamos estudando a percolação por sítio na rede unidimensional, onde grandezas básicas como n_s , p_s , Λ_s e S foram introduzidas. Depois generalizamos estas grandezas e resolvemos a percolação por sítio na árvore de Cayley por meio da função geratriz. Na árvore de Cayley pudemos observar o comportamento crítico de várias grandezas na forma de lei de potência ϵ^μ , sendo conveniente a introdução dos expoentes β , γ , σ e τ , associados ao parâmetro de ordem, ao segundo momento do tamanho de aglomerado (S), tamanho máximo do cluster s_{max} e ao número de configurações.

O modelo SEI é caracterizado por duas reações: a primeira de infecção $I + S \rightarrow I + I$, e a outra de exposição $I + S \rightarrow I + E$. Vimos que os aglomerados gerados por este modelo são diretamente mapeados nos aglomerados da percolação isotrópica, pois os expoentes estáticos e p_c são compatíveis com os valores da percolação.

No ponto crítico, algumas grandezas variam conforme uma lei de potência para tempos suficientemente longos. Este comportamento, dado por t^μ , pode ser observado nas séries temporais geradas pelo modelo SEI, onde estimamos $\eta = 1.5846(3)$, $\theta = 0.5846(4)$, $\delta = 0.0923(2)$ e $z = 1.1313(5)$. Estes valores, compatíveis e mais precisos que os anteriores [18], enquadram o modelo SEI na classe de universalidade da percolação dinâmica.

Referências Bibliográficas

- [1] Alexandrowicz, Z. (1980). Critically branched chains and percolation clusters. *Phys. Lett. A* **80**, 284.
- [2] Antal, T. e Droz, M. (2001). Phase transitions and oscillations in a lattice prey-predator model. *Phys. Rev. E* **63**, 056119.
- [3] Arashiro, E., Rodrigues, A. L., de Oliveira, M. J., e Tomé, T. (2008). Time correlation function in systems with two coexisting biological species. *Phys. Rev. E* **77**, 061909.
- [4] Arashiro, E., Rodrigues, A. L., de Oliveira, M. J., e Tomé, T. (2009). The stochastic nature of predator-prey cycles. *Comp. Phys. Comm.* **180**, 536.
- [5] Arashiro, E. e Tomé, T. (2007). The threshold of coexistence and critical behaviour of a predator-prey cellular automaton. *J. Phys. A* **40**, 887.
- [6] Bailei, N. T. J. (1953). The total size of a general stochastic epidemic. *Biometrika* **40**, 177.
- [7] Bailei, N. T. J. (1957). *The Mathematical Theory of Epidemics*. Hafner.
- [8] Cardy, J. L. (1998). *Finite-Size Scaling*, volume 2. Physical Sciences & Engineering Division.
- [9] Dammer, S. M. e Hinrichsen, H. (2003). Epidemic spreading with immunization and mutations. *Phys. Rev. E* **63**, 016114.

- [10] de Oliveira, M. J. e Tomé, T. (2009). The role of noise in population dynamics cycles. *Phys. Rev. E* **79**, 061128.
- [11] de Oliveira, M. J. e Tomé, T. (2011). Susceptible-infected-recovered and susceptible-exposed-infected models. *J. Phys. A: Math. Theor.* **44**, 095005.
- [12] de Souza, D. R. e Tomé, T. (2010). Stochastic lattice gas model describing the dynamics of the sirs epidemic process. *Physica A* **389**, 1142.
- [13] de Souza, D. R., Tomé, T., e Ziff, R. M. (2011). A new scale-invariant ratio and finite-size scaling for the stochastic susceptible-infected-recovered model. *J. Stat. Mech.* P03006.
- [14] Dietz, K. (1967). Epidemics and rumors: A survey. *J. Roy. Stat. Soc. A* **130**, 505.
- [15] Fisher, M. E. e Essam, J. W. (1961). Some cluster size and percolation problems. *J. Math. Phys.* **2**, 609.
- [16] Grassberg, P. (1983). On the critical behavior of the general epidemic process and dynamical percolation. *Math. Biosc.* **63**, 157.
- [17] Hasting, A. (1997). *Population Biology: Concepts and Models*. Springer.
- [18] Henkel, M., Hinrichsen, H., e Lübeck, S. (2005). *Non-Equilibrium Phase Transitions*, volume 1 - Absorbing Phase Transitions. Cambridge University Press.
- [19] Jacobsen, J. L. (2014). High-precision percolation thresholds and potts-model critical manifolds from graph polynomials. *J. Phys. A: Math. Theor.* **47** (13): 135001.
- [20] Keeling, M. J. e Rohani, P. (2008). *Modeling Infectious Disease in Humans and Animals*. Princeton University Press.

- [21] Marro, J. e Dickman, R. (2005). *Nonequilibrium Phase Transitions in Lattice Models*. Cambridge University Press.
- [22] Mollison, D. (1977). Spatial contact models for ecological and epidemic spread. *J. Roy. Stat. Soc. B* **39**, 283.
- [23] Nisbet, R. M. e Gurney, W. C. S. (1982). *Modeling Fluctuating population*. Wiley.
- [24] Privman, V. (1998). *Finite Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems*. World Scientific.
- [25] Renshaw, E. (1991). *Modeling Biological Population in Space and Time*. Cambridge University Press.
- [26] Satulovsky, J. E. e Tomé, T. (1994). Stochastic gas lattice model for a predator-prey system. *Phys. Rev. E* **49**, 5073.
- [27] Souza, D. R. (2012). Transições de fase em modelos estocásticos para descrever epidemias.
- [28] Stauffer, D. (1985). *Introduction to Percolation Theory*. Taylor and Francis, London.
- [29] Tomé, T. e de Oliveira, M. J. (2014). *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade*. Editora da Universidade de São Paulo.
- [30] Tomé, T. e Ziff, R. M. (2010). Critical behavior of the susceptible-infected-recovered model on a square lattice. *Phys. Rev. E* **82** 051921.