UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA

Dinâmica de Populações: um estudo a partir de autômatos celulares probabilísticos

Kelly Cristina de Carvalho

Orientadora:
Tânia Tomé Martins de Castro

SBI-IFUSP
305M810T4227

)issertação apresentada ao Instituto de 'ísica da Universidade de São Paulo para btenção do título de Mestre em Ciências

Banca examinadora:

Prof. Dr. José Roberto Drugowich de Felício (FFCLRP-USP)
Prof. Dr. Reynaldo Daniel Pinto (IFUSP)
Profa. Dra. Tânia Tomé Martins de Castro (IFUSP)

INSTITUTO DE FÍSICA
Serviço de Biblioteca e Informação
Tombo: 4227 ex 2

São Paulo
2005

Prof. Armando Corbani Ferraz
Presidente da Comissão de Pós Graduação

16/02/05

530
C331d
M
Ex.2

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

Carvalho, Kelly Cristina de

Dinâmica de Populações: um estudo a partir de autômatos celulares probabilísticos.
São Paulo - 2005.

Dissertação (Mestrado) - Universidade de São Paulo
Instituto de Física - Departamento de Física Geral

Orientador: Profa. Dra. Tânia Tomé Martins de Castro
Área de Concentração: Física

Unitermos

1. Processos Estocásticos;
2. Mudança de Fase;
3. Autômatos Celulares;
4. Método de Monte Carlo.

USP/IF/SBI-012/2005

Ao meu pai

e à minha mãe

Agradecimentos

Ao CNPq, pelo apoio financeiro, e à professora Tânia, por sua orientação e paciência demonstrada comigo; sua clareza de raciocínio e exatidão de conceitos sempre tornaram nossas discussões muito esclarecedoras. Também agradeço as sugestões e observações, sempre colocadas de forma muito construtiva, que recebi do professor Mário e que muito contribuíram para o trabalho.

Aos colegas da Física e de outras datas, Dri, Edu, Emerson, Si e Zé, do departamento, Masayuki, Selene, Henrique, Sérgio, Valdir, e companheiros de sala, Evandro, Carlos, Cris e Gustavo. Todos fizeram parte deste trabalho, seja pela ajuda com os programas e computadores, sugestões, ou simplesmente pela amizade.

A duas pessoas que estimo muito, Selma e Shirlei, pelo incentivo de sempre.

Resumo

Apresentamos dois autômatos celulares com regras de interação locais que permitem descrever a dinâmica de população de um sistema predador-presa. Os modelos são definidos sobre uma rede regular quadrada e se diferenciam pelo caráter isotrópico ou anisotrópico da interação entre os sítios. A cada sítio é associada uma variável estocástica, que pode assumir três estados – *vazio*, *presa* ou *predador*. A dinâmica de competição entre espécies animais que nos interessa é a mesma descrita pelo modelo de Lotka-Volterra no qual as populações de presas e predadores oscilam temporalmente. Nosso objetivo é a análise dessas oscilações, como se comportam com o aumento da rede e se permanecem estáveis. Para a obtenção das séries temporais realizamos simulações de Monte Carlo. Para o autômato definido sobre o espaço isotrópico, também realizamos análise de campo médio dinâmico. Os resultados indicam que a oscilação é um efeito local (não sobrevive em sistemas infinitos), e é mais significativo devido à migração das espécies pelos subsistemas. O estudo da anisotropia revela alguns padrões espaciais organizados e que as oscilações são menos intensas do que no caso isotrópico e como conseqüência a fase ativa é mais abrangente.

Abstract

We present two cellular automata with local interaction rules which allow us to describe the dynamical population of a predator-prey system. The models are defined on a regular square lattice and are distinguished by the isotropic or anisotropic character of the interaction between sites. To each site a stochastic variable is associated, which can assume three states – *void*, *prey* or *predator*. The competition dynamics between animal species which interest us is the same described by the Lotka-Volterra model in which the populations of preys and predators oscillate in time. Our aim is the analysis of these oscillations, how they behave with an increasing lattice and if they remain stable. In order to obtain temporal series we perform Monte Carlo simulations. For the automaton defined on isotropic space, dynamical mean field analysis was also performed. Results indicate that the oscillation is a local effect (vanishing in infinite systems), and is more significant due to migration of species through the subsystems. The study of anisotropy reveals some organized spatial patterns and that oscillations are less intense than in the isotropic case and as a consequence the active phase is more comprehensive.

Sumário

1 Introdução **1**

2 Modelos **4**

2.1 Autômatos Celulares 6

2.2 Autômato Celular Predador-Presa
(autômato PP) 10

2.3 Autômato Celular Predador-Presa Anisotrópico
(autômato PP anisotrópico) 17

3 Equações de evolução para correlações e aproximações de campo médio dinâmico **23**

3.1 Equações de evolução para o *autômato PP* 24

3.2 O método de campo médio dinâmico 27

3.2.1 Campo Médio Simples 28

3.2.2 Campo Médio de Pares 28

3.3 Considerações gerais 29

3.3.1 Homogeneidade, isotropia e vínculos 29

3.3.2 Parametrização para o diagrama de fases 31

3.4 Campo médio simples para o *autômato PP* 32

3.5 Campo médio com pares para o *autômato PP* 35

4 Simulações de Monte Carlo **45**

4.1 Algoritmo 46

4.2 Oscilações 50

4.2.1 Amplitude 53

4.2.2 Freqüência 54

4.2.3 Estabilidade 57

4.2.4 Sub-redes 58

4.3 Diagrama de fases 63

5 Conclusões **79**

A Correlações de sítios para autômatos celulares **81**

B Irreversibilidade **84**

C Estabilidade das oscilações em 3d **88**

D Diagrama de fases conjunto **90**

Referências Bibliográficas **94**

Capítulo 1

Introdução

A proposta do nosso trabalho é o estudo, através do formalismo da mecânica estatística de não-equilíbrio, de sistemas de partículas interagentes que residem em reticulados [1] e que evoluem no tempo de acordo com dinâmicas estocásticas irreversíveis [2] [3] [4]. Em particular, buscamos a compreensão dos mecanismos que conduzem aos padrões estacionários que apresentem oscilações espaço-temporais.

Há muito interesse em estudar os comportamentos oscilatórios uma vez que esses fenômenos estão presentes em diversos sistemas encontrados na natureza, em especial os biológicos. Nesta classe, e dentro do contexto de dinâmica de populações [5] [6] [7] [8] [9], está o sistema predador-presa, no qual duas espécies coexistem numa região do espaço e a interação entre elas envolve o consumo de uma espécie (*presa*) pela outra (*predador*).

O modelo mais simples que exibe oscilação temporal é conhecido como modelo de Lotka-Volterra [10] [11] [12]. Há dois aspectos principais que não são descritos pelo modelo de Lotka-Volterra e que nos motivam a estudar um sistema predador-presa nos domínios da mecânica estatística: flutuações e estrutura espacial. Dados coletados na natureza, ou mesmo dados obtidos em experiências de laboratório, exibem flutuações na amplitude e

freqüência das populações de presas e predadores [13]. Num sistema ecológico, as flutuações podem ser ocasionadas pelas variações das condições ambientais e se traduzem em variações nas populações das espécies, sem interferir no caráter cíclico. A incorporação de estrutura espacial ao modelo pode limitar a ocupação de presas e predadores e propicia a inserção de aspectos locais da interação entre as espécies [8] [14].

Para estudar o comportamento das oscilações nesta dissertação vamos propor um autômato celular com regras de interação local simples que reproduzam as características de competição entre espécies de um sistema predador-presa. Introduzidos originalmente com a proposta de modelar a auto-reprodução biológica, os autômatos celulares mostraram-se convenientes para descrever muitos sistemas físicos compostos por um conjunto finito de variáveis discretas, que evoluem no espaço e tempo discretos [15].

Embora este seja um modelo relativamente simples que exibe oscilação como uma de suas fases, e cujas possibilidades de interpretações são amplas, nós o trataremos sempre como um sistema predador-presa; sendo assim, todos os comportamentos que observarmos e as conseqüentes interpretações terão como rótulo o sistema predador-presa, mesmo que este não seja muito realista.

Numa analogia ao modelo de *Toom* [16], introduzimos uma anisotropia no modelo para verificarmos alterações no comportamento oscilante. O modelo de *Toom* específico a que nos referimos (*north-east-center voting model*) é um autômato celular com regras de interação locais baseadas no modelo do votante majoritário e que exploram a anisotropia da rede. Não é nossa intenção descrevê-lo aqui. A única semelhança com o nosso modelo está em considerarmos a mesma vizinhança anisotrópica.

No capítulo 2 introduzimos os autômatos celulares e as equações que os regem. Em seguida, apresentamos uma descrição detalhada dos modelos estudados. O primeiro deles,

autômato predador-presa (*autômato PP*), possui as regras de interação local da versão gás de rede estudada por *Satulovsky & Tomé* [17] [18]. No segundo modelo, que chamamos de autômato predador-presa anisotrópico (*autômato PP anisotrópico*), foi introduzida uma anisotropia inspirada no modelo de *Toom*.

No capítulo 3 são apresentadas as equações de evolução temporal das densidades de presas e predadores e algumas correlações de sítios. Descrevemos o método de campo médio dinâmico e exibimos a análise da aproximação de um e dois sítios para o *autômato PP*. A aproximação de dois sítios, ou campo médio na aproximação de pares, é suficiente para um boa descrição qualitativa do modelo, o qual exibe uma fase oscilante.

Os resultados das simulações de Monte Carlo em redes quadradas regulares, para os dois modelos, são apresentados no capítulo 4. Realizamos um estudo minucioso dos estados oscilantes, caracterizando sua amplitude, freqüência e como se comportam em redes grandes. O comportamento de subsistemas contidos na rede também é analisado, e permite a compreensão da diminuição da oscilação à medida em que o tamanho do sistema aumenta. Além disso, realizamos simulações com um recurso adicional que não permite a evolução para os estados absorventes. Este recurso é uma pequena modificação nos modelos e não altera suas principais características. Estes resultados estão na seção 4.3 sobre o diagrama de fases.

As conclusões são expostas no capítulo 5. Os apêndices A e B estão relacionados ao formalismo dos autômatos celulares e à verificação da irreversibilidade nos modelos estudados. Os resultados de algumas simulações e a comparação com o modelo predador-presa na versão gás de rede são apresentados nos apêndices C e D.

Capítulo 2

Modelos

Um sistema físico pode ser estudado modelando como os diferentes tipos de partículas que o constituem interagem em nível microscópico, com o intuito de entender como comportamentos característicos do sistema em grande escala são desencadeados por regras simples de interação entre as partículas, porém que incorporem aspectos essenciais do sistema. O estudo através de métodos estatísticos e dinâmicas estocásticas é realizado construindo-se os possíveis estados microscópicos desses sistemas e investigando como esses estados evoluem no tempo. Essa descrição, que também pode ser aplicada a sistemas que atingem o equilíbrio termodinâmico, é muito útil para a compreensão das propriedades de sistemas fora do equilíbrio por não podermos, em princípio, associar-lhes uma *Hamiltoniana* [3] [19].

Se considerarmos que as partículas estão localizadas, uma forma de descrever os possíveis estados microscópicos de um sistema é atribuir variáveis estocásticas aos sítios de uma rede. A rede é o objeto geométrico n-dimensional que representa o espaço de ocorrência dos eventos, isto é, podemos pensar que a rede faz o papel da região espacial que compreende o sistema físico que estamos estudando. O sítio representa, na rede, as posições que podem ser ocupadas pelas partículas. Em uma dimensão, os sítios são posi-

cionados lado a lado; em duas ou mais dimensões, a posição de cada sítio é indicada pelo encontro das malhas da rede (Figura 2.1), portanto partimos do princípio que o espaço é *discreto*. Considerando que cada sítio pode permanecer vazio ou ser ocupado por diferentes partículas, cada variável estocástica η_i representa o estado em que se encontra o sítio i. O conjunto dos estados que cada variável estocástica assume representa o estado do sistema. Considerando uma rede de N sítios, o estado do sistema ficará completamente representado por

$$\eta = (\eta_1, \eta_2, \ldots \eta_i, \ldots \eta_N) \,. \tag{2.1}$$

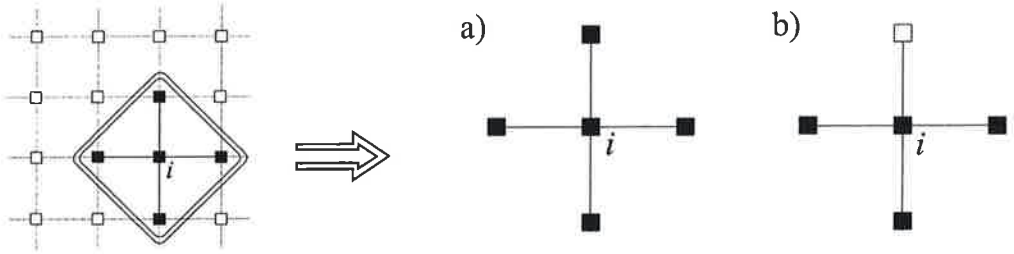


Figura 2.1: Representação de uma rede regular quadrada com cada sítio localizado no encontro das malhas; em destaque estão representados o sítio i e sua primeira vizinhança. Os sítios escuros indicam os pares que interagem: a) caso isotrópico – o sítio i interage com todos os seus vizinhos, não privilegia nenhuma direção; b) caso anisotrópico – o sítio i interage apenas com alguns dos sítios vizinhos.

A mudança dos possíveis estados do sistema ocorre de acordo com as regras de interação entre os sítios submetidas a uma dinâmica de evolução temporal, que pode ser síncrona ou assíncrona [3] [4]. Na dinâmica assíncrona, a evolução temporal é dada por uma *equação mestra* [20], que é a equação que governa os processos estocásticos markovianos a tempo contínuo, e as regras de interação são aplicadas em geral a apenas um sítio a cada instante de tempo. A dinâmica síncrona se caracteriza pela aplicação simultânea das regras a todos os sítios em cada instante. O tempo aqui, diferente do caráter contínuo

que possui na dinâmica assíncrona, é discretizado e nos referiremos a instantes sucessivos de tempo pelo uso dos termos "passo l" e "passo $(l+1)$". Na dinâmica síncrona portanto, o estado atingido por um determinado sítio no passo l não afeta o estado que um outro sítio atinge no mesmo passo, de modo que dizemos que as variáveis estocásticas são independentes ou que os estados atribuídos aos sítios evoluem independentemente. Esses são os autômatos celulares.

2.1 Autômatos Celulares

Autômatos celulares são sistemas nos quais as regras de interação são aplicadas simultaneamente a todos os sítios da rede [15]. Conhecidas as regras de interação, basta saber o estado atual para que tenhamos informação sobre o estado seguinte, de modo que esse é um processo markoviano a tempo discreto e a probabilidade de se ter um determinado estado η no passo $(l+1)$ pode ser escrita somando-se ponderadamente sobre todos os estados no passo l,

$$P_{l+1}(\eta) = \sum_{\eta'} W(\eta|\eta')\, P_l(\eta') \,, \tag{2.2}$$

onde $W(\eta|\eta')$ é a probabilidade de transição do estado η' no passo l para o estado η no passo $(l+1)$. Essa probabilidade depende apenas dos estados η e η', não depende do tempo, e contém em si as regras da transição. $W(\eta|\eta')$ é uma probabilidade condicional [21] e portanto satisfaz a condição

$$W(\eta|\eta') \geq 0 \,. \tag{2.3}$$

A somatória se estende por todos os possíveis estados que o sistema pode assumir; num sistema de N sítios por exemplo, onde cada sítio possa assumir κ estados $\eta_i = \alpha_1, \alpha_2, ..., \alpha_\kappa$, teremos κ^N possíveis estados para o sistema. O conjunto desses κ^N elementos, com

todos os estados distintos entre si, compõe o espaço amostral e portanto a distribuição de probabilidades para esses estados deve ser normalizada, $\sum_\eta P(\eta) = 1$, de onde decorre a propriedade

$$\sum_\eta W(\eta|\eta') = 1 \,. \tag{2.4}$$

$W(\eta|\eta')$ pode ser tratada como um elemento da matriz de transição W, $P_{l+1} = WP_l$, a qual chamamos de matriz estocástica [4]. A independência dos estados assumidos pelos sítios num mesmo passo implica que as variáveis estocásticas η_i, $i = 1...N$, são independentes, de modo que os elementos da matriz W podem ser fatorados em termos da contribuição de transição para cada sítio,

$$W(\eta|\eta') \;=\; \prod_{i=1}^{N} w_i(\eta_i|\eta') \,, \tag{2.5}$$

que rotulamos de w_i e representa portanto a probabilidade do sítio i assumir o estado η_i uma vez que o sistema se encontra no estado η'. Os critérios que nos conduzem às condições (2.3) e (2.4) aplicados a (2.5), observando que η_i representa todos os possíveis estados que cada sítio pode assumir, implicam que as novas condições a serem satisfeitas são

$$w_i(\eta_i|\eta') \geq 0 \qquad \text{e} \qquad \sum_{\eta_i} w_i(\eta_i|\eta') = 1 \,. \tag{2.6}$$

A conexão do modelo com o formalismo matemático é feita quando consideramos a probabilidade de que determinados sítios assumam certos estados. Por exemplo, a probabilidade de que o sítio j assuma o estado α, o sítio k o estado β, ..., e o sítio m assuma o estado μ no passo $(l+1)$ é obtida como a seguir

$$P_{l+1}(\eta_j = \alpha, \eta_k = \beta, ..., \eta_m = \mu) \;=\; \langle \delta(\eta_j, \alpha)\delta(\eta_k, \beta) \cdots \delta(\eta_m, \mu) \rangle_{l+1} \,, \tag{2.7}$$

e correspondem a correlações de sítios. A função $\delta(a,b)$ é o *delta de Kronecker*. Particularmente, estaremos interessados na obtenção de correlações de *um* e *dois* sítios,

$$P_{l+1}(\eta_j = \alpha) = \langle \delta(\eta_j, \alpha) \rangle_{l+1} , \tag{2.8}$$

$$P_{l+1}(\eta_j = \alpha, \eta_k = \beta) = \langle \delta(\eta_j, \alpha) \delta(\eta_k, \beta) \rangle_{l+1} . \tag{2.9}$$

A média da função $\delta(\eta_j, \alpha)$ é interpretada como a densidade do estado α, e representa uma função de estado, da mesma forma que correlações de mais sítios.

Uma propriedade qualquer do sistema associada a uma função de estado $\mathcal{F}(\eta)$ pode ser obtida diretamente a partir do cálculo de seu valor médio,

$$\langle \mathcal{F}(\eta) \rangle_l = \sum_{\eta} \mathcal{F}(\eta) \, P_l(\eta) . \tag{2.10}$$

Essa é uma soma, com *pesos* dados pela função de estado, de toda a distribuição de probabilidade no passo l e por isso também $\langle \mathcal{F}(\eta) \rangle$ é uma grandeza vinculada ao passo l. Então as médias (2.8) e (2.9) se expressam num *autômato celular* (Apêndice A) por meio das médias das probabilidades de transição por sítio,

$$\langle \delta(\eta_j, \alpha) \rangle_{l+1} = \langle w_j(\alpha|\eta') \rangle_l , \tag{2.11}$$

$$\langle \delta(\eta_j, \alpha) \delta(\eta_k, \beta) \rangle_{l+1} = \langle w_j(\alpha|\eta') w_k(\beta|\eta') \rangle_l , \tag{2.12}$$

ou seja, correlações de m sítios no passo $(l+1)$ no autômato, são obtidas a partir das médias do produto das probabilidades de transição w_i de cada um dos m sítios no passo l

$$\langle \delta(\eta_j, \alpha) \, \delta(\eta_k, \beta) \cdots \delta(\eta_m, \mu) \rangle_{l+1} = \langle w_j(\alpha|\eta') \, w_k(\beta|\eta') \cdots w_m(\mu|\eta') \rangle_l . \tag{2.13}$$

Vemos que a probabilidade do sítio assumir um estado no passo $(l+1)$ está diretamente relacionada com a probabilidade de transição do próprio sítio no passo anterior, isto é,

depende somente das regras de transição do próprio sítio e por isso diz-se que os sítios possuem autonomia.

Os autômatos celulares são de grande utilidade na modelagem de sistemas físicos em que possamos discretizar o espaço (isto é, considerar as partículas localizadas) e o tempo. Podemos observar que as regras de transição, embutidas em w_i, podem ser quaisquer e, em princípio, a interação pode englobar vários sítios ou mesmo todo o sistema. Mas também devemos notar que quanto mais ampla for a interação, mais complexa será a descrição do modelo. Por isso, em geral, um autômato é bem útil ao modelarmos sistemas onde a interação é de curto alcance, ou seja, onde possamos considerar regras locais.

Também devemos observar que pelo fato das funções de estado estarem diretamente conectadas a essas regras, estas incorporam os parâmetros aos quais o sistema está sujeito, ou *parâmetros de controle*, e por conseguinte a natureza da transição, que pode ser determinística ou probabilística. Então, quando essas regras são probabilísticas, temos um autômato celular probabilístico, como os modelos que apresentaremos nas próximas seções.

Na descrição que fazemos dos sistemas físicos, abordando fenômenos de não-equilíbrio, para cada conjunto dos parâmetros de controle esperamos que as funções de estado atinjam determinados comportamentos. Neste contexto, os parâmetros de controle fornecem os vínculos aos quais o sistema deve obedecer e portanto esperamos que, para um tempo suficiente, o sistema chegue a um regime estacionário no qual irá transitar por estados que, em média, reproduzem o comportamento da função de estado. Portanto, devemos esperar que

$$P_{est}(\eta) \;=\; \sum_{\eta'} W(\eta|\eta')\, P_{est}(\eta')\;, \tag{2.14}$$

onde $P_{est}(\eta)$ representa agora uma distribuição de probabilidades estacionária. Esta

equação é o ponto de partida para caracterizarmos a reversibilidade num sistema, inerente a processos de equilíbrio, ou a irreversibilidade, inerente a processos de não-equilíbrio.

Considerando a equação (2.4), podemos observar que a equação acima pode ser reescrita como

$$\sum_{\eta'} \{ W(\eta|\eta') \, P_{est}(\eta') \; - \; W(\eta'|\eta) \, P_{est}(\eta) \} \; = \; 0 \tag{2.15}$$

e quando a condição

$$W(\eta|\eta') \, P_{est}(\eta') \; = \; W(\eta'|\eta) \, P_{est}(\eta) \tag{2.16}$$

é satisfeita para quaisquer dois estados distintos η e η', então o processo que estamos considerando possui reversibilidade microscópica e, portanto, P_{est} representa estados estacionários de *equilíbrio* termodinâmico. Quando a equação acima não é satisfeita, estamos diante de uma situação de não-equilíbrio, ou seja, a não obediência da equação (2.16) caracteriza um processo irreversível e, portanto, P_{est} representa estados estacionários de *não-equilíbrio*. A condição (2.16) é chamada de *balanceamento detalhado para o autômato* [3] e no Apêndice B expomos um critério para sua verificação.

2.2 Autômato Celular Predador-Presa *(autômato PP)*

Um sistema predador-presa pode ser modelado através de um autômato celular atribuindo a cada sítio da rede um estado que representa a ocupação por uma *presa*, a ocupação por um *predador* ou o sítio *vazio* (ausência de partículas no sítio). Conside-

raremos que o sítio pode estar ocupado por uma única partícula. Esses estados estão associados a uma variável dinâmica η_i, que será rotulada da seguinte forma:

- $\eta_i = 0$ se o sítio i estiver *vazio*;
- $\eta_i = 1$ se o sítio i estiver ocupado por uma *presa*;
- $\eta_i = 2$ se o sítio i estiver ocupado por um *predador*.

A competição entre espécies (partículas) ocorre numa região do espaço bidimensional e por isso, para dar sentido ao sistema predador-presa, consideraremos que as variáveis estocásticas estão associadas aos sítios de uma rede regular quadrada. Genericamente, a definição do modelo pode ser estendida para uma rede n-dimensional. O uso da rede é visto como um recurso limitador ao crescimento das espécies [14]. Outro aspecto do modelo é que nenhuma região do espaço será privilegiada, ou seja, as espécies terão as mesmas condições de sobrevivência em qualquer região do espaço. Isso significa que consideraremos o espaço homogêneo. Na rede, as propriedades da homogeneidade espacial nos permitem estabelecer que os estados assumidos pelos sítios independem da posição. Também consideraremos o espaço isotrópico; nenhuma direção do espaço será preferencial, de modo que presas e predadores interagem igualmente por todos os lados, isto é, a contribuição da interação entre dois estados é a mesma qualquer que seja sua orientação na rede. Por exemplo, a contribuição de um par de estados localizado no sentido *centro − norte* é equivalente à contribuição desse mesmo par se ele estiver localizado no sentido *centro − sul*, *centro − leste* ou *centro − oeste*.

Cada um dos N sítios da rede poderá assumir apenas um estado no mesmo instante de tempo (ou passo) e as transições entre os possíveis estados, transições estas que ocorrem em sucessivos instantes de tempo, obedecerão a regras probabilísticas. Essas regras descrevem como ocorre a interação *vazio-presa-predador* em nível microscópico. Assumimos que a transição de um estado para o outro deve obedecer a ordem mostrada na

Figura 2.2a. *Presas* só podem ser criadas em sítios *vazios*, processo que caracteriza o nascimento de uma presa, *presas* podem dar lugar a *predadores*, num processo em que está implícita a morte de presas e o nascimento de predadores, e *predadores* podem dar lugar a sítios *vazios*, um processo que associamos à morte de predadores. Os sítios vazios são o meio no qual ocorre a reprodução de presas e podem ser vistos como uma fonte de recursos às necessidades de sobrevivência das presas. A morte de predadores completa o ciclo, reintegrando ao sistema esses recursos. Também assumimos para o modelo os parâmetros p_a para a probabilidade de criação de presas, p_b para a probabilidade de criação de predadores, e p_c para a probabilidade de morte de predadores. Todos esses parâmetros são tais que $0 \leq p_x \leq 1$, $x = a, b, c$. Duas transições são catalíticas, como indica a Figura 2.2a, portanto a ocupação do sítio por uma presa ou por um predador está condicionada, respectivamente, à existência de presas ou predadores nas proximidades do sítio, enquanto uma transição é espontânea, isto é, ocorre independentemente da configuração de estados dos sítios vizinhos.

As transições inversas, Figura 2.2b, são proibidas para qualquer configuração em que se encontrar o sistema, e todas contribuem com probabilidade *zero*. Neste quadro, processos de nascimento de presas em sítios ocupados por predadores não ocorrem, como também não ocorre a ocupação de sítios vazios por predadores, ou a morte de presas sem vínculos com a presença de predadores.

As regras de interação são locais, com cada sítio interagindo apenas com seus primeiros vizinhos, que correspondem aos primeiros sítios localizados ao *norte*, *sul*, *leste* e *oeste*, como na Figura 2.1a. Assim, o estado que o sítio i pode assumir dependerá apenas do estado do síto i e de seus primeiros vizinhos no passo anterior. Isso reduzirá a soma sobre os estados de todos os sítios à soma dos estados do sítio i e seus primeiros vizinhos em (A.9).

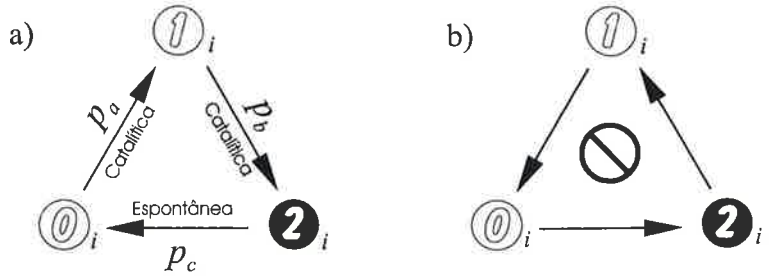


Figura 2.2: Esquema da hierarquia de transição dos estados de cada sítio. Partículas brancas representam sítios vazios, partículas cinzas representam sítios ocupados por uma presa e partículas pretas representam sítios ocupados por um predador. Também estão representadas a variável estocástica associada ao estado do sítio, $\eta_i = 0,\ 1,\ 2$, e as probabilidades de transição, p_a, p_b e p_c, entre os estados. a) A transição dos estados do sítio devem ocorrer no sentido horário; duas transições são catalíticas (dependem dos estados dos sítios vizinhos) enquanto que uma transição é espontânea (não depende da vizinhança). b) As transições em sentido anti-horário são proibidas e contribuem com probabilidade *zero*.

Essas regras locais são as mesmas consideradas por *Satulovsky & Tomé* [17]. Entretanto, neste trabalho os autores consideram um modelo descrito por dinâmica de tempo contínuo e aqui consideramos um autômato celular, que trará algumas diferenças pois, além de considerarmos a probabilidade de transição, também devemos considerar a probabilidade de que o estado não seja alterado. A seguir vamos descrever, com exemplos, as probabilidades de transição por sítio $w_i(\eta_i'|\eta_i)$ para cada um dos casos, lembrando que η_i representa o estado do sítio i no passo l e η_i' no passo $(l+1)$:

- $\eta_i = 0$: se um sítio estiver vazio e em sua primeira vizinhança houver presas, tem-se uma condição favorável ao nascimento de uma nova presa. Então o sítio i será ocupado por uma presa com probabilidade p_a proporcional ao número de primeiros vizinhos também ocupados por presas,

$$\omega_i(1|0) \;=\; \frac{1}{4}\, p_a \sum_k \delta(\eta_k, 1)\,. \tag{2.17}$$

A somatória em k indica a soma sobre todos os primeiros vizinhos do sítio i no passo l. O nascimento de predadores num sítio vazio é um processo proibido,

$$\omega_i(2|0) \;=\; 0\,, \tag{2.18}$$

e a condição (2.6) completa as possibilidades, fornecendo a probabilidade de que o sítio permaneça no mesmo estado, ou seja, a situação em que não observamos o nascimento de uma presa,

$$\omega_i(0|0) \;=\; 1 - \frac{1}{4}\,p_a \sum_k \delta(\eta_k, 1)\,. \tag{2.19}$$

Exemplos de transições para algumas configurações de sítios são apresentados na Figura 2.3;

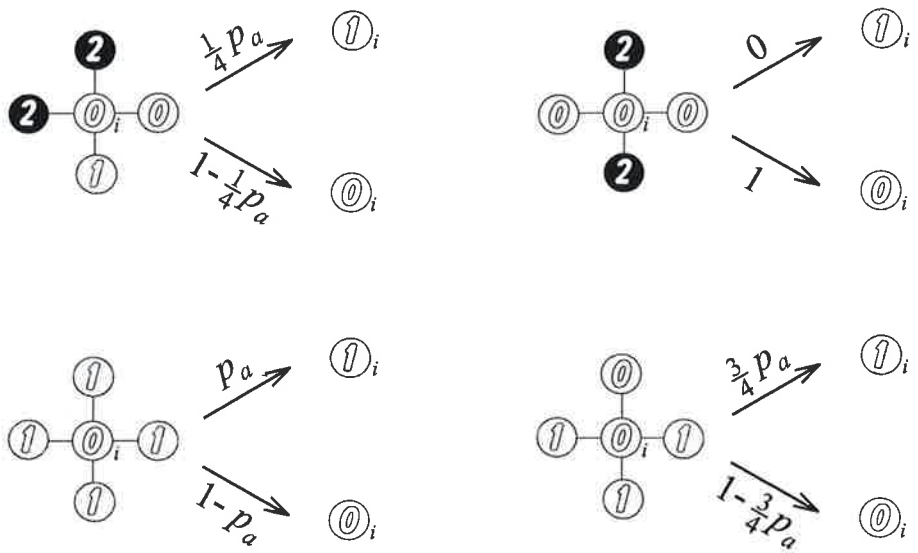


Figura 2.3: Alguns exemplos com a probabilidade de criação de presas (processo catalítico) para o *autômato PP*. A probabilidade do sítio central permanecer em seu estado também está indicada. A ocupação do sítio central por um predador é proibida e foi omitida. Estamos considerando somente a transição do sítio i e portanto os possíveis estados assumidos pela vizinhança não estão representados.

- $\eta_i = 1$: se um sítio estiver ocupado por uma presa, e houver predadores nos sítios vizinhos, então o sítio passa a ser ocupado por um predador com probabilidade proporcional ao número de vizinhos predadores,

$$\omega_i(2|1) = \frac{1}{4} p_b \sum_k \delta(\eta_k, 2) , \tag{2.20}$$

e é o único processo que representa a morte de presas, portanto

$$\omega_i(0|1) = 0 , \tag{2.21}$$

e o estado se mantém inalterado com probabilidade

$$\omega_i(1|1) = 1 - \frac{1}{4} p_b \sum_k \delta(\eta_k, 2) , \tag{2.22}$$

de acordo com a condição (2.6). Exemplos desse caso são apresentados na Figura 2.4;

- $\eta_i = 2$: se um sítio estiver ocupado por um predador, este morre espontaneamente com probabilidade p_c independente de quais sejam os vizinhos,

$$\omega_i(0|2) = p_c . \tag{2.23}$$

Uma presa não pode ocupar o lugar de um predador,

$$\omega_i(1|2) = 0 , \tag{2.24}$$

e o predador sobrevive com probabilidade

$$\omega_i(2|2) = 1 - p_c . \tag{2.25}$$

A Figura 2.5 exibe alguns exemplos.

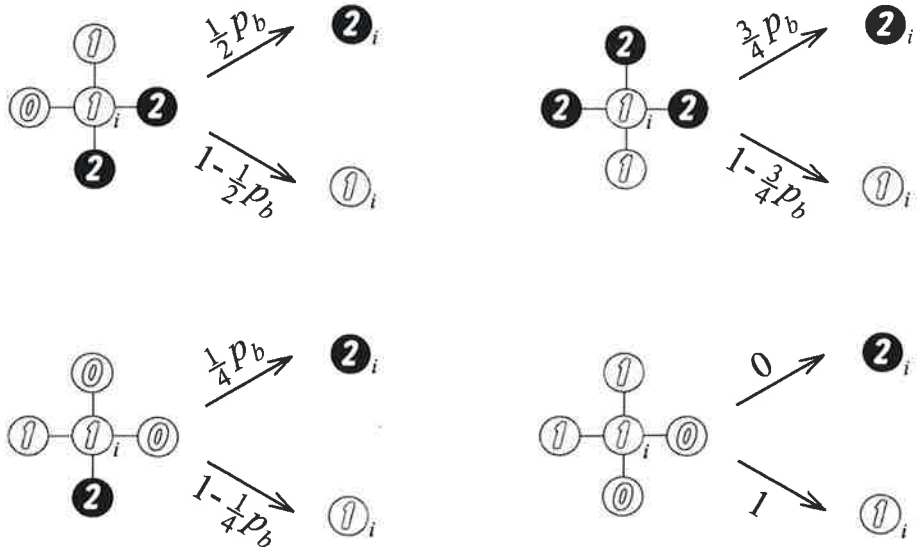


Figura 2.4: Alguns exemplos com a probabilidade de criação de predadores (processo catalítico) para o *autômato PP*. A probabilidade do sítio central permanecer ocupado por uma presa também está indicada. A morte de uma presa sem vínculos com o nascimento de um predador é um processo proibido.

As probabilidades de transição por sítio podem ser sintetizadas na forma

$$\omega_i(0|\eta_i) = \left[1 - \frac{1}{\zeta}\, p_a \sum_k \delta(\eta_k, 1)\right] \delta(\eta_i, 0) + p_c\, \delta(\eta_i, 2)\,, \tag{2.26}$$

$$\omega_i(1|\eta_i) = \frac{1}{\zeta}\, p_a\, \delta(\eta_i, 0) \sum_k \delta(\eta_k, 1) + \left[1 - \frac{1}{\zeta}\, p_b \sum_k \delta(\eta_k, 2)\right] \delta(\eta_i, 1)\,, \tag{2.27}$$

$$\omega_i(2|\eta_i) = \frac{1}{\zeta}\, p_b\, \delta(\eta_i, 1) \sum_k \delta(\eta_k, 2) + (1 - p_c)\, \delta(\eta_i, 2)\,, \tag{2.28}$$

onde ζ representa a coordenação da rede e entra nas probabilidades acima como um fator de normalização, $\sum_k \cdots$ é a soma sobre os primeiros vizinhos do sítio i na rede. Observemos que a soma dessas probabilidades,

$$\omega_i(0|\eta_i) + \omega_i(1|\eta_i) + \omega_i(2|\eta_i) = \delta(\eta_i, 0) + \delta(\eta_i, 1) + \delta(\eta_i, 2)\,, \tag{2.29}$$

satisfaz (2.6), uma vez que η_i é fixo.

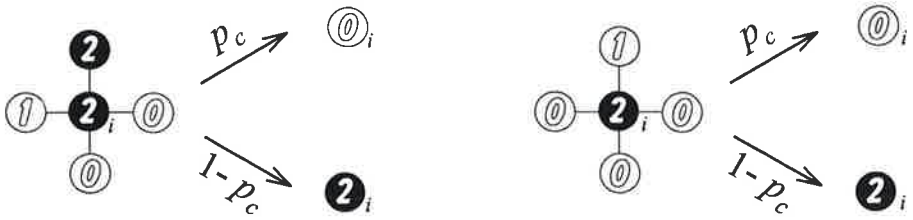


Figura 2.5: Exemplos com a probabilidade de morte de predadores para o *autômato PP*. Esse é um processo espontâneo e independe da vizinhança.

As regras permitem a existência de dois estados absorventes, os quais, uma vez que são atingidos, não possibilitam a evolução para um estado diferente. Uma vez que a morte de predadores é espontânea, uma configuração na qual apenas predadores estão presentes não é estável, e o sistema não deve permanecer indefinidamente nesse estado, exceto no limite $p_c \to 0$. Numa situação em que as presas foram extintas, o sistema inevitavelmente evolui para um estado absorvente de vazio, ou seja, uma configuração em que todos os sítios estão *vazios*. A situação em que há poucos predadores na rede pode levar à sua extinção, de modo que o sistema pode evoluir para um estado absorvente de presas. Como no outro caso, uma vez atingido esse estado, o sistema ficará aprisionado nele indefinidamente.

A existência de estados absorventes evidencia que a irreversibilidade é intrínseca às regras do modelo e como conseqüência o modelo não obedece ao balanceamento detalhado (Apêndice B).

2.3 Autômato Celular Predador-Presa Anisotrópico *(autômato PP anisotrópico)*

O autômato celular predador-presa anisotrópico é uma variação do autômato intro-

duzido na seção anterior. O modelo continua definido numa rede regular quadrada, porém as interações ocorrem numa direção preferencial. Assim, dizemos que o modelo possui uma anisotropia espacial. Permanecem os parâmetros e a ordem da mudança de estado por sítio, como indica a Figura 2.2, e as considerações sobre a homogeneidade do espaço. O tipo de processo envolvido na transição também é preservado, ou seja, reprodução catalítica de presas e predadores e morte espontânea de predadores, porém as regras locais agora devem incorporar a anisotropia. A Figura 2.6 exemplifica o que ocorre ao considerarmos a vizinhança anisotrópica em contraste com a vizinhança isotrópica, no que se refere à reprodução de presas ou predadores pois apenas as reações catalíticas envolvem a vizinhança. No caso isotrópico (Figura 2.6a), a ocupação dos sítios ocorre por todos os sentidos *norte*, *sul*, *leste* e *oeste*; no caso anisotrópico (Figura 2.6b), presas e predadores apenas se reproduzirão nos sentidos *sul* e *oeste*.

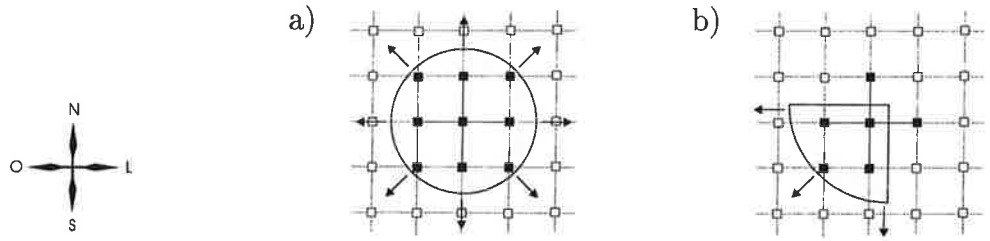


Figura 2.6: Situação do crescimento de presas em sítios vazios ou de predadores num meio de presas. Os quadrados escuros indicam os sítios ocupados. a) Na vizinhança isotrópica a reprodução de presas ou predadores ocorre em todas as direções; b) Na vizinhança anisotrópica que estamos considerando, a reprodução será restrita à porção indicada.

Observe que o modelo é essencialmente o mesmo se considerarmos outras vizinhanças anisotrópicas que preservem a simetria como por exemplo os sítios *norte* e *oeste*, ou os sítios *oeste* e *sul*, ou os sítios *sul* e *leste*.

Como no caso isotrópico, a contribuição de cada um dos processos proibidos é *zero*,

$$\omega_i(0|1) = 0 \ , \quad \omega_i(1|2) = 0 \ , \quad \omega_i(2|0) = 0 \ , \tag{2.30}$$

e as regras de interação, para uma rede bidimensional, passam a ser as seguintes:

- se um sítio estiver vazio e ao norte ou ao leste houver ao menos uma presa, então ele passa a ser ocupado por uma presa com probabilidade $w_i(1|0) = \frac{1}{2}\, n_a\, p_a$ dependente do número de vizinhos presas ao norte e ao leste n_a. A probabilidade do sítio permanecer vazio será $w_i(0|0) = 1 - \frac{1}{2}\, n_a\, p_a$, observando a condição (2.6). Exemplos são apresentados na Figura 2.7;

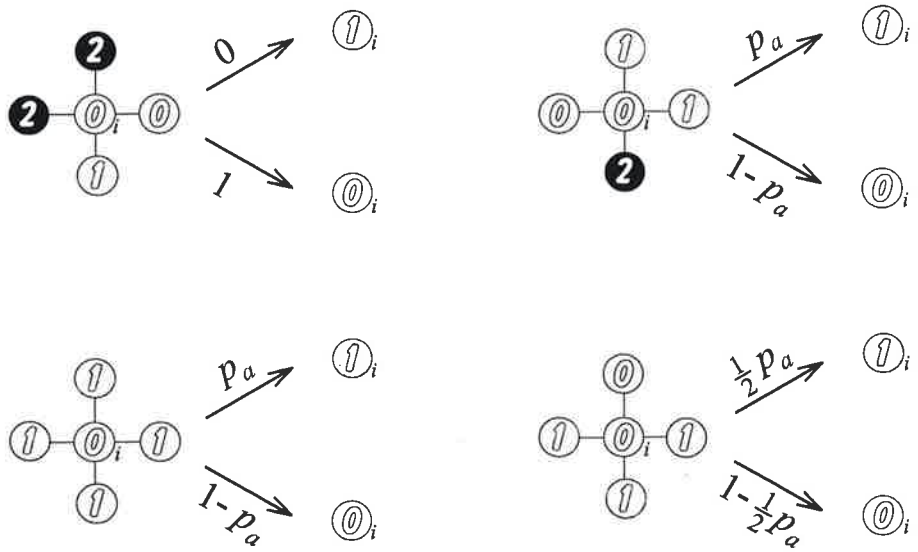


Figura 2.7: Alguns exemplos com a probabilidade de criação de presas para o *autômato PP anisotrópico*. Como no caso isotrópico, este continua um processo catalítico, porém com vizinhança anisotrópica; apenas os sítios localizados ao norte e ao leste interagem com o sítio i. Estão representadas apenas as transições permitidas.

- se um sítio estiver ocupado por uma presa, e houver predadores nos sítios ao norte e ao leste, então o sítio passa a ser ocupado por um predador com probabilidade

$w_i(2|1) = \frac{1}{2}\, n_b\, p_b$ proporcional ao número de vizinhos predadores n_b ao norte e ao leste e a probabilidade de sobrevivência da presa será portanto $w_i(1|1) = 1 - \frac{1}{2}\, n_b\, p_b$. A presença de predadores ou não nos sítios vizinhos ao oeste e ao sul não contribui para a interação como no caso isotrópico. A Figura 2.8 exibe alguns exemplos desse caso;

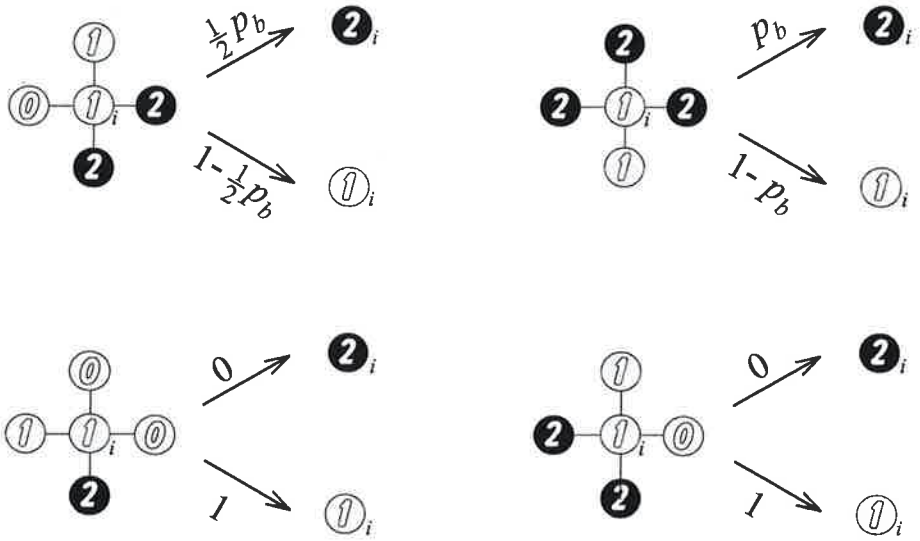


Figura 2.8: Exemplos com a probabilidade de criação de predadores (processo catalítico) para o *autômato PP anisotrópico*. A presença de predadores nos sítios ao oeste e ao sul não contribui para a probabilidade de transição.

- se um sítio estiver ocupado por um predador, este morre espontaneamente com probabilidade $w_i(0|2) = p_c$ e sobrevive com probabilidade $w_i(0|2) = 1 - p_c$ independente de quais sejam os vizinhos. Não há distinção em relação às regras para a morte de predadores do *autômato PP*, como mostra a Figura 2.9.

A partir dessas regras, as probabilidades de transição por sítio podem ser escritas

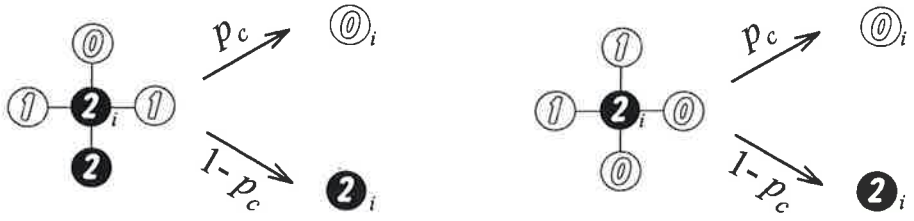


Figura 2.9: Exemplos com a probabilidade de morte de predadores para o *autômato PP anisotrópico*. Como o processo é espontâneo, não há restrições para a vizinhança do sítio i, este caso é idêntico ao caso isotrópico.

como

$$\omega_i(1|\eta_i) = \frac{1}{\varphi}\, p_a n_a\, \delta(\eta_i, 0) + \left[1 - \frac{1}{\varphi}\, p_b n_b\right] \delta(\eta_i, 1)\,, \tag{2.31}$$

$$\omega_i(2|\eta_i) = \frac{1}{\varphi}\, p_b n_b\, \delta(\eta_i, 1) + (1 - p_c)\, \delta(\eta_i, 2)\,, \tag{2.32}$$

$$\omega_i(0|\eta_i) = \left[1 - \frac{1}{\varphi}\, p_a n_a\right] \delta(\eta_i, 0) + p_c\, \delta(\eta_i, 2)\,, \tag{2.33}$$

onde φ representa o número de vizinhos que contribuem para a interação e

$$n_a = \sum_{k'} \delta(\eta_{k'}, 1) \qquad \text{e} \qquad n_b = \sum_{k'} \delta(\eta_{k'}, 2) \tag{2.34}$$

correspondem ao número de vizinhos presas e predadores, respectivamente. Em duas dimensões $\varphi = 2$ e $\sum_{k'}$ denota a soma sobre os vizinhos do sítio i localizados ao *norte* e ao *leste* apenas.

Os estados absorvente de vazio e absorvente de presa continuam existindo, e o modelo se mantém intrinsecamente irreversível.

Propusemos este modelo com o intuito de verificar o efeito da anisotropia nas oscilações do sistema predador-presa [16]. É um modelo inspirado no modelo de *Toom*, em que se consideram apenas dois estados por sítio e as regras de atualização apresentam outras

características. A semelhança com nosso modelo está no fato da primeira vizinhança ser a mesma vizinhança anisotrópica.

Veremos no capítulo 4, dedicado às simulações de Monte Carlo, que um dos resultados provenientes do modelo anisotrópico diz respeito à extensão da região oscilante no diagrama de fases, isto é, a região na qual o sistema apresenta oscilações temporais nas densidades de presas e predadores parece ser maior, quando comparada com a região oscilante associada ao modelo isotrópico.

Capítulo 3

Equações de evolução para correlações e aproximações de campo médio dinâmico

As equações de evolução temporal das densidades de presas e predadores e outras correlações são obtidas a partir da equação de evolução para $P_l(\alpha)$ somando-se sobre todos os estados possíveis do sistema. Como as regras de interação envolvem apenas os primeiros vizinhos mais próximos, no caso de correlações de um sítio essa soma se reduz a

$$P_{l+1}(\alpha) = \sum_{\eta_m \eta_i \eta_j \eta_k \eta_n} w_j \left(\alpha \left| \begin{array}{ccc} & \eta_m & \\ \eta_i & \eta_j & \eta_k \\ & \eta_n & \end{array} \right. \right) P_l \left(\begin{array}{ccc} & \eta_m & \\ \eta_i & \eta_j & \eta_k \\ & \eta_n & \end{array} \right) \tag{3.1}$$

para uma rede quadrada. Genericamente,

$$P_{l+1}(\alpha) = \sum_{\delta_j} \sum_{\eta_j \eta_{\delta_j}} w_j(\alpha|\eta_j \eta_{\delta_j})\, P_l(\eta_j \eta_{\delta_j}) \,, \tag{3.2}$$

onde utilizamos δ_j para denotar qualquer primeiro vizinho do sítio j que contribui na interação.

Para um sistema de partículas interagentes, as equações de evolução de um sítio dependem de correlações de dois sítios ou mais, dependendo das regras que regem o sistema. Em nossos modelos a interação é local e depende do próprio sítio j, logo todas as correlações de mais de um sítio serão de sítios vizinhos. A probabilidade de que dois sítios vizinhos sejam visitados pelos estados α e β, para um autômato celular probabilístico, pode ser escrita na forma

$$P_{l+1}(\alpha\beta) = \sum_{\substack{\delta_j \\ (\delta_j \neq k)}} \sum_{\substack{\delta_k \\ (\delta_k \neq j)}} \sum_{\eta_{\delta_j}\eta_j\eta_k\eta_{\delta_k}} w_j(\alpha|\eta_{\delta_j}\eta_j\eta_k)\, w_k(\beta|\eta_j\eta_k\eta_{\delta_k})\, P_l(\eta_{\delta_j}\eta_j\eta_k\eta_{\delta_k}) \,. \quad (3.3)$$

As somas em δ_j e δ_k excluem os sítios vizinhos que estão fixos, k e j respectivamente.

A seguir são apresentadas as equações de evolução para o *autômato PP* com a dependência espacial. Para tornar mais claros os estados assumidos por cada sítio que participa da interação, isto é, explicitando a dependência espacial, as equações serão apresentadas utilizando-se a notação $P^l_{ijk\ldots}(\alpha\beta\gamma\ldots)$ para exprimir a probabilidade de, no passo de tempo l, o sítio i assumir o estado α, o sítio j assumir o estado β e o sítio k assumir o estado γ, e assim sucessivamente.

3.1 Equações de evolução para o *autômato PP*

Considerando as regras definidas na seção 2.2 para o autômato celular probabilístico predador-presa (*autômato PP*) podemos escrever as equações de evolução temporal para as densidades de presas $P^l_j(1)$ e predadores $P^l_j(2)$. Também podemos obter as equações para evolução temporal das correlações de dois sítios vizinhos $P^l_{jk}(01)$, $P^l_{jk}(12)$ e $P^l_{jk}(02)$.

$$P_j^{l+1}(1) = \frac{1}{\zeta}\, p_a \sum_{\delta_j} P^l_{j,\delta_j}(01) - \frac{1}{\zeta}\, p_b \sum_{\delta_j} P^l_{j,\delta_j}(12) + P^l_j(1)\,, \tag{3.4}$$

$$P_j^{l+1}(2) = \frac{1}{\zeta}\, p_b \sum_{\delta_j} P^l_{j,\delta_j}(12) + (1-p_c)\, P^l_j(2)\,, \tag{3.5}$$

$$\begin{aligned}
P_{jk}^{l+1}(01) = {} & \frac{1}{\zeta}\, p_a \sum_{\substack{\delta_k \\ (\delta_k \neq j)}} \left[P^l_{jk,\delta_k}(001) - \frac{1}{\zeta}\, p_a \sum_{\substack{\delta_j \\ (\delta_j \neq k)}} P^l_{\delta_j,jk,\delta_k}(1001) \right] \\
& + \left(1 - \frac{p_a}{\zeta}\right) \left[P^l_{jk}(01) - \frac{1}{\zeta}\, p_b \sum_{\substack{\delta_k \\ (\delta_k \neq j)}} P^l_{jk,\delta_k}(012) \right] \\
& - \frac{1}{\zeta}\, p_a \sum_{\substack{\delta_j \\ (\delta_j \neq k)}} \left[P^l_{\delta_j,jk}(101) - \frac{1}{\zeta}\, p_b \sum_{\substack{\delta_k \\ (\delta_k \neq j)}} P^l_{\delta_j,jk,\delta_k}(1012) \right] \\
& + \frac{1}{\zeta}\, p_a\, p_c \sum_{\substack{\delta_k \\ (\delta_k \neq j)}} P^l_{jk,\delta_k}(201) \\
& + p_c \left[\left(1 - \frac{p_b}{\zeta}\right) P^l_{jk}(21) - \frac{1}{\zeta}\, p_b \sum_{\substack{\delta_k \\ (\delta_k \neq j)}} P^l_{jk,\delta_k}(212) \right]\,,
\end{aligned} \tag{3.6}$$

$$
\begin{aligned}
P_{jk}^{l+1}(12) &= \frac{1}{\zeta^2}\, p_a\, p_b \sum_{\substack{\delta_k \\ (\delta_k \neq j)}} \left[P_{jk,\delta_k}^{l}(012) + \sum_{\substack{\delta_j \\ (\delta_j \neq k)}} P_{\delta_j,jk,\delta_k}^{l}(1012) \right] \\
&+ \frac{1}{\zeta}\, p_a\, (1-p_c) \sum_{\substack{\delta_j \\ (\delta_j \neq k)}} P_{\delta_j,jk}^{l}(102) \\
&+ \frac{1}{\zeta}\, p_b \sum_{\substack{\delta_k \\ (\delta_k \neq j)}} \left[P_{jk,\delta_k}^{l}(112) - \frac{1}{\zeta}\, p_b \sum_{\substack{\delta_j \\ (\delta_j \neq k)}} P_{\delta_j,jk,\delta_k}^{l}(2112) \right] \\
&+ (1-p_c) \left[\left(1 - \frac{p_b}{\zeta}\right) P_{jk}^{l}(12) - \frac{1}{\zeta}\, p_b \sum_{\substack{\delta_j \\ (\delta_j \neq k)}} P_{\delta_j,jk}^{l}(212) \right] , \qquad (3.7)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
P_{jk}^{l+1}(02) &= \frac{1}{\zeta}\, p_b \sum_{\substack{\delta_k \\ (\delta_k \neq j)}} \left[\left(1 - \frac{p_a}{\zeta}\right) P_{jk,\delta_k}^{l}(012) - \frac{1}{\zeta}\, p_a \sum_{\substack{\delta_j \\ (\delta_j \neq k)}} P_{\delta_j,jk,\delta_k}^{l}(1012) \right] \\
&+ (1-p_c) \left[P_{jk}^{l}(02) - \frac{1}{\zeta}\, p_a \sum_{\substack{\delta_j \\ (\delta_j \neq k)}} P_{\delta_j,jk}^{l}(102) \right] \\
&+ \frac{1}{\zeta}\, p_b\, p_c \left[P_{jk}^{l}(21) + \sum_{\substack{\delta_k \\ (\delta_k \neq j)}} P_{jk,\delta_k}^{l}(212) \right] \\
&+ p_c\, (1-p_c)\, P_{jk}^{l}(22) . \qquad (3.8)
\end{aligned}
$$

As equações para as densidades e para correlações de pares do *autômato PP aniso-*

trópico podem ser obtidas de maneira equivalente, observando sua definição na seção 2.3. Escritas na forma reduzida, as diferenças entre os dois conjuntos de equações são mínimas, porém observamos que todos os *fatores* são distintos. E mais, considerando-se os vínculos existentes devido à homogeneidade e isotropia do espaço (como será visto na seção seguinte) o sistema de equações (3.4)-(3.8) para o *autômato PP* pode ser analisado pelo método de campo médio [3] [22] [23].

Para uma análise de campo médio do *autômato PP anisotrópico*, seriam necessárias equações hierárquicas nas direções espaciais norte e sul, o que não será feito nesta dissertação.

Se fôssemos colecionar equações em número suficiente às novas variáveis (correlações de maior ordem) que surgem, chegaríamos a um sistema infinito de equações. Uma forma de se obter um conjunto finito de n equações acopladas a n variáveis é truncar esse sistema infinito de equações e reduzir a ordem das correlações por meio de alguma aproximação. O método geralmente utilizado é o de *campo médio dinâmico*.

3.2 O método de campo médio dinâmico

As aproximações de campo médio dinâmico [24] [25] [26] [27] [28] consistem em se fazer algumas considerações específicas sobre as variáveis dinâmicas, no que diz respeito à influência que exercem entre si. Quando essa influência existe, dizemos que o sistema é (ou que as variáveis dinâmicas são) correlacionado(as). Ao contrário, quando o comportamento de uma variável dinâmica não afeta o comportamento de uma outra, dizemos que o sistema é descorrelacionado ou que as variáveis dinâmicas são todas independentes.

Num sistema onde ocorre interação entre as partículas, como é o caso dos *autômatos*

PP e PP anisotrópico, sempre há correlação no sistema, e de todas as ordens. O papel da aproximação de campo médio é diminuir a ordem da correlação de um aglomerado de sítios. Nesse esquema serão feitos aqui dois graus de aproximações. O primeiro, desprezando-se quaisquer correlações existentes entre os sítios. O segundo, mantendo correlações de pares de sítios.

3.2.1 Campo Médio Simples

O método de *campo médio simples* ou *campo médio na aproximação de um sítio* consiste em desprezar quaisquer correlações existentes e portanto assumir que todas as variáveis dinâmicas associadas aos aglomerados de sítios são independentes. Formalmente, temos

$$P(\eta_1\eta_2\cdots\eta_i\cdots\eta_N) \approx P(\eta_1)P(\eta_2)\cdots P(\eta_i)\cdots P(\eta_N) = \prod_{i=1}^{N} P(\eta_i) \tag{3.9}$$

onde η_i, $i = 1\ldots N$, são as variáveis dinâmicas associadas aos sítios do aglomerado. Como num sistema de partículas interagentes sempre existe alguma correlação, essa não é a melhor aproximação que pode ser feita, mas é a mais simples.

3.2.2 Campo Médio de Pares

O método de *campo médio na aproximação de pares*, ou *aproximação de dois sítios*, consiste em não desprezar todas as correlações existentes, mas reduzi-las a correlações de dois sítios. Para isso, inicialmente vamos considerar uma correlação de três sítios vizinhos e relacioná-la com a probabilidade condicional

$$P(\eta_i\eta_j\eta_k) = P(\eta_j)P(\eta_i\eta_k|\eta_j). \tag{3.10}$$

A aproximação consiste em se fazer uma consideração sobre a probabilidade condicional $P(\eta_i\eta_k|\eta_j)$, assumindo que η_i e η_k possam ser influenciados por η_j (sítio central) mas que não influenciem um ao outro. Dessa forma consideramos que η_i e η_k são independentes, ou seja,

$$P(\eta_i\eta_k|\eta_j) \approx P(\eta_i|\eta_j)P(\eta_k|\eta_j) = \frac{P(\eta_i\eta_j)}{P(\eta_j)}\frac{P(\eta_j\eta_k)}{P(\eta_j)}, \tag{3.11}$$

e então podemos escrever

$$P(\eta_i\eta_j\eta_k) \approx P(\eta_j)\prod_{\delta}\frac{P(\eta_j\eta_{j+\delta})}{P(\eta_j)}, \tag{3.12}$$

onde a produtória em δ é sobre os vizinhos do sítio j.

Esse resultado pode ser estendido às correlações entre aglomerados maiores de sítios. Sejam $(\eta_{A_1},\ldots,\eta_{A_n})$ as variáveis estocásticas associadas a um aglomerado A de sítios e $(\eta_{B_1},\ldots,\eta_{B_m})$ as variáveis estocásticas associadas a um aglomerado B. A aproximação de pares para o aglomerado AB pode ser escrita genericamente por

$$P(AB) \approx P(A)\prod_{i}^{m}\frac{P(A,\eta_{B_i})}{P(A)}. \tag{3.13}$$

Essa aproximação produz melhores resultados do que a de um sítio, como veremos na seção 3.5 para o *autômato PP*.

3.3 Considerações gerais

3.3.1 Homogeneidade, isotropia e vínculos

As considerações sobre isotropia e homogeneidade do espaço trazem algumas simplificações no conjunto de equações (3.4)-(3.8) para o *autômato PP*. Os exemplos abaixo são considerados para uma cadeia de sítios.

No caso de espaço isotrópico nenhuma direção do espaço é preferencial e a relação abaixo deve ser satisfeita

$$P^l_{ji}(\alpha\beta) \;=\; P^l_{jk}(\alpha\beta). \tag{3.14}$$

Se o espaço é homogêneo, as correlações também não devem depender de sua localização, sendo igualmente provável que cada um dos sítios pertencentes ao sistema seja visitado por um certo estado α. Neste caso, podemos escrever as seguintes relações:

$$P^l_i(\alpha) = P^l_j(\alpha) = P^l_k(\alpha)\ , \tag{3.15}$$

$$P^l_{ij}(\alpha\beta) = P^l_{jk}(\alpha)\ . \tag{3.16}$$

Assim, para espaço isotrópico e homogêneo as somatórias que aparecem nas equações (3.4)-(3.8) do *autômato PP* são bem determinadas e correspondem a

$$\sum_{\delta_j}, \sum_{\delta_k} \longrightarrow \zeta \qquad \text{e} \qquad \sum_{\substack{\delta_k \\ (\delta_k \neq j)}}, \sum_{\substack{\delta_j \\ (\delta_j \neq k)}} \longrightarrow \zeta - 1\ , \tag{3.17}$$

onde ζ é o número de primeiros vizinhos (número de coordenação da rede). A primeira relação corresponde à soma sobre todas as direções espaciais e a segunda corresponde à soma de todas as direções espaciais menos uma (que é a direção correspondente ao sítio vizinho que está fixo), de modo que esses fatores incorporam características da rede, como o número de primeiros vizinhos.

Além dessas relações, devemos considerar que nem todas as variáveis são independentes, uma vez que o sistema está sujeito aos vínculos

$$\sum_{\eta_i} P^l(\eta_i) = 1 \qquad \text{e} \qquad \sum_{\eta_j} P^l(\eta_i\eta_j) = P^l(\eta_i)\ . \tag{3.18}$$

3.3.2 Parametrização para o diagrama de fases

Para os dois modelos descritos nas seções 2.2 e 2.3, o diagrama de fases é construído sobre o espaço tridimensional onde cada eixo corresponde a um dos três parâmetros de controle p_a, p_b e p_c e cada um desses parâmetros pertence ao intervalo [0,1]. Para melhor visualizar o diagrama, o estudo do sistema nas análises de campo médio e simulações foi realizado no plano $p_a + p_b + p_c = 1$ (Figura 3.1). Utilizamos a parametrização

$$\begin{aligned} p_a &= \frac{1-c}{2} - p \\ p_b &= \frac{1-c}{2} + p \\ p_c &= c \end{aligned} \tag{3.19}$$

e como conseqüência os novos limites de ação dos parâmetros p e c são $-\frac{1}{2} \leq p \leq \frac{1}{2}$ e $0 \leq c \leq (1 - 2|p|)$. Observe que a linha $p = 0$ representa pontos em que $p_a = p_b$. Na região $p < 0$ temos $p_a > p_b$ enquanto que na região $p > 0$ ocorre o contrário, $p_b > p_a$.

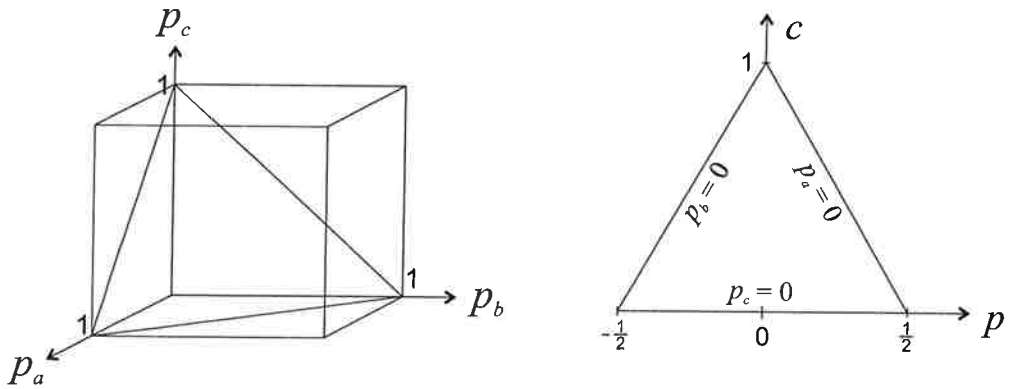


Figura 3.1: O plano cinza que corta o diagrama de fases indica a região estudada. Os novos parâmetros são p e c, limitados pelos planos $p_a = 0$, $p_b = 0$ e $p_c = 0$.

3.4 Campo médio simples para o *autômato PP*

A aplicação direta dessa aproximação pode ser observada abaixo:

$$\begin{aligned} P^l_{j,\delta_j}(01) &\approx P^l_j(0)\, P^l_{\delta_j}(1) \\ P^l_{j,\delta_j}(12) &\approx P^l_j(1)\, P^l_{\delta_j}(2) \end{aligned} \tag{3.20}$$

e as equações (3.4) e (3.5) assumirão a forma

$$P^{l+1}_j(1) = \frac{1}{\zeta}\, p_a\, P^l_j(0) \sum_{\delta_j} P^l_{\delta_j}(1) - \frac{1}{\zeta}\, p_b\, P^l_j(1) \sum_{\delta_j} P^l_{\delta_j}(2) + P^l_j(1) \tag{3.21}$$

$$P^{l+1}_j(2) = \frac{1}{\zeta}\, p_b\, P^l_j(1) \sum_{\delta_j} P^l_{\delta_j}(2) + (1 - p_c)\, P^l_j(2)\,. \tag{3.22}$$

As considerações sobre homogeneidade espacial, conforme a equação (3.15), eliminam a dependência espacial que antes havia nessas equações e como conseqüência também eliminarão a dependência no número de vizinhos da rede (3.17). Essa é uma característica dessa aproximação.

A presença do vínculo (3.18)

$$P^l_j(0) + P^l_j(1) + P^l_j(2) = 1 \tag{3.23}$$

implica que as equações (3.21) e (3.22) são suficientes para descrever o sistema. Usando as definições

$$P^l_j(1) \equiv x_l \qquad\qquad P^l_j(2) \equiv y_l \tag{3.24}$$

para as variáveis que consideraremos independentes e que representam as densidades de presas e predadores, respectivamente, na aproximação de campo médio simples o *autômato PP* é descrito pelo mapa bidimensional

$$\begin{aligned} x_{l+1} &= p_a\, x_l(1 - x_l - y_l) - p_b\, x_l y_l + x_l\,, \\ y_{l+1} &= p_b\, x_l y_l + (1 - p_c)\, y_l\,. \end{aligned} \tag{3.25}$$

Os pontos de equilíbrio (ou pontos fixos) desse mapa são aqueles que representam a solução estacionária

$$x_{l+1} = x_l \equiv x \ , \qquad y_{l+1} = y_l \equiv y \tag{3.26}$$

e correspondem às três soluções

$$(x_1, y_1) = (0, 0) \ , \qquad (x_2, y_2) = (1, 0) \ , \qquad (x_3, y_3) = \left(\frac{p_c}{p_b}, \frac{1 - p_c/p_b}{1 + p_b/p_a}\right) \tag{3.27}$$

das quais as duas primeiras são triviais e a terceira é uma solução que depende dos parâmetros de controle (p_a, p_b, p_c) e está limitada ao intervalo $(0, 1)$. Esta é a solução que chamaremos de *ativa*.

A solução 1 indica a ausência total de presas e predadores no sistema e portanto representa o estado *absorvente de vazio*. A solução 2 representa o estado *absorvente de presas* pois indica que todo o sistema está preenchido por presas. Para analisar esses pontos fixos é necessário sabermos como se comportam as sucessivas iterações do mapa (3.25) nas proximidades dessas soluções.

A análise de estabilidade linear [29] revelou que a solução (x_1, y_1) é um ponto de sela hiperbólico para qualquer conjunto de parâmetros (p_a,p_b,p_c), ou seja, é sempre instável. Isso significa que as sucessivas iteradas do mapa (3.25) nas proximidades de $(0, 0)$ aproximam-se desse ponto por *uma direção* mas afastam-se dele pela *outra*. Esse comportamento indica que, pelo menos nessa aproximação, o estado *absorvente de vazio* não é presente no *autômato PP*.

Para as soluções 2 e 3, a tabela 3.1, a seguir, exibe as superfícies de transições entre os diferentes comportamentos p_{ci}, $i = 1, 2$, como função dos parâmetros p_a e p_b e as respectivas curvas de transições c_i como função de p, utilizando-se a parametrização (3.19).

Tabela 3.1: Superfícies e curvas de mudança de comportamento dos pontos fixos na aproximação de *campo médio simples* para o *autômato PP*.

superfícies de transição			curvas de transição		
p_{c1}	$=$	$\frac{4p_b{}^2}{p_a+4p_b}$	c_1	$=$	$p+\frac{9}{14}-\frac{1}{7}\left(\frac{25}{4}+7p(1-p)\right)^{\frac{1}{2}}$
p_{c2}	$=$	p_b	c_2	$=$	$\frac{1}{3}(1+2p)$

Na região $0 \leq c < c_2$ a solução *absorvente de presas* é um ponto de sela, e portanto instável. Para $c_2 < c \leq 1-2|p|$, as sucessivas iterações no mapa aproximam-se monotonicamente da solução e portanto nessa região o ponto $(1,0)$ é um *nó* assintoticamente estável. As curvas c_i (ou superfícies p_{ci}) representam pontos de estabilidade não assintótica, e uma análise linear é insuficiente para defini-los.

A solução ativa, por sua vez, é estável para $0 \leq c < c_2$ e instável para $c_2 < c \leq 1-2|p|$ e assim podemos perceber que a *perda de estabilidade* de uma solução está associada ao *ganho de estabilidade* da outra. Mas a *região ativa-estável* possui dois comportamentos distintos, separados por c_1, no que se refere à forma como os pontos fixos são atingidos. Para $0 \leq c < c_1$ a solução ativa comporta-se como um *foco* assintoticamente estável (as sucessivas iterações do mapa mostram oscilações amortecidas no tempo) enquanto que na região $c_1 < c < c_2$ a solução ativa comporta-se como um *nó* assintoticamente estável. As trajetórias estão esquematizadas na Figura 3.2.

As soluções estáveis que apresentam comportamento similar estão agrupadas no diagrama de fases (Figura 3.3) utilizando-se a parametrização (3.19). São traçadas as curvas c_1 e c_2, delimitando os diferentes comportamentos dos estados.

Para $p = 0$, estão traçadas as curvas que exibem o comportamento das densidades (soluções estáveis) de *presas*, *predadores* e *sítios vazios* como função de c (Figura 3.4).

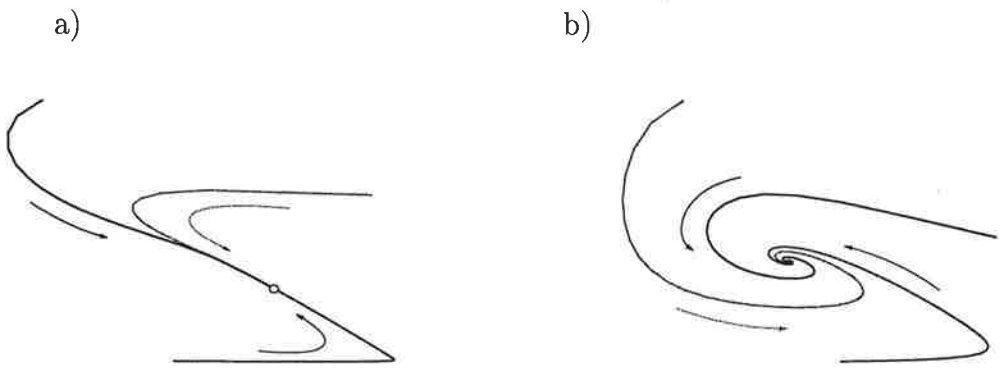


Figura 3.2: Trajetórias no espaço de fases na aproximação de campo médio simples para o *autômato PP*. a) Para $p = 0$ e $c = 0,2$ o ponto fixo é um *nó assintoticamente estável*. b) Para $p = -0,2$ e $c = 0,12$ o ponto fixo é um *foco assintoticamente estável*. Em cada caso o mapa (3.25) foi iterado para três condições iniciais diferentes.

Especificamente neste caso, a curva de densidades de predadores é igual a curva de densidades de sítios vazios. Na região $p_b < p_a$ as densidades de predadores são maiores que as densidades de sítios vazios, enquanto na região $p_b > p_a$ é observado o inverso.

Essa análise não nos mostra que o modelo exibe oscilações estáveis no tempo, conforme esperamos obter num modelo de dinâmica de populações para um sistema predador-presa, porém exibe uma região que apresenta oscilações amortecidas no tempo e que numa aproximação melhor poderá evidenciar uma nova fase. Isso é o que será feito na próxima seção.

3.5 Campo médio com pares para o *autômato PP*

Nessa aproximação serão mantidas todas as correlações de *um* e *dois* sítios no conjunto

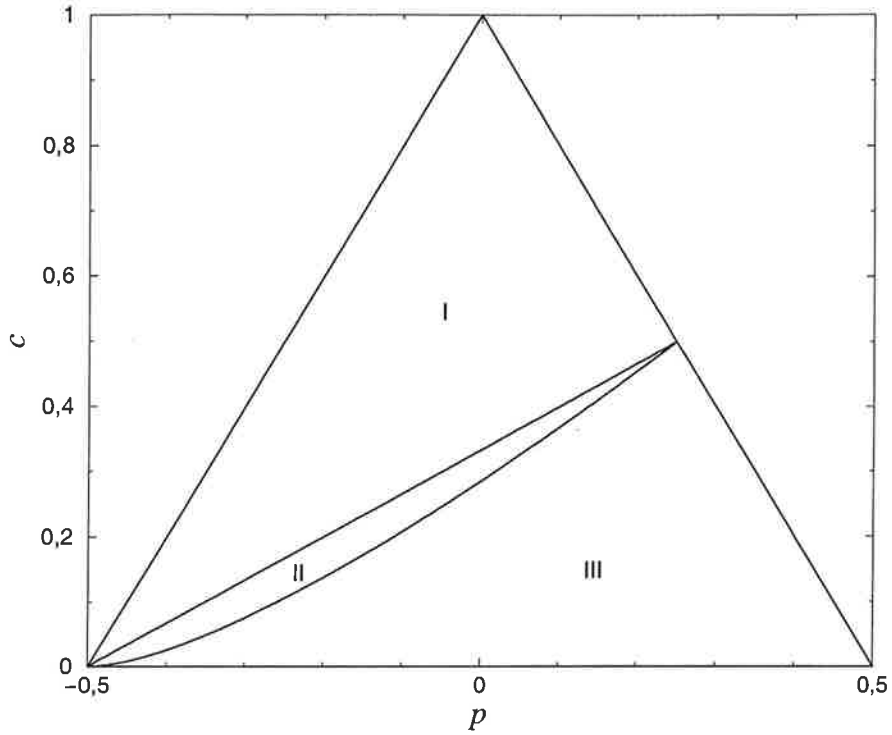


Figura 3.3: Diagrama de fases em função dos parâmetros p e c na aproximação de campo médio simples para o *autômato PP*. A região I indica a fase *absorvente de presas*. As regiões II e III correspondem à fase ativa mas diferem na forma como os pontos de equilíbrio são atingidos. As soluções nas regiões I e II são *nós assintoticamente estáveis* enquanto na região III correspondem a *focos assintoticamente estáveis*. A curva c_1 separa as regiões II e III e a curva c_2 separa I e II.

de equações (3.4)-(3.5) e todas as correlações de *três* e *quatro* sítios serão aproximadas por correlações de *dois* sítios.

A aproximação de correlações de *três* sítios é direta, como em (3.12). Para reduzir as correlações de *quatro* sítios vizinhos à correlações de *dois* sítios, serão feitas duas aproximações sucessivas. Primeiro, reduzindo-as a correlações de *três* sítios e em seguida usar novamente a aproximação (3.12)

$$P(\eta_i\eta_j\eta_k\eta_l) \approx \frac{P(\eta_i\eta_j\eta_k)P(\eta_j\eta_k\eta_l)}{P(\eta_j\eta_k)} \approx \frac{P(\eta_i\eta_j)P(\eta_j\eta_k)P(\eta_k\eta_l)}{P(\eta_j)P(\eta_k)}. \tag{3.28}$$

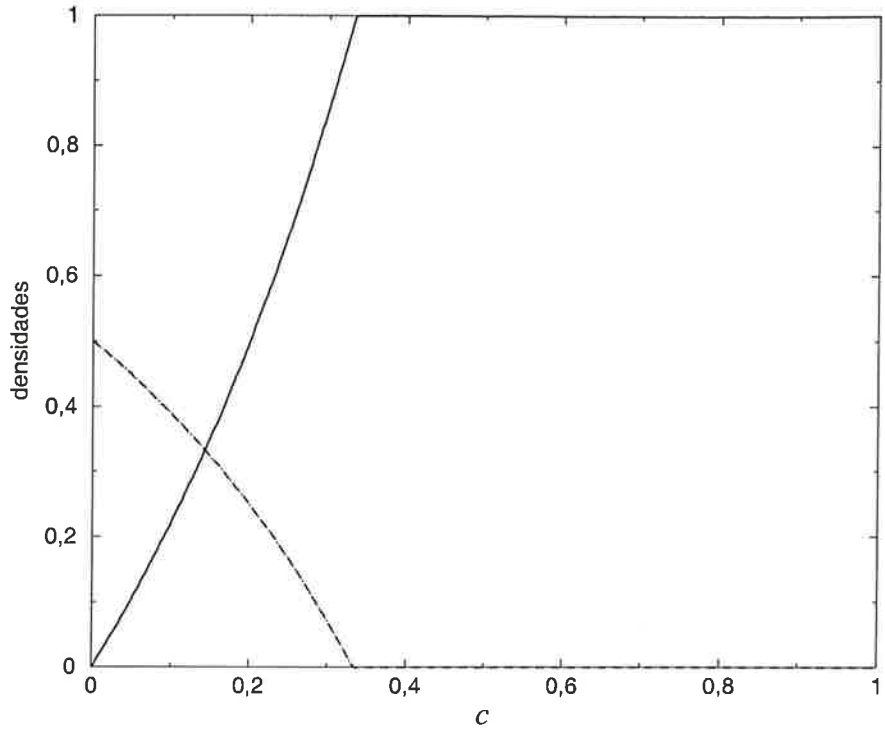


Figura 3.4: Densidades de *presas* (linha cheia), *predadores* (linha tracejada) e *sítios vazios* (linha pontilhada) versus c na aproximação de *campo médio simples* para o *autômato PP* e $p = 0$. Neste caso a curva de densidades para sítios vazios é igual a curva de densidades para predadores.

Utilizando as definições

$$\begin{array}{llllllll} q_l & \equiv & P^l_{jk}(00) & u_l & \equiv & P^l_{jk}(01) & w_l & \equiv & P^l_{jk}(02) & z_l & \equiv & P^l_j(0) \\ & & & r_l & \equiv & P^l_{jk}(11) & v_l & \equiv & P^l_{jk}(12) & x_l & \equiv & P^l_j(1) \\ & & & & & & s_l & \equiv & P^l_{jk}(22) & y_l & \equiv & P^l_j(2)\,, \end{array} \tag{3.29}$$

onde trataremos como independentes as variáveis x_l, y_l, u_l, v_l e w_l, e as mesmas considerações sobre isotropia e homogeneidade do espaço, os vínculos serão

$$\begin{array}{lllll} z_l & = & 1 - x_l - y_l & r_l & = & x_l - u_l - v_l \\ q_l & = & z_l - u_l - w_l & s_l & = & y_l - v_l - w_l\,, \end{array} \tag{3.30}$$

e o conjunto de equações (3.4)-(3.8) passará a ter a forma

$$x_{l+1} = p_a\, u_l - p_b\, v_l + x_l\,, \tag{3.31}$$

$$y_{l+1} = p_b\, v_l + (1 - p_c)\, y_l\,, \tag{3.32}$$

$$\begin{aligned} u_{l+1} &= f_d\, p_a \left[\frac{q_l u_l}{z_l} - f_d\, p_a\, \frac{q_l {u_l}^2}{{z_l}^2}\right] + \left[\left(1 - \frac{p_a}{\zeta}\right) - f_d\, p_a\, \frac{u_l}{z_l}\right]\left[u_l - f_d\, p_b\, \frac{u_l v_l}{x_l}\right] \\ &+ f_d\, p_a\, p_c\, \frac{w_l u_l}{z_l} + p_c \left[\left(1 - \frac{p_b}{\zeta}\right) v_l - f_d\, p_b\, \frac{{v_l}^2}{x_l}\right]\,, \end{aligned} \tag{3.33}$$

$$\begin{aligned} v_{l+1} &= f_d\, p_b \left[\frac{p_a}{\zeta}\, \frac{u_l v_l}{x_l} + f_d\, p_a\, \frac{{u_l}^2 v_l}{z_l x_l}\right] + f_d\, p_a\, (1 - p_c)\, \frac{w_l u_l}{z_l} \\ &+ f_d\, p_b \left[\frac{r_l v_l}{x_l} - f_d\, p_b\, \frac{r_l {v_l}^2}{{x_l}^2}\right] + (1 - p_c) \left[\left(1 - \frac{p_b}{\zeta}\right) v_l - f_d\, p_b\, \frac{{v_l}^2}{x_l}\right]\,, \end{aligned} \tag{3.34}$$

$$\begin{aligned} w_{l+1} &= f_d\, p_b \left[\left(1 - \frac{p_a}{\zeta}\right) \frac{u_l v_l}{x_l} - f_d\, p_a\, \frac{{u_l}^2 v_l}{z_l x_l}\right] + (1 - p_c) \left[w_l - f_d\, p_a\, \frac{u_l w_l}{z_l}\right] \\ &+ p_c \left[\frac{p_b}{\zeta}\, v_l + f_d\, p_b\, \frac{{v_l}^2}{x_l}\right] + p_c\, (1 - p_c)\, s_l\,. \end{aligned} \tag{3.35}$$

O fator f_d está relacionado à coordenação da rede,

$$f_d \equiv \frac{\zeta - 1}{\zeta}\,. \tag{3.36}$$

A solução desse conjunto de equações se mostrou muito complexa e não foi possível encontrar uma solução analítica. Porém é possível verificar que o ponto $(x, y, u, v, w) = (1, 0, 0, 0, 0)$, correspondente ao estado *absorvente de presa*, continua como solução. Com

a solução numérica [30] do mapa 5-dimensional acima e sua análise de estabilidade foi possível identificar quatro fases distintas, o que revela uma diferença qualitativa em relação a aproximação anterior. A Figura 3.5 mostra como se comportam as densidades como função de c para a linha $p = 0$.

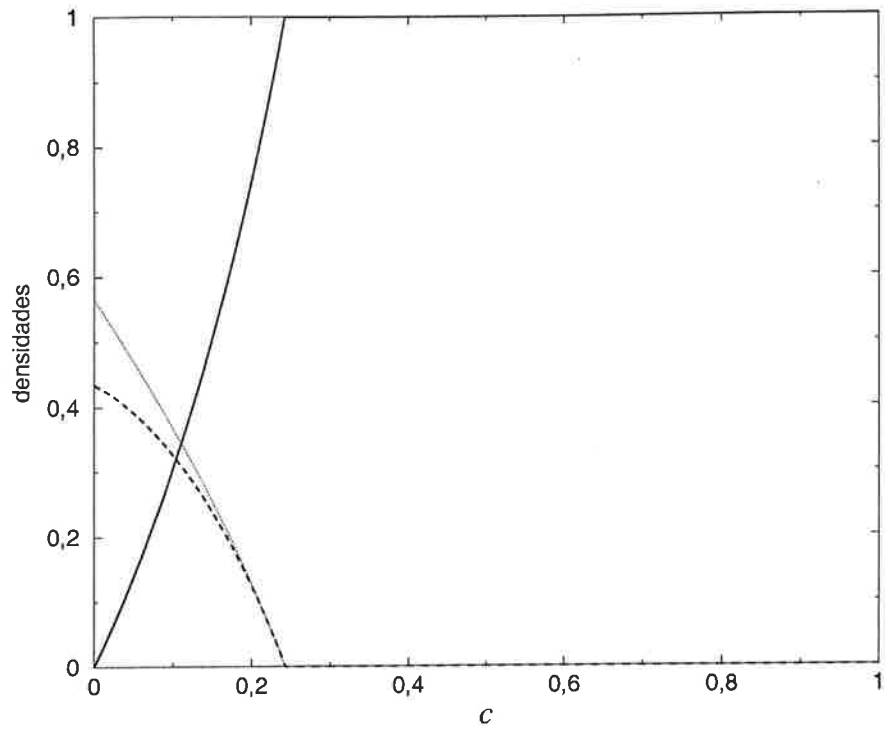


Figura 3.5: Densidades de *presas* (linha cheia), *predadores* (linha tracejada) e *sítios vazios* (linha pontilhada) versus c para $p = 0$. Aproximação de *campo médio com pares* para o *autômato PP*.

No diagrama de fases (Figura 3.6) a região I corresponde à fase *absorvente de presas* e II, III e IV correspondem às regiões em que as soluções ativas são estáveis e, como na aproximação simples, elas diferem quanto ao comportamento das sucessivas iteradas do mapa nas proximidades do ponto de equilíbrio. Na região II estão as soluções que correspondem a *nós assintoticamente estáveis* e na região III os *focos assintoticamente estáveis*, de maneira similar ao diagrama da aproximação simples.

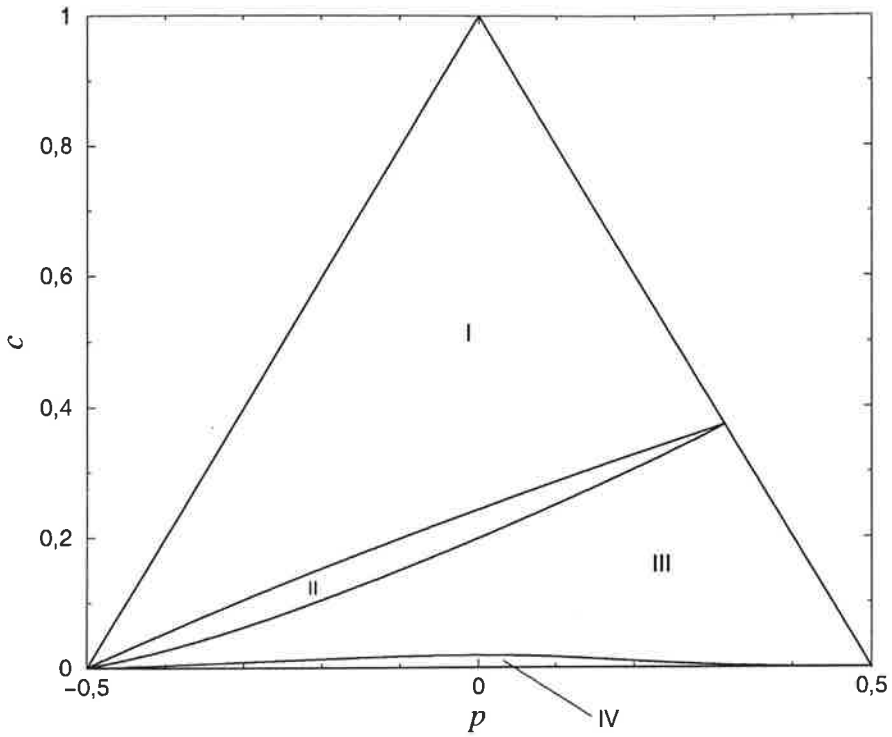


Figura 3.6: Diagrama de fases em função dos parâmetros p e c na aproximação de campo médio com pares para o *autômato PP*. A região I indica a fase *absorvente de presas*. As regiões II e III correspondem à fase *ativa não-oscilante* cujas soluções possuem estabilidade assintótica (*nós* e *focos*). A região IV corresponde à fase *ativa oscilante* em que as soluções são centros estáveis.

A região IV corresponde à fase oscilante, em que se concentrou nosso interesse. Ela apresenta oscilações que não se amortecem com o tempo e cujos pontos fixos são centros estáveis que produzem ciclos limites como trajetórias no espaço de fase. Assim a transição da região III para a região IV (c decrescente) é uma bifurcação de Hopf, que é mostrada em maior detalhe na Figura 3.7. A Figura 3.8 mostra como as densidades evoluem no tempo produzindo as oscilações e o correspondente diagrama do espaço de fases, com o ciclo limite.

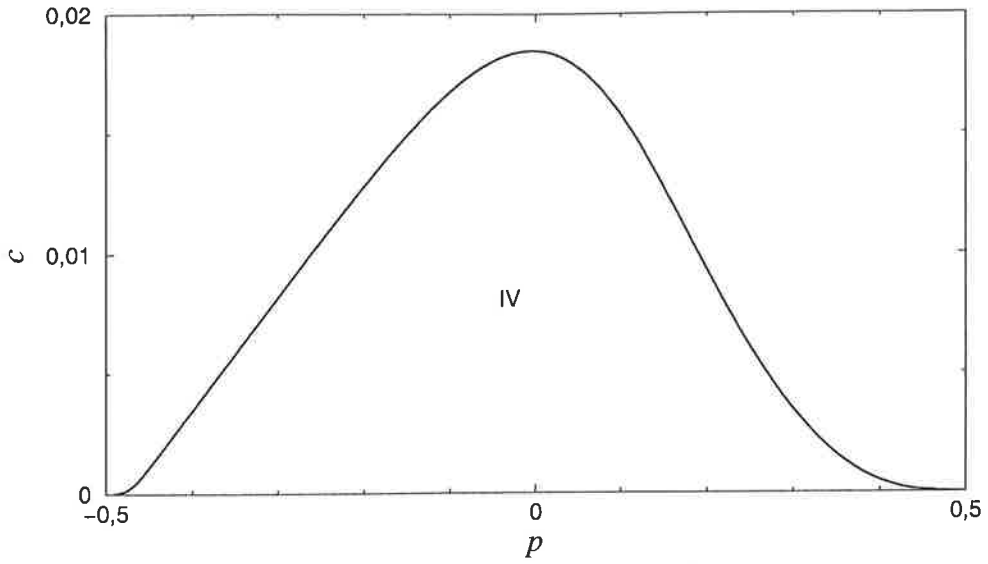


Figura 3.7: Região IV do diagrama de fases ampliada evidenciando a bifurcação de Hopf. Aproximação de campo médio com pares para o *autômato PP*.

Podemos pensar que o estado oscilante é o mecanismo responsável pela manutenção num sistema predador-presa, pois é o indício de um ciclo que se repete continuamente. Por exemplo, um máximo de presas, ou seja a abundância desta espécie, é uma condição que favorece o crescimento de predadores, ao mesmo tempo em que também se observa um decaimento do número de presas. O esvanecimento de presas implica na diminuição do número de predadores, dando condições para o crescimento da população de presas até que se reinicie o ciclo.

Fixando o parâmetro p, verificamos que, em toda a região oscilante, a freqüência das oscilações varia linearmente com o parâmetro c, $\omega \sim c$ (Figura 3.9a). Baixas freqüências estão relacionadas a valores pequenos de c. Isso é coerente com o modelo, uma vez que, quanto menor c, mais lentamente os predadores irão morrer e, como conseqüência, mais *tardiamente* o ciclo irá se completar, fato que se traduz em períodos maiores de oscilação.

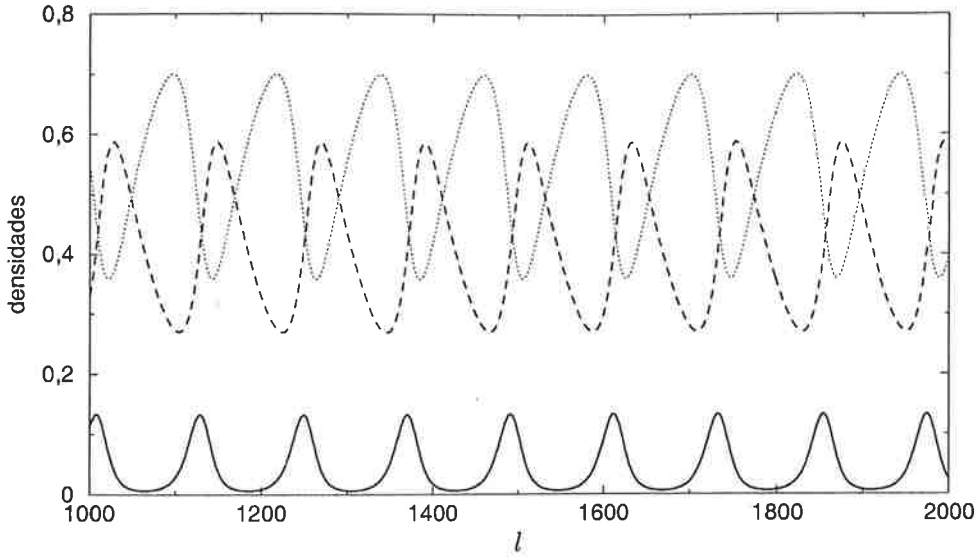
Ao contrário do que ocorre com as freqüências, as maiores amplitudes estão relacionadas aos menores valores de c. Esse comportamento é válido tanto para as densidades de presas como de predadores. É interessante observar que a bifurcação de Hopf ocorre quando $A^2 \to 0$ [31]. A Figura 3.9b exibe o comportamento de $A^2 \times c$, considerando-se a amplitude da densidade de predadores, para a linha $p = 0$. A extrapolação da curva até $A^2 = 0$ está em concordância com os valores obtidos através da análise dos autovalores. A tabela 3.2 mostra alguns resultados obtidos pelos dois métodos.

Tabela 3.2: Alguns dados da bifurcação de Hopf obtidos por $A^2 \to 0$ e pela análise dos autovalores.

p	c ($A^2 \to 0$)	c (*autovalores*)
-0,4	0,0033 (1)	0,00346 (1)
-0,2	0,0130 (1)	0,01284 (1)
0	0,0195 (1)	0,01846 (1)
0,2	0,0095 (1)	0,00932 (1)
0,4	0,0005 (1)	0,00048 (1)

Embora as regras do modelo permitam o estado *absorvente de vazio*, nenhuma dessas aproximações o descrevem. Contudo, a ausência desse estado nessa análise não indica que ele não exista. Uma investigação melhor, uma aproximação de três sítios por exemplo, até poderia vir a exibir essa fase. Porém, isto seria demasiadamente trabalhoso para o nosso propósito, já que o nosso interesse está voltado para a fase oscilante.

a)



b)

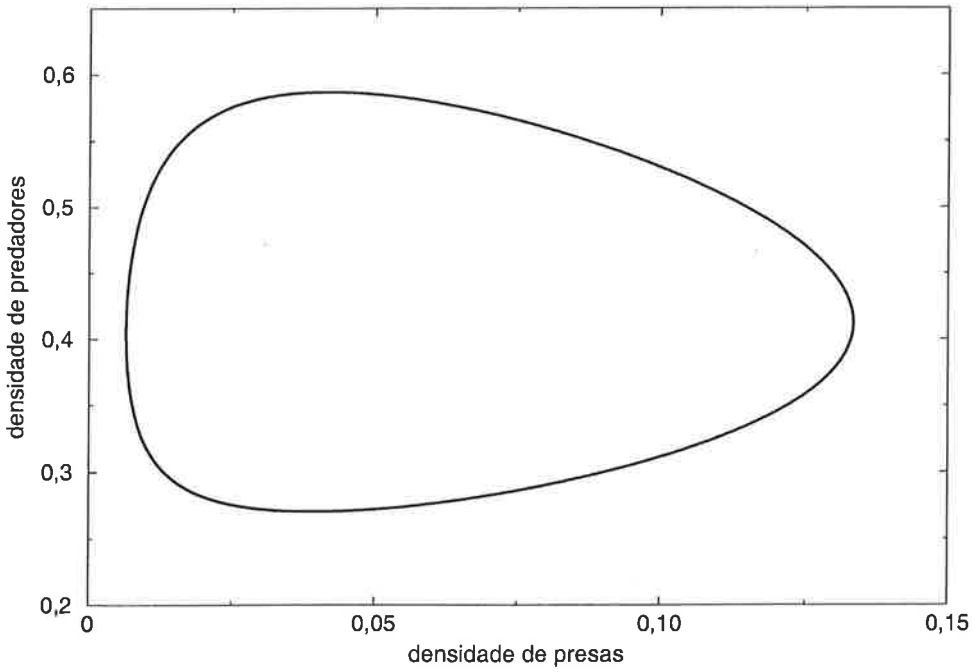
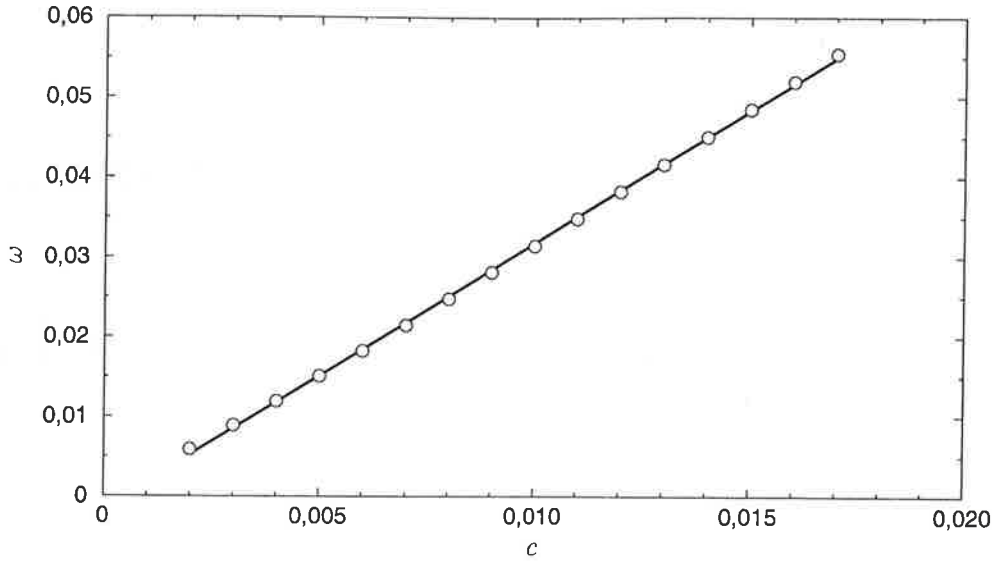


Figura 3.8: Fase ativa oscilante na aproximação de campo médio com pares para o *autômato PP*: a) densidades de *presas* (linha cheia), *predadores* (linha tracejada) e *sítios vazios* (linha pontilhada) versus l para $p = 0$ e $c = 0,016$; b) trajetórias no espaço de fases (*presas* $\times$ *predadores*) para o mesmo conjunto de parâmetros exibindo o ciclo limite.

a)



b)

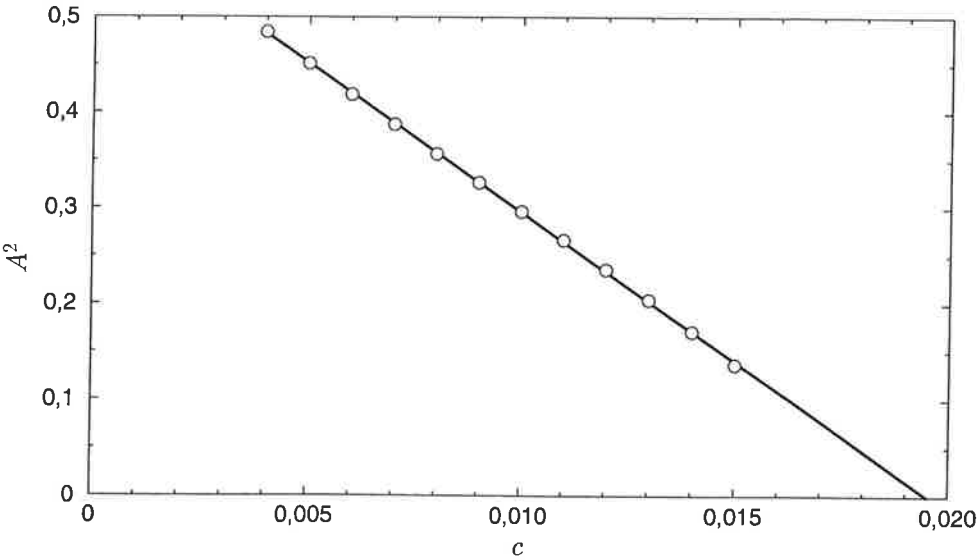


Figura 3.9: *Autômato PP* na aproximação de campo médio de pares. Comportamento da amplitude A e da freqüência ω na fase oscilante para $p = 0$. a) $\omega \times c$; b) $A^2 \times c$ (amplitude referente à densidade de predadores).

Capítulo 4

Simulações de Monte Carlo

Para alcançar o principal objetivo do estudo em questão, precisamos saber se realmente oscilações estão presentes e se persistem no limite termodinâmico.

A solução exata de um sistema complexo via construção de equações de evolução temporal para grandezas relevantes fica comprometida devido ao grande número de variáveis envolvidas, de modo que as aproximações feitas no capítulo anterior são significativas por exibirem o comportamento qualitativo do modelo.

Entre os métodos disponíveis para o estudo desses sistemas estão os métodos numéricos de solução conhecidos como *simulações de Monte Carlo* por estarem associados a eventos probabilísticos [4] [32]. O estudo numérico é justificado por teorias que relacionam comportamento microscópico e termodinâmico e das quais é possível extrair informações sobre a estabilidade e comportamento crítico [33].

A simulação consiste em gerar estados microscópicos do sistema ao longo do tempo compatíveis com as probabilidades p_a, p_b e p_c (probabilidades de criação de presas, predadores e sítios vazios respectivamente) para os *autômatos PP e PP anisotrópico.*

Quanto mais estados gerarmos, maior será a informação sobre o comportamento do sistema. Para isso, basta fornecermos uma configuração inicial, a partir da qual sucessivos estados serão gerados.

Neste trabalho, a informação de que precisamos será obtida através das médias das densidades de presas, predadores, sítios vazios e das variâncias associadas a essas médias. O processo de obtenção dessas grandezas será descrito na seção seguinte. Na seção 4.2 apresentamos nossa análise das oscilações e posteriormente na seção 4.3 algumas considerações sobre o diagrama de fases.

4.1 Algoritmo

Um autômato celular é definido sobre espaço e tempo discretos e é portanto de fácil implementação numérica. O algoritmo é estruturado do seguinte modo:

1. Fixam-se os parâmetros p_a, p_b e p_c (ou equivalentemente p e c) e a dimensão linear da rede L. O número total de sítios na rede será identificado com $N = L^2$ (de modo geral $N = L^d$, onde d é a dimensão da rede);

2. Atribui-se uma configuração inicial ao sistema $\eta = (\eta_1, \ldots \eta_i, \ldots \eta_N)$, onde a variável estocástica $\eta_i = 0, 1, 2$ representa os estados em que o sítio i pode estar. Se $\eta_i = 0$, o sítio está desocupado (sítio vazio), se $\eta_i = 1$ o sítio está ocupado por uma presa e se $\eta_i = 2$ o sítio está ocupado por um predador. A configuração inicial que atribuímos é aleatória, de modo que para cada sítio i da rede foi associado um número sorteado entre os três valores representativos 0, 1 e 2.

3. Para cada sítio i, verificamos η_i. Atualizam-se todos os sítios de maneira síncrona e independente com uma certa probabilidade w_i definida como segue:

- se o sítio estiver vazio ($\eta_i = 0$), contamos o número de sítios vizinhos que estão ocupados por uma presa, grandeza que chamaremos de n_{ai}, então

$$w_i = \frac{1}{4}\, p_a\, n_{ai}; \tag{4.1}$$

- se o sítio estiver ocupado por uma presa ($\eta_i = 1$), contamos o número de sítios vizinhos que estão ocupados por um predador, grandeza que chamaremos de n_{bi}, então

$$w_i = \frac{1}{4}\, p_b\, n_{bi}; \tag{4.2}$$

- se o sítio estiver ocupado por um predador ($\eta_i = 2$), independentemente de quais sejam os vizinhos, a probabilidade de transição será

$$w_i = p_c. \tag{4.3}$$

A medida da probabilidade w_i é dada por um número aleatório ϵ gerado uniformemente no intervalo [0,1). Assim se $w_i > \epsilon$, o estado é alterado, caso contrário, se $w_i \leq \epsilon$, o estado se mantém. Portanto, para o processo descrito acima, a configuração dos novos estados será $\eta' = (\eta'_1, \ldots \eta'_i, \ldots \eta'_N)$, onde para $\eta_i = 0, 1, 2$, η'_i passará a ser, respectivamente, $\eta'_i = 1, 2, 0$ se o sítio i for alterado ou $\eta'_i = 0, 1, 2$ se o sítio i permanecer no mesmo estado.

4. Guarda-se o número de sítios ocupados por presas, n_1, predadores, n_2, e sítios vazios, n_0.

Os itens 3 e 4 são repetidos. Cada atualização completa da rede (item 3) corresponde a um *passo de Monte Carlo* (*PMC*), ou um passo de tempo. Os primeiros passos são descartados, de modo que o item 4 apenas se inicia após o transiente. É necessário descartar o transiente pois as configurações iniciais, sejam elas aleatórias ou não, nunca representam corretamente os padrões espaciais característicos de certo conjunto de parâmetros (p, c), sendo necessário um tempo para o sistema se adequar.

Cabe lembrar como é feita a atualização síncrona. Iniciamos atualizando o sítio 1 e sucessivamente até o sítio N. Como a atualização de cada sítio depende da configuração η, as novas configurações η' serão guardadas para serem usadas na próxima atualização.

No caso do *autômato PP*, os sítios vizinhos são os primeiros sítios localizados ao norte, sul, leste e oeste. Para o *autômato PP anisotrópico*, os sítios vizinhos são os primeiros sítios localizados ao norte e ao leste e o fator $\frac{1}{4}$ que aparece nas probabilidades acima é substituído por $\frac{1}{2}$ nas equações (4.1) e (4.2). Esses fatores correspondem à normalização para o máximo número de primeiros vizinhos que interagem com o sítio central, que podemos encontrar em cada caso, considerando-se uma rede quadrada regular (quatro vizinhos no caso do *autômato PP* e dois vizinhos no caso do *autômato PP anisotrópico*).

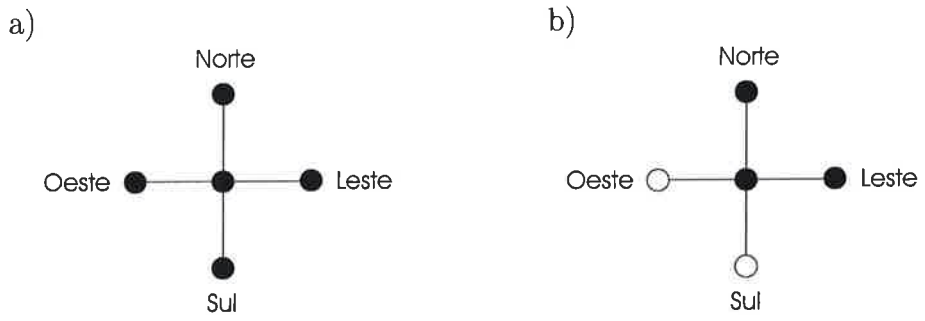


Figura 4.1: Esquema da interação local entre os sítios numa rede quadrada regular para os dois modelos estudados. a) *Autômato PP*. O sítio central interage com os primeiros sítios localizados ao norte, sul, leste e oeste. b) *Autômato PP anisotrópico*. Neste caso a interação ocorre apenas com os primeiros sítios localizados ao norte e ao leste.

Neste esquema de atualizações, ainda é preciso fazer considerações sobre as condições de contorno, pois estamos analisando sistemas finitos. Para que as mesmas regras possam

ser aplicadas aos sítios da periferia da rede, utilizamos em todas as simulações condições de contorno periódicas. Assim, por exemplo, redes unidimensionais são análogas a um anel e redes quadradas a um toro.

Considerando M como o número de passos de Monte Carlo efetivo (isto é, descontado o transiente), calculam-se as grandezas:

- Média das densidades da série temporal

$$\overline{\rho}_k = \frac{1}{M}\sum_{l=1}^{M} \rho_{k_l} \tag{4.4}$$

onde

$$\rho_{k_l} = \frac{n_{k_l}}{N}, \quad k = 0, 1, 2, \tag{4.5}$$

é a densidade da espécie k no l-ésimo passo de Monte Carlo. N representa o número total de sítios da rede e $n_{k_l} = \sum_{i=1}^{N} \delta(k, \eta_i)_l$ é o número de sítios ocupados pela espécie k no passo l;

- Desvio padrão do conjunto de dados

$$\sigma_k = \left[\frac{1}{M}\sum_{l=1}^{M} (\rho_{k_l} - \overline{\rho}_k)^2\right]^{\frac{1}{2}} \tag{4.6}$$

com ρ_{k_l} e $\overline{\rho}_k$ definidos como acima.

Essas grandezas se aproximam do valor médio verdadeiro das densidades de presas, predadores e sítios vazios quando M é muito grande e foram utilizadas para se estudar as oscilações e delimitar as diferentes fases no diagrama de fases dos modelos. Em todas as simulações, descartamos os primeiros 200000 passos e consideramos $M = 2^{21}$ PMC, exceto nas simulações das sub-redes, nas quais consideramos $M = 2^{20}$ PMC.

4.2 Oscilações

O comportamento da média das densidades de sítios vazios, presas e predadores versus c, para $p_a = p_b$ ($p = 0$), pode ser visto na Figura 4.2 para o *autômato PP* e para uma rede 160×160. Os erros são compatíveis com o tamanho dos símbolos. A Figura 4.3 apresenta os resultados para o *autômato PP anisotrópico*.

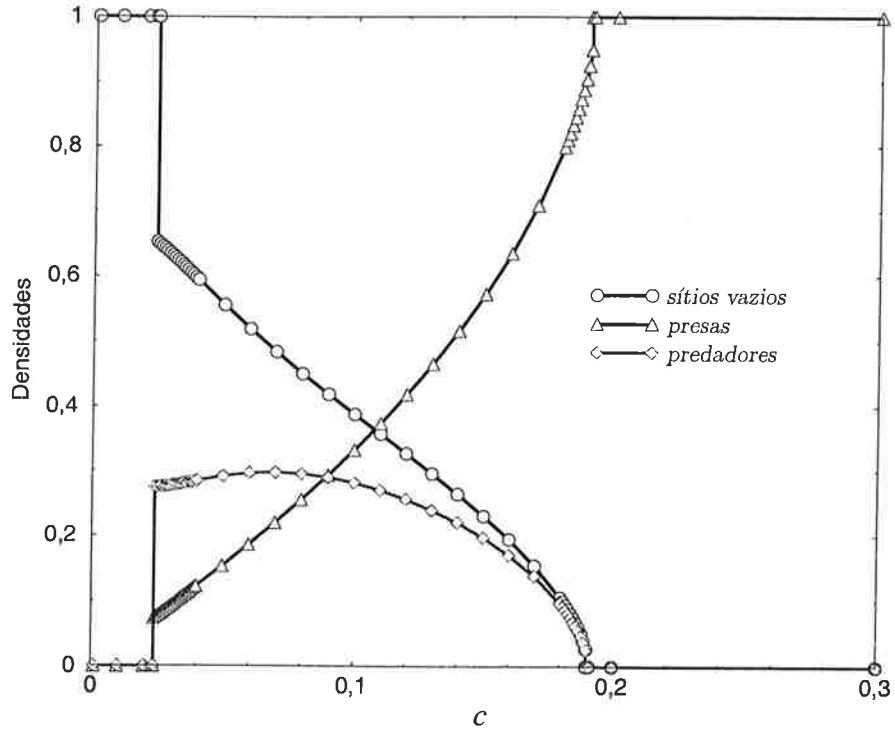


Figura 4.2: Densidades médias de presas $\overline{\rho}_1$, predadores $\overline{\rho}_2$ e sítios vazios $\overline{\rho}_0$ versus c para $p = 0$. Simulações de Monte Carlo do *autômato PP* para uma rede 160×160. Observamos estados *ativos* e dois estados absorventes. Para valores mais baixos de c o sistema evolui para estados *absorventes de sítios vazios* e para valores mais altos o sistema evolui para estados *absorventes de presas*.

O sistema pode evoluir, de acordo com os parâmetros, para estados absorventes e estados

INSTITUTO DE FÍSICA
Serviço de Biblioteca e Informação
Tombo: 4227 ex. 2

ativos. Para maiores valores de c, observamos que os *autômatos* evoluem para um estado *absorvente de presas*. Em especial, o *autômato PP* evolui para um estado *absorvente de sítios vazios* na região dos menores valores de c. Veremos a análise dos estados absorventes e as transições para esses na seção 4.3. Focalizamos aqui a atenção nos estados ativos.

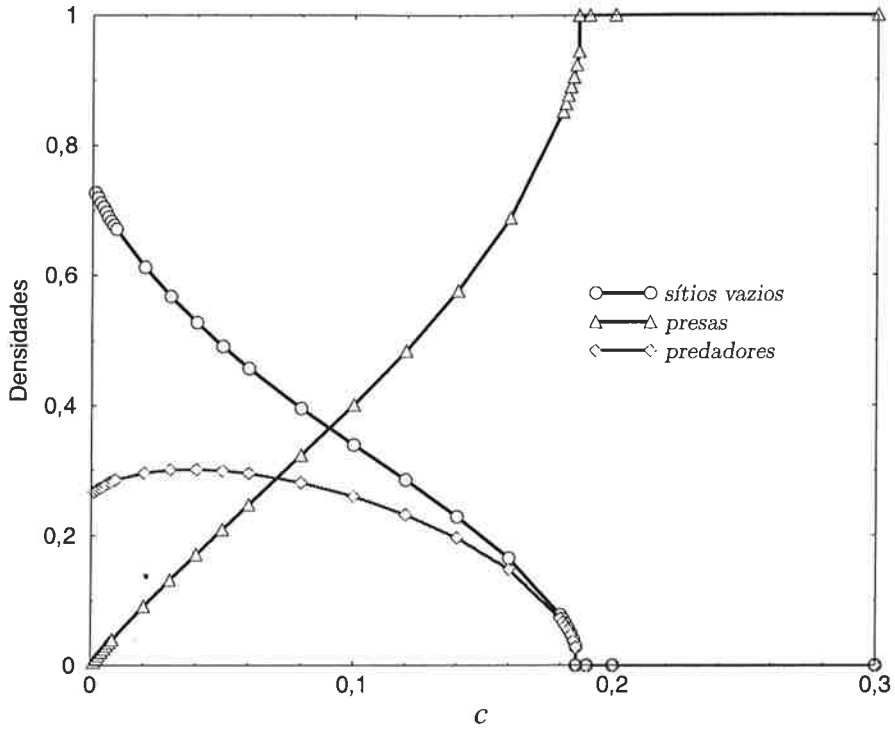


Figura 4.3: Densidades médias de presas $\overline{\rho}_1$, predadores $\overline{\rho}_2$ e sítios vazios $\overline{\rho}_0$ versus c para $p = 0$. Simulações de Monte Carlo do *autômato PP anisotrópico* para uma rede 160×160. Neste caso observamos que, além de estados *ativos*, o sistema evolui para estados *absorventes de presas*.

Na região ativa, $0 < \rho_k < 1$, $k = 0, 1, 2$, observou-se que os estados ativos têm dois comportamentos distintos. As Figuras 4.4 e 4.5 exibem as possíveis evoluções das densidades de presas, predadores e sítios vazios no tempo para uma rede 160×160. Para valores pequenos de c as séries temporais para as densidades apontam (ver Figura 4.4) um comportamento oscilatório. Para maiores valores de c, ainda na região ativa, observa-

se a partir da Figura 4.5 um estado *não-oscilante*, sendo a flutuação observada na série temporal apenas de caráter estocástico. Para redes menores as amplitudes de um estado *oscilante* são maiores comparativamente à redes maiores e é quando esse estado se torna mais evidente. Para redes maiores, a dificuldade em distinguir os comportamentos aumenta, uma vez que as amplitudes vão se tornando da ordem das flutuações estocásticas (este fato pode ser observado nas Figuras 4.6a e 4.7a, que apresentam as densidades de presas em função do tempo para os mesmos parâmetros das Figuras 4.4 e 4.5 e estão na mesma escala). Devido a isso, é necessário um método sistemático de estudo dos estados *oscilantes*: como caracterizá-los (distingui-los dos demais estados) e como verificar se são estáveis no limite em que o tamanho da rede $L \to \infty$. Basicamente, uma oscilação é caracterizada por sua amplitude e freqüência, de modo que precisamos obtê-los por algum método. É o que veremos a seguir.

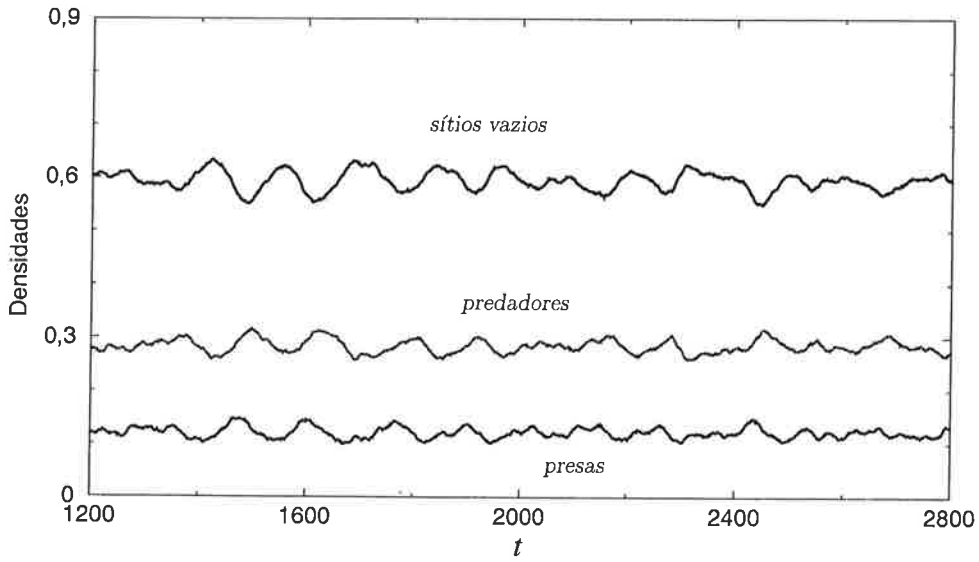


Figura 4.4: Densidades de presas, predadores e sítios vazios como função do tempo (*PMC*) em uma região *oscilante* do diagrama de fases ($p = 0$ e $c = 0,04$). Simulações de Monte Carlo do *autômato PP* para uma rede 160×160.

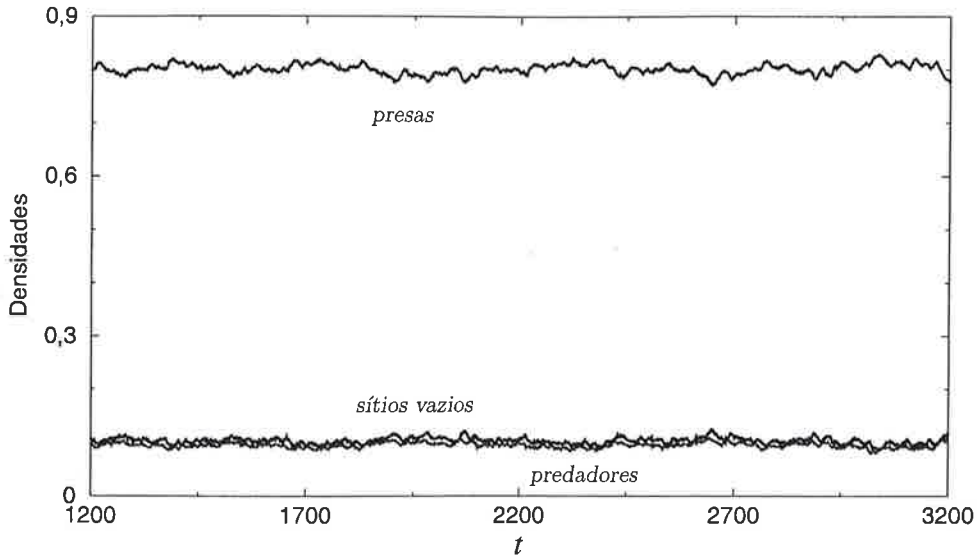


Figura 4.5: Densidades de presas, predadores e sítios vazios como função do tempo (*PMC*) em uma região *não-oscilante* do diagrama de fases ($p = 0$ e $c = 0,18$). Simulações de Monte Carlo do *autômato PP* para uma rede 160×160.

4.2.1 Amplitude

Desconsiderando inicialmente flutuações estocásticas, uma oscilação pode ser descrita por

$$\rho = \overline{\rho} + A\cos(\omega t + \phi) \tag{4.7}$$

onde ρ representa a densidade em função do tempo, $\overline{\rho}$ é seu valor médio, A é a amplitude da oscilação e $\omega = 2\pi/T$ é a freqüência.

Para relacionar (4.7) com uma grandeza relevante e mensurável, vamos considerar a média do quadrado da diferença $(\rho - \overline{\rho})$

$$< (\rho - \overline{\rho})^2 >_M = A^2 < \cos^2(\omega t + \phi) >_M . \tag{4.8}$$

O lado esquerdo dessa relação representa a variância da série temporal em M passos de

Monte Carlo. Dessa forma podemos escrever

$$\sigma \sim A\,, \tag{4.9}$$

ou seja, a amplitude da oscilação é proporcional ao desvio padrão da série temporal e portanto estudando-se o comportamento de σ teremos informações sobre o comportamento da amplitude.

Analogamente à análise de campo médio, a transição de uma região *oscilante* para uma região *não-oscilante* ocorre quando A^2 se anula [31]. Como estamos utilizando σ como uma medida de A, então devemos esperar que σ^2 se anule. Assim a primeira tentativa foi verificar o comportamento dessa grandeza para diferentes valores de c. Esse método se mostrou inadequado para a obtenção da transição *ativo oscilante – ativo não-oscilante* pois, como σ é sensível às flutuações estocásticas, e estas são tão maiores quanto mais próximas às transições para os estados absorventes, observamos uma não-linearidade no comportamento de σ^2.

Esse procedimento para o cálculo da amplitude será utilizado na determinação da estabilidade das oscilações (subseção 4.2.3).

4.2.2 Freqüência

A ocorrência de uma oscilação implica na existência de uma freqüência característica, que pode ser observada no espectro de potências da série temporal,

$$P(\omega_k) = \frac{1}{M}\left|\sum_{l=0}^{M-1} x_l e^{i\frac{2\pi}{M}kl}\right|^2 , \quad k = 0, ..., M-1, \tag{4.10}$$

onde x_l representa as densidades no passo l de uma série temporal específica. $P(\omega_k)$ é obtido a partir da transformada de Fourier discreta.

Os espectros de potências característicos de uma região *oscilante* e de uma região *não-oscilante* podem ser observados nas Figuras 4.6 e 4.7, assim como os respectivos comportamentos das densidades de presas como função do tempo [34]. Para séries temporais associadas a predadores e a sítios vazios, o espectro de potências tem comportamento similar ao de presas, apenas apresentando uma diferença na altura do pico, o que está relacionado com a amplitude da oscilação da série temporal específica.

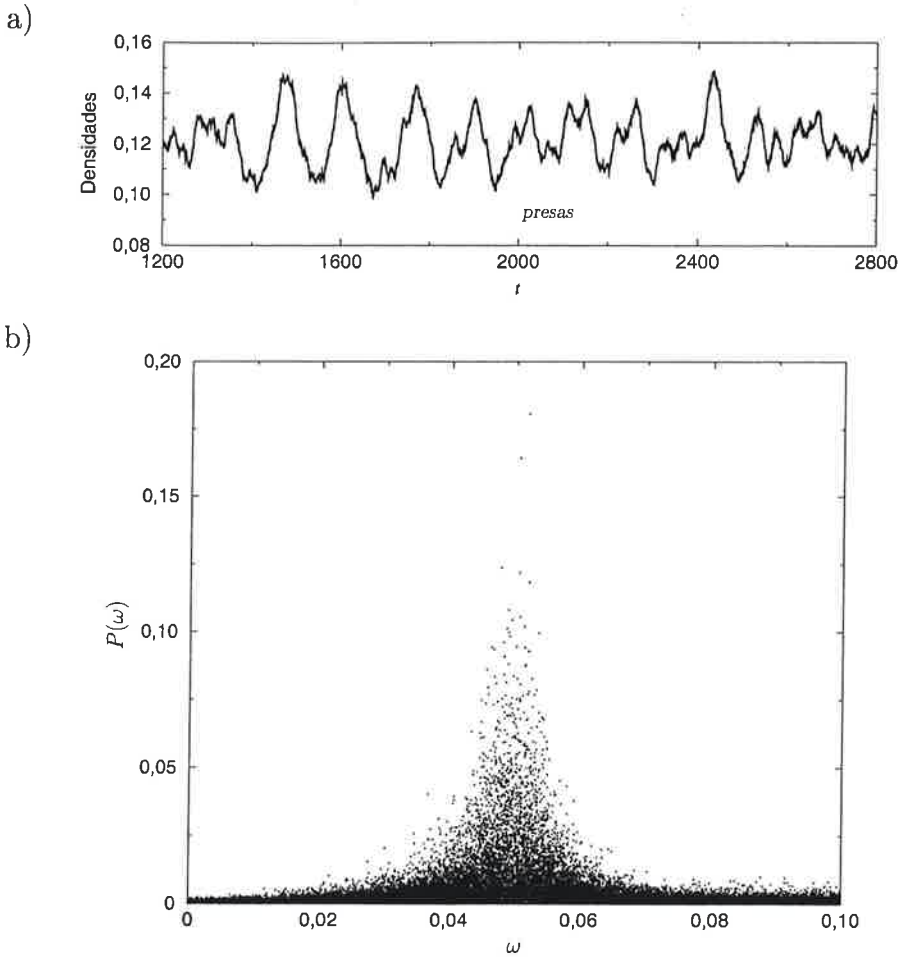


Figura 4.6: a) Um trecho da Figura 4.4 enfatizando a série temporal relativa à densidade de presas. b) Espectro de potências da mesma série temporal.

Embora não possamos relacionar diretamente o espectro de potências com a ampli-

tude, amplitudes maiores estão associadas a picos maiores. É exatamente a presença de um pico no espectro de potências que distingue uma série temporal de comportamento periódico de outra de comportamento não-periódico. Flutuações na série temporal apenas de caráter estocástico se caracterizam por um decaimento contínuo de $P(\omega_k)$ à medida em que a freqüência aumenta. Flutuações associadas a um comportamento periódico na série temporal produzem um pico, que se sobressai às flutuações estocásticas, nas freqüências características do movimento. Essa análise foi utilizada para a confirmação de um estado *oscilante*, distinguindo-o de um estado *não-oscilante*.

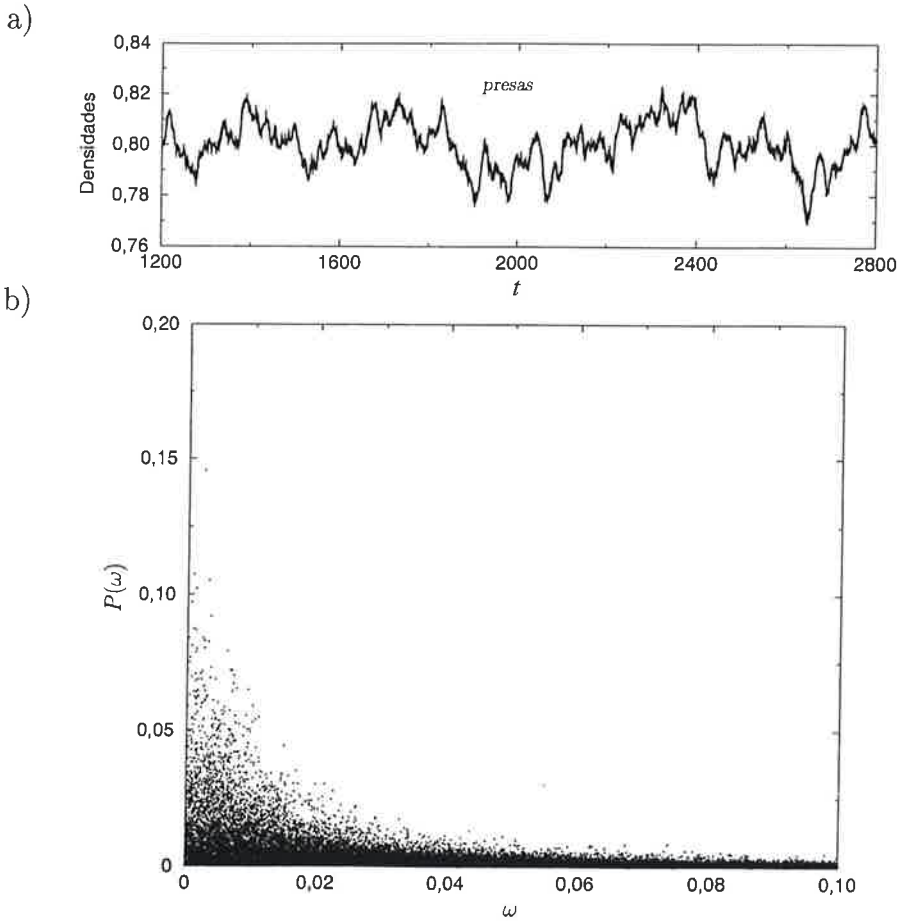


Figura 4.7: Série temporal da densidade de presas (a) relativa à Figura 4.5 e respectivo espectro de potências (b).

4.2.3 Estabilidade

A análise espectral de uma série temporal distingue uma região *oscilante* de uma região *não-oscilante* para um espaço físico fixo, ou seja, para uma rede de dimensão linear L. Porém, para uma região *oscilante*, é preciso verificar o comportamento da amplitude com o aumento de L, ou a estabilidade dessas oscilações no limite termodinâmico. Interpretando o erro σ_L, como uma medida da amplitude de uma rede de dimensão linear L, esperamos verificar o comportamento

$$\sigma_L \sim L^{\alpha} \tag{4.11}$$

onde estamos considerando α como constante. Através da relação acima, é possível obter α (Apêndice C).

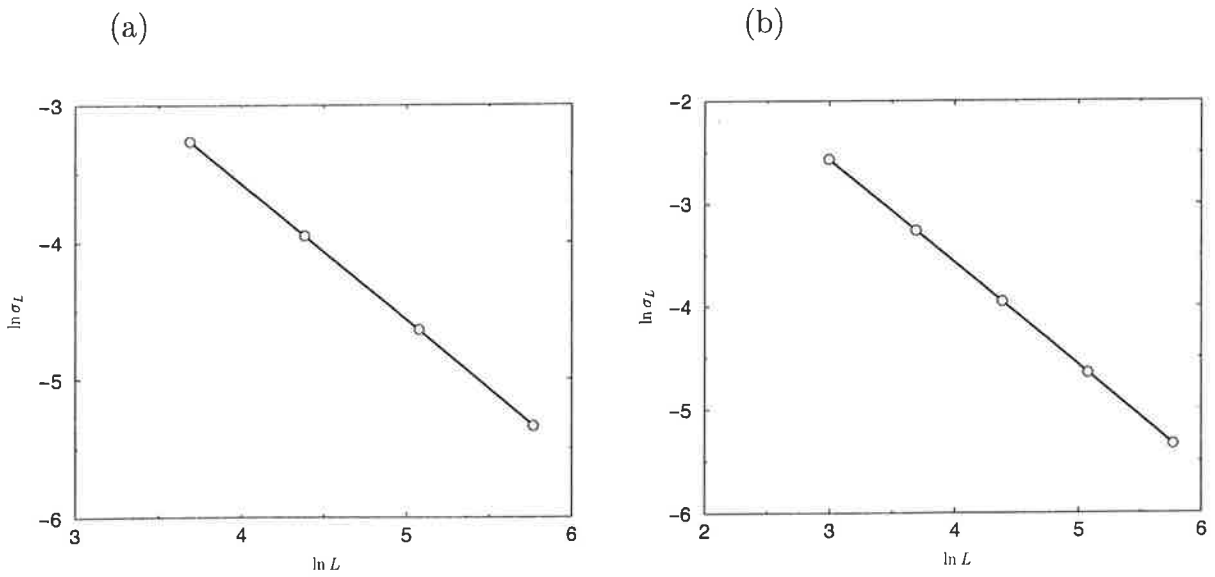


Figura 4.8: Comportamento da amplitude σ_L em função da dimensão linear L da rede na região *oscilante* para $d = 2$. Simulações de Monte Carlo com parâmetros $p = 0$ e $c = 0,08$: a) *autômato PP* e b) *autômato PP anisotrópico*. Em ambos os casos, os dados correspondem à série temporal de presas.

A Figura 4.8 exibe o gráfico $\ln \sigma_L \times \ln L$ para cada um dos autômatos considerando-se a série temporal de presas.

Em todos os dados (Apêndice C) obtivemos $\alpha \approx -d/2$, o que nos leva a concluir que o comportamento da amplitude é da forma

$$\sigma_L \sim \frac{1}{L^{d/2}} . \tag{4.12}$$

Isso nos mostra que os erros (amplitudes) são inversamente proporcionais à raiz quadrada do número de sítios da rede N, isto é, decaem com o aumento do sistema, o que torna as oscilações instáveis e, portanto, no limite termodinâmico tendem a desaparecer.

4.2.4 Sub-redes

Para observarmos o que ocorre com as oscilações das densidades de presas e predadores localmente, vamos subdividir uma rede em várias sub-redes e verificar o comportamento de uma sub-rede em relação a outra sub-rede de mesma dimensão linear [35] [36]. Com esse objetivo realizamos simulações, para os dois autômatos estudados, de uma rede de dimensão linear $L = 320$ com condições periódicas de contorno. Simultaneamente, guardamos as densidades de presas e predadores pertencentes às sub-redes com $L = 160,\ 80,\ 40$. As regiões estudadas podem ser observadas na Figura 4.9. O conjunto A refere-se às quatro sub-redes com $L = 160$ que compõem a rede $L = 320$, as quais rotulamos $A - i$, $A - ii$, $A - iii$ e $A - iv$. A sub-rede $A - i$ foi dividida em sub-redes com $L = 80$, que formam o conjunto B, $B - i$, $B - ii$, $B - iii$ e $B - iv$, e novamente a sub-rede $B - i$ foi dividida em quatro sub-redes com $L = 40$, que formam o conjunto C, $C - i$, $C - ii$, $C - iii$ e $C - iv$.

O transiente dessas simulações não foi excluído de uma análise, como veremos a seguir.

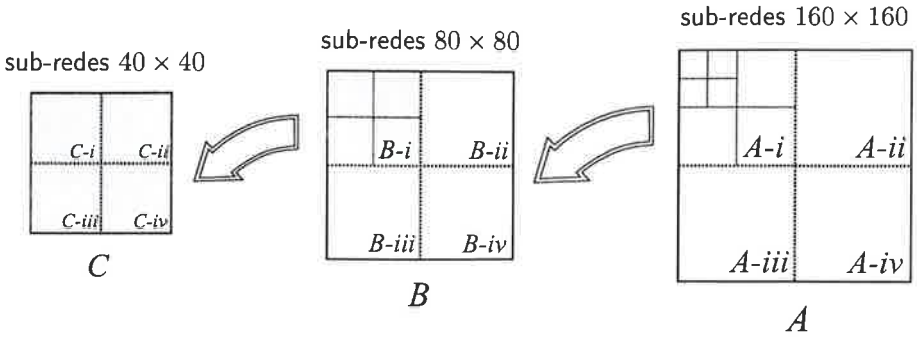


Figura 4.9: Sub-redes estudadas: O conjunto A refere-se às quatro sub-redes 160×160 ($A - i$, $A - ii$, $A - iii$ e $A - iv$) que compõem a rede 320×320. A sub-rede $A - i$ foi dividida em outras quatro sub-redes 80×80 ($B - i$, $B - ii$, $B - iii$ e $B - iv$) que formam o conjunto B. O conjunto C se refere às quatro sub-redes 40×40 ($C - i$, $C - ii$, $C - iii$ e $C - iv$) que compõem $B - i$.

O estudo de sub-redes foi feito para alguns parâmetros (p, c) pertencentes à região *oscilante* para cada um dos modelos.

Cada conjunto de sub-redes estudado apresenta o mesmo padrão de oscilação, ou seja, as densidades de presas, predadores ou sítios vazios de sub-redes de mesma dimensão linear evoluem no tempo com a mesma faixa de freqüências e amplitudes. É possível ver esse resultado através do espectro de potências das sub-redes. Na Figura 4.10 é apresentado o espectro de potências das sub-redes 80×80 (conjunto B) para as densidades de predadores do *autômato PP* referentes aos parâmetros $p = 0$ e $c = 0,05$. Todas as quatro sub-redes ($B - i$, $B - ii$, $B - iii$ e $B - iv$) apresentam distribuição de freqüências e altura dos picos semelhantes para séries temporais de predadores. Este comportamento se repete na análise de presas e sítios vazios. Os outros conjuntos de sub-redes, A e C, apresentam as mesmas características descritas acima. Essas freqüências e amplitudes características de uma sub-rede, $L = 160$ por exemplo, são compatíveis com as obtidas por uma simulação independente de uma rede de mesma dimensão linear. Na Figura 4.11 é apresentado o espectro de potências da densidade de presas de uma sub-rede 40×40

$(C-i)$, correspondente ao *autômato PP anisotrópico* com parâmetros $p = 0$ e $c = 0,05$, e de uma simulação independente de uma rede de dimensão linear $L = 40$, com os mesmos parâmetros.

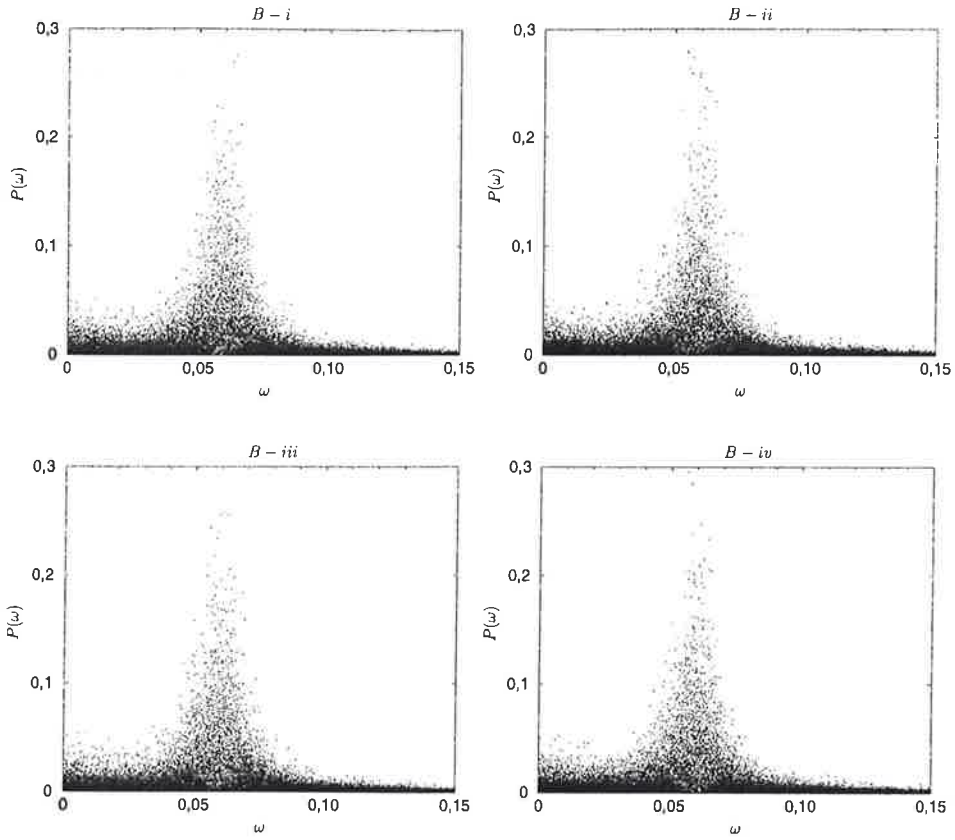


Figura 4.10: Espectro de potências de sub-redes 80×80 pertencentes ao conjunto B. Dados referentes à série temporal de predadores para os parâmetros $p = 0$ e $c = 0,05$ e *autômato PP*. A mesma análise para as densidades de presas e sítios vazios produz resultados semelhantes.

Analisamos o início do transiente e verificamos que a oscilação de todas as sub-redes inicia-se em fase para logo em seguida tornar-se totalmente fora de fase. As Figuras 4.12 (*autômato PP*) e 4.13 (*autômato PP anisotrópico*) exibem a evolução temporal das densi-

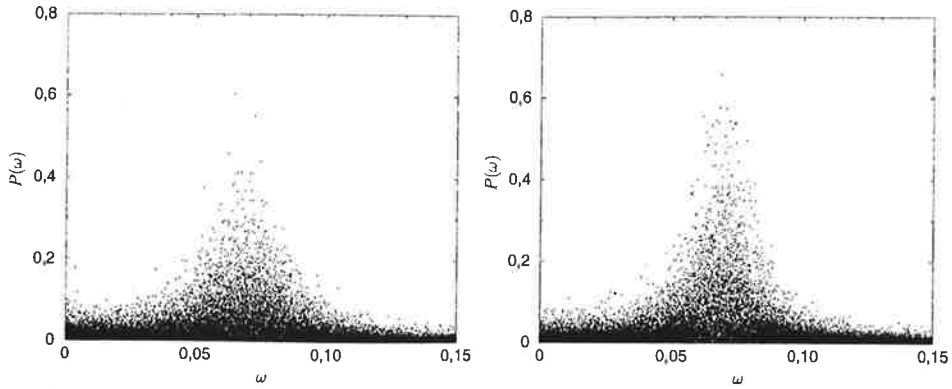


Figura 4.11: Espectro de potências de uma (a) sub-rede 40×40 e de uma (b) simulação independente de uma rede com $L = 40$. Análise referente às densidades de presas do *autômato PP anisotrópico* para os parâmetros $p = 0$ e $c = 0,05$.

dades de presas, no início da simulação, para a rede 320×320 e algumas de suas sub-redes ($A - i$ e $B - i$). Este fato está relacionado às condições iniciais que utilizamos. O sistema começa a evoluir com uma distribuição homogênea de estados, portanto as mesmas condições estão presentes em todos os subsistemas. À medida em que o sistema se organiza para gerar padrões específicos aos parâmetros utilizados, não observamos mais uma homogeneidade na distribuição espacial das espécies.

A falta de sincronização indica que as concentrações máximas (ou mínimas) de presas (ou predadores) ocorrem em regiões diferentes do espaço para tempos diferentes. Deste modo, o número de presas (ou predadores) aumenta se considerarmos sistemas maiores, mas não na mesma proporção do aumento do número de sítios da rede. Estamos supondo que, se a oscilação fosse sincronizada, teríamos as mesmas densidades, em um dado instante de tempo, para todas as sub-redes. Certamente, a não-coerência na oscilação do conjunto de sub-redes é responsável pela diminuição da oscilação das densidades das populações da rede.

Para um exemplo, vamos considerar dois instantes distintos de uma simulação do

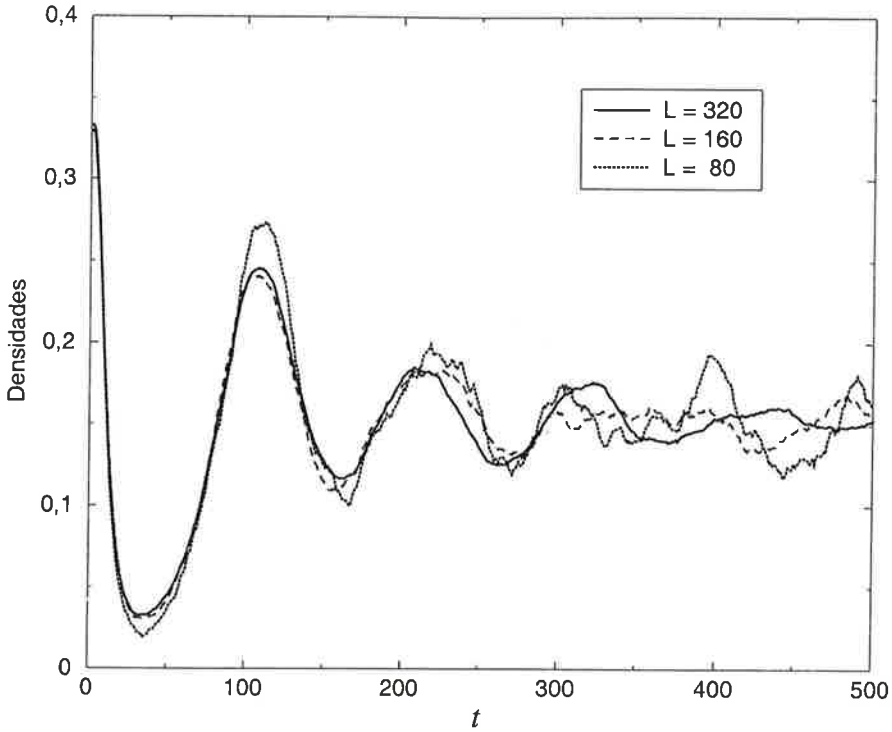


Figura 4.12: Início da simulação mostrando a evolução das densidades de presas da rede e de algumas sub-redes para o *autômato PP*. Nos primeiros passos a oscilação está em fase. À medida em que os padrões espaciais se auto-organizam, as oscilações se tornam defasadas.

autômato PP para $p = 0,2$ e $c = 0,1$. Observe a Figura 4.14, onde estão representadas as evoluções temporais das densidades de presas de duas sub-redes 80×80 ($B - ii$ e $B - iii$) e as fotografias da rede 160×160 dividida em quadrantes em dois instantes. As presas estão representadas em azul e os predadores em vermelho. Em t_1, o máximo de presas ocorre em $B - iii$ e em t_2, o máximo ocorre em $B - ii$. Para o *autômato PP anisotrópico* um exemplo é apresentado na Figura 4.15, com parâmetros $p = -0,1$ e $c = 0,04$. Neste caso, a evolução das densidades se refere aos predadores e mais uma vez os máximos das sub-redes ocorrem em instantes diferentes. Em t_1 o máximo de predadores se dá em $B - iv$ enquanto que em t_2 o máximo ocorre em $B - i$.

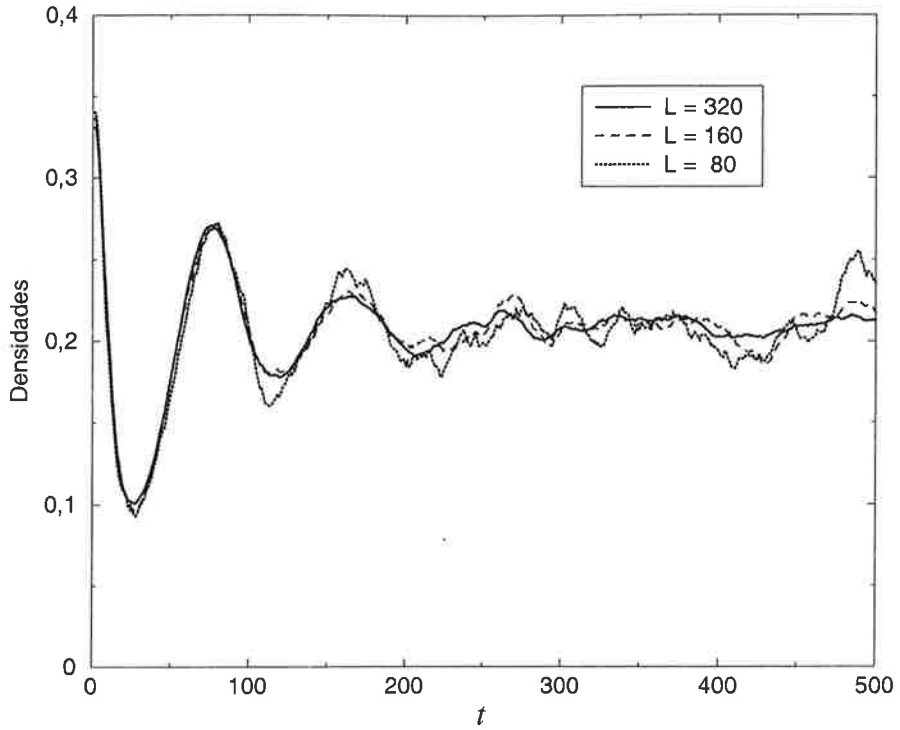


Figura 4.13: Início da simulação mostrando a evolução das densidades de presas da rede e suas sub-redes para o *autômato PP anisotrópico*. Como no caso isotrópico, a distribuição homogênea de estados pelo sistema produz oscilações coerentes apenas nos primeiros passos. Os padrões espaciais atingidos na seqüência levam os subsistemas a oscilarem com fases diferentes.

4.3 Diagrama de fases

Na seção anterior, citamos a presença de quatro fases nos modelos estudados: as fases absorvente de sítios vazios e absorvente de presas (Figuras 4.2 e 4.3) e as fases *ativa oscilante* e *ativa não-oscilante* (Figuras 4.4 e 4.5). A existência de um pico no espectro de potências nos estados *oscilantes* foi a referência para determinar a transição *ativo oscilante – ativo não-oscilante*. E, embora tenhamos verificado que não há oscilações no limite termodinâmico, elas ocorrem em nível local e portanto são evidentes para redes

finitas. E as amplitudes das oscilações são tão maiores quanto menor a dimensão linear L da rede, quando as analisamos para parâmetros (p, c) fixos.

Para as transições *ativo – absorvente de sítios vazios* e *ativo – absorvente de presas* observamos que, como as flutuações diminuem com o aumento de L, elas são tão melhor determinadas quanto maior for a dimensão linear L. Para entender isso, vamos fazer algumas considerações. Há duas formas de atingir o estado absorvente. Uma delas é a densidade de presas se anular, caso em que o sistema evoluirá para o estado absorvente de vazio, e a outra é a densidade de predadores se anular, caso em que o sistema evoluirá para o estado absorvente de presas. Portanto a evolução para qualquer um desses estados está condicionada à baixa densidade dessas duas espécies, associadas às flutuações estocásticas à que estão sujeitas. Assim, para L menor, a flutuação é maior e, portanto, a simulação é mais suscetível a evoluir para o estado absorvente nesses limites de baixas densidades. À medida em que L aumenta, as flutuações diminuem, o que permite obter mais pontos de estados ativos perto da transição, sem que o sistema evolua para o estado absorvente.

A utilização de redes pequenas compromete muito a construção do diagrama de fases, principalmente na região de uma possível transição para o estado *absorvente de vazio* no caso do *autômato PP*. De fato, a presença da oscilação nessa região, de amplitude tão maior quanto menor for c, antecipa o estado absorvente. Assim, para a construção do diagrama de fases, inicialmente consideramos uma rede 160×160. Não analisamos o comportamento crítico dessas transições, pois não era o principal objetivo do presente estudo. Para delimitarmos as fases, na primeira tentativa fizemos uso dos seguintes critérios:

1. Fixando-se p e aumentando os valores de c, o comportamento dos estados ativos passa de oscilante para não-oscilante. Consideramos como o ponto de transição entre esses estados o máximo valor de c em que ainda fosse possível observar um pico no espectro de potências. Investigamos as séries temporais a intervalos de $0,01$ em c.

2. Para determinar os limites da fase ativa nas imediações dos estados absorventes, realizamos um conjunto de dez pequenas simulações de 50000 *PMC*. Se mais da metade sobreviver então consideramos o estado como ativo ($0 < \rho < 1$), caso contrário o estado é absorvente. Para p fixo, variamos c na fração de milésimos.

As Figuras 4.2 e 4.3 foram obtidas utilizando-se esses critérios. Ambos os casos se referem a $p = 0$. A partir delas observamos que apenas o *autômato PP* pode evoluir para estados absorventes de vazio (atingidos para $c = 0,024$). Essa é a primeira diferença observada nos resultados entre os modelos. Em princípio, o critério utilizado não nos permite afirmar com certeza se o *autômato PP anisotrópico* realmente não evolui para o estado *absorvente de vazio* à medida em que c decresce. Muito próximo dos eixos $p_a = p_b = p_c = 0$ os transientes são muito maiores e esse critério não se aplica. Por outro lado, também não podemos afirmar que o *autômato PP* apresenta esse estado. Especificamente para $p = 0$, à medida em que nos aproximamos de $c = 0$, as amplitudes das oscilações aumentam no caso do *autômato PP* e diminuem no *autômato PP anisotrópico*. A baixa densidade de presas dessa região, aliada às oscilações cada vez maiores do modelo isotrópico, pode provocar a extinção das presas e fazer com que o sistema evolua para o estado absorvente de vazio.

Nas proximidades do eixo $p_a = 0$, esse critério também não permite delimitar corretamente as fases. Essa é uma região em que o número de predadores no sistema é muito pequeno, fato que aliado às flutuações estocásticas pode levar à extinção dessa espécie, conduzindo o sistema ao estado absorvente de presas antecipadamente. Em geral, a porção esquerda do diagrama de fases ($p < 0$) é "bem comportada", em ambos os modelos. Para $p > 0$, o *autômato PP* possui uma região na qual não é possível identificar a fase por esse critério. Nela temos baixas densidades de presas e predadores que somadas às oscilações/flutuações, o sistema evolui ora para o estado absorvente de vazio ora para o absorvente de presa.

Devido a essas dificuldades na determinação das fases, refizemos as simulações, porém com uma modificação. Não permitimos a extinção de predadores ou presas no sistema. Para implementarmos, seguimos os mesmos passos descritos na seção 4.1, porém se o número de presas for a *zero* criamos uma presa aleatoriamente em um dos sítios vazios e se o número de predadores for a *zero*, criamos um predador em um sítio, também escolhido aleatoriamente, entre os ocupados por uma presa. Utilizando-se esse critério, nunca atingimos os estados absorventes, porém ele nos permite estimar com boa precisão a curva de transição. Na verdade, esse é um recurso muito útil para que possamos superar o transiente sem atingir o estado absorvente. É no transiente, e principalmente nos primeiros passos da simulação, que se atinge as maiores amplitudes/flutuações, e o uso desse critério evita a evolução antecipada para o estado absorvente e permite que o padrão de evolução temporal se estabilize. Com isso, eliminamos todas as regiões em que haviam ambigüidade de fases, e também conseguimos analisar mais detalhadamente regiões de baixas densidades de presas e predadores.

A Figura 4.16 apresenta o comportamento das densidades médias de presas, predadores e sítios vazios para os dois modelos e $p = 0$. Pelo novo critério, o *autômato PP* não evolui mais para o estado absorvente de vazio. Porém, alguns estados atingidos para $c < 0,01$ não são absolutamente confiáveis. No caso do *autômato PP anisotrópico*, não há diferenças em relação ao resultado obtido pelo primeiro critério.

Para determinarmos o ponto de mudança de fase, utilizamos o fato de que os expoentes críticos associados à transição para estados absorventes pertencem à classe de universalidade da percolação direcionada em $d+1$ dimensões [37]. Na criticalidade, perto da transição para o estado absorvente de presas, o expoente crítico β se relaciona com as densidades como

$$\rho \sim (c_c - c)^{\beta} \, . \tag{4.13}$$

No caso $d = 2$, temos $\beta \cong 0,58$ [2] [4]. Como fixamos p, estaremos sempre determinando o ponto crítico referente ao parâmetro c. A Figura 4.17 mostra como se comportam as curvas de densidades perto da transição para o *autômato PP anisotrópico* e $p = 0,1$. Para essa análise é importante obtermos pontos bem próximos à transição. Próximo à transição, as densidades de presas, predadores e sítios vazios obedecem à relação (4.13) e colapsam em c_c, o ponto crítico.

O diagrama de fases do *autômato PP*, utilizando-se o último critério, é apresentado na Figura 4.18. Para o *autômato PP anisotrópico* o diagrama de fases é apresentado na Figura 4.19. Nelas exibimos a fase *absorvente de presas* (A) e as fases *ativa oscilante* (O) e *ativa não-oscilante* (NO). A maior parte dos pontos foram obtidos com redes 160×160 mas próximo ao eixo $p_a = 0$ foi necessário o uso de redes 320×320 para determinarmos a transição para o estado absorvente (Apêndice D). A linha que separa a fase *oscilante* da *não-oscilante* foi determinada utilizando-se o critério 1 descrito anteriormente. Embora a fase oscilante desapareça em redes infinitas, num sistema finito ela sempre está presente.

Para $p < 0$, quase não há diferença entre os modelos. Nesses casos, a anisotropia não promove nenhum padrão espacial especial, em relação ao caso isotrópico. Nessa região, para c baixo, encontramos as maiores densidades de predadores (ver Figura 4.15), que ficam em pequenos grupos bem distribuídos pela rede, de modo que as presas ficam sempre cercadas. Aqui temos $p_a > p_b$, ou seja, a probabilidade de nascimento de presas é maior que a probabilidade de morte, de modo que a perda de presas é recuperada rapidamente, e conseqüentemente as amplitudes são baixas. Quanto maior a diferença $(p_a - p_b)$, o estado absorvente de presas é atingido para valores de p_c menores.

Alguns parâmetros produzem padrões espaciais bem interessantes [38]. No *autômato PP*, para $p > 0,2$ e c pequeno, observamos alguns comportamentos similares ao da Figura 4.20. Esta se refere aos parâmetros $p = 0,3$ e $c = 0,06$. Nesta região, $p_b > p_a$,

os predadores têm crescimento mais rápido do que as presas, ou seja, a morte de presas ocorre mais rapidamente que sua reprodução o que logo conduz o sistema à uma baixa densidade de presas. Na ausência de presas, os predadores também não se reproduzem e mesmo sujeitos à uma probabilidade de morte relativamente baixa, sua densidade evolui para baixos valores. Isso permite que grupos de presas isolados cresçam formando alguns aglomerados grandes até que atinjam os predadores remanescentes no sistema, que rapidamente se reproduzem dizimando as presas. Este é um mecanismo no qual observamos as maiores oscilações. Como as densidades das espécies também são baixas, essa é a região onde o sistema é mais suscetível de evoluir para o estado absorvente de vazio. Sendo a densidade de predadores baixa, então em redes pequenas (L baixo) eventualmente pode ocorrer, em primeiro lugar, a extinção dos predadores. Isto acarreta na evolução do sistema para o estado absorvente de presas. Porém, para L suficientemente grande, aliado ao fato de que c é relativamente pequeno, há tempo para que um aglomerado de presas cresça até atingir um predador e a dinâmica sobreviva.

No *autômato PP anisotrópico*, para $p > 0$ e à medida em que c se aproxima de *zero*, há a formação de "paredes" de predadores, impedindo que as presas se reproduzam livremente. Isto é, aglomerados horizontais e verticais de predadores na forma de camadas que, devido à dinâmica do modelo e aos parâmetros, impedem a reprodução e conseqüente passagem das presas. Um exemplo para $p = 0,3$ e $c = 0,02$ está na Figura 4.21.

Estes padrões se tornam evidentes para toda a extensão $p > 0$ e parecem ser os responsáveis pelo sistema não evoluir para o estado absorvente de vazio, em comparação com o modelo isotrópico. A combinação de finas camadas de presas e predadores intercaladas com regiões mais extensas de sítios vazios não permite aos predadores e às presas se reproduzirem livremente. A associação de baixas densidades de presas e predadores com a anisotropia considerada, impede grandes flutuações e/ou oscilações nessa região. Basicamente, a oscilação observada nesses casos é devida ao escape de presas, ou seja,

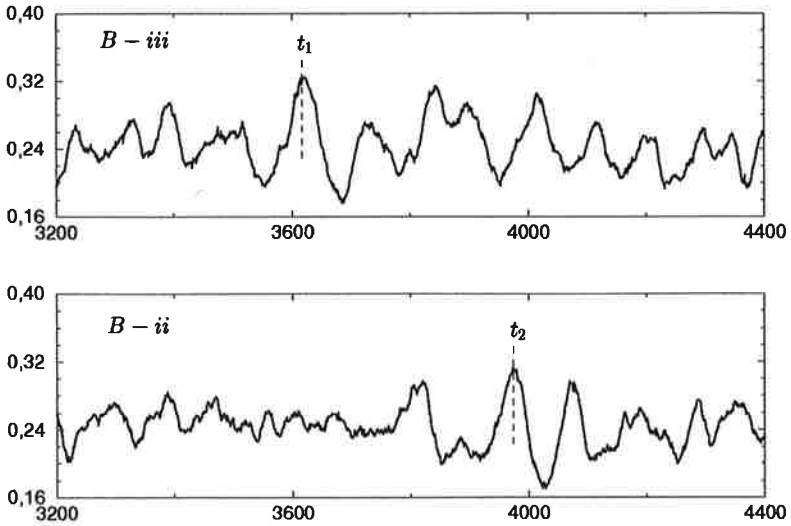
quando elas conseguem furar a barreira de predadores. Este fato está relacionado com a morte de predadores da "parede" e isso ocorre esporadicamente, devido aos baixos valores de c. Esse comportamento é o responsável pelas menores freqüências observadas, muito próximas ao ruído característico das flutuações.

Ainda no *autômato PP anisotrópico*, observamos a formação de estruturas extremamente organizadas, as quais permitem ao sistema permanecer no estado *ativo*, mesmo com um número baixo de predadores. Na Figura 4.22 mostramos um exemplo para $p = 0,32$ e $c = 0,2$.

Ao contrário do caso discutido acima, esses padrões são atingidos à medida em que nos aproximamos da transição para o estado absorvente de presas. Uma probabilidade relativamente alta de morte de predadores faz com que o número correspondente dessa espécie seja rapidamente diminuído. Como o processo de morte de presas está relacionado ao processo de nascimento de predadores, esse quase não ocorre. Já a reprodução de presas se dá quase continuamente. Mesmo com uma probabilidade de criação de presas bem menor que a probabilidade de morte, o número reduzido de predadores na rede faz com que logo o sistema apresente alta densidade de presas. Passamos a ter então uma situação de poucos predadores isolados num "mar de presas". Devido à anistropia eles passam a se desenvolver no sentido de nordeste para sudoeste, e crescem por toda a rede devido à abundância de presas, deixando atrás de si um rastro de que dá lugar a sítios vazios. Como não se reproduzem em sítios vazios, todos os focos de predadores vão se agrupar, exatamente nas faixas de máxima densidade de presas. Embora as presas tenham uma probabilidade menor de nascimento, logo preenchem novamente a região de sítios vazios devido à sua "alta densidade", dando continuidade à dinâmica. A oscilação que observamos é residual, pouco significativa, da mesma magnitude das flutuações, porém que persiste e parece ser conseqüência dos mecanismos de manutenção dessa estrutura.

A existência dessas estruturas é devido exclusivamente à anisotropia que, combinada com certo conjunto de parâmetros, promovem uma evolução temporal bem ordenada, e como conseqüência o estado absorvente de presas é alcançado posteriormente. É justamente na região em que observamos essas estruturas que a curva de transição no diagrama de fases do *autômato PP anisotrópico* está acima da curva de transição do *autômato PP* (ver Figura D.1).

a)



b)

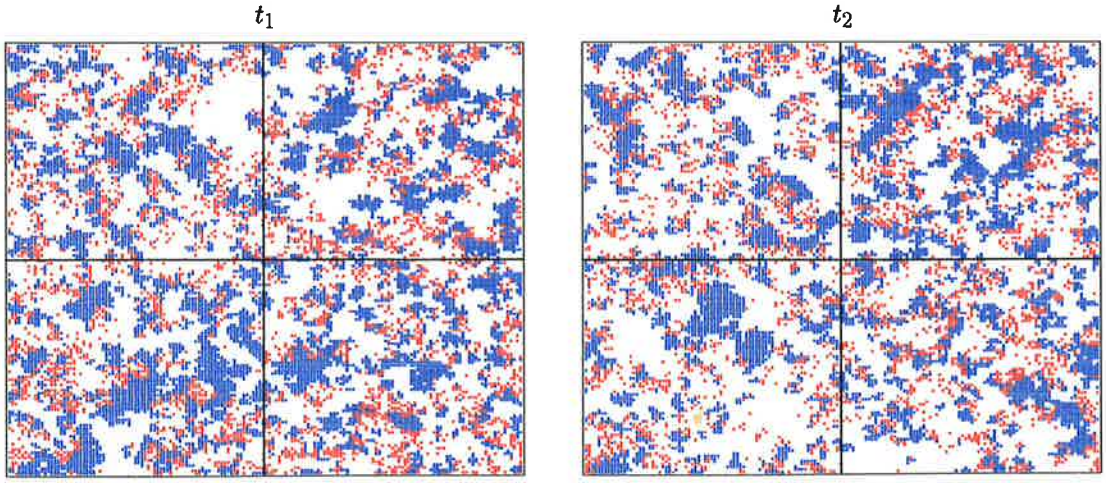
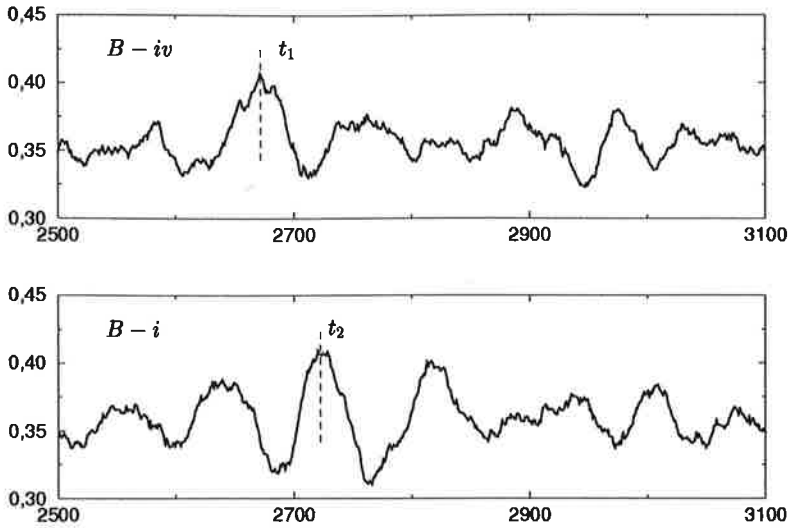


Figura 4.14: Simulações de Monte Carlo do *autômato PP* com parâmetros $p = 0,2$ e $c = 0,1$ para uma rede 160×160. a) Séries temporais das densidades de presas para as sub-redes ($B - ii$ e $B - iii$). b) Duas fotografias da rede indicando as quatro sub-redes 80×80. As presas estão representadas em azul e os predadores em vermelho. Em t_1 o máximo de presas ocorre em $B - iii$ e em t_2 o máximo ocorre em $B - ii$.

a)



b)

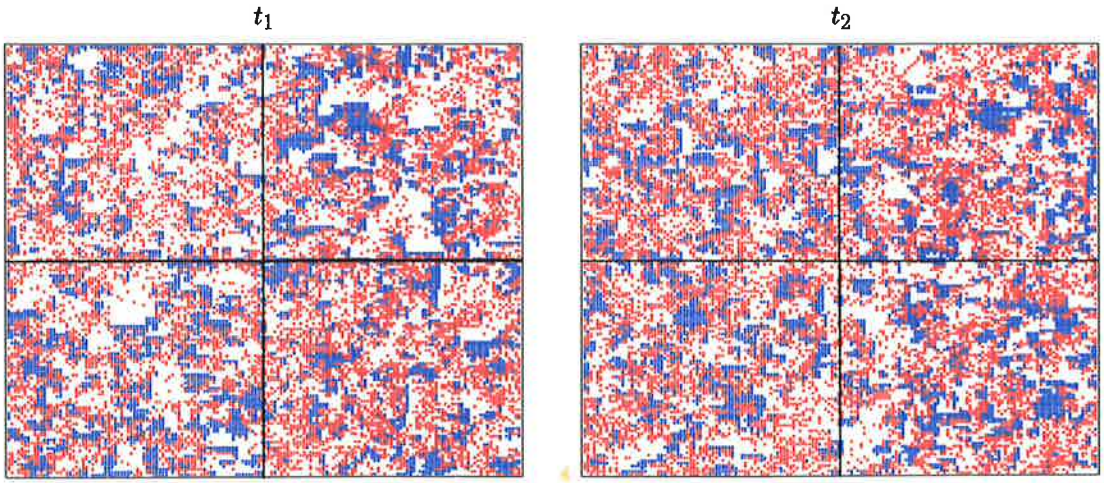


Figura 4.15: Simulações de Monte Carlo do *autômato PP anisotrópico* com parâmetros $p = -0,1$ e $c = 0,04$ para uma rede 160×160. a) Séries temporais das densidades de predadores para as sub-redes 80×80 ($B - i$ e $B - iv$). b) Duas fotografias da rede indicando as quatro sub-redes. A cor azul representa as presas e a cor vermelha os predadores. Em t_1 o máximo de predadores ocorre em $B - iv$ e em t_2 o máximo ocorre em $B - i$.

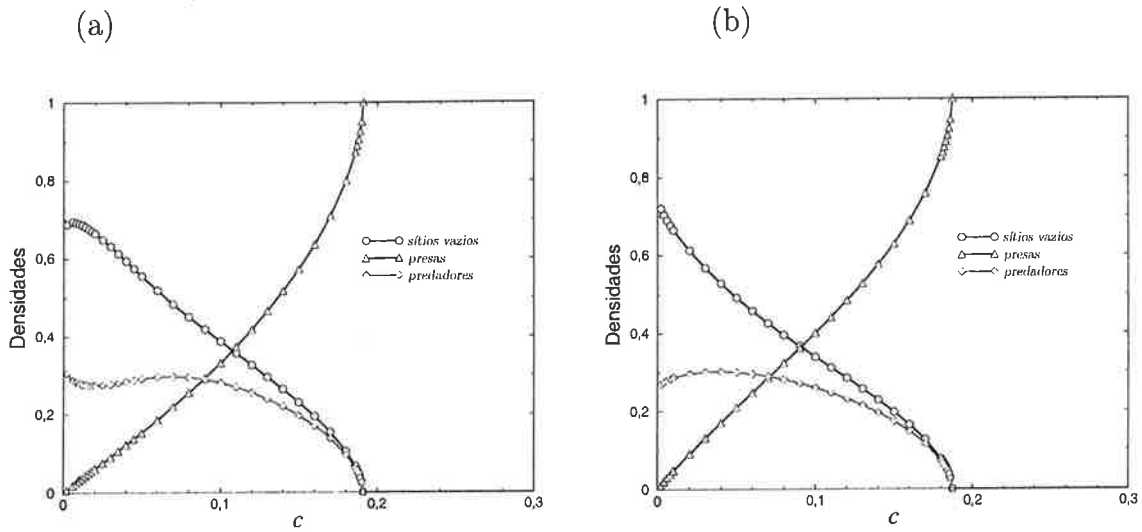


Figura 4.16: Densidades médias de presas, predadores e sítios vazios versus c para $p = 0$. Simulações de Monte Carlo sem permitir a extinção das espécies para (a) *autômato PP* e (b) *autômato PP anisotrópico*.

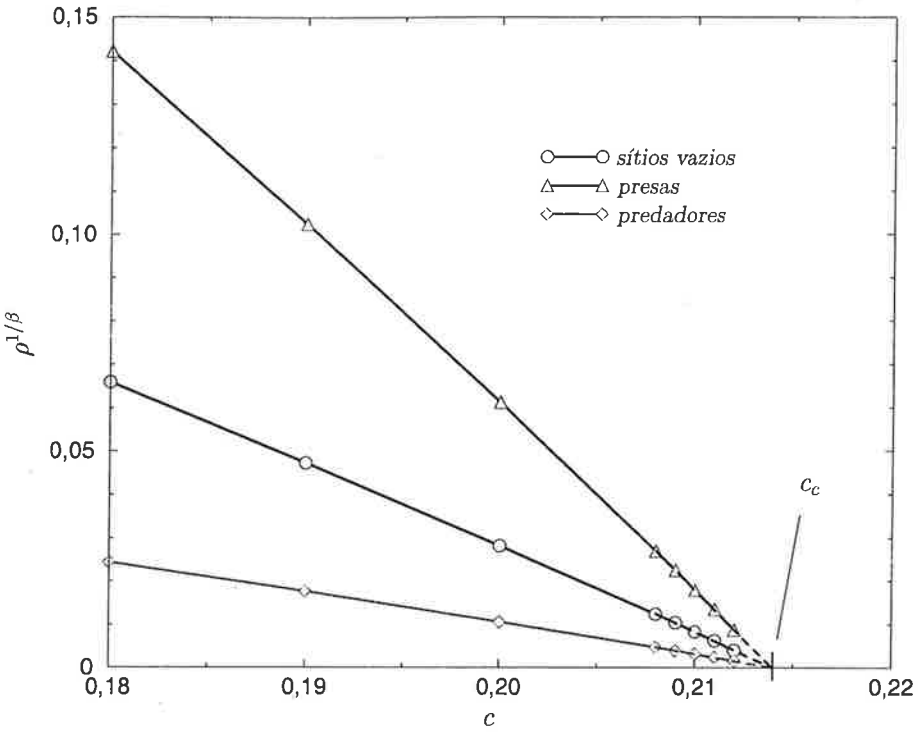


Figura 4.17: Densidades $\rho^{1/\beta}$ versus c, onde $\beta = 0,58$ é o expoente crítico do parâmetro de ordem na percolação direcionada em $d+1$ dimensões. Para o caso de presas consideramos $(1-\rho)^{1/\beta}$. *Autômato PP anisotrópico* para $p = 0,1$ e $d = 2$.

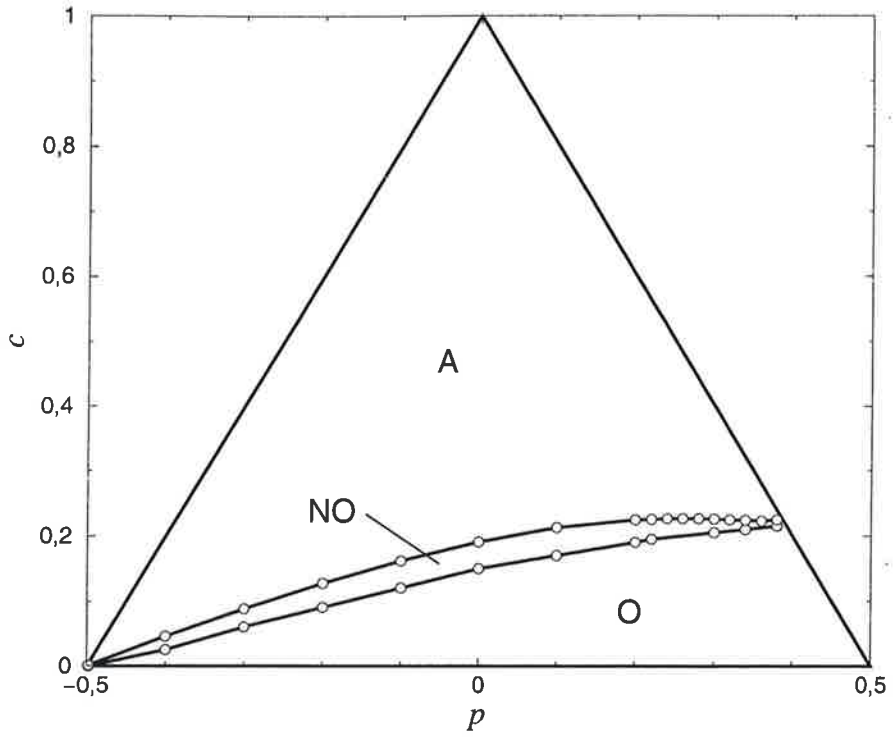


Figura 4.18: Diagrama de fases para o *autômato PP* para $d = 2$. Simulações de Monte Carlo para uma rede 160×160, sem permitir a extinção de presas e predadores. Estão representadas as fases *absorvente de presas* (A), *ativa não-oscilante* (NO) e *ativa oscilante* (O).

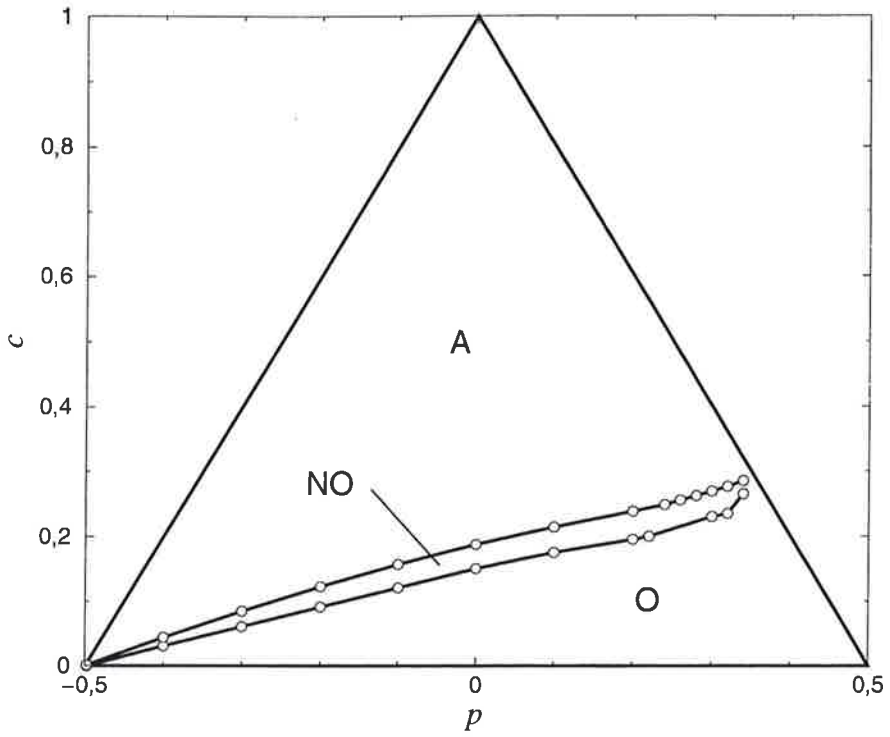


Figura 4.19: Diagrama de fases do *autômato PP anisotrópico* para $d = 2$, exibindo a fase *absorvente de presas* (A) e as fases *ativa oscilante* (O) e *ativa não-oscilante* (NO). Simulações de Monte Carlo para uma rede 160×160 sem permitir a extinção das espécies.

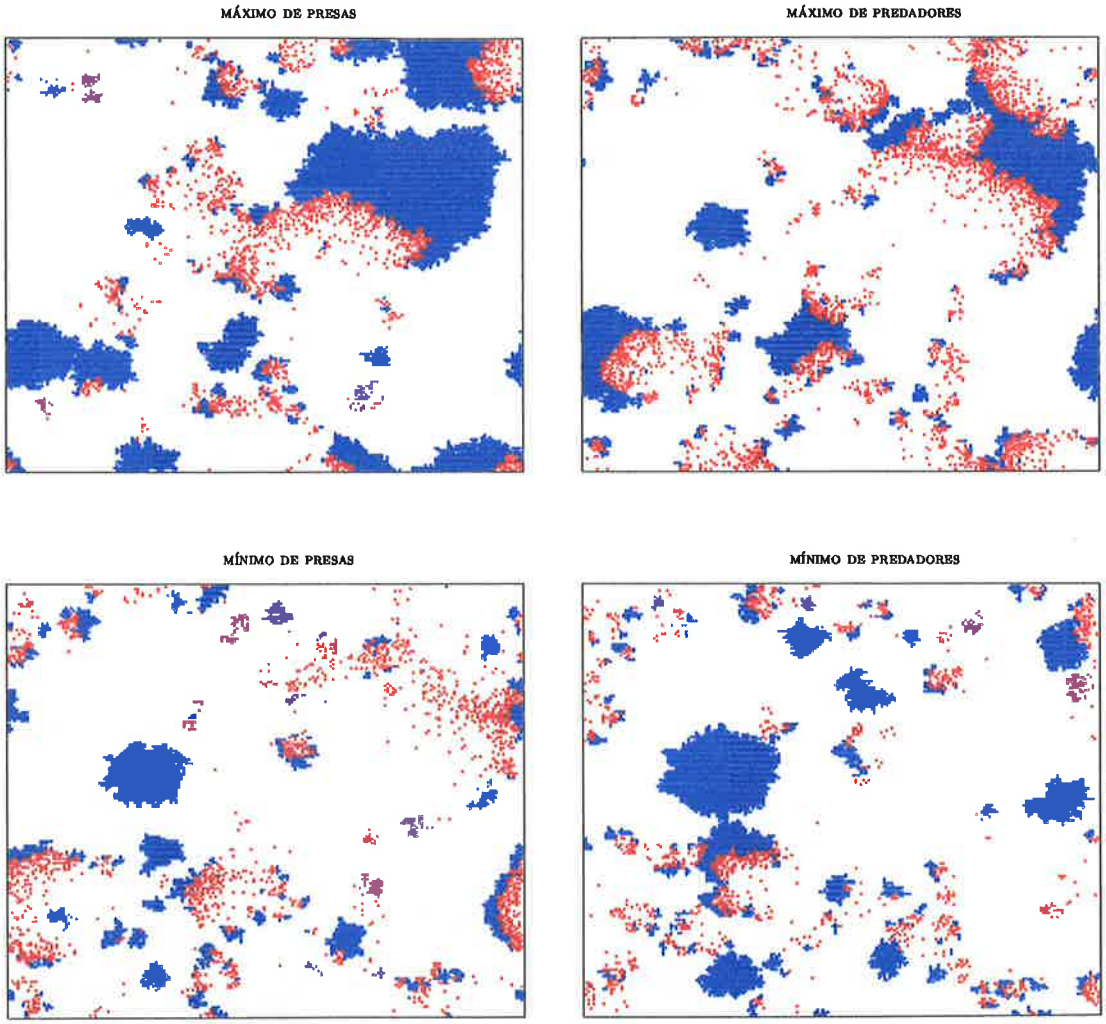


Figura 4.20: Quatro fotografias do *autômato PP* com parâmetros $p = 0,3$ e $c = 0,06$ em instantes seqüenciais: máximo de presas, máximo de predadores, mínimo de presas e mínimo de predadores. O azul corresponde às presas e o vermelho corresponde aos predadores. Simulações de Monte Carlo para uma rede 200×200. A baixa densidade de predadores permite que as presas se agrupem em grandes aglomerados. É nessa região que o modelo atinge as maiores amplitudes.

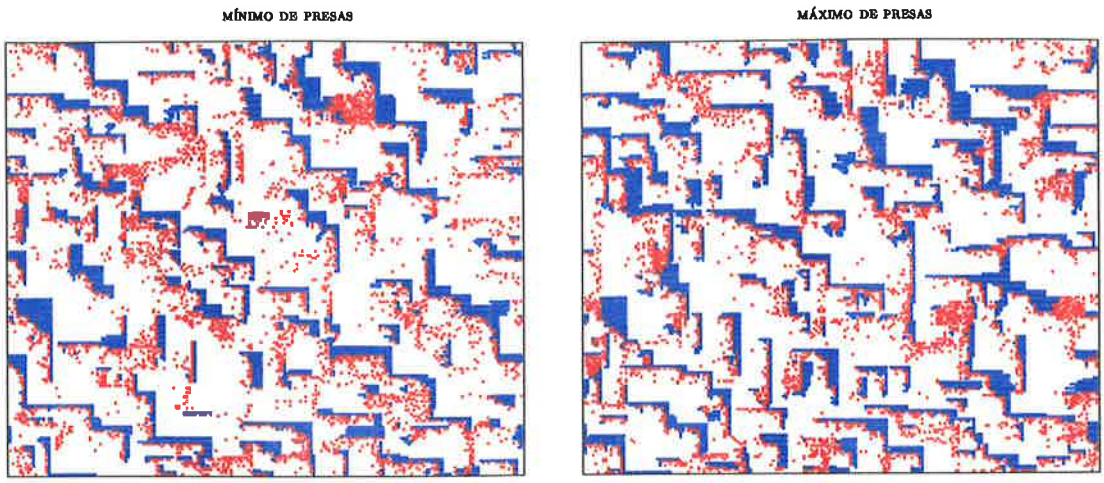


Figura 4.21: Fotografias do *autômato PP anisotrópico* com parâmetros $p = 0,3$ e $c = 0,02$ em dois instantes para uma rede 200×200. Essa figura é um exemplo dos padrões espaciais atingidos para c pequeno e $p > 0$. A formação de barreiras de predadores (vermelho) intercaladas com sítios vazios permite ao sistema atingir baixas densidades de presas (azul) sem evoluir para o estado *absorvente de vazio*.

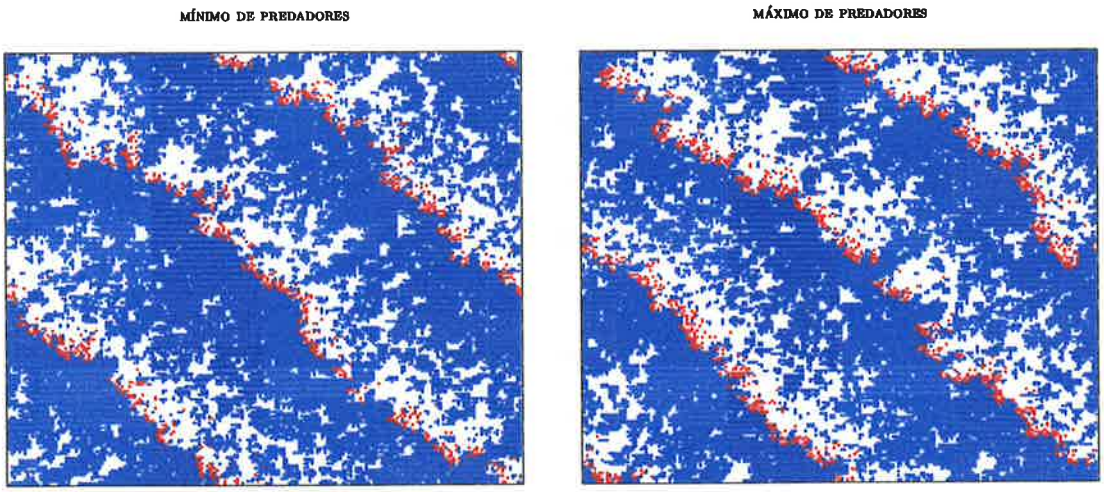


Figura 4.22: Fotografias do *autômato PP anisotrópico* com parâmetros $p = 0,32$ e $c = 0,2$ em dois instantes seqüenciais. Simulações de Monte Carlo para uma rede 200×200. Neste caso, os padrões espaciais bem organizados permitem ao sistema sobreviver com baixas densidades de predadores. Esses são os padrões responsáveis pela transição para o estado *absorvente de presa* ocorrer para valores maiores de c, em comparação com o modelo isotrópico. As presas estão representadas em azul e os predadores em vermelho.

Capítulo 5

Conclusões

Apresentamos dois autômatos celulares probabilísticos (*isotrópico* e *anisotrópico*) com regras de interação markovianas, locais e que reproduzem o mecanismo de competição de um sistema predador-presa. A interação ocorre apenas entre os primeiros vizinhos de uma rede regular. Em um dos modelos (modelo *anisotrópico*) levamos em conta a anisotropia espacial, a qual é responsável pelo sistema exibir padrões espaciais bem organizados que promovem um aumento da fase ativa em comparação com o modelo *isotrópico*. Estes padrões estão associados a oscilações temporais das populações de presas e predadores.

Verificamos que as regras de interação consideradas (morte espontânea de predadores e reprodução catalítica de presas e predadores) são importantes na manutenção de um sistema predador-presa, gerando estados oscilantes em ambos os modelos.

Obtivemos os diagramas de fases dos dois modelos através de aproximações de campo médio dinâmico e simulações de Monte Carlo. Verificamos que o sistema pode evoluir para os seguintes estados: *absorvente de presa*, *absorvente de vazio* e ativo. Esse último pode compreender oscilações (*ativo oscilante*) ou ser caracterizado por densidades constantes das espécies (*ativo não-oscilante*).

A análise de campo médio, na aproximação de pares de sítios, do modelo isotrópico mais uma vez mostra bons resultados qualitativos, com soluções que apresentam ciclos limites no espaço de fases, denunciando a existência de uma fase oscilante. A aproximação de um sítio não revela esse resultado.

O estudo das oscilações via simulações de Monte Carlo mostrou que elas estão presentes apenas em sistema finitos. A análise de subsistemas de um dado sistema indica que esses não oscilam coerentemente e, portanto, não guardam a informação sobre todo o sistema. Essa falta de sincronia faz com que a amplitude das oscilações diminua com o aumento do tamanho linear L da rede de acordo com a relação $A \sim L^{-d/2}$. Portanto a consideração de autômatos celulares, aqui propostos, não muda o resultado proveniente da dinâmica de tempo contínuo.

Para determinar a curva de transição para o estado absorvente de presas, utilizamos um recurso adicional nas simulações, que permitiu obter estados ativos onde antes estes evoluiam para estados absorventes. Nesta simulação, discutida na seção 4.3, impusemos que não houvesse extinção das espécies. Embora não tenhamos estudado a transição *ativo-absorvente* em detalhes, a curva foi obtida com relativa precisão. Utilizamos o resultado de que transições contínuas para um único estado absorvente pertencem à classe de universalidade da percolação direcionada (*conjectura de Grassberger*).

Concluímos que a estrutura espacial conferida por uma rede e dinâmicas estocásticas com regras locais são relevantes na descrição de um sistema predador-presa. De fato, entre outras propriedades, a abordagem aqui considerada mostra que as oscilações temporais no sistema predador-presa têm as seguintes características: (*i*) possuem flutuações como observado na natureza; (*ii*) aparentam ser um fenômeno local e (*iii*) são conseqüência da formação de padrões espaciais.

Apêndice A

Correlações de sítios para autômatos celulares

A média de qualquer função de estado $\mathcal{F}(\eta)$ no passo $(l+1)$ é obtida por meio da distribuição de probabilidades no mesmo passo,

$$\langle \mathcal{F}(\eta) \rangle_{l+1} = \sum_{\eta} \mathcal{F}(\eta)\, P_{l+1}(\eta).$$

Inserindo nesta equação as equações que governam a evolução dos estados no autômato celular (2.2) e (2.5) obtemos

$$\langle \mathcal{F}(\eta) \rangle_{l+1} = \sum_{\eta} \sum_{\eta'} \mathcal{F}(\eta) \prod_{i=1}^{N} w_i(\eta_i|\eta') P_l(\eta') \,. \tag{A.1}$$

Estamos interessados na média de funções de estado do tipo

$$\mathcal{F}_1(\eta_j) = \delta(\eta_j, \alpha) \,, \tag{A.2}$$

$$\mathcal{F}_2(\eta_j, \eta_k) = \delta(\eta_j, \alpha)\delta(\eta_k, \beta) \,, \tag{A.3}$$

$$\cdots$$

$$\mathcal{F}_m(\eta_j, \eta_k, ..., \eta_m) = \delta(\eta_j, \alpha)\delta(\eta_k, \beta) \cdots \delta(\eta_m, \gamma) \,. \tag{A.4}$$

Inicialmente, vamos obter a média da função $\mathcal{F}_1$. Substituindo $\mathcal{F}_1$ na equação (A.1)

$$\langle \delta(\eta_j, \alpha) \rangle_{l+1} = \sum_{\eta'} \sum_{\eta} \delta(\eta_j, \alpha) \prod_{i=1}^{N} w_i(\eta_i|\eta') \, P_l(\eta') \tag{A.5}$$

e observando que a somatória em η é uma soma sobre todas as variáveis estocásticas associadas aos N sítios,

$$\sum_{\eta} \longrightarrow \sum_{\eta_1 \eta_2 \cdots \eta_j \cdots \eta_N} ,$$

podemos escrever explicitamente

$$\begin{aligned} \langle \delta(\eta_j, \alpha) \rangle_{l+1} = \sum_{\eta'} \Bigg\{ & \sum_{\eta_1} w_1(\eta_1|\eta') \sum_{\eta_2} w_2(\eta_2|\eta') \cdots \\ & \sum_{\eta_j} \delta(\eta_j, \alpha) \, w_j(\eta_j|\eta') \cdots \sum_{\eta_N} w_N(\eta_N|\eta') \Bigg\} \, P_l(\eta') \, . \end{aligned} \tag{A.6}$$

Usando a condição (2.6),

$$\sum_{\eta_i} w_i(\eta_i|\eta') = 1 \quad \text{para qualquer } i,$$

a equação (A.6) se reduz a

$$\langle \delta(\eta_j, \alpha) \rangle_{l+1} = \sum_{\eta'} \sum_{\eta_j} \delta(\eta_j, \alpha) \, w_j(\eta_j|\eta') \, P_l(\eta') \, . \tag{A.7}$$

A somatória em η_j pode ser resolvida se observarmos que

$$\sum_{\eta_j} \delta(\eta_j, \alpha) \, w_j(\eta_j|\eta') = \begin{cases} w_j(\alpha|\eta') & \text{se } \eta_j = \alpha \\ 0 & \text{se } \eta_j \neq \alpha \end{cases} ; \tag{A.8}$$

logo

$$\langle \delta(\eta_j, \alpha) \rangle_{l+1} = \sum_{\eta'} w_j(\alpha|\eta') \, P_l(\eta') = \langle w_j(\alpha|\eta') \rangle_l \, . \tag{A.9}$$

Seguindo os mesmos passos que nos conduziram a (A.7), obtemos para a média da função $\mathcal{F}_2$

$$\begin{aligned}\langle \delta(\eta_j,\alpha)\ \delta(\eta_k,\beta)\rangle_{l+1} &= \sum_{\eta} \delta(\eta_j,\alpha)\ \delta(\eta_k,\beta)\ P_{l+1}(\eta) \\ &= \sum_{\eta'}\sum_{\eta_j} \delta(\eta_j,\alpha) w_j(\eta_j|\eta') \sum_{\eta_k} \delta(\eta_k,\beta) w_k(\eta_k|\eta') P_l(\eta')\ . \qquad \text{(A.10)}\end{aligned}$$

As somas em η_j e η_k são eliminadas ao aplicarmos novamente (A.8) a ambas, de forma independente, o que resulta em

$$\begin{aligned}\langle \delta(\eta_j,\alpha)\ \delta(\eta_k,\beta)\rangle_{l+1} &= \sum_{\eta'} w_j(\alpha|\eta')\ w_k(\beta|\eta')\ P_l(\eta') \\ &= \langle w_j(\alpha|\eta')\ w_k(\beta|\eta')\rangle_l\ . \qquad \text{(A.11)}\end{aligned}$$

A generalização para obter $\mathcal{F}_m$ é automática. O resultado (A.11) pode ser estendido para obtermos correlações de m sítios distintos

$$\begin{aligned}\langle \delta(\eta_j,\alpha)\ \delta(\eta_k,\beta)\ \cdots\ \delta(\eta_m,\mu)\rangle_{l+1} &= \sum_{\eta'} w_j(\alpha|\eta') w_k(\beta|\eta') \cdots w_m(\mu|\eta')\ P_l(\eta') \\ &= \langle w_j(\alpha|\eta')\ w_k(\beta|\eta')\ \cdots\ w_m(\mu|\eta')\rangle_l\ . \qquad \text{(A.12)}\end{aligned}$$

Apêndice B

Irreversibilidade

Num autômato celular, para sabermos se o modelo obedece ou não ao balanceamento detalhado

$$W(\eta|\eta')\, P_{est}(\eta') \;=\; W(\eta'|\eta)\, P_{est}(\eta) \tag{B.1}$$

deveríamos conhecer, além da probabilidade de transição $W(\eta|\eta')$, a probabilidade estacionária $P_{est}(\eta)$ [3]. Para isso procuraríamos soluções do tipo $P_{est} = WP_{est}$ [4], o que, em geral, pode não ser uma tarefa fácil ou mesmo possível, pela complexidade da matriz estocástica W.

Porém, se observarmos que para a sucessão de estados

$$\eta_a \to \eta_b \to \eta_c \to \cdots \to \eta_x \to \eta_a \;, \tag{B.2}$$

a condição (B.1) se reescreve

$$W(\eta_a|\eta_x)\cdots W(\eta_c|\eta_b)W(\eta_b|\eta_a)P_{est}(\eta_a) \;=\; W(\eta_a|\eta_b)W(\eta_b|\eta_c)\cdots W(\eta_x|\eta_a)P_{est}(\eta_a),$$

é possível contornar a necessidade do conhecimento prévio de $P_{est}(\eta)$. Portanto, ao uti-

lizarmos uma trajetória cíclica (B.2), a tarefa de determinarmos se o processo é reversível

$$\underbrace{W(\eta_a|\eta_x)\cdots W(\eta_c|\eta_b)W(\eta_b|\eta_a)}_{\mathcal{A}} = \underbrace{W(\eta_a|\eta_b)W(\eta_b|\eta_c)\cdots W(\eta_x|\eta_a)}_{\mathcal{B}} \tag{B.3}$$

se resume a determinar se a igualdade $\mathcal{A} = \mathcal{B}$ é satisfeita para toda e qualquer sucessão de estados. Observe que esse recurso só pode ser utilizado para um mínimo de três estados. Contudo, mesmo a obediência de (B.3) deve ser vista com reservas, uma vez que, em geral, não é hábil a verificação dessa condição para todos os possíveis estados. Por isso esse é um recurso muito mais utilizado para evidenciar a irreversibilidade. Assim, qualquer trajetória cíclica $\eta_a \to \eta_b \to \eta_c \to \cdots \to \eta_a$, com $\eta_a, \eta_b, \eta_c, \ldots$ pertencentes ao espaço de configurações do sistema, em que $\mathcal{A} \neq \mathcal{B}$, isto é, em que a probabilidade de transição não obedece ao balanceamento detalhado, caracteriza a irreversibilidade do modelo.

Os modelos que estudamos é dessa classe. A presença de estados absorventes no modelo já denuncia esse fato. Porém, mesmo modelos que não possuem estados absorventes podem apresentar irreversibilidade. A não observância de (B.3) em nossos modelos é trivial, uma vez que a seqüência de estados $0 \to 1 \to 2 \to 0$ é possível e a seqüência inversa $0 \to 2 \to 1 \to 0$ tem probabilidade *zero* de ocorrer, mas vejamos um exemplo para o *autômato PP*. Vamos considerar a sucessão de estados $\lambda, \mu, \nu, \sigma$ como indica a figura B.1.

Cada uma das probabilidades de transição é dada a seguir, utilizando-se condições de contorno periódicas:

$$\begin{aligned}
W(\mu|\lambda) &= \frac{1}{2}\, p_a\, \frac{1}{4}\, p_b \left(1 - \frac{1}{2}p_a\right)^2 \left(1 - \frac{1}{4}p_b\right) (1 - p_c)^3 \,, \\
W(\nu|\mu) &= \frac{1}{4}\, p_b\, p_c \left(1 - \frac{1}{2}p_a\right) \left(1 - \frac{1}{4}p_a\right) \left(1 - \frac{1}{4}p_b\right) \left(1 - \frac{3}{4}p_b\right) (1 - p_c)^3 \,,
\end{aligned}$$

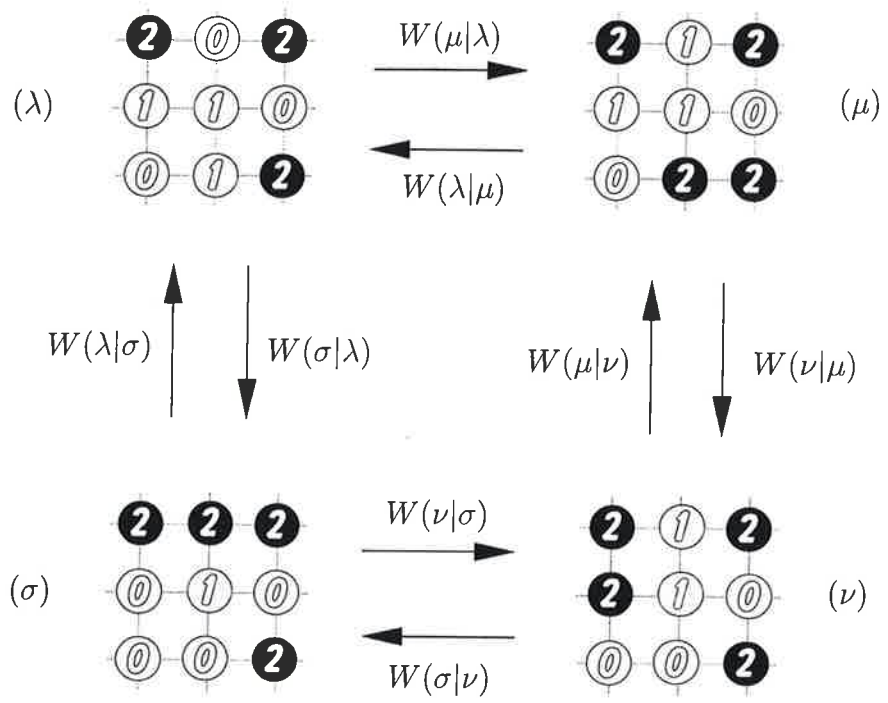


Figura B.1: São apresentados quatro estados cíclicos, λ, μ, ν e σ, de um sistema de $N = 9$ sítios. A probabilidade de transição $\mathcal{A}$ da trajetória externa (sentido horário) possui um valor não-nulo. A probabilidade de transição $\mathcal{B}$ associada à trajetória interna (sentido anti-horário) é *zero* e, portanto, $\mathcal{A} \neq \mathcal{B}$, e o modelo não apresenta reversibilidade microscópica.

$$
\begin{aligned}
W(\sigma|\nu) &= \frac{1}{2}\, p_b\, p_c \left(1 - \frac{1}{2}p_a\right)\left(1 - \frac{1}{4}p_a\right)\left(1 - \frac{1}{4}p_b\right)(1 - p_c)^3 \,, \\
W(\lambda|\sigma) &= \left(\frac{1}{4}p_a\right)^2 p_c \left(1 - \frac{1}{4}p_a\right)\left(1 - \frac{1}{4}p_b\right)(1 - p_c)^3 \,,
\end{aligned}
$$

$$
W(\lambda|\mu) = W(\sigma|\lambda) = W(\nu|\sigma) = W(\mu|\nu) \;=\; 0 \,.
$$

Calculemos a probabilidade de transição $\mathcal{A}$ associada à trajetória $\lambda \to \mu \to \nu \to \sigma \to \lambda$ e depois a probabilidade $\mathcal{B}$ associada à trajetória reversa $\lambda \to \sigma \to \nu \to \mu \to \lambda$,

$$
\begin{aligned}
\mathcal{A} &= W(\mu|\lambda)W(\nu|\mu)W(\sigma|\nu)W(\lambda|\sigma) \\
&= \frac{1}{4}\left[p_a p_b p_c\left(1-\frac{1}{4}p_a\right)\right]^3\left[\frac{1}{4}\left(1-\frac{1}{2}p_a\right)\left(1-\frac{1}{4}p_b\right)(1-p_c)^3\right]^4\left(1-\frac{3}{4}p_b\right)
\end{aligned}
$$

$$
\mathcal{B} = W(\lambda|\mu)W(\sigma|\lambda)W(\nu|\sigma)W(\mu|\nu) = 0\,.
$$

Como de fato $\mathcal{A} \neq \mathcal{B}$, está caracterizada a irreversibilidade no *autômato PP*.

A seqüência de estados que a figura B.1 apresenta foi especialmente escolhida para também servir de exemplo para o *autômato PP anisotrópico*. Utilizando-se novamente condições de contorno periódicas, obtemos um resultado similar

$$
\mathcal{A} = \left[\frac{1}{4}p_a p_b p_c\right]^3\left(1-\frac{1}{2}p_a\right)^4(1-p_a)\left(1-\frac{1}{2}p_b\right)^2(1-p_b)(1-p_c)^{12}
$$

e

$$
\mathcal{B} = 0\,,
$$

e portanto a irreversibilidade microscópica é presente em ambos os modelos.

Apêndice C

Estabilidade das oscilações em 3d

Para verificarmos como é o decaimento da amplitude em função de L, vamos tomar o logaritmo de ambos os lados de $\sigma_L \sim L^{\alpha}$ e considerar L a variável independente e σ_L a variável dependente,

$$\ln \sigma_L = \alpha \ln L + \beta \,, \tag{C.1}$$

onde α e β são constantes.

Para essa análise, também realizamos simulações de Monte Carlo dos dois autômatos em três dimensões, para os parâmetros $p = 0$ e $c = 0,08$. A Figura C.1 apresenta o gráfico $\ln \sigma_L \times \ln L$ associado à densidade de presas.

A tabela C.1 exibe o parâmetro de ajuste α para os dados referentes às presas, aos predadores e aos sítios vazios em duas e três dimensões, para os parâmetros $p = 0$ e $c = 0,08$ e para os *autômatos celulares PP* e *PP anisotrópico*.

Verificamos que os resultados dos ajustes satistazem $d \approx -2\alpha$ em ambos os modelos e, portanto, as amplitudes obedecem à relação $\sigma_L \sim L^{-d/2}$.

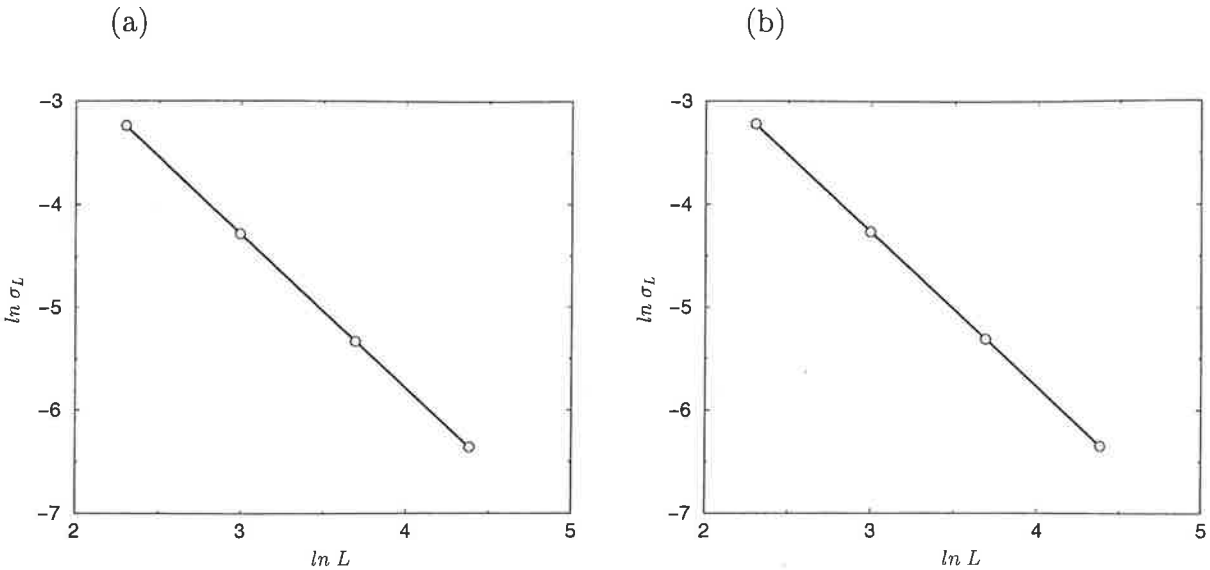


Figura C.1: Comportamento da amplitude σ_L com o tamanho da rede L na região *oscilante* ($p = 0$ e $c = 0,08$) em três dimensões para: (a) *autômato PP* e (b) *autômato PP anisotrópico*. Dados correspondentes às presas. Os comportamentos referentes aos predadores e sítios vazios são semelhantes.

Tabela C.1: Parâmetros de ajuste α (coeficiente angular) obtidos dos gráficos $\ln \sigma_L \times \ln L$ em $2d$ e $3d$ para $p = 0$ e $c = 0,08$. Em ambos os autômatos observamos $\alpha \approx -d/2$ para presas, predadores e sítios vazios.

modelo	d	α_{vazio}	α_{presa}	$\alpha_{predador}$
isotrópico	2	-0,9963 (10)	-0,9969 (17)	-0,99737 (47)
isotrópico	3	-1,4990 (22)	-1,4996 (20)	-1,4992 (17)
anisotrópico	2	-0,99887 (92)	-0,99841 (70)	-0,99948 (88)
anisotrópico	3	-1,5036 (14)	-1,5027 (16)	-1,5033 (15)

Apêndice D

Diagrama de fases conjunto

A análise das fases no lado direito do diagrama de fases ficou comprometida nas primeiras simulações que realizamos, como vimos na seção 4.3, sendo necessário introduzirmos na simulação um recurso adicional (não deixar a última presa ou o último predador morrerem), o qual permitiu à série temporal "superar" o transiente sem evoluir para o estado absorvente.

Com este recurso conseguimos resolver em grande parte o problema, e pudemos chegar bem próximo à transição para o estado *absorvente de presas*. Porém, à medida em que nos aproximamos de $p_a = 0$, esse recurso vai perdendo sua eficiência, uma vez que precisamos aumentar cada vez mais o tamanho da rede para que os dados sejam suficientemente confiáveis e não comprometer a análise da transição.

Para verificarmos o quanto esses dados são confiáveis, também realizamos simulações de Monte Carlo, utilizando o mesmo método, do modelo Predador-Presa na versão gás de rede [17]. Este possui as regras de transição do *autômato PP* e é definido sobre espaço isotrópico e tempo contínuo (*isotrópico TC*). A transição para o estado *absorvente de presas* desse modelo foi obtida por J. Satulovsky [14] via simulações de Monte Carlo de-

pendentes do tempo [2]. Nas proximidades de $p_a = 0$, comparamos a curva de transição obtida nos dois casos. Os valores começam a divergir para $p_a < 0,05$. Nessa região as densidades de predadores são extremamente pequenas, de modo que o fato de sempre deixar um predador no sistema acaba por elevar o valor real da densidade média dessa espécie e conseqüentemente superestimamos o valor da transição. Para $p = 0,4$, por exemplo, as simulações dependentes do tempo fornecem $c = 0,1761$ (ver dados J. Satulovsky [14]). Com o método que utilizamos obtivemos $c = 0,183$ (ver tabela D.1 abaixo) para uma rede de dimensão linear $L = 320$, um erro de 4% aproximadamente.

A tabela D.1 apresenta os valores da transição obtidos para os três modelos por este método. Consideramos sempre ao determinar a transição, a análise das séries temporais referentes às presas. O erro foi estimado comparando-se com as outras séries.

Tabela D.1: Valores da transição para o estado *absorvente de presas* dos modelos predador-presa a tempo contínuo (*isot. TC*), autômato PP (*isot.*) e autômato PP anisotrópico (*anisot.*). Resultados obtidos por simulações de Monte Carlo sem permitir a extinção de presas e predadores para $L = 160$ e $^*L = 320$. Os traços indicam pontos que não foram determinados.

p	$c_{(isot.\ TC)}$	$c_{(isot.)}$	$c_{(anisot.)}$	p	$c_{(isot.\ TC)}$	$c_{(isot.)}$	$c_{(anisot.)}$
-0,498	0,00093(1)	0,00093(1)	0,00089(1)	0,24	0,2027(1)	0,2262(1)	0,2489(2)
-0,4	0,0449(3)	0,0453(2)	0,0433(2)	0,26	0,2012(1)	0,2265(1)	0,2555(2)
-0,3	0,0864(1)	0,0879(1)	0,0839(1)	0,28	0,1992(1)	0,2262(2)	0,2625(4)
-0,2	0,1238(1)	0,1271(1)	0,1218(1)	0,3	0,1967(2)	0,2256(1)*	0,2691(2)*
-0,1	0,1560(1)	0,1619(1)	0,1564(1)	0,32	0,1939(2)	0,2249(1)*	0,2768(4)*
0,0	0,1816(1)	0,1910(1)	0,1873(1)	0,34	0,1908(1)*	0,2240(2)*	0,285(1)*
0,1	0,1984(1)	0,2126(1)	0,2139(1)	0,36	0,1874(4)*	0,223(1)*	–
0,2	0,2041(1)	0,2245(1)	0,2382(1)	0,38	0,184(1)*	0,225(3)*	–
0,22	0,2037(1)	0,2255(1)	0,2481(2)	0,4	0,183(3)*	–	–

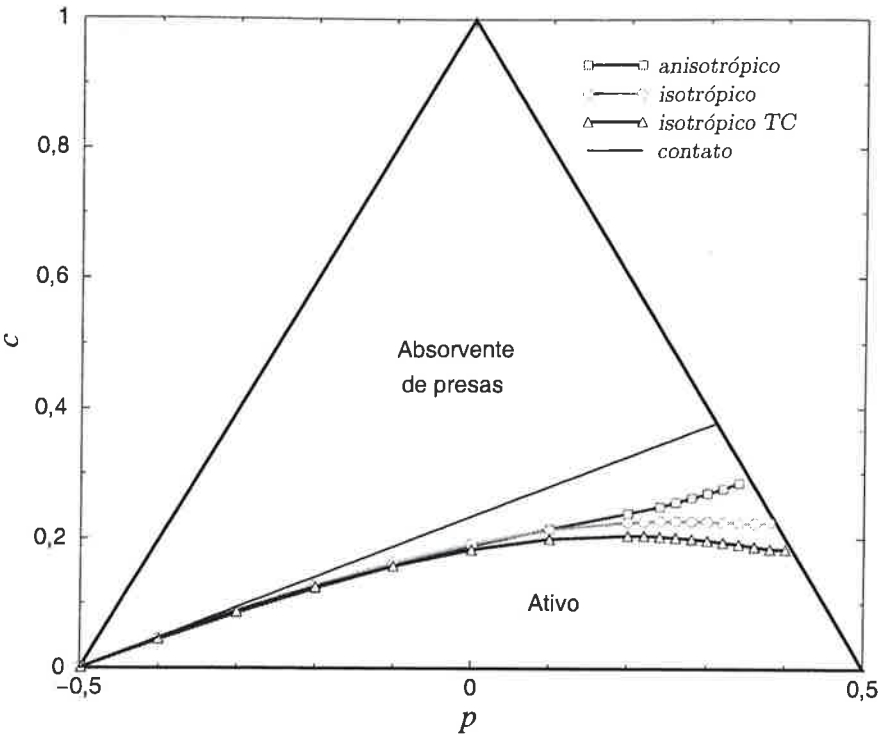


Figura D.1: Diagrama de fases mostrando as curvas de transição, do estado ativo para o estado absorvente de presas, dos *autômatos PP* e *PP anisotrópico* e do modelo Predador-Presa na versão tempo contínuo (*isotrópico TC*), e a linha de transição obtida pelo mapeamento no processo de contato em duas dimensões.

A Figura D.1 exibe o diagrama de fases comparativo para os três modelos. As principais diferenças estão no lado direito do diagrama ($p > 0$). Em todos é possível verificar que a transição é "bem-comportada" para $p < 0$, isto é, não diferem significativamente, e as três curvas colapsam no canto esquerdo ($p_a \to 1$, $p_b \to 0$ e $c \to 0$) do diagrama de fases. É possível mostrar que todos os modelos se mapeiam no processo de contato neste extremo. Os processos que estamos considerando são:

$$① \xrightarrow{p_b} ❷ \qquad ❷ \xrightarrow{p_c} ⓪ \qquad ⓪ \xrightarrow{p_a} ① \; .$$

Quando p_a é muito próximo de *um*, o número de presas no sistema é alto e, portanto,

qualquer predador ou sítio vazio estará próximo ou será vizinho de uma presa. Deste fato decorre que qualquer sítio vazio que eventualmente surja na rede será, probabilisticamente, imediatamente ocupado por uma presa. Dessa maneira, a morte de predadores será seguida quase que instantaneamente pelo nascimento de uma presa e o processo de reprodução de presas em sítios vazios pode ser suprimido dando lugar a

$$\textcircled{0} \xrightarrow{p_b} \textcircled{2} \qquad \textcircled{2} \xrightarrow{p_c} \textcircled{0} \quad .$$

Passamos então a considerar dois processos, dos quais um é catalítico e o outro é espontâneo, que são similares ao processo de contato, onde a criação de partículas ocorre cataliticamente com taxa λ e a aniquilação de uma partícula ocorre com taxa *um*. Nas variáveis do modelo predador-presa, temos

$$\textcircled{0} \xrightarrow{\lambda} \textcircled{2} \qquad \textcircled{2} \xrightarrow{1} \textcircled{0} \quad .$$

A analogia entre os modelos é feita considerando-se $\lambda = p_b/p_c$, de modo que haja correspondência entre os processos. Em termos das variáveis p e c, temos

$$c = \left(\frac{1}{2} + \lambda\right)^{-1} \left(\frac{1}{2} + p\right) \quad . \tag{D.1}$$

No modelo de contato, em duas dimensões, a transição ocorre para $\lambda_c = 1,647$ e no diagrama (p, c) a linha de transição será descrita por

$$c_c = 0,466 \left(\frac{1}{2} + p\right) \quad . \tag{D.2}$$

Referências Bibliográficas

[1] T. M. Liggett. *Interacting Particle Systems.* Springer-Verlag, New York, 1985

[2] R. Dickman e J. Marro. *Nonequilibrium Phase Transitions in Lattice Models.* Cambridge University Press, 1999

[3] T. Tomé. *Irreversibilidade. Modelos de rede com dinâmicas estocásticas.* Tese de Livre-Docência, Instituto de Física da Universidade de São Paulo, São Paulo, 1996

[4] T. Tomé e M. J. de Oliveira. *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade.* Edusp, São Paulo, 2001

[5] A. Provata, G. Nicolis e F. Baras (1999). *Oscillatory dynamics in low-dimensional supports: a lattice Lotka-Volterra model.* J. Chem. Phys. **110**, 8361.

[6] T. Antal e M. Droz (2001). *Phase transitions and oscillations in a lattice prey-predator model.* Phys. Rev. E **63**, 056119.

[7] M. A. M. de Aguiar, E. M. Rauch e Y. Bar-Yam (2003). *Mean-field approximation to a spatial host-pathogen model.* Phys. Rev. E **67**, 047102.

[8] D. Tilman e P. Kareiva. *Spatial Ecology: The Role of Space in Population Dynamics and Interactions.* Princeton University Press, Princeton, NJ, 1997

[9] A. Hastings. *Population Biology - concepts and models.* Spring-Verlag, New York, 1998

[10] A. J. Lotka (1920). *Analytical note on certain rhythmic relations in organic systems.* Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A. **6**, 410.

[11] V. Volterra. *Leçons sur la Théorie Mathématique de la Lutte pour la Vie.* Gauthier-Villars, Paris, 1931

[12] N. S. Goel, S. C. Maitra and E. W. Montroll (1971). *On the Volterra and other nonlinear models of interacting populations.* Rev. Mod. Phys. **43**, 231.

[13] H. Haken. *Synergetics: an Introduction.* Springer-Verlag, Berlin, 1983

[14] J. E. Satulovsky. *Modelo estocástico para um sistema predador-presa.* Tese de Doutoramento, Instituto de Física da Universidade de São Paulo, São Paulo, 1995

[15] S. Wolfram (1983). *Statistical mechanics of cellular automata.* Rev. Mod. Phys. **55**, 601.

[16] C. H. Bennett e G. Grinstein (1985). *Role of irreversibility in stabilizing complex and nonergodic behavior in locally interacting discrete systems.* Phys. Rev. Lett. **55**, 657.

[17] J. E. Satulovsky e T. Tomé (1994). *Stochastic lattice gas model for a predator-prey system.* Phys. Rev. E **49**, 5073.

[18] J. E. Satulovsky e T. Tomé (1997). *Spatial instabilities and local oscillations in a lattice gas Lotka-Volterra model.* J. Math. Biol. **35**, 344.

[19] B. Derrida. *Dynamical phase transitions in spin models and automata* em Fundamental problems in Statistical Mechanics VII, p. 273 - editado por H. van Beijeren. North Holland, Amsterdam, 1990

[20] N. G. ván Kampen. *Stochastic processes in Physics and Chemistry.* North-Holland, Amsterdam, 1981

[21] C. A. B. Dantas. *Probabilidade: Um Curso Introdutório.* Edusp, São Paulo, 1997

[22] R. Kikuchi (1951). *A theory of cooperative phenomena.* Phys. Rev. **81**, 988.

[23] H. Mamada e F. Takano (1968). *New approximate method for Ising system.* J. Phys. Soc. Japan **25**, 675.

[24] R. Dickman (1986). *Kinetic phase transitions in a surface-reaction model: Mean-field theory.* Phys. Rev. A **34**, 4246.

[25] T. Tomé e M. J. de Oliveira (1989). *Self-organization in a kinetic Ising model.* Phys. Rev. A **40**, 6643.

[26] T. Tomé (1994). *Spreading of damage in the Domany-Kinzel cellular automaton: a mean-field approach.* Phys. A **212**, 99.

[27] T. Tomé e J. R. D. de Felício (1996). *Probabilistic cellular automaton describing a biological immune system.* Phys. Rev. E **53**, 3976.

[28] G. G. Bosco. *Transições de fase em modelos irreversíveis com simetria de inversão e estado absorvente.* Dissertação de Mestrado, Instituto de Física da Universidade de São Paulo, São Paulo, 2001

[29] N. Fiedler-Ferrara e C. P. C. do Prado. *Caos - uma introdução.* Editora Edgard Blücher, São Paulo, 1995

[30] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling e B. P. Flannery. *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*, Second Edition. Cambridge University Press, 1992

[31] R. D. Pinto, W. M. Gonçalves, J. C. Sartorelli e M. J. de Oliveira (1995). *Hopf bifurcation in a leaky faucet experiment.* Phys. Rev. E **52**, 6896.

[32] K. Binder e D. Heermann. *Monte Carlo Simulations in Statistical Physics.* Springer-Verlag, Berlin, 1997

[33] J. M. Yeomans. *Statistical Mechanics of Phase Transitions.* Oxford University Press, Oxford, 1992

[34] K. C. de Carvalho e Tânia Tomé. *Mecânica estatística de não-equilíbrio e dinâmica de populações* em Tendências da Física Estatística no Brasil, p. 128 - Org. Tânia Tomé. Editora Livraria da Física, São Paulo, 2003

[35] F. M. C. Vieira e P. M. Bisch (1993). *Oscillatory patterns in an autocatalytic reaction ring network simulated by a probabilistic cellular automaton.* Phys. A **199**, 40.

[36] K. C. de Carvalho e T. Tomé (2004). *Probabilistic cellular automata describing a biological two-species system.* Mod. Phys. Lett. B **18**, 873.

[37] P. Grassberger (1982). *On phase transitions in Schlögl's second model.* Z. Phys. B **47**, 365.

[38] K. C. de Carvalho e T. Tomé (2005). *Patterns of spatio-temporal oscillations in a probabilistic cellular automata for a predator-prey system.* Em preparação.