UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
Instituto de Física

Dinâmica Estocástica de Populações Biológicas

Flávia Mayumi Ruziska Hirata

Orientadora: Prof^a. Dra. Tânia Tomé
Martins de Castro.

Tese de doutorado apresentada ao
Instituto de Física para a obtenção
do título de Doutora em Ciências.

Banca examinadora:

Prof^a. Dr^a. Tânia Tomé Martins de Castro (IF-USP)

Prof^a. Dr^a. Suani Tavares Rubim de Pinho (UFBA)

Prof. Dr. Jeferson Jacob Arenzon (UFRGS)

Prof. Dr. Masayuki Oka Hase (EACH-USP)

Prof. Dr. Silvio Roberto de Azevedo Salinas (IF-USP)

**São Paulo
2017**

Agradecimentos

À minha orientadora Prof^a Dra. Tânia Tomé Martins de Castro, por me guiar neste doutorado direto, pelos ensinamentos, pelo tempo dedicado ao nosso trabalho, pela paciência e por todo apoio.

Ao Prof. Dr. Mário José de Oliveira, pela colaboração e por todo apoio também oferecido durante meu doutorado.

Ao colaborador Prof. Dr. Everaldo Arashiro, pela colaboração no trabalho “Dinâmicas de duas populações biológicas e dois nichos ecológicos”.

À Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) pelo apoio financeiro (projeto 2012/22929-9).

À minha família, ao Felipe e aos meus amigos por todo carinho e apoio oferecidos.

Resumo

Nesta tese investigamos modelos irreversíveis dentro do contexto da mecânica estatística de não-equilíbrio motivados por alguns problemas de dinâmicas de populações biológicas. Procuramos identificar a existência de transições de fase e as classes de universalidade às quais os modelos pertencem. Além disso, buscamos modelos que capturem as principais características dos sistemas biológicos que procuramos descrever. Encontramos a solução analítica exata para o modelo suscetível-infectado-recuperado (SIR) em uma rede unidimensional. Investigamos o modelo suscetível-infectado-recuperado com infecção recorrente. Mostramos que o modelo pertence à classe de universalidade da percolação isotrópica, salvo pelos parâmetros em que se torna o processo de contato. Obtivemos também a linha de transição entre as fases em que há e não há propagação da epidemia, através de aproximações de campo médio e por simulações de Monte Carlo do modelo na rede quadrada. Publicamos estes resultados em [1]. Investigamos uma dinâmica para duas espécies biológicas e dois nichos ecológicos; para tanto introduzimos um modelo estocástico irreversível de quatro estados. Concluimos que o modelo oferece uma descrição para as oscilações temporais das populações das espécies e para a alternância de dominância entre estas. Para chegar a esta conclusão, utilizamos simulações de Monte Carlo do modelo na rede quadrada, aproximações de campo médio e a abordagem da equação mestra de “nascimento e morte”, a qual, para grandes populações, pode ser aproximada por uma equação de Fokker-Planck que é associada a um conjunto de equações de Langevin. Anexamos um artigo submetido para publicação com as conclusões desta pesquisa no apêndice B. Por fim, usando simulações de Monte Carlo, analisamos a dinâmica de duas espécies biológicas e dois nichos ecológicos incluindo difusão. Novamente verificamos que o modelo gera cenários com oscilações temporais das populações das espécies e alternância de dominância entre estas. Ademais, concluimos que o modelo pertence à classe de universalidade da percolação direcionada e obtivemos o diagrama de fase.

Palavras-chave: dinâmica estocástica; populações biológicas; mecânica estatística de não-equilíbrio.

Abstract

In this thesis we investigate irreversible models within the context of nonequilibrium statistical mechanics motivated by some problems of biological population dynamics. We look for identifying the existence of phase transition and the universality classes to which the models belong. In addition to that, we look for models that capture the main characteristics of the biological systems which we are interested in describing. We found the exact analytic solution of the susceptible-infected-recovered (SIR) model on one-dimensional lattice. We investigated the susceptible-infected-recovered model with recurrent infection. We showed that the model belongs to the isotropic percolation universality class, except for the parameters that make the model become a contact process. We obtained the transition line between the phases in which there is propagation of the epidemic and in which there is not, by means of mean-field approximations and Monte Carlo simulations on a square lattice, and the results are published in [1]. Furthermore, we investigated a dynamic for two biological species and ecological niches; for this purpose we introduced an irreversible stochastic model with four states. We conclude that the model offers a description of time oscillations of the species populations and of the alternating dominance between them. To achieve this conclusion we used Monte Carlo simulations of this model on a square lattice, mean-field approximation, and the birth and death master equation approach, which for large populations can be approximated by a Fokker-Planck equation that is associated to a set of Langevin equations. We attach an article submitted with the conclusions of this research in the appendix B. Finally, using Monte Carlo simulations, we analyzed a dynamic for two biological species and ecological niches including diffusion. Again, we verified that the model generates scenarios with time oscillations of the species populations and with alternating dominance between them. Also, we conclude that the model belongs to the directed percolation universality class and we found the phase diagram.

Keywords: stochastic dynamic; population biology; nonequilibrium statistical mechanics

Lista de Figuras

3.1	ρ versus λ	48
3.2	Mortes por praga em Mumbai.	51
3.3	Diagrama ilustrando os processos locais dos modelos SIR e SIRS.	54
3.4	Diagrama ilustrando as transições do modelo SIR.	56
4.1	Diagrama com definições para o modelo SIR unidimensional.	70
4.2	Gráficos das soluções analíticas do modelo SIR unidimensional.	78
5.1	Diagrama ilustrando as transições existentes no modelo suscetível-infectado-recuperado com infecção recorrente.	82
5.2	Densidade de indivíduos recuperados no estado estacionário z_∞ versus q , na aproximação de campo médio simples.	90
5.3	$x, y, z, -\dot{x}$ versus t nas aproximações de campo médio.	97
5.4	z, U, P e UP versus q para $p = 0$	103
5.5	UP versus q e UP versus $1/L$ para $p = 0$	104
5.6	$\ln(U), \ln(P), \ln(z)$ e $\ln(S)$ versus q para $p = 0$	105
5.7	z, U, P e UP versus q para $q = 2p$	106
5.8	UP versus q e UP versus $1/L$ para $q = 2p$	107
5.9	$\ln(U), \ln(P), \ln(z)$ e $\ln(S)$ versus q para $q = 2p$	107
5.10	Diagrama de fase modelo suscetível-infectado-recuperado com infecção recorrente.	109
5.11	ρ, u versus λ	113
5.12	$\ln(\rho)$ versus $\ln(L)$	114
5.13	$\langle N_S(t) \rangle / N, \langle N_I(t) \rangle / N$ e $\langle N_R(t) / N \rangle$ versus t	115

5.14	Comparação dos clusters formados na fase ativa para $b = 0,9$ e diversos valores de a e c	116
5.15	Comparação dos clusters formados sobre a linha de transição de fase para diferentes conjuntos de parâmetros.	117
6.1	Diagrama de transições locais na dinâmica para duas espécies biológicas e dois nichos ecológicos.	123
6.2	x_0, x_1, x_2 e x_3 versus r_1 , para $r_2 = 0,5$, na aproximação de campo médio simples.	131
6.3	x_0, x_1, x_2 e x_3 versus r_1 , para $r_1 = r_2$, na aproximação de campo médio simples.	132
6.4	Diagrama de fase para a dinâmica de duas espécies biológicas e dois nichos ecológicos na aproximação de campo médio simples.	137
6.5	x_1 e C_{11} para $r_1 = r_2$, resultados da equação de “nascimento e morte”.	146
6.6	Densidade espectral de x_1 para $r_1 = r_2$, para $r_1 = r_2$, resultados da equação de “nascimento e morte”.	146
6.7	x_1, x_3, C_{11}, C_{33} e C_{13} para $r_1 = r_2 = 0,7$, resultados da equação de “nascimento e morte”.	148
6.8	x_1, x_3, C_{11}, C_{33} e C_{13} para $r_1 = 0,7$ e $r_2 = 0,8$, resultados da equação de “nascimento e morte”.	148
6.9	x_1, C_{11} e C_{13} para $r_1 = r_2$, resultados das simulações de Monte Carlo na rede quadrada de lado $L = 40$ para a dinâmica estocástica de duas espécies biológicas e dois nichos ecológicos.	152
6.10	x_1, C_{11} e C_{13} para $r_1 = r_2$, resultados das simulações de Monte Carlo na rede quadrada de lado $L = 80$ para a dinâmica estocástica de duas espécies biológicas e dois nichos ecológicos.	153
6.11	Densidade espectral de x_1 , resultados de simulações na rede quadrada.	154
6.12	x_1, x_3, C_{11}, C_{33} e C_{13} para $r_1 = r_2 = 0,78$, resultados para simulações de Monte Carlo na rede quadrada de lado $L = 40$	155
6.13	x_1, x_3, C_{11}, C_{33} e C_{13} para $r_1 = r_2 = 0,78$, resultados para simulações de Monte Carlo na rede quadrada de lado $L = 80$	155

6.14	x_1, x_3, C_{11}, C_{33} e C_{13} para $r_1 = 0,78$ e $r_2 = 0,80$, resultados para simulações de Monte Carlo na rede quadrada de lado $L = 40$. .	158
6.15	x_1, x_3, C_{11}, C_{33} e C_{13} para $r_1 = 0,78$ e $r_2 = 0,80$, resultados para simulações de Monte Carlo na rede quadrada de lado $L = 80$. .	158
6.16	Densidade espectrais de x_1 e x_3 para $r_1 = 0,78$ e $r_2 = 0,80$, resultados das simulações de Monte Carlo na rede quadrada. .	159
6.17	x_1, x_3, C_{11}, C_{33} e C_{13} para $r_1 = 0,70$ e $r_2 = 0,96$, resultados para simulações de Monte Carlo na rede quadrada de lado $L = 40$. .	160
6.18	x_1, x_3, C_{11}, C_{33} e C_{13} para $r_1 = 0,70$ e $r_2 = 0,96$, resultados para simulações de Monte Carlo na rede quadrada de lado $L = 80$. .	160
6.19	Densidade espectrais de x_1 e x_3 para $r_1 = 0,70$ e $r_2 = 0,96$, resultados das simulações de Monte Carlo na rede quadrada. .	161
6.20	$\langle \bar{x} \rangle = \langle x_1 \rangle = \langle x_2 \rangle$ versus $r = r_1 = r_2$ nas aproximações de campo médio e para simulações de Monte Carlo na rede quadrada de lado $L = 160$	162
7.1	x_1, C_{11} e C_{13} para $r_1 = r_2$. Resultados das simulações de Monte Carlo na rede unidimensional de tamanho $L = 1600$ para a dinâmica estocástica de duas espécies biológicas e dois nichos ecológicos incluindo difusão.	173
7.2	x_1, C_{11} e C_{13} para $r_1 = r_2$. Resultados das simulações de Monte Carlo na rede unidimensional de tamanho $L = 3200$ para a dinâmica estocástica de duas espécies biológicas e dois nichos ecológicos incluindo difusão.	174
7.3	x_1, x_3, C_{11}, C_{33} e C_{13} para $r_1 = r_2 = 0,80$, resultados para simulações de Monte Carlo na rede unidimensional de tamanho $L = 1600$ para a dinâmica estocástica de duas espécies biológicas e dois nichos ecológicos incluindo difusão.	175
7.4	x_1, x_3, C_{11}, C_{33} e C_{13} para $r_1 = r_2 = 0,80$, resultados para simulações de Monte Carlo na rede unidimensional de tamanho $L = 3200$ para a dinâmica estocástica de duas espécies biológicas e dois nichos ecológicos incluindo difusão.	175

7.5	x_1, x_3, C_{11}, C_{33} e C_{13} para $r_1 = r_2 = 0,80$, resultados para simulações de Monte Carlo na rede unidimensional de tamanho $L = 1600$ para a dinâmica estocástica de duas espécies biológicas e dois nichos ecológicos incluindo difusão para $r_1 = 0,80$ e $r_2 = 0,82$..	177
7.6	x_1, x_3, C_{11}, C_{33} e C_{13} para $r_1 = r_2 = 0,80$, resultados para simulações de Monte Carlo na rede unidimensional de tamanho $L = 3200$ para a dinâmica estocástica de duas espécies biológicas e dois nichos ecológicos incluindo difusão para $r_1 = 0,80$ e $r_2 = 0,82$..	177
7.7	x_1, x_3, C_{11}, C_{33} e C_{13} para $r_1 = r_2 = 0,80$, resultados para simulações de Monte Carlo na rede unidimensional de tamanho $L = 1600$ para a dinâmica estocástica de duas espécies biológicas e dois nichos ecológicos incluindo difusão para $r_1 = 0,80$ e $r_2 = 0,85$..	178
7.8	x_1, x_3, C_{11}, C_{33} e C_{13} para $r_1 = r_2 = 0,80$, resultados para simulações de Monte Carlo na rede unidimensional de tamanho $L = 1600$ para a dinâmica estocástica de duas espécies biológicas e dois nichos ecológicos incluindo difusão para $r_1 = 0,80$ e $r_2 = 0,85$..	178
7.9	$\langle \bar{x} \rangle = \langle x_1 \rangle = \langle x_3 \rangle$ e $\frac{\langle \bar{x}^2 \rangle}{\langle \bar{x} \rangle^2}$ versus $r = r_1 = r_2$.	182
7.10	$\langle \bar{x}^2 \rangle / \langle \bar{x} \rangle^2$ versus $r = r_1 = r_2$.	183
7.11	$\ln(\langle \bar{x} \rangle)$ e $\ln(L(\langle \bar{x} \rangle^2 - \langle \bar{x}^2 \rangle))$ versus $\ln L$.	183
7.12	$\ln(\langle \bar{x} \rangle)$ e $\ln(L(\langle \bar{x} \rangle^2 - \langle \bar{x}^2 \rangle))$ versus $\ln L$ para valores mais próximos do ponto crítico.	184
7.13	$\langle x_1 \rangle$ e $\frac{\langle x_1^2 \rangle}{\langle x_1 \rangle^2}$ versus r_2 .	186
7.14	Diagrama de fase para a dinâmica de duas espécies biológicas e dois nichos ecológicos incluindo difusão em uma rede unidimensional.	187
7.15	Sítios da rede nos estados NA, CA, NB, CB em azul, preto, verde e vermelho, respectivamente, versus tempo para $s = 0$ e $r_1 = r_2 = 0,80$, conjunto de parâmetros dentro da região ativa do diagrama de fase.	188

- 7.16 Sítios da rede nos estados NA , CA , NB , CB em azul, preto, verde e vermelho, respectivamente, *versus* tempo para $s = 0$ e $r_1 = r_2 = 0,73970$, conjunto de parâmetros dentro da região ativa do diagrama de fase. 189

Lista de Tabelas

5.1	Probabilidades de transição de um sítio.	83
5.2	Valores de $p = \frac{a}{b}$, $q = \frac{c}{b}$ e UP sobre a linha de transição obtidos das simulações de Monte Carlo na rede quadrada.	108
7.1	Valores para r_{2c} em simulações para r_1 fixo.	187

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Populações biológicas e a mecânica estatística de não-equilíbrio	1
2	Modelos estocásticos definidos por equações mestras	11
2.1	Cadeias de Markov	11
2.2	Equação mestra em espaços de estados discretizados	13
2.2.1	Condição de balanceamento detalhado	15
2.3	Processos estocásticos do tipo “nascimento e morte”	16
2.3.1	Caso 1: uma variável estocástica.	16
2.3.2	Caso 2: M variáveis estocásticas	23
2.3.3	Caso 2: M variáveis estocásticas no limite do contínuo	27
2.4	Modelos estocásticos e espacialmente estruturados assíncronos	31
2.4.1	Definição	31
2.4.2	Dinâmica de “um sítio”	32
2.4.3	Aproximação de campo médio	35
2.5	Simulações de Monte Carlo em modelos irreversíveis	37
2.5.1	Simulações para processos estocásticos do tipo “nascimento e morte” de M variáveis	38
2.5.2	Simulações para modelos estocásticos espacialmente estruturados assíncronos	39
3	Dois modelos fundamentais	41
3.1	Processo de contato	41
3.1.1	Introdução	41

3.1.2	Definição	42
3.1.3	Equações de evolução temporal para médias e correlações	44
3.1.4	Classe de universalidade	48
3.2	Modelo suscetível-infectado-recuperado (SIR)	50
3.2.1	Introdução	50
3.2.2	Definição	55
3.2.3	Equações de evolução temporal para médias e correlações	57
3.2.4	Classe de universalidade	63
4	Modelo suscetível-infectado-recuperado unidimensional	69
4.1	Solução exata em uma rede unidimensional	69
4.2	Análise dos resultados	79
5	Modelo suscetível-infectado-recuperado com infecção recorrente	81
5.1	Definição	81
5.1.1	Casos Particulares	85
5.2	Equações de evolução temporal para médias e correlações . . .	86
5.2.1	Aproximação de campo médio simples	88
5.2.2	Aproximação de campo médio com pares	92
5.2.3	Integração numérica das aproximações de campo médio	96
5.3	Simulações de Monte Carlo	98
5.3.1	Algoritmos	98
5.3.2	Grandezas de interesse calculadas	100
5.3.3	Resultados das simulações estacionárias	102
5.3.4	Caso particular $c = 0$: Simulações do processo de con- tato da rede quadrada	110
5.3.5	Evolução temporal da média das densidades de suscetí- veis, infectados e recuperados e retratos da rede	114
5.4	Conclusão	118
6	Dinâmica estocástica para duas espécies biológicas e dois nichos eco- lógicos	121
6.1	Definição	122
6.1.1	Mudança de parâmetros	124

6.2	Interpretação do modelo no contexto de dinâmica de populações	125
6.3	Equações para a evolução temporal das médias e correlações	127
6.3.1	Aproximação de campo médio simples	128
6.3.2	Aproximação de campo médio com pares	132
6.4	Função de correlação e densidade espectral	139
6.4.1	Função de correlação temporal	139
6.4.2	Análise espectral	140
6.5	Processo estocástico do tipo “nascimento e morte”	141
6.5.1	Definição da equação mestra do tipo “nascimento e morte” e equação de Fokker-Planck	142
6.5.2	Resultados das simulações do processo do tipo “nascimento e morte”	145
6.6	Simulações de Monte Carlo	149
6.6.1	Algoritmo	150
6.6.2	Análise de séries temporais e correlações	151
6.6.3	Densidade média de CA e CB sobre a linha de parâmetros $s = 0$ e $r_1 = r_2$	161
6.7	Conclusão	162
7	Dinâmica estocástica para duas espécies biológicas e dois nichos ecológicos incluindo difusão	167
7.1	Definição	168
7.2	Simulações de Monte Carlo	168
7.2.1	Algoritmos	169
7.2.2	Análise de séries temporais e correlações	170
7.2.3	Grandezas de interesse nas simulações no estado estacionário	179
7.2.4	Simulações no estado estacionário	180
7.2.5	Retratos da rede em função do tempo	188
7.3	Conclusão	189
8	Conclusões	193

Sumário	xvi
Bibliografia	197
A Artigo publicado sobre modelo suscetível-infectado-recuperado com infecção recorrente	211
B Artigo publicado sobre a dinâmica para duas espécies biológicas e dois nichos ecológicos	221

Capítulo 1

Introdução

1.1 Populações biológicas e a mecânica estatística de não-equilíbrio

A mecânica estatística de não-equilíbrio descreve fenômenos irreversíveis e abarca diversos tratamentos. Entre estes, ressaltamos os que usam dinâmicas estocásticas [2–9]. Dentre estas ainda, existem várias abordagens possíveis.

Algumas dinâmicas, por exemplo, são definidas diretamente a partir de uma equação de Langevin, a qual tem uma equação de Fokker-Planck associada, ou de um sistema de equações de Langevin, que possui uma equação de Kramers associada [9].

Outras dinâmicas são dadas por cadeias de Markov, em que o tempo, o espaço e o conjunto de valores que a variável estocástica assumem são discretos. Além disso, a probabilidade da variável estocástica assumir um determinado valor em um instante de tempo depende apenas do valor que assumiu no instante anterior. Também é possível considerar cadeias de Markov de ordem superior, nas quais a probabilidade da variável estocástica assumir um valor em um determinado instante depende dos valores assumidos em um conjunto finito de instantes anteriores. Quando consideramos processos markovianos a tempo discreto para um conjunto de variáveis estocásticas, em que cada uma está associada a um sítio de uma rede, temos um autômato celular probabilístico. Nestes, a cada instante de tempo todas variáveis são atualizadas

simultaneamente de acordo com regras probabilísticas que definem o modelo. Esse tipo de atualização é denominada síncrona [2–9].

Existem também dinâmicas governadas por equações mestras, nas quais, assim como em cadeias de Markov, as variáveis estocásticas assumem um conjunto discreto de valores, entretanto o tempo é contínuo. Dentre os processos cujas evoluções temporais são dadas por equações mestras, ainda há vários tipos de modelos possíveis; destacamos aqui dois tipos que utilizamos nesta tese:

1. Modelos estocásticos para conjuntos de N elementos de M tipos, a cada tipo k associa-se uma variável estocástica n_k que fornece o número de elementos do tipo k no sistema, o qual tem estado definido pelo vetor estocástico $n = (n_1, n_2, \dots, n_k, \dots, n_M)$. Dessa forma, a evolução temporal é fornecida por uma equação mestra do tipo “nascimento e morte” para $P(n, t)$, a probabilidade de o sistema estar no estado n no instante de tempo t . Os processos são tais que as transições possíveis são $n_k \rightarrow n_k + 1$ e $n_k \rightarrow n_k - 1$. Vale mencionar que quando se considera N grande é possível aproximar uma equação mestra do tipo “nascimento e morte” por uma equação de Fokker-Planck [2–8].
2. Modelos estocásticos definidos em redes regulares de N sítios, nos quais associa-se a cada sítio i uma variável estocástica η_i , que pode assumir M valores, de modo que o estado do sistema fica definido pelo vetor estocástico $\eta = (\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_i, \dots, \eta_N)$. Assim, a evolução temporal fica governada por uma equação mestra para $P(\eta, t)$, a probabilidade de o sistema estar no estado η no instante de tempo t . Em particular, pode-se adotar a dinâmica de “um sítio” na qual são permitidas apenas transições entre estados que diferem pelo estado de um único sítio. No texto desta tese, nos referimos a esse tipo de modelo como “modelo estocástico espacialmente estruturado” [2–4]. Nesses modelos, em geral, obtivemos os resultados de aproximações de campo médio simples e com pares bem como de simulações de Monte Carlo.

A investigação dos estados estacionários de modelos irreversíveis, das possíveis transições de fase existentes nestes modelos, bem como a identificação

das classes de universalidade constituem um tópico importante da mecânica estatística de não-equilíbrio [2, 4, 5, 10–14].

Por outro lado, temos a questão da modelagem de dinâmicas de populações biológicas que pode ser abordada de diferentes formas. Quando há interesse nas flutuações existentes na evolução temporal das grandezas que caracterizam essas populações, os métodos da mecânica estatística constituem um conjunto de ferramentas adequado. Frequentemente os fenômenos de interesse são irreversíveis, nesses casos as análises da mecânica estatística de não-equilíbrio são as pertinentes, em particular, os tratamentos baseados em dinâmicas estocásticas são bastante apropriados.

Dinâmicas de populações biológicas englobam um conjunto amplo de problemas, por exemplo, a propagação de epidemias, tais como a gripe, dengue, zika; diversos tópicos da ecologia, como crescimento de uma população, competição entre espécies, predação, mutualismo, regulação de ecossistemas, biodiversidade; entre outras questões [2–5, 8, 15–26]. Há numerosos modelos para dinâmicas de populações biológicas, com diversos tipos de abordagens e diferentes níveis de descrições. Uma discussão sobre que nível de descrição é adequado para descrever uma determinada dinâmica de população biológica é apresentada em [27]. Ressaltamos, em seguida, apenas alguns dos muitos modelos sobre dinâmicas de populações biológicas.

Sistemas de equações diferenciais foram utilizados para descrever diversos problemas, em 1920 Lotka [28–30] analisou o sistema predador-presa, seguido por Volterra [31]; em 1927, Kermack e McKendrick introduziram [32] o modelo suscetível-infectado-recuperado (SIR) buscando explicar os dados da peste que ocorreu em Mumbai entre 1905 e 1906; desde então muitos trabalhos usam essa abordagem, como, por exemplo, em uma modelagem para a cólera em [33].

Uma das maneiras de incluir a espacialidade nos modelos de dinâmicas de populações biológicas é utilizar a abordagem de metapopulação e os modelos de fragmentos (“patch models”). Neste tratamento, considera-se que a população é composta de subpopulações que vivem em fragmentos de habitats interconectados; em vez de se considerar o número absoluto de indivíduos de cada espécie, passa-se a considerar a fração de fragmentos que cada uma

ocupa [19]. Levins introduziu esse tipo de descrição em 1962 [34], posteriormente nesta abordagem também foram incluídas dinâmicas estocásticas. Em [35–38] a abordagem de metapopulação é amplamente discutida. Destacamos aqui alguns exemplos: modelos de metapopulações foram utilizados para entender a relação entre fragmentação do habitat, conservação das espécies e biodiversidade [39, 40]; um trabalho experimental em que se observou metapopulações de bactérias em uma paisagem nanométrica fabricada é apresentado em [41]; um modelo estocástico com abordagem de metapopulações proposto para explicar as perdas em plantações devido a pragas pode ser encontrado em [42]; um modelo de metapopulação para a dinâmica do mosquito anopheles foi introduzido em [43].

A abordagem baseada na equação mestra do tipo “nascimento e morte”, que desconsidera a espacialidade, mas inclui a presença de ruídos estocásticos, pode ser encontrada, por exemplo, em [44] na análise do modelo predador-presa e em [45] para o modelo epidemiológico suscetível-infectado-recuperado-suscetível SIRS.

Autômatos celulares foram utilizados, por exemplo, para descrever uma parte do sistema imunológico em [46] e para investigar o sistema predador-presa em [47–50]. Recentemente um autômato celular foi introduzido [51] para analisar o comportamento do sistema predador-presa em uma rede fractal.

Já modelos estocásticos espacialmente estruturados assíncronos foram usados, por exemplo, para investigar o processo de contato [52, 53], para descrever o sistema predador-presa e modificações deste em [44, 54–56], para investigar os modelos epidemiológicos suscetível-infectado-recuperado (SIR) e suscetível-infectado-recuperado-suscetível (SIRS) em [45, 57–60], para modelar a propagação da de doenças transmitidas por vetores [61], como por exemplo dengue, para investigar o modelos suscetível-exposto-infectado (SEI) [62], entre outros trabalhos.

Ferramentas de teoria de campos foram utilizadas, por exemplo, para analisar flutuações e correlações em modelos do tipo Lotka-Volterra [63], e na análise de um modelo do tipo predador-presa [64].

Há vários trabalhos sobre modelos epidemiológicos em redes complexas. Na referência [65], são descritos diversos processos epidêmicos em vários

tipos de redes complexas. O espalhamento de epidemias em redes livres de escalas foi investigado em [66], a questão da imunização em redes complexas foi analisada em [67], a análise de dinâmicas de epidemias em redes livres de escala finitas foi feita em [68], a ausência de um limiar de infecção em redes livres de escala com graus correlacionados foi investigada em [69]. Investigou-se o modelo suscetível-infectado-suscetível (SIS) por diferentes ângulos, por exemplo, comparou-se resultados teóricos e de simulações numéricas [70], fez-se investigações em redes aleatórias livres de escalas [71]. O processo de contato (que equivale ao SIS em redes regulares) também foi estudado de diversas formas, por exemplo, investigou-se o comportamento crítico em redes do tipo “small world” [72], em junções tipo estrela [73] e em uma rede livre escala de homofílica [74]. Redes complexas também foram utilizadas para representar metapopulações [75] no estudo dos efeitos de estruturas de populações locais. Recentemente um critério para discernir a natureza dos limiares de infecção para diversos modelos epidêmicos em redes livre de escala foi proposto [76].

Modelos definidos em redes usando teoria dos jogos também têm sido usados para descrever problemas de dinâmicas de populações biológicas. Por exemplo, foram investigados: um modelo do tipo predador-presa cíclico para quatro espécies com inclusão da diluição das populações (sítios vazios) e da possibilidade de migração, neste trabalho qual é observada a formação de alianças defensivas [77]; um modelo de cinco espécies em que cada uma possui duas presas e dois predadores [78]; um sistema em que há cooperação entre indivíduos em uma rede com distribuição de idades heterogênea [79]; um modelo para a coexistência de 4 espécies do tipo pedra-papel-tesoura [80], esse mesmo tipo modelo com adição de interações não locais o que gera oscilações globais [81]; modelos para presas e predadores com a possibilidade de alianças entre os predadores para a caça e entre as presas para a defesa [82, 83].

Mais exemplos de abordagens e modelos para descrever problemas de dinâmicas de populações biológicas podem ser encontrados em [2–4, 8, 16, 19–23, 26, 27, 84–98]. Em particular, destacamos aqui o processo de contato e o modelo suscetível-infectado-recuperado (SIR), modelos que estão intima-

mente ligados aos trabalhos desenvolvidos nesta tese e são importantes tanto do ponto de vista epidemiológico quanto da investigação de modelos irreversíveis.

O processo de contato é um modelo simplificado para propagação de doenças em que não existe imunização. Nesse modelo considera-se uma população composta por indivíduos suscetíveis e infectados. Indivíduos suscetíveis tornam-se infectados por contato com indivíduos infectados, os quais se tornam suscetíveis espontaneamente. Este é um dos modelos mais simples que possui transição de fase mesmo em uma dimensão. Harris [99] demonstrou que no limite termodinâmico o modelo apresenta um estado ativo estável, além do estado absorvente no qual todos indivíduos são suscetíveis de forma que o ciclo de reações do modelo é interrompido. O processo de contato pertence à classe da percolação direcionada corroborando a seguinte conjectura: “Se um modelo exibe transições contínuas para estados absorventes então o comportamento do modelo é o mesmo da classe de universalidade da percolação direcionada.”. Esta conjectura foi proposta independentemente por Janssen em 1981 [100] e por Grassberger em 1982 [101] e generalizada por Grinstein, Lai e Browne em 1989 [102].

Já o modelo suscetível-infectado-recuperado (SIR) é um modelo simplificado para a propagação de uma epidemia em que existem indivíduos que são imunizados permanentemente ou que morrem. Nesse caso considera-se uma população composta por indivíduos suscetíveis, infectados e recuperados/removidos. Indivíduos suscetíveis tornam-se infectados por contato com indivíduos infectados, os quais se tornam recuperados espontaneamente e permanecem nesse estado. Já os estados estacionários do modelo suscetível-infectado-recuperado são todos absorventes. A transição de fase ocorre entre a fase em que existe propagação da epidemia (estado estacionário absorvente composto por indivíduos suscetíveis e recuperados) e a fase em que não existe propagação da epidemia (estado estacionário absorvente composto essencialmente por indivíduos suscetíveis). O modelo SIR estocástico espacialmente estruturado pertence à classe de universalidade da percolação isotrópica. Na referência [57] são apresentados os argumentos de como os clusters de recuperados do modelo SIR estocástico espacialmente estruturados relacionam-se

com os clusters da percolação.

As investigações nesta tese são feitas a partir da proposição de modelos motivados por dinâmicas de populações biológicas e da busca pela descrição das propriedades de sistemas irreversíveis. Procuramos descrever problemas da dinâmica de populações biológicas utilizando as abordagens 1 e 2 mencionadas anteriormente, bem como investigar as possíveis transições de fase existentes e identificar classes de universalidades.

Mais especificamente, além do processo de contato e do modelo SIR estocástico espacialmente estruturado, nesse doutorado investigamos três modelos:

- Modelo suscetível-infectado-recuperado com infecção recorrente. Neste modelo, além das transições do modelo suscetível-infectado-recuperado (SIR) usual, adiciona-se a possibilidade dos indivíduos infectados, espontaneamente, tornarem-se suscetíveis novamente. Neste trabalho utilizamos abordagem 2, ou seja, investigamos um modelo estocástico definido em uma rede regular com evolução temporal assíncrona, obtivemos resultados das simulações de Monte Carlo para o modelo definido na rede quadrada e das aproximações de campo médio simples e com pares.
- Dinâmica estocástica para duas espécies biológicas e dois nichos ecológicos. Nesse modelo temos quatro estados que podem ser interpretados como colônias dos tipos A e B e nichos desocupados dos tipos A e B . Admitimos que as colônias dos tipos A e B utilizam recursos diferentes e alteram seus meios ambientes de modos distintos. Dessa forma, em um nicho desocupado do tipo $A(B)$, ou seja, uma região com condições ambientais favoráveis à colônia do tipo $A(B)$ há a possibilidade de proliferação de uma colônia do tipo $A(B)$ devido à presença de vizinhos de colônias do tipo $A(B)$, isto é, a colônia $A(B)$ se expande. Eventualmente uma colônia do tipo $A(B)$ não pode mais sobreviver na região pois cessam os recursos, mas a colônia do tipo $B(A)$ pode, pois os recursos que esta utiliza são diferentes. Logo uma colônia do tipo $A(B)$ pode desaparecer espontaneamente deixando no seu lugar um nicho do tipo $B(A)$ desocupado. Nesta investigação buscamos descobrir se o

modelo gera cenários com oscilações das populações e alternância de dominância entre as espécies, pois essas são características de dinâmicas de populações encontradas na natureza [25, 26, 103–105]. Para este trabalho usamos as abordagens 1 e 2, ou seja, investigamos o modelo estocástico definido em uma rede regular com evolução temporal assíncrona através de simulações de Monte Carlo para o modelo definido na rede quadrada, obtivemos as aproximações de campo médio simples e com pares e investigamos a versão do modelo em que a dinâmica é dada por uma equação mestra do tipo “nascimento e morte”.

- Dinâmica estocástica para duas espécies biológicas e dois nichos ecológico com acreção de difusão. Este problema foi analisado por simulações de Monte Carlo em uma rede unidimensional. Neste trabalho novamente buscamos descobrir se o modelo gera cenários com oscilações das populações e alternância de dominância entre as espécies. Além disso, também procuramos obter o diagrama de fase a classe de universalidade do modelo.

No capítulo 2 apresentamos dois tipos de modelos com dinâmicas temporais governadas por uma equação que utilizamos nesta tese: processos estocásticos do tipo “nascimento e morte” e modelos estocásticos espacialmente estruturados assíncronos. No capítulo 3 ressaltamos alguns resultados importantes sobre o processo de contato e o modelo suscetível-infectado-recuperado (SIR) respectivamente, pois estes são modelos importantes na área, além disso que auxiliam na compreensão da tese. No capítulo 4 apresentamos a solução exata do modelo suscetível-infectado-recuperado (SIR) em uma rede unidimensional. No capítulo 5 expomos uma das pesquisas desta tese: o modelo suscetível-infectado-recuperado com infecção recorrente. No capítulo 6 apresentamos outro trabalho desta tese: a dinâmica estocástica para duas espécies biológicas e dois nichos ecológicos. Neste capítulo também utilizamos a abordagem 1 mencionada acima, na qual escrevemos uma equação mestra do tipo “nascimento e morte”. No capítulo 7 expomos a dinâmica estocástica para duas espécies biológicas e dois nichos ecológicos com acreção de difusão. O capítulo 8 apresenta as conclusões da tese. Nos apêndices A e B anexamos,

respectivamente, os artigos publicados sobre o modelo suscetível-infectado-recuperado com infecção recorrente e sobre a dinâmica estocástica para duas espécies biológicas e dois nichos ecológicos.

Capítulo 2

Modelos estocásticos definidos por equações mestras

Neste capítulo descrevemos dois tipos de modelos regidos por equações mestras e com espaço de estados discretizados: processos estocásticos do tipo “nascimento e morte” e modelos estocásticos espacialmente estruturados assíncronos. Existem outros tipos de modelos regidos por equações mestras, nosso foco aqui está nas abordagens que utilizamos nos trabalhos desta tese. Todavia, antes de apresentarmos estes dois tipos de modelos propriamente, relembremos a definição de cadeias de Markov bem como a dedução, feita a partir destas, da equação mestra para sistemas em que o espaço de estados é discretizado.

2.1 Cadeias de Markov

Seja uma variável estocástica ou um vetor estocástico $\mathbf{n}$ definido em um espaço de estados discretizado. Denotamos por

$$P_m(n_0, n_1, n_2, \dots, n_m) \tag{2.1}$$

a distribuição de probabilidade conjunta de que o estado $(n_0, n_1, n_2, \dots, n_m)$ seja tal que $n = n_k$ para $t = k$ com $k \in \{0, 1, 2, \dots, m\}$. Ademais, denotamos por

$$P_{m+1}(n_{m+1} | n_0, n_1, n_2, \dots, n_m), \quad (2.2)$$

a probabilidade condicional de que $n = n_{m+1}$ no instante $t = m + 1$, dado que $n = n_k$ nos instantes $t = k$ com $k \in \{0, 1, 2, \dots, m\}$. Denomina-se cadeia de Markov de alcance 1 um processo estocástico tal que seja satisfeita a seguinte propriedade

$$P_{m+1}(n_{m+1} | n_0, n_1, n_2, \dots, n_m) = P_{m+1}(n_{m+1} | n_m). \quad (2.3)$$

Ou seja, um processo em que o estado no instante $t = m + 1$ depende apenas do estado n_m no instante $t = m$. Segue dessa propriedade que

$$P_m(n_0, n_1, n_2, \dots, n_m) = P_m(n_m | n_{m-1}) \dots P_2(n_2 | n_1) P_1(n_1 | n_0) P(n_0). \quad (2.4)$$

A probabilidade $P_m(n_m)$ de que $n = n_m$ no instante $t = m$ é

$$P_m(n_m) = \sum_{\{n_k\}, k \neq m} P_m(n_0, n_1, n_2, \dots, n_m), \quad (2.5)$$

em que $\sum_{\{n_k\}, k \neq m}$ indica que a soma é feita sobre todos os n_k tal que $k \neq m$. Utilizando a relação (2.4) na equação (2.5) encontramos

$$P_m(n_m) = \sum_{n_{m-1}} P_m(n_m | n_{m-1}) P_{m-1}(n_{m-1}). \quad (2.6)$$

A probabilidade condicional $P_m(n_m | n_{m-1})$ pode ser entendida como a probabilidade de transição do estado n_{m-1} para o estado n_m , a qual pode depender do instante considerado. Nos processos markovianos cujas probabilidades de transição não variam no tempo escrevemos

$$P_m(n_m | n_{m-1}) = T(n_m, n_{m-1}), \quad (2.7)$$

e a equação (2.6) torna-se

$$P_m(\mathbf{n}_m) = \sum_{\mathbf{n}_{m-1}} T(\mathbf{n}_m, \mathbf{n}_{m-1}) P_{m-1}(\mathbf{n}_{m-1}), \quad (2.8)$$

ou ainda, simplificando a notação

$$P_m(\mathbf{n}) = \sum_{\mathbf{n}'} T(\mathbf{n}, \mathbf{n}') P_{m-1}(\mathbf{n}'). \quad (2.9)$$

E $T(\mathbf{n}, \mathbf{n}')$ pode ser entendido como um elemento de uma matriz T com as seguintes propriedades

$$T(\mathbf{n}, \mathbf{n}') \geq 0, \quad (2.10)$$

já que $T(\mathbf{n}, \mathbf{n}')$ é uma probabilidade condicional e

$$\sum_{\mathbf{n}} T(\mathbf{n}, \mathbf{n}') = 1, \quad (2.11)$$

pois ela deve estar normalizada. A matriz T é denominada matriz estocástica.

2.2 Equação mestra em espaços de estados discretizados

Seja uma cadeia de Markov cuja matriz estocástica é $T(\mathbf{n}, \mathbf{n}')$. Considere que as transições ocorrem a cada intervalo de tempo Δt e que a matriz estocástica satisfaça as seguintes propriedades

$$T(\mathbf{n}, \mathbf{n}') = \Delta t W(\mathbf{n}, \mathbf{n}'), \quad (2.12)$$

$$T(\mathbf{n}', \mathbf{n}') = 1 - \Delta t \Omega(\mathbf{n}'), \quad (2.13)$$

Nota-se que $\Omega(\mathbf{n}') = \sum_{\mathbf{n} \neq \mathbf{n}'} W(\mathbf{n}, \mathbf{n}')$, pois admitindo que Δt é tão pequeno que a probabilidade de permanência no mesmo estado é próxima à unidade

e lembrando da propriedade dada na equação (2.11) segue que

$$\sum_n T(n, n') = 1 - \Omega(n')\Delta t \times \sum_{n \neq n'} T(n, n') = 1 \Rightarrow \Omega(n') = \sum_{n \neq n'} W(n, n'). \quad (2.14)$$

Utilizando as equações (2.12) e (2.13) na equação (2.9) obtemos

$$P_{m+1}(n) = T(n, n)P_m(n) + \sum_{n' \neq n} T(n, n')P_m(n'), \quad (2.15)$$

$$P_{m+1}(n) = P_m(n) - \Delta t \Omega(n)P_m(n) + \Delta t \sum_{n' \neq n} W(n, n')P_m(n'). \quad (2.16)$$

Definindo $P(n, t)$ como a probabilidade do sistema estar no estado n no instante $t = m\Delta t$, tomando o limite em que $\Delta t \rightarrow 0$ e usando a propriedade dada na equação (2.14) encontramos

$$\frac{P(n, t + \Delta t) - P(n, t)}{\Delta t} = -\Omega(n)P(n, t) + \sum_{n' \neq n} W(n, n')P(n', t), \quad (2.17)$$

$$\frac{d}{dt}P(n, t) = \sum_{n' \neq n} \{W(n, n')P(n', t) - W(n', n)P(n, t)\}. \quad (2.18)$$

A expressão (2.18) é denominada equação mestra e fornece a evolução temporal para a distribuição de probabilidades $P(n, t)$ para processos markovianos a tempo contínuo e em espaços de estados discretizados. Convém notar que $W(n, n')$ é a taxa de transição (isto é, a probabilidade de transição por unidade de tempo), do estado n' para o estado n . Além disso, dada uma grandeza de estado $f(n)$, cuja média é definida por

$$\langle f(n) \rangle = \sum_n f(n)P(n, t), \quad (2.19)$$

é possível obter, através da equação mestra (2.18), a equação para a evolução temporal da média $\langle f(n) \rangle$ pois

$$\frac{d}{dt}\langle f(n) \rangle = \sum_n f(n) \frac{d}{dt}P(n, t). \quad (2.20)$$

2.2.1 Condição de balanceamento detalhado

Dado um sistema regido por uma equação mestra (2.20), temos que o sistema evolui no tempo e pode atingir estados estacionários nos quais,

$$\frac{d}{dt}P(n,t) = 0. \quad (2.21)$$

Nesse caso o sistema é descrito por uma distribuição de probabilidades estacionária $P_{est}(n)$ tal que

$$\sum_{n'} [P_{est}(n')W(n,n') - P_{est}(n)W(n',n)] = 0. \quad (2.22)$$

Dizemos que a condição de balanceamento detalhado é satisfeita se as taxas são tais que vale a expressão

$$P_{est}(n')W(n,n') = P_{est}(n)W(n',n), \quad (2.23)$$

$\forall(n,n')$. Quando esta condição é satisfeita o sistema atinge um estado de equilíbrio termodinâmico.

Se um sistema satisfaz a condição de balanceamento detalhado então ele possui reversibilidade microscópica porque

$$P_{est}(n')W(n,n')\Delta t = P_{est}(n)W(n',n)\Delta t, \quad (2.24)$$

sendo o termo à esquerda interpretado como a probabilidade de o sistema se encontrar no instante t no estado n' e no instante $t + \Delta t$ no estado n e o termo à direita como a probabilidade de o sistema se encontrar no instante t no estado n e no instante $t + \Delta t$ no estado n' . Em outras palavras, a probabilidade de transição $n' \rightarrow n$ em um intervalo de tempo Δt é igual à sua reversa para qualquer par (n,n') .

Os modelos tratados nesta tese são inerentemente irreversíveis, as taxas de transição que os definem fazem com que a condição de balanceamento detalhado não possa ser satisfeita. De fato, todos modelos apresentados nesse trabalho possuem estados absorventes, estados que uma vez atingidos têm a

transição para qualquer outro estado proibida; contudo, a transição de outros estados para os estados absorventes pode ocorrer, logo não há reversibilidade microscópica.

2.3 Processos estocásticos do tipo “nascimento e morte”

Processos do tipo “nascimento e morte” [2], ou “birth and death processes” [3, 15, 17, 20] ou “one-step processes” [6] são processos markovianos a tempo contínuo nos quais as variáveis estocásticas assumem valores dentro de um conjunto de inteiros e cujas transições são tais que estas variáveis podem sofrer apenas incrementos de ± 1 . As equações mestras que regem esses processos são chamadas de equações mestras do tipo “nascimento e morte” ou do tipo “birth and death”. Nesta tese utilizamos um modelo do tipo “nascimento e morte” para analisar a dinâmica de duas espécies biológicas e dois nichos ecológicos no capítulo 6.

2.3.1 Caso 1: uma variável estocástica.

Frequentemente o termo processos do tipo “nascimento e morte” diz respeito a processos de uma única variável estocástica. O nome “nascimento e morte” provém justamente de que em alguns casos essa variável pode ser interpretada como o tamanho de uma população e os processos existentes podem ser entendidos como nascimentos ou mortes de indivíduos [15, 17, 20].

Para uma variável estocástica, define-se um processo estocástico do tipo “nascimento e morte” [6] como um processo markoviano a tempo contínuo, em que uma variável estocástica n assume valores em conjunto I de inteiros, no qual a evolução temporal é dada por equação mestra

$$\frac{d}{dt}P(n,t) = \sum_{n' \neq n} \{W(n,n')P(n',t) - W(n',n)P(n,t)\}, \quad (2.25)$$

e cuja taxa de transição é da forma

$$W(n, n') = B(n')\delta(n' + 1, n) + D(n')\delta(n', n + 1) \quad n' \neq n. \quad (2.26)$$

$$W(n, n) = -[B(n) + D(n)]. \quad (2.27)$$

Em que usamos a notação $\delta(a, b)$ para denotar o delta de Kronecker. Substituindo a taxa dada na expressão (2.26) na equação mestra (2.25) obtemos

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}P(n, t) &= \sum_{n' \neq n} \{W(n, n')P(n', t) - W(n, n')P(n, t)\}, \\ \frac{d}{dt}P(n, t) &= \sum_{n' \neq n} \{[B(n')\delta(n' + 1, n) + D(n')\delta(n', n + 1)]P(n', t) \\ &\quad - [B(n)\delta(n + 1, n') + D(n)\delta(n, n + 1)]P(n, t)\}, \\ \frac{d}{dt}P(n, t) &= B(n - 1)P(n - 1, t) + D(n + 1)P(n + 1, t) - [B(n) + D(n)]P(n, t). \end{aligned} \quad (2.28)$$

Esta última equação é denominada equação mestra do tipo “nascimento e morte” [6, 15, 17, 20] e $B(n)$, $D(n)$ podem ser entendidas com as taxas de nascimento e morte de um indivíduo, respectivamente. Convém destacar que há cinco categorias para esta equação com relação ao intervalo I no qual n assume valores [6]:

1. $I = \mathbb{Z}$;
2. $I = \{n \in \mathbb{Z} | n > n_0\}$, por exemplo, $I = \mathbb{N}$;
3. $I = \{n \in \mathbb{Z} | n < N\}$;
4. $I = \{n_0, n_0 + 1, \dots, N\}$;
5. I constituído da união de conjuntos dos tipos 2, 3, 4, separados por lacunas nas quais não podem ocorrer transições, de modo que o processo pode ser decomposto em vários processos independentes dos tipos 2, 3 e 4.

Além disso, no que se refere às taxas $B(n)$ e $D(n)$ existem as seguintes classificações [6]:

1. $B(n)$ e $D(n)$ constantes, independentes de n ;
2. $B(n)$ e $D(n)$ dependem de n linearmente;
3. $B(n)$ e $D(n)$ dependem de n não-linearmente;
4. $B(n)$ pertence a um dos tipos 1, 2, e 3 e $D(n)$ a outro.

Dada uma grandeza de estado $f(n)$, a partir da equação mestra do tipo “nascimento e morte” (2.28), podemos encontrar a equação para a evolução temporal da média $\langle f(n) \rangle$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle f(n) \rangle &= \sum_n f(n) \frac{d}{dt} P(n, t), \\ \frac{d}{dt} \langle f(n) \rangle &= \sum_n f(n) [B(n-1)P(n-1, t) + D(n+1)P(n+1, t) - [B(n) + D(n)]P(n, t)], \\ \frac{d}{dt} \langle f(n) \rangle &= \langle [f(n+1) - f(n)]B(n) \rangle + \langle [f(n-1) - f(n)]D(n) \rangle. \end{aligned} \quad (2.29)$$

Em particular, para $f(n) = n$ encontramos

$$\frac{d}{dt} \langle n \rangle = \langle B(n) \rangle - \langle D(n) \rangle. \quad (2.30)$$

Já para $f(n) = n^2$ obtemos

$$\frac{d}{dt} \langle n^2 \rangle = \langle (2n+1)B(n) \rangle - \langle (2n-1)D(n) \rangle. \quad (2.31)$$

Alguns exemplos

Destacamos aqui alguns exemplos de processos do tipo “nascimento e morte” para uma variável. Não apresentamos os detalhes das resoluções, pois estas fogem ao escopo da tese e podem ser encontradas nas referências que citamos ao longo do texto.

Exemplo 1: Processo de Poisson

Para $I = \mathbb{N}$, $P(n, 0) = \delta(n, 0)$, $D(n) = 0$, $B(n) = \mathcal{Q}$, sendo $\mathcal{Q}$ uma constante,

temos o processo de Poisson [6, 15], cuja equação mestra é

$$\frac{d}{dt}P(n,t) = \mathcal{Q}(P(n-1,t) - P(n,t)) \quad \text{para } n > 0. \quad (2.32)$$

Para $n = 0$ não há a possibilidade da transição para $n = -1$, de modo que a equação se reduz a

$$\frac{d}{dt}P(0,t) = -\mathcal{Q}P(0,t). \quad (2.33)$$

Esse conjunto de equações diferenciais pode ser resolvido iterativamente, ou pelo método da função geratriz [15], e a solução é justamente a distribuição de Poisson

$$P(n,t) = \frac{1}{n!}e^{-\mathcal{Q}t}(\mathcal{Q}t)^n, \quad (2.34)$$

Da equação (2.30), lembrando que $n(0) = 0$, encontramos a média $\langle n(t) \rangle$,

$$\frac{d}{dt}\langle n(t) \rangle = \mathcal{Q} \Rightarrow \langle n(t) \rangle = \mathcal{Q}t. \quad (2.35)$$

Da equação (2.31), lembrando que $n(0) = 0$, obtemos

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle n^2(t) \rangle &= \langle (2n(t) + 1)\mathcal{Q} \rangle = 2\mathcal{Q}^2t + \mathcal{Q} \\ \Rightarrow \langle n^2(t) \rangle &= \mathcal{Q}^2t^2 + \mathcal{Q}t \end{aligned} \quad (2.36)$$

Logo, para a variância $\sigma^2 = \langle n^2(t) \rangle - \langle n(t) \rangle^2$ encontramos

$$\sigma^2(t) = \mathcal{Q}t \quad (2.37)$$

Exemplo 2: Processo de nascimento puro

Para $I = \{n \in \mathbb{N} | n \geq n_0\}$, $P(n,0) = \delta(n,n_0)$, $B(n) = \mathcal{B}n$ e $D(n) = 0$, sendo $\mathcal{B}$ uma constante, temos o processo de nascimento puro (“pure birth process”[20]) no qual as hipóteses são: o processo analisado está numa escala de tempo em que os indivíduos não morrem, os recursos são ilimitados, a taxa de reprodução é à mesma para todos os seres sendo independente do tempo e da idade dos indivíduos. Essa última hipótese é melhor aplicada, por exemplo, para seres unicelulares que se reproduzem por mitose. Neste caso,

a equação mestra, para $n > n_0$, torna-se

$$\frac{d}{dt}P(n,t) = \mathcal{B}[(n-1)P(n-1,t) - nP(n,t)]. \quad (2.38)$$

Para $n = n_0$ não há a possibilidade da transição de $n_0 - 1$ para n_0 , pois a condição inicial é $n = n_0$ e só ocorrem nascimentos, logo, para $n = n_0$ temos

$$\frac{d}{dt}P(n_0,t) = -\mathcal{B}n_0P(n_0,t). \quad (2.39)$$

Pode-se encontrar a solução resolvendo o conjunto de equações iterativamente, ou pelo método da função geratriz, ou ainda usando a técnica de variáveis aleatórias [15], o resultado que se encontra é

$$P(n,t) = \binom{n-1}{n-n_0} e^{-\mathcal{B}n_0t} (1 - e^{-\mathcal{B}t})^{n-n_0}, \quad (2.40)$$

Portanto $P(n,t)$ é uma distribuição binominal negativa para o processo de nascimento puro.

Substituindo os valores das taxas na equação (2.30), lembrando que $n(0) = n_0$, obtemos a média $\langle n(t) \rangle$

$$\frac{d}{dt}\langle n(t) \rangle = \mathcal{B}\langle n(t) \rangle \Rightarrow \langle n(t) \rangle = n_0 e^{\mathcal{B}t}. \quad (2.41)$$

Lembrando da equação (2.31), e da condição inicial $n^2(0) = n_0^2$ encontramos

$$\frac{d}{dt}\langle n^2(t) \rangle = \langle (2n(t) + 1)\mathcal{B}n(t) \rangle = 2\mathcal{B}\langle n^2(t) \rangle + \mathcal{B}\langle n(t) \rangle \quad (2.42)$$

$$\Rightarrow \langle n^2(t) \rangle = n_0(n_0 + 1)e^{2\mathcal{B}t} - n_0e^{\mathcal{B}t}, \quad (2.43)$$

Dessa forma, para a variância $\sigma^2 = \langle n^2(t) \rangle - \langle n(t) \rangle$ obtemos

$$\sigma^2(t) = n_0(e^{2\mathcal{B}t} - e^{\mathcal{B}t}). \quad (2.44)$$

Exemplo 3: Processo de morte puro

Para $I = \{n \in \mathbb{N} | n \leq n_0\}$, $P(n,0) = \delta(n,n_0)$, $B(n) = 0$ e $D(n) = \mathcal{D}n$,

sendo $\mathcal{D}$ uma constante, temos a situação reversa, o processo de morte puro (“pure death process” [20]). Neste caso as hipóteses são: os organismos não se reproduzem, os indivíduos se desenvolvem independentemente, a taxa com a qual os seres morrem é a mesma para todos indivíduos e não muda com o tempo. Dessa forma, a equação mestra, para $n < n_0$, é

$$\frac{d}{dt}P(n,t) = D[(n+1)P(n+1,t) - nP(n,t)]. \quad (2.45)$$

Para $n = n_0$ não há a possibilidade da transição de $n_0 + 1$ para n_0 , pois a condição inicial é $n = n_0$ e só ocorrem mortes, assim a equação se reduz a

$$\frac{d}{dt}P(n_0,t) = -Dn_0P(n_0,t). \quad (2.46)$$

Pode-se demonstrar, resolvendo as equações diferenciais iterativamente, usando a técnica da função geratriz, ou a técnica de variáveis aleatórias [15], que a solução desta equação é

$$P(n,t) = \binom{n_0}{n} e^{-\mathcal{D}nt} (1 - e^{-\mathcal{D}t})^{n_0-n}. \quad (2.47)$$

Em particular, este resultado também pode ser encontrado da seguinte forma: escreve-se a equação diferencial para a probabilidade $\mathcal{V}(t)$ de que um indivíduo específico esteja vivo no instante t , resolve-se esta equação, nota-se que a probabilidade de que um indivíduo esteja morto no instante t é $\mathcal{M}(t) = 1 - \mathcal{V}(t)$; então, lembrando que as mortes são eventos independentes, escreve-se a distribuição binomial com probabilidades $\mathcal{V}(t)$ e $\mathcal{M}(t)$ de o indivíduo estar vivo ou morto, respectivamente, no instante t [20].

Além disso, substituindo os valores das taxas na equação (2.30), encontramos a expressão para $\langle n(t) \rangle$

$$\frac{d}{dt}\langle n(t) \rangle = -\mathcal{D}\langle n(t) \rangle \Rightarrow \langle n(t) \rangle = n_0 e^{-\mathcal{D}t}. \quad (2.48)$$

Mais uma vez, lembrando da equação (2.31), e da condição inicial $n^2(0) = n_0^2$

encontramos

$$\frac{d}{dt}\langle n^2(t) \rangle = \langle -(2n(t) - 1)\mathcal{D}n(t) \rangle = -2\langle n^2(t) \rangle + \mathcal{D}\langle n(t) \rangle \quad (2.49)$$

$$\Rightarrow \langle n^2(t) \rangle = n_0(n_0 - 1)e^{-2\mathcal{D}t} + n_0e^{-\mathcal{D}t}, \quad (2.50)$$

Dessa forma, para a variância $\sigma^2 = \langle n^2(t) \rangle - \langle n(t) \rangle^2$ obtemos

$$\sigma^2(t) = n_0(e^{-\mathcal{D}t} - e^{2\mathcal{D}t}). \quad (2.51)$$

Exemplo 4: Processo nascimento e morte simples linear

A união dos dois processos descritos acima nos exemplos 2 e 3 gera o processo de nascimento e morte simples linear (“simple linear birth and death process”[20]). Nesse caso as hipóteses são: todos os membros da população são capazes de se reproduzir, as taxas com as quais os indivíduos se reproduzem e morrem são constantes não dependem nem da idade dos indivíduos nem do tempo.

Assim, para $I = \mathbb{N}$, $B(n) = \mathcal{B}n$ e $D(n) = \mathcal{D}n$, sendo $\mathcal{B}$ e $\mathcal{D}$ constantes, a equação mestra para $n > 0$ é

$$\frac{d}{dt}P(n,t) = \mathcal{B}[(n-1)P(n-1,t) - nP(n,t)] + \mathcal{D}[(n+1)P(n+1,t) - D(n)P(n,t)] \quad (2.52)$$

Já para $n = 0$, não podem nascer indivíduos sem que haja alguma população, nem existem indivíduos para morrer, portanto a equação torna-se

$$\frac{d}{dt}P(0,t) = \mathcal{D}(1)P(1,t). \quad (2.53)$$

Mais uma vez a solução pode ser encontrada tanto pelo método da função geratriz, quanto técnica de variáveis aleatórias [15]. Em particular, para $\langle n(0) \rangle = 1$ obtém-se a distribuição geométrica

$$P(0,t) = \mathcal{F}(t) \quad (2.54)$$

$$P(n,t) = [1 - \mathcal{F}(t)][1 - \mathcal{G}(t)][\mathcal{G}(t)]^{n-1} \quad \text{para } n \geq 1 \quad (2.55)$$

$$\mathcal{F}(t) = \frac{\mathcal{D}(e^{(\mathcal{B}-\mathcal{D})t} - 1)}{\mathcal{B}e^{(\mathcal{B}-\mathcal{D})t} - \mathcal{D}} \quad (2.56)$$

$$\mathcal{G}(t) = \frac{\mathcal{B}(e^{(\mathcal{B}-\mathcal{D})t} - 1)}{\mathcal{B}e^{(\mathcal{B}-\mathcal{D})t} - \mathcal{D}} \quad (2.57)$$

Existe solução exata para $P(n,t)$ para qualquer condição inicial $\langle n(0) \rangle = n_0 \neq 1$, contudo, por essa ser demasiadamente longa não a apresentamos neste texto. Substituindo os valores das taxas na equação (2.30), e admitindo como condição inicial $n(t) = n_0$ encontramos a expressão para $\langle n(t) \rangle$

$$\frac{d}{dt} \langle n(t) \rangle = \langle \mathcal{B} \rangle - \langle \mathcal{D} \rangle \Rightarrow \langle n(t) \rangle = n_0 e^{(\mathcal{B}-\mathcal{D})t} \quad (2.58)$$

Substituindo os valores das taxas na equação (2.31), obtemos a equação para $\langle n^2(t) \rangle$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle n^2(t) \rangle &= \langle (2n(t) + 1)\mathcal{B}n(t) \rangle - \langle (2n(t) - 1)\mathcal{D}n(t) \rangle \\ &= 2(\mathcal{B} - \mathcal{D}) \langle n^2(t) \rangle + (\mathcal{B} + \mathcal{D}) \langle n(t) \rangle \\ &\Rightarrow \langle n^2(t) \rangle = n_0 \left(n_0 + \frac{\mathcal{B} + \mathcal{D}}{\mathcal{B} - \mathcal{D}} \right) e^{2(\mathcal{B}-\mathcal{D})t} - n_0 \frac{\mathcal{B} + \mathcal{D}}{\mathcal{B} - \mathcal{D}} e^{(\mathcal{B}-\mathcal{D})t}, \end{aligned} \quad (2.59)$$

Logo, para a variância $\sigma^2 = \langle n^2(t) \rangle - \langle n(t) \rangle$ encontramos

$$\sigma^2(t) = n_0 \frac{\mathcal{B} + \mathcal{D}}{\mathcal{B} - \mathcal{D}} (e^{2(\mathcal{B}-\mathcal{D})t} - e^{(\mathcal{B}-\mathcal{D})t}). \quad (2.60)$$

Para modelos mais realistas, taxas $B(n)$ e $D(n)$ mais complexas podem ser introduzidas, entretanto para casos mais complexos eventualmente não é possível encontrar solução exata, mas ainda é possível fazer simulações da dinâmica dada pela equação mestra.

2.3.2 Caso 2: M variáveis estocásticas

Apresentamos agora uma das possíveis generalizações para M variáveis estocásticas, a qual utilizamos nesta tese. Seja um conjunto de N elementos de M tipos, consideremos a variável estocástica n_k referente ao número de elementos

do tipo k , com $k \in \{0, 1, 2, \dots, M-1\}$, o estado do sistema fica definido pelo vetor estocástico

$$\mathbf{n} = (n_0, n_1, \dots, n_k, \dots, n_{M-1}). \quad (2.61)$$

A evolução temporal é dada por uma equação mestra

$$\frac{d}{dt}P(\mathbf{n}, t) = \sum_{\mathbf{n}' \neq \mathbf{n}} \{W(\mathbf{n}, \mathbf{n}')P(\mathbf{n}', t) - W(\mathbf{n}', \mathbf{n})P(\mathbf{n}, t)\}. \quad (2.62)$$

Admitamos que só ocorrem transições entre estados $\mathbf{n}'$ e $\mathbf{n}$ que diferem pelo estado de apenas duas variáveis estocásticas sucessivas da seguinte forma: uma variável estocástica n_k sofre um decremento de -1 e sua sucessora um incremento de +1. Considerando que n_0 é a variável sucessora de n_{M-1} , todas transições podem ser descritas pela expressão

$$n_k \rightarrow n_k - 1 \quad (2.63)$$

$$n_{\text{mod}(k+1, M)} \rightarrow n_{\text{mod}(k+1, M)} + 1 \quad (2.64)$$

Em que usamos a notação $\text{mod}(m_1, m_2) = m_1 \bmod m_2$. Convém notar que utilizamos a função $\text{mod}(m_1, m_2)$ por ela possuir a seguinte propriedade

$$\text{mod}(m_1 + Rm_2, m_2) = \text{mod}(m_1, m_2) \quad \forall R \in \mathbb{Z}, \quad (2.65)$$

por exemplo, $\text{mod}(-2, 3) = \text{mod}(1, 3) = \text{mod}(4, 3) = 1$. Denominado a transição definida pelas expressões (2.63) e (2.64) como processo rotativos, denotando por $\omega_k(\mathbf{n})$ a taxa de transição destes processos, notamos que quando nos restringimos aos processos rotativos:

- os estados $\mathbf{n}'$, a partir dos quais podem ocorrer um processo que leva ao estado $\mathbf{n}$ são escritos como

$$\mathbf{n}' = (n_0, n_1, \dots, n_k + 1, n_{\text{mod}(k+1, M)} - 1, \dots, n_{M-1}),$$

com $k \in \{0, 1, 2, \dots, M-1\}$,

- a taxa $W(\mathbf{n}, \mathbf{n}')$ é substituída pela taxa $\omega_k(\mathbf{n}')$,

- a somatória em $\mathbf{n}'$ é substituída pela somatória em k .

Dessa forma, a equação mestra do tipo “nascimento e morte” para modelos de M variáveis estocásticas em que só ocorrem processos rotativos é

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}P(\mathbf{n},t) = & \sum_{k=0}^{M-1} \left\{ \omega_k[(n_0, n_1, \dots, n_k + 1, n_{\text{mod}(k+1, M)} - 1, \dots, n_{M-1})] \right. \\ & \times P[(n_0, n_1, \dots, n_k + 1, n_{\text{mod}(k+1, M)} - 1, \dots, n_{M-1}), t] - \omega_k(\mathbf{n})P(\mathbf{n}, t) \left. \right\}. \end{aligned} \quad (2.66)$$

Denotando por $\mathbf{e}^k = (e_0^k, e_1^k, \dots, e_{M-1}^k)$ o vetor tal que

$$e_i^k = -\delta(i, k) + \delta(i, \text{mod}(k+1, M)) \quad (2.67)$$

podemos reescrever a equação (2.66) como

$$\frac{d}{dt}P(\mathbf{n},t) = \sum_{k=0}^{M-1} [\omega_k(\mathbf{n} - \mathbf{e}^k)P(\mathbf{n} - \mathbf{e}^k, t) - \omega_k(\mathbf{n})P(\mathbf{n}, t)]. \quad (2.68)$$

A evolução temporal da média $\langle F(\mathbf{n}) \rangle$, de uma grandeza de estado $F(\mathbf{n})$, é dada por

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle F(\mathbf{n}) \rangle &= \frac{d}{dt} \sum_{\mathbf{n}} P(\mathbf{n})F(\mathbf{n}) \\ \frac{d}{dt}\langle F(\mathbf{n}) \rangle &= \sum_{\mathbf{n}} \sum_{k=0}^{M-1} [\omega_i(\mathbf{n} - \mathbf{e}^k)P(\mathbf{n} - \mathbf{e}^k) - \omega_k(\mathbf{n})P(\mathbf{n})]F(\mathbf{n}) \\ \frac{d}{dt}\langle F(\mathbf{n}) \rangle &= \sum_{k=0}^{M-1} \langle [F(\mathbf{n} + \mathbf{e}^k) - F(\mathbf{n})]\omega_k(\mathbf{n}) \rangle \end{aligned} \quad (2.69)$$

Em particular, para $F(\mathbf{n}) = n_i$, encontramos

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle n_i \rangle &= \langle [(n_i - 1) - n_i]\omega_i(\mathbf{n}) \rangle + \langle [(n_{\text{mod}(i-1, M)} + 1) - n_{\text{mod}(i-1, M)}]\omega_{\text{mod}(i-1, M)}(\mathbf{n}) \rangle \\ \frac{d}{dt}\langle n_i \rangle &= -\langle \omega_i(\mathbf{n}) \rangle + \langle \omega_{\text{mod}(i-1, M)}(\mathbf{n}) \rangle. \end{aligned} \quad (2.70)$$

Já para $F(\mathbf{n}) = n_i^2$, obtemos

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle n_i^2 \rangle &= \langle [(n_i - 1)^2 - n_i^2] \varpi_i(\mathbf{n}) \rangle + \\ &\quad + \langle [(n_{\text{mod}(i-1),M} + 1)^2 - n_{\text{mod}(i-1,M)}^2] \varpi_{\text{mod}(i-1,M)}(\mathbf{n}) \rangle \\ \frac{d}{dt} \langle n_i^2 \rangle &= \langle (1 - 2n_i) \varpi_i(\mathbf{n}) \rangle + \langle (1 + 2n_{\text{mod}(i-1,M)}) \varpi_{\text{mod}(i-1,M)}(\mathbf{n}) \rangle. \end{aligned} \quad (2.71)$$

A partir de $\langle n_i^2 \rangle$ e de $\langle n_i \rangle^2$ pode-se encontrar a variância σ_i

$$\sigma_i^2 = \langle n_i^2 \rangle - \langle n_i \rangle^2. \quad (2.72)$$

Exemplo: Modelo predador-presa

Um modelo do tipo “nascimento e morte” para o sistema predador presa, que possui três estados, foi investigado no artigo [44], todavia vale mencionar que a notação utilizada no artigo é diferente. Neste modelo considera-se que existem espaços vazios, espaços ocupados por presas e espaços ocupados por predadores. Assim o sistema fica definido pelo vetor estocástico

$$\mathbf{n} = (n_0, n_1, n_2), \quad (2.73)$$

em que n_0 é o número de espaços vazios, n_1 o número de presas e n_2 o número de predadores. O número total de espaços é constante, $n_0 + n_1 + n_2 = N$. As transições existentes neste sistema são (i) espaços vazios são ocupados por presas com taxa proporcional à fração de presas no sistema, (ii) predadores alimentam-se das presas tomando seu espaço com taxa proporcional à fração de predadores no sistema, (iii) predadores morrem espontaneamente deixando espaços vazios. Dessa forma, os processos possíveis e suas taxas são

$$n_0 \rightarrow n_0 - 1 \text{ e } n_1 \rightarrow n_1 + 1 \text{ com taxa } \varpi_0(\mathbf{n}) = an_0 \frac{n_1}{N} \quad (2.74)$$

$$n_1 \rightarrow n_1 - 1 \text{ e } n_2 \rightarrow n_2 + 1 \text{ com taxa } \varpi_1(\mathbf{n}) = bn_1 \frac{n_2}{N}, \quad (2.75)$$

$$n_2 \rightarrow n_2 - 1 \text{ e } n_0 \rightarrow n_0 + 1 \text{ com taxa } \varpi_2(\mathbf{n}) = cn_2. \quad (2.76)$$

Assim, a equação mestra do tipo “nascimento e morte” para este modelo é

$$\frac{d}{dt}P(\mathbf{n},t) = \sum_{k=0}^2 [\omega_k(\mathbf{n} - \mathbf{e}^k)P(\mathbf{n} - \mathbf{e}^k,t) - \omega_i(\mathbf{n})P(\mathbf{n},t)]. \quad (2.77)$$

Em que $\mathbf{e}^0 = (-1,1,0)$, $\mathbf{e}^1 = (0, -1,1)$ e $\mathbf{e}^2 = (1,0, -1)$, e as taxas $\omega_0(\mathbf{n})$, $\omega_1(\mathbf{n})$ e $\omega_2(\mathbf{n})$ são dadas nas equações (2.74-2.76).

A partir da equação (2.70) obtemos as equações para as evoluções temporais das médias de n_0 , n_1 e n_2

$$\frac{d}{dt}\langle n_0 \rangle = -\langle \omega_0(\mathbf{n}) \rangle + \langle \omega_2(\mathbf{n}) \rangle = -\frac{a}{N}\langle n_0 n_1 \rangle + c\langle n_2 \rangle, \quad (2.78)$$

$$\frac{d}{dt}\langle n_1 \rangle = -\langle \omega_1(\mathbf{n}) \rangle + \langle \omega_0(\mathbf{n}) \rangle = -\frac{b}{N}\langle n_1 n_2 \rangle + \frac{a}{N}\langle n_0 n_1 \rangle, \quad (2.79)$$

$$\frac{d}{dt}\langle n_2 \rangle = -\langle \omega_2(\mathbf{n}) \rangle + \langle \omega_1(\mathbf{n}) \rangle = -c\langle n_2 \rangle + \frac{b}{N}\langle n_1 n_2 \rangle. \quad (2.80)$$

Através da equação (2.71), encontramos as equações para $\langle n_0^2 \rangle$, $\langle n_1^2 \rangle$ e $\langle n_2^2 \rangle$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle n_0^2 \rangle &= \langle (1 - 2n_0)\omega_0(\mathbf{n}) \rangle + \langle (1 + 2n_2)\omega_2(\mathbf{n}) \rangle, \\ &= \frac{a}{N}\langle (1 - 2n_0)n_0 n_1 \rangle + c\langle (1 + 2n_2)n_2 \rangle, \end{aligned} \quad (2.81)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle n_1^2 \rangle &= \langle (1 - 2n_1)\omega_1(\mathbf{n}) \rangle + \langle (1 + 2n_0)n_0\omega_0(\mathbf{n}) \rangle, \\ &= \frac{b}{N}\langle (1 - 2n_1)n_1 n_2 \rangle + \frac{a}{N}\langle (1 + 2n_0)n_0 n_1 \rangle, \end{aligned} \quad (2.82)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle n_2^2 \rangle &= \langle (1 - 2n_2)\omega_2(\mathbf{n}) \rangle + \langle (1 + 2n_1)n_1\omega_1(\mathbf{n}) \rangle, \\ &= \frac{c}{N}\langle (1 - 2n_2)n_2 \rangle + \frac{b}{N}\langle (1 + 2n_1)n_1 n_2 \rangle. \end{aligned} \quad (2.83)$$

2.3.3 Caso 2: M variáveis estocásticas no limite do contínuo

Para valores grandes de N , pode ser feita uma expansão na equação mestra do tipo “nascimento e morte” (6.94) que leva a uma equação de Fokker-Planck.

Inicialmente definimos as variáveis estocásticas

$$x_i = n_i / N, \quad (2.84)$$

com i assumindo os valores no conjunto $\{0, 1, 2, \dots, M-1\}$, o vetor estocástico

$$\mathbf{x} = (x_0, x_1, \dots, x_{M-1}), \quad (2.85)$$

a taxa

$$\varsigma_k(\mathbf{x}) = \varpi_k(\mathbf{n}) / N, \quad (2.86)$$

e a distribuição de probabilidades $\varrho(\mathbf{x}, t)$. Desse modo, a equação (2.68) fornece

$$\frac{\partial}{\partial t} \varrho(\mathbf{x}, t) = N \sum_{k=0}^{M-1} [\varsigma_k(\mathbf{x} - \mathbf{e}^k / N) \varrho(\mathbf{x} - \mathbf{e}^k / N, t) - \varsigma_k(\mathbf{x}) \varrho(\mathbf{x}, t)], \quad (2.87)$$

Definindo agora função $b_k(\mathbf{x}, t)$ tal que

$$b_k(\mathbf{x}, t) = \varsigma_k(\mathbf{x}) \varrho(\mathbf{x}, t), \quad (2.88)$$

a equação (2.87) torna-se

$$\frac{\partial}{\partial t} \varrho(\mathbf{x}, t) = N \sum_{i=0}^{M-1} [b_k(\mathbf{x} - \mathbf{e}^k / N, t) - b_k(\mathbf{x}, t)], \quad (2.89)$$

Sendo $\mathbf{j}^k$ o vetor tal que

$$\mathbf{j}_i^k = \delta(k, i), \quad (2.90)$$

vemos que

$$\mathbf{e}^k = -\mathbf{j}^k + \mathbf{j}^{\text{mod}(k+1, M)} \quad (2.91)$$

logo, a equação (2.89) pode ser expressa por

$$\frac{\partial}{\partial t} \varrho(\mathbf{x}, t) = N \sum_{k=0}^{M-1} [b_k(\mathbf{x} + \mathbf{j}^k / N - \mathbf{j}^{\text{mod}(k+1, M)} / N, t) - b_k(\mathbf{x}, t)], \quad (2.92)$$

Tal notação é útil para fazer a expansão do termo $b_k(\mathbf{x} + \mathbf{j}^k / N - \mathbf{j}^{\text{mod}(k+1, M)} / N, t)$.

Expandindo $b_k(\mathbf{x} + \mathbf{j}^k/N - \mathbf{j}^{mod(k+1,M)}/N, t)$ em torno de $\mathbf{x}$ até ordem de $1/N$ encontramos

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \varrho(\mathbf{x}, t) = N \sum_{k=0}^{M-1} & \left[b_k(\mathbf{x}, t) + \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial x_k} b_k(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial x_{mod(k+1,M)}} b_k(\mathbf{x}, t) \right. \\ & + \frac{1}{2N^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_k^2} b_k(\mathbf{x}, t) + \frac{\partial^2}{\partial x_{mod(k+1,M)}^2} b_k(\mathbf{x}, t) + \right. \\ & \left. \left. - \frac{1}{2N} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_k \partial x_{mod(k+1,M)}} b_k(\mathbf{x}, t) + \frac{\partial^2}{\partial x_{mod(k+1,M)} \partial x_k} b_k(\mathbf{x}, t) \right) - b_k(\mathbf{x}, t) \right], \end{aligned} \quad (2.93)$$

Fazendo a mudança de variável $mod(k+1, M) \rightarrow k'$ no terceiro e no quinto termo da somatória e simplificando a expressão obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \varrho(\mathbf{x}, t) = \sum_{k=0}^{M-1} & \left[\frac{\partial}{\partial x_k} b_k(\mathbf{x}, t) - \frac{\partial}{\partial x_k} b_{mod(k-1, M)}(\mathbf{x}, t) \right. \\ & + \frac{1}{2N} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_k^2} b_k(\mathbf{x}, t) + \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} b_{mod(k-1, M)}(\mathbf{x}, t) \right) \\ & \left. - \frac{1}{N} \frac{\partial^2}{\partial x_k \partial x_{mod(k+1, M)}} b_k(\mathbf{x}, t) \right], \end{aligned} \quad (2.94)$$

ou ainda, lembrando que $b_k(\mathbf{x}, t) = \varsigma_k(\mathbf{x}) \varrho(\mathbf{x}, t)$, encontramos

$$\frac{d}{dt} \varrho(\mathbf{x}, t) = \sum_{k=0}^{M-1} \left\{ - \frac{\partial}{\partial x_k} [(\varsigma_{mod(k-1, M)}(\mathbf{x}) - \varsigma_k(\mathbf{x})) \varrho(\mathbf{x}, t)] + \right. \quad (2.95)$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2N} \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} [(\varsigma_{mod(k-1, M)}(\mathbf{x}) + \varsigma_k(\mathbf{x})) \varrho(\mathbf{x}, t)] \\ & \left. - \frac{1}{N} \frac{\partial^2}{\partial x_k \partial x_{mod(k+1, M)}} (\varsigma_k(\mathbf{x}) \varrho(\mathbf{x}, t)) \right\}. \end{aligned} \quad (2.96)$$

A equação de Fokker-Planck (2.96) é associada à seguinte equação de Langevin

$$\frac{d}{dt} x_k = \varsigma_{mod(k-1, M)}(\mathbf{x}) - \varsigma_k(\mathbf{x}) + \vartheta_{mod(k-1, M)}(t) - \vartheta_k(t), \quad (2.97)$$

válida para $k = 0, 1$ ou 2 ; e na qual $\vartheta_k(t)$ é um ruído branco gaussiano com as seguintes propriedades

$$\langle \vartheta_k(t) \rangle = 0, \quad (2.98)$$

$$\langle \vartheta_k(t) \vartheta_i(t') \rangle = \frac{\zeta_k}{N} \delta_{k,i} \delta(t - t'). \quad (2.99)$$

Em seguida consideramos um exemplo do limite do contínuo nesse tipo de modelo.

Exemplo: modelos predador-presa no limite do contínuo

Retornando agora ao exemplo do modelo predador-presa, mas no caso do limite do contínuo, consideremos as variáveis estocásticas $x_i = n_i/N$ (com i assumindo os valores no conjunto $\{0, 1, 2\}$), o vetor estocástico $\mathbf{x} = (x_0, x_1, x_2)$ e a distribuição de probabilidades $\varrho(\mathbf{x}, t)$ temos que a equação (2.77) fornece

$$\frac{\partial}{\partial t} \varrho(\mathbf{x}, t) = N \sum_{k=0}^2 [\zeta_k(\mathbf{x} - \mathbf{e}^k/N) \varrho(\mathbf{x} - \mathbf{e}^k/N, t) - \zeta_k(\mathbf{x}) \varrho(\mathbf{x}, t)], \quad (2.100)$$

em que $\zeta_i = \omega_i(\mathbf{n})/N$.

Para valores grandes de N a expansão da equação (2.100) até ordem de $1/N$ resulta

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \varrho(\mathbf{x}, t) = \sum_{k=0}^2 \left\{ - \frac{\partial}{\partial x_k} [(\zeta_{\text{mod}(k-1,3)}(\mathbf{x}) - \zeta_k(\mathbf{x})) \varrho(\mathbf{x}, t)] + \right. \\ \left. \frac{1}{2N} \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} [(\zeta_{\text{mod}(k-1,3)}(\mathbf{x}) + \zeta_k(\mathbf{x})) \varrho(\mathbf{x}, t)] - \frac{1}{N} \frac{\partial^2}{\partial x_k \partial x_{\text{mod}(k+1,3)}} (\zeta_k(\mathbf{x}) \varrho(\mathbf{x}, t)) \right\}. \end{aligned} \quad (2.101)$$

A equação de Fokker-Planck (2.101) é associada à seguinte equação de Langevin

$$\frac{d}{dt} x_k = \zeta_{\text{mod}(k-1,3)}(\mathbf{x}) - \zeta_k(\mathbf{x}) + \vartheta_{\text{mod}(k-1,3)}(t) - \vartheta_k(t), \quad (2.102)$$

válida para $k = 0, 1, 2$ ou 3 ; e na qual $\vartheta_k(t)$ é um ruído branco gaussiano com

as seguintes propriedades

$$\langle \vartheta_k(t) \rangle = 0, \quad (2.103)$$

$$\langle \vartheta_k(t) \vartheta_i(t') \rangle = \frac{\zeta_k}{N} \delta_{k,i} \delta(t - t'). \quad (2.104)$$

Substituindo as taxas na equação (2.102) obtemos

$$\frac{d}{dt} \langle x_0 \rangle = cx_2 - ax_0x_1 + \vartheta_2(t) - \vartheta_0(t) \quad (2.105)$$

$$\frac{d}{dt} \langle x_1 \rangle = ax_0x_1 - bx_1x_2 + \vartheta_0(t) - \vartheta_1(t) \quad (2.106)$$

$$\frac{d}{dt} \langle x_2 \rangle = bx_1x_2 - cx_2 + \vartheta_1(t) - \vartheta_2(t). \quad (2.107)$$

Mais análises foram feitas no artigo [44], inclusive uma expansão da equação do tipo “nascimento e morte” até segunda ordem de $\frac{1}{N}$, aqui, entretanto, apenas destacamos como esse modelo é um exemplo de processo do tipo “nascimento e morte” considerando um sistema de três estados e apenas processos rotativos descritos acima.

2.4 Modelos estocásticos e espacialmente estruturados assíncronos

O formalismo de modelos estocásticos espacialmente estruturados assíncronos foi utilizado em todos modelos analisados nesta tese. Apresentamos em seguida sua definição, a dinâmica de “um sítio”[2] e a aproximação de campo médio.

2.4.1 Definição

Seja uma rede de N sítios, na qual em cada sítio reside uma partícula, um indivíduo, ou, mais genericamente, um elemento biológico. Consideremos que essa população de partículas, indivíduos, elementos biológicos evolui no tempo conforme regras estocásticas locais. Admitamos ainda que a evolução

no espaço de configurações seja contínua no tempo.

A cada sítio i da rede associamos uma variável estocástica η_i , a qual assume um conjunto de M valores, cada qual relativo a um estado possível. Dessa maneira, o estado microscópico do sistema fica representado pelo vetor estocástico

$$\eta = (\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_i, \dots, \eta_N). \quad (2.108)$$

Sejam η e η' dois estados do sistema, denotamos a taxa de transição do estado η' para o estado η por $W(\eta, \eta')$. A probabilidade $P(\eta, t)$ da ocorrência do estado η no instante de tempo t é governada pela equação mestra

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\eta, t) = \sum_{\eta' \neq \eta} \{W(\eta, \eta') P(\eta', t) - W(\eta', \eta) P(\eta, t)\}. \quad (2.109)$$

Dessa forma, modelos regidos por equações mestras ficam definidos pelas taxas de transição $W(\eta, \eta')$ para todos os pares (η, η') .

2.4.2 Dinâmica de “um sítio”

Nesta subseção apresentamos a definição da dinâmica de “um sítio”, pois adotamos esta dinâmica nos modelos que investigamos. Na dinâmica de “um sítio” admitimos que as transições ocorrem somente entre estados que diferem entre si pelo estado de um único sítio.

Se o sistema está em um estado η' , a taxa de transição por sítio para um estado que difere de η' apenas pelo estado do i -ésimo sítio fica denotada por $\tilde{w}_i(\eta_i, \eta') \geq 0$. Visto que qualquer sítio pode ter seu estado modificado então a taxa de transição $W(\eta, \eta')$ pode ser expressa como

$$W(\eta, \eta') = \sum_{i=1}^N \tilde{w}_i(\eta_i, \eta') \prod_{j=1(\neq i)}^N \delta(\eta_j, \eta'_j). \quad (2.110)$$

Logo, se dinâmica for tal que seja possível apenas um sítio ter seu estado

modificado a cada instante de tempo, a equação mestra fica

$$\frac{d}{dt}P(\eta, t) = \sum_{i=1}^N \sum_{\eta'_i} [P(\eta_1, \dots, \eta'_i, \dots, \eta_N, t) \tilde{w}_i(\eta_i, \eta_1, \dots, \eta'_i, \dots, \eta_N) - P(\eta, t) \tilde{w}_i(\eta'_i, \eta)]. \quad (2.111)$$

É possível ainda reescrevermos a equação mestra de uma forma mais simples. Para tanto, primeiramente associamos os M estados de um sítio aos M valores que a variável estocástica η_i pode assumir, a saber $0, 1, 2, \dots, M-1$. Dessa forma, se buscamos expressar que apenas o estado do i -ésimo sítio dos vetores estocásticos η' e η são distintos, podemos escrever $\eta_i = \text{mod}(\eta'_i + \alpha, M)$ com $\alpha \in \{1, 2, \dots, M-1\}$. Logo a taxa de transição de um estado η' para um estado η que difere de η' apenas pelo estado do i -ésimo sítio pode ser expressa como

$$w_i^\alpha(\eta') = \tilde{w}_i(\text{mod}(\eta'_i - \alpha, M), \eta') \text{ com } \alpha \in \{1, 2, \dots, M-1\}. \quad (2.112)$$

Notamos então, que fazer a soma sobre todos os valores de η'_i que podem passar para η_i é o mesmo que fazer a soma sobre todos os valores de α , já que variando α no intervalo $\{1, 2, \dots, M-1\}$ todos os $M-1$ estados η'_i distintos de η_i são considerados. Desse modo, podemos substituir a taxa $\tilde{w}_i(\eta_i, \eta_1, \dots, \eta'_i, \dots, \eta_N)$ pela taxa $w_i^\alpha(\eta') = \tilde{w}_i(\text{mod}(\eta'_i - \alpha, M), \eta')$ e a somatória em η'_i pela somatória em α . Com essas substituições obtemos

$$\frac{d}{dt}P(\eta, t) = \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha} [P(\eta_1, \dots, \eta_i^\alpha, \dots, \eta_N; t) w_i^\alpha(\eta_1, \dots, \eta_i^\alpha, \dots, \eta_N) - P(\eta; t) w_i^\alpha(\eta)], \quad (2.113)$$

em que $\eta_i^\alpha = \text{mod}(\eta_i - \alpha, M)$. Esta equação é a equação mestra para modelos estocásticos definidos em redes, regidos por equações mestras, nos quais se adota a dinâmica de “um sítio”, ou, mais sucintamente, equação mestra para dinâmicas de “um sítio”. A partir desta podemos encontrar a evolução temporal da média de uma grandeza de estado $f(\eta)$

$$\frac{d}{dt} \langle f(\eta) \rangle = \sum_{\eta} f(\eta) \frac{d}{dt} P(\eta, t),$$

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle f(\eta) \rangle &= \sum_{\eta} f(\eta) \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha} \left[P(\eta_1, \dots, \eta_i^{\alpha}, \dots, \eta_N; t) w_i^{\alpha}(\eta_1, \dots, \eta_i^{\alpha}, \dots, \eta_N) \right. \\ &\quad \left. - P(\eta; t) w_i^{\alpha}(\eta) \right], \\ \frac{d}{dt}\langle f(\eta) \rangle &= \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha} \sum_{\eta} f(\eta) \left[P(\eta_1, \dots, \eta_i^{\alpha}, \dots, \eta_N; t) w_i^{\alpha}(\eta_1, \dots, \eta_i^{\alpha}, \dots, \eta_N) \right. \\ &\quad \left. - P(\eta; t) w_i^{\alpha}(\eta) \right].\end{aligned}$$

Podemos fazer a soma tanto em todas as configurações η , quanto em todas as configurações $\eta' = (\eta_1, \dots, \eta_i^{\alpha}, \dots, \eta_N)$, em que ${}^{\alpha}\eta_i = \text{mod}(\eta_i + \alpha, M)$. Fazendo essa mudança de variável no primeiro termo da soma temos

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle f(\eta) \rangle &= \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha} \left[\sum_{\eta'} f(\eta_1, \dots, \text{mod}(\eta_i - \alpha, M), \dots, \eta_N) P(\eta'; t) w_i^{\alpha}(\eta') \right. \\ &\quad \left. - \sum_{\eta} f(\eta) P(\eta; t) \tilde{w}_i^{\alpha}(\eta) \right],\end{aligned}$$

ou seja,

$$\frac{d}{dt}\langle f(\eta) \rangle = \sum_{i=0}^{M-1} \sum_{\alpha} \langle [f(\eta_1, \dots, {}^{\alpha}\eta_i, \dots, \eta_N) - f(\eta)] w_i^{\alpha}(\eta) \rangle, \quad (2.114)$$

em que ${}^{\alpha}\eta_i = \text{mod}(\eta_i + \alpha, M)$. Esta equação fornece a evolução temporal da média de uma grandeza de estado $f(\eta)$ quando se adota a dinâmica de “um sítio”.

Em particular, quando somente transições cíclicas são permitidas temos $\alpha = 1$. Nesse caso, a equação mestra fica

$$\frac{d}{dt}P(\eta, t) = \sum_{i=1}^N [P(\eta_1, \dots, \eta_i^1, \dots, \eta_N; t) w_i^1(\eta_1, \dots, \eta_i^1, \dots, \eta_N) - P(\eta; t) \tilde{w}_i^1(\eta)], \quad (2.115)$$

em que $\eta_i^1 = \text{mod}(\eta_i - 1, M)$ é simplesmente o antecessor de η_i no ciclo $0 \rightarrow 1 \rightarrow \dots \rightarrow M \rightarrow 0$. Portanto, podemos simplificar a notação, chamando $w_i(\eta) = \tilde{w}_i^1(\eta)$ e $\eta^i = (\eta_1, \dots, \eta_i^1, \dots, \eta_N)$. Desse modo, temos que a expressão para a equação mestra adotando a dinâmica de “um sítio” em um modelo

apenas com transições cíclicas torna-se

$$\frac{d}{dt}P(\eta, t) = \sum_{i=1}^N [P(\eta^i, t)w_i(\eta^i) - P(\eta, t)w_i(\eta)], \quad (2.116)$$

E a expressão para a evolução temporal da média de uma grandeza de estado $f(\eta)$ fica

$$\frac{d}{dt}\langle f(\eta) \rangle = \sum_{i=0}^{M-1} \langle [f(\eta^i) - f(\eta)]w_i(\eta) \rangle, \quad (2.117)$$

em que $\eta^i = (\eta_1, \dots, \eta_i, \dots, \eta_N)$ e $\eta_i = \text{mod}(\eta_i + 1, M)$ é simplesmente o sucessor no ciclo $0 \rightarrow 1 \rightarrow \dots \rightarrow M \rightarrow 0$.

O processo de contato analisado no capítulo 3 e a dinâmica para duas espécies biológicas e dois nichos ecológicas introduzida e analisada no capítulo 6 são exemplos de casos em que apenas ocorrem permutações cíclicas. No modelo suscetível-infectado-recuperado com infecção recorrente analisado no capítulo 5 ocorrem transições para $\alpha = 1$ e para $\alpha = 2$.

2.4.3 Aproximação de campo médio

Na mecânica estatística de equilíbrio e de não-equilíbrio há diferentes tipos de aproximações de campo médio. Aqui apresentamos a aproximação de campo médio vista nas referências [106–108], utilizada em vários trabalhos como, por exemplo, [48, 108, 109] e apresentada em livros [2, 4, 5].

As equações para evolução temporal para as correlações de um determinado número de sítios podem ser obtidas da equação mestra, como foi mencionado nas seções 2.4 e 2.4.2, e podem depender de correlações de aglomerados contendo mais sítios. Assim sendo, forma-se um conjunto infinito de equações acopladas para as correlações. As aproximações de campo médio de diferentes ordens são feitas por meio de truncamentos desse conjunto de equações em estágios distintos.

Na aproximação de primeira ordem, denominada aproximação de campo médio simples, aproximamos a probabilidade de um aglomerado de sítios pelo produto das probabilidades de cada sítio, o que significa que todas as

correlações entre sítios do aglomerado são desprezadas. Deste modo temos,

$$P(\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_N) = \prod_{i=1}^N P(\eta_i). \quad (2.118)$$

As aproximações de ordens superiores são feitas de forma que em uma aproximação de ordem m as correlações de m ou mais sítios sejam aproximadas por correlações de m ou menos sítios.

Seja um aglomerado C de sítios constituído de “núcleo” A e uma borda B . Podemos escrever a probabilidade de uma configuração $\eta_C = \eta_i, i \in C$ dos sítios que compõem C como

$$P(\eta_C) = P(\eta_B, \eta_A) = P(\eta_B | \eta_A) P(\eta_A). \quad (2.119)$$

em que $P(\eta_B | \eta_A)$ é a probabilidade condicional da configuração $\eta_B = \eta_i, i \in B$ dada a configuração $\eta_A = \eta_i, i \in A$.

Fazemos a aproximação sobre a probabilidade condicional desprezando as correlações entre os sítios da borda B , ou seja,

$$P(\eta_B | \eta_A) = \prod_{i \in B} P(\eta_i, \eta_A). \quad (2.120)$$

Considerando a aproximação (2.120) temos

$$P(\eta_C) = P(\eta_A) \prod_{i \in B} P(\eta_i | \eta_A) = P(\eta_A) \prod_{i \in B} \frac{P(\eta_i, \eta_A)}{P(\eta_A)}. \quad (2.121)$$

Em particular, denominamos aproximação de campo médio com pares, a aproximação que inclui flutuações correspondentes às correlações de dois sítios vizinhos.

Ressaltamos aqui que nos modelos apresentados nessa tese utilizamos um caso particular da aproximação de campo médio simples e um caso particular da aproximação de campo médio com pares que destacamos a seguir. A aproximação de campo médio simples aplicada à correlação de dois sítios

fornece

$$P(\eta_i, \eta_j) = P(\eta_i)P(\eta_j). \quad (2.122)$$

Já da aproximação de campo médio com pares aplicada à correlação de três sítios temos

$$P(\eta_i, \eta_j, \eta_k) = \frac{P(\eta_i, \eta_j)P(\eta_j, \eta_k)}{P(\eta_j)}. \quad (2.123)$$

2.5 Simulações de Monte Carlo em modelos irreversíveis

Os sistemas irreversíveis são, em geral, definidos por dinâmicas estocásticas que incluem as regras de transições. As simulações de Monte Carlo são realizações computacionais de trajetórias estocásticas no espaço de configurações. O nome Monte Carlo surge do uso de números aleatórios na geração das configurações sucessivas [110].

Em particular no caso de modelos definidos por equações mestras, a dinâmica é definida por um conjunto de taxas de transição. Para fazer simulações computacionais primeiramente discretiza-se o tempo em intervalos Δt para então obter a probabilidade de transição a cada tempo. Desse modo, dado um estado n , em um instante t , a probabilidade de transição para o estado n' no instante $t + \Delta t$ é:

$$W(n', n)\Delta t, \quad (2.124)$$

desde que Δt seja suficientemente pequeno. A probabilidade do sistema não sair do estado n é:

$$1 - \sum_{n' \neq n} W(n', n)\Delta t. \quad (2.125)$$

A análise dos resultados é frequentemente feita por teoria de escala finita. Essa teoria permite a obtenção de resultados no limite termodinâmico a partir dos dados gerados em sistemas finitos [110]. A teoria de escala finita foi proposta inicialmente para o estudo de sistemas em equilíbrio termodinâmico, mas tem sido utilizada na análise de simulações numéricas de sistemas de não-equilíbrio. Várias dinâmicas estocásticas em reticulados e irreversíveis

têm sido exploradas com esse método [2, 5, 11].

2.5.1 Simulações para processos estocásticos do tipo “nascimento e morte” de M variáveis

Seja um processo estocástico do tipo “nascimento e morte” em que se considera um conjunto de N elementos de M tipos. Seja a variável estocástica n_k referente ao número de elementos do tipo k , com $k \in \{0, 1, 2, \dots, M-1\}$, admitamos que sejam permitidos somente processos rotativos, definidos pelas transições expressas nas equações (2.63) $[n_k \rightarrow n_k - 1]$ e (2.64) $[n_{\text{mod}(k+1, M)} \rightarrow n_{\text{mod}(k+1, M)} + 1]$, e que estas ocorram com taxa $\omega_k(\mathbf{n})$.

Supondo que os intervalos Δt em que são considerados as iterações são tais que no máximo ocorre uma transição, a simulação computacional deste processo pode ser feita seguindo o algoritmo abaixo.

1. Definimos as variáveis $x_k = n_k/N$ referentes à fração de elementos do tipo k no sistema.
2. Definimos algum tipo de condição inicial, por exemplo, $x_k = 1/N \quad \forall k$.
3. Definimos o k -ésimo intervalo $I_k = [\sum_{i=0}^{k-1} x_i, \sum_{i=0}^k x_i)$ para $1 < k \leq M$ e $I_0 = [0, x_0/N)$. Notar que a união destes intervalos gera o intervalo $[0, 1)$.
4. Sorteamos um número aleatório $\theta \in [0, 1)$. Identificamos a qual k -intervalo este pertence. Admitimos então que um elemento do tipo k foi sorteado e realizamos o processo descrito nas equações (2.63) e (2.64) com probabilidade $p_k = \omega_k(\mathbf{n}) / \sum_{k=0}^{M-1} \omega_k(\mathbf{n})$.
5. A cada N repetições do passo 3 consideramos completo um passo de Monte Carlo e são salvos dados.
6. Se há interesse nas grandezas médias, repetimos todo o processo e tomamos média dos valores encontrados.

2.5.2 Simulações para modelos estocásticos espacialmente estruturados assíncronos

Seja um modelo estocástico espacialmente estruturado assíncrono de M estados definido em uma rede de N sítios. Seja $w_i^\alpha(\eta')$ a taxa de transição de um sítio i , seja $p_i = \Delta t w_i^\alpha(\eta')$ a probabilidade de transição de um sítio i em um intervalo Δt .

A simulação computacional deste processo pode ser feita seguindo algoritmo abaixo.

1. Definimos um vetor (para o caso unidimensional), ou uma rede (para o caso da rede quadrada), ou mais genericamente uma estrutura que possua um elemento associado a cada sítio da rede.
2. Definimos algum tipo de condição inicial, por exemplo, o estado de todos os sítios é sorteado aleatoriamente com mesma probabilidade para todos os sítios.
3. Definimos algum tipo de condição de contorno, tipicamente periódicas.
4. Sorteamos um sítio i da rede, alteramos o estado deste sítio seguindo as regras do modelo com probabilidade p_i .
5. A cada N repetições do passo 4 consideramos completo um passo de Monte Carlo e são salvos dados.
6. Se há interesse nas grandezas médias, repetimos todo o processo e tomamos média dos valores encontrados.

Vale notar que existem técnicas mais eficientes para a simulação de modelos estocásticos espacialmente estruturados assíncronos, as quais são discutidas no decorrer da tese para os casos que estudamos. Além disso, em alguns casos estamos interessados apenas nos estados estacionários de forma que os dados do transiente são desprezados. Há também os casos em que a simulação roda até atingir o estado absorvente e tomamos médias dos estados finais encontrados em diversas simulações.

Capítulo 3

Dois modelos fundamentais

Nesse capítulo descrevemos várias propriedades do processo de contato e do modelo suscetível-infectado-recuperado. É importante que sejam bem definidas as propriedades destes modelos, pois são modelos fundamentais no âmbito da mecânica estatística de não-equilíbrio e que estão intimamente relacionados com os trabalhos desenvolvidos nesta tese. Destacamos que o modelo suscetível-infectado-recuperado com infecção recorrente que apresentamos no capítulo 5 torna-se o processo de contato para um determinado conjunto de parâmetros e recai no modelo suscetível-infectado-recuperado (SIR) usual para outro.

3.1 Processo de contato

3.1.1 Introdução

O processo de contato é equivalente ao suscetível - infectado - suscetível (SIS) em redes regulares [2–5, 11, 12, 111]. O modelo é definido em uma rede em que cada sítio pode estar em dois estados, a saber, suscetível e infectado. Entendemos um sítio no estado suscetível/infectado como um sítio “ocupado” por um indivíduo suscetível/infectado. Os indivíduos suscetíveis tornam-se infectados por contato com indivíduos infectados, sendo que esse processo é catalítico. A taxa de infecção é tanto maior quanto maior o número de infecta-

dos nas vizinhanças de um suscetível. O outro processo levado em conta nesse modelo diz respeito à recuperação de indivíduos infectados: esses se recuperam e se tornam novamente suscetíveis por meio de um processo espontâneo, ou seja, os indivíduos infectados não adquirem imunização permanente. O modelo possui um estado absorvente, no qual todos os indivíduos são suscetíveis (pois não há surgimento de infectados se estes não existem) e um estado estacionário ativo, no qual a epidemia nunca cessa nem contamina toda a população. Entre estes dois estados há uma transição contínua.

A interpretação desse modelo como um processo epidêmico simples foi feita por Bailey em 1975 [88], mas o processo de contato já havia sido proposto por Harris em 1974 [99]. Harris demonstrou que no limite termodinâmico o modelo apresenta um estado ativo estável além do estado absorvente. Esta demonstração é muito importante, porque em sistemas finitos, que são os estudados em simulações numéricas, o estado absorvente sempre é atingido dado tempo suficiente. Convém destacar que este é um dos modelos mais simples que possui transição de fase em uma dimensão.

Outro aspecto que ressaltamos é uma das conjecturas mais importantes sobre transições de fase de não equilíbrio: a conjectura da percolação direcionada “Se um modelo exhibe transições contínuas para estados absorventes então o comportamento do modelo é o mesmo da classe de universalidade da percolação direcionada”. Esta conjectura foi proposta independentemente por Janssen em 1981 [100] e por Grassberger em 1982 [101] e generalizada por Grinstein, Lai e Browne em 1989 [102]. Tal conjectura tem sido corroborada por muitos modelos e estudos numéricos. O processo de contato é um dos modelos que corrobora essa conjectura.

3.1.2 Definição

Apresentamos aqui a definição do processo de contato dentro do contexto de modelos estocásticos espacialmente estruturados visto no capítulo 2. Consideramos uma população composta por indivíduos suscetíveis (S) e infectados (I). Definimos o modelo em uma rede regular com N sítios em que cada sítio possui ζ vizinhos. A cada sítio i associamos uma variável estocástica η_i , que

pode assumir os valores 0 e 1 referentes respectivamente aos estados suscetível (S) e infectado (I). Dessa forma, o estado do sistema fica definido pelo vetor estocástico $\eta = (\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_N)$.

A evolução temporal do sistema é dada por uma equação mestra e escolhe-se a dinâmica de “um sítio” [2] explicada na subseção 2.4.2. Dessa maneira, na evolução do sistema escolhe-se aleatoriamente um sítio i sobre a rede, então:

1. se o sítio estiver vazio ($\eta_i = 0$), ele passa a ser ocupado com uma taxa de transição proporcional ao número n dos primeiros vizinhos ocupados. Sendo λ a taxa de infecção, em uma rede regular de coordenação ζ , a taxa de transição vale $\lambda n / \zeta$;
2. se o sítio estiver ocupado, ele é desocupado com taxa igual a 1.

Ressaltamos que, via mudança de escala temporal, poderíamos utilizar outras parametrizações. Com efeito, no capítulo 5 apresentamos um modelo que recai no processo de contato para um determinado de conjunto de parâmetros, porém com outra escala temporal.

A taxa de transição por sítio desse modelo é

$$w_i(\eta) = \eta_i + \frac{\lambda}{\zeta}(1 - \eta_i) \sum_v \eta_{i+v}. \quad (3.1)$$

em que $\sum_v$ é a soma sobre os primeiros vizinhos do sítio escolhido i .

Como já vimos no capítulo 2, para um modelo estocástico espacialmente estruturado, em que adotamos a dinâmica de “um sítio” e as transições são cíclicas, a equação mestra fica dada pela expressão (2.116) e a evolução temporal de uma grandeza de estado $f(\eta)$ fica dada pela equação (2.117). Dessa forma, a equação mestra para o processo de contato é

$$\frac{d}{dt}P(\eta, t) = \sum_{i=1}^N [P(\eta^i, t)w_i(\eta^i) - P(\eta, t)w_i(\eta)], \quad (3.2)$$

em que $\eta^i = (\eta_1, \dots, \eta_i^1, \dots, \eta_N)$ e $\eta_i^1 = \text{mod}(\eta_i - 1, 2)$ é o antecessor de η_i no ciclo $0 \rightarrow 1 \rightarrow 0$ e $w_i(\eta)$ é dada na equação (3.1).

E a equação para uma grandeza de estado $f(\eta)$ é

$$\frac{d}{dt}\langle f(\eta) \rangle = \sum_{i=1}^N \langle [f({}^i\eta) - f(\eta)] w_i(\eta) \rangle, \quad (3.3)$$

em que ${}^i\eta = (\eta_1, \dots, {}^1\eta_i, \dots, \eta_N)$ e ${}^1\eta_i = \text{mod}(\eta_i + 1, 2)$ é sucessor de η_i no ciclo $0 \rightarrow 1 \rightarrow 0$ e $w_i(\eta)$ é dado na equação (3.1).

Vale notar que para esse caso com apenas dois estados, 0 e 1, o antecessor no ciclo $0 \rightarrow 1 \rightarrow 0$ é o mesmo que o sucessor neste ciclo e pode ser expresso simplesmente como $1 - \eta_i$. Logo ${}^i\eta = \eta^i = (\eta_1, \dots, 1 - \eta_i, \dots, \eta_N)$.

3.1.3 Equações de evolução temporal para médias e correlações

Em especial, se escolhermos $f(\eta) = \eta_j$, usando a equação (3.3) encontramos a evolução temporal da média $\langle \eta_j \rangle$

$$\frac{d}{dt}\langle \eta_j \rangle = \frac{\lambda}{\zeta} \sum_v \langle (1 - \eta_j) \eta_{j+v} \rangle - \langle \eta_j \rangle. \quad (3.4)$$

Em que $\sum_v$ é a soma sobre os primeiros vizinhos do sítio j . Notamos que a evolução temporal da média $\langle \eta_j \rangle$ depende da correlação de dois sítios. Escolhemos, então, $f(\eta) = \eta_j \eta_k$, para encontrarmos a evolução temporal para a correlação de dois sítios

$$\frac{d}{dt}\langle \eta_j \eta_k \rangle = \sum_i \langle [\eta_j({}^i\eta) \eta_k({}^i\eta) - \eta_j(\eta) \eta_k(\eta)] w_i(\eta) \rangle, \quad (3.5)$$

ou,

$$\frac{d}{dt}\langle \eta_j \eta_k \rangle = \langle (1 - 2\eta_j) \eta_k w_j(\eta) \rangle + \langle (1 - 2\eta_k) \eta_j w_k(\eta) \rangle, \quad (3.6)$$

em que

$$\langle (1 - 2\eta_j) \eta_k w_j(\eta) \rangle = \frac{\lambda}{\zeta} \left\langle \sum_{v(j+v \neq k)} \eta_k (1 - \eta_j) \eta_{j+v} \right\rangle + \frac{\lambda}{\zeta} \langle (1 - \eta_j) \eta_k \rangle - \langle \eta_j \eta_k \rangle,$$

sendo $\sum_{v(j+v \neq k)}$ a soma nos primeiros vizinhos do sítio j que não o sítio k , e

$$\langle (1 - 2\eta_k)\eta_j w_k(\eta) \rangle = \frac{\lambda}{\zeta} \left\langle \sum_{v(k+v \neq j)} \eta_j (1 - \eta_k) \eta_{k+\delta} \right\rangle + \frac{\lambda}{\zeta} \langle (1 - \eta_k) \eta_j \rangle - \langle \eta_k \eta_j \rangle,$$

sendo $\sum_{v(k+v \neq j)}$ a soma nos primeiros vizinhos do sítio k que não o sítio j . Portanto, a partir das equações acima vemos que a evolução temporal da correlação de dois sítios depende da correlação de três sítios.

Aproximação de campo médio simples

Apresentamos, primeiramente, o tratamento de campo médio simples, descrito no capítulo 2, no qual as correlações entre os sítios são desprezadas.

Assumindo que a solução é homogênea e isotrópica, temos $\rho = \langle \eta_i \rangle$ e $\Phi = \langle \eta_i \eta_{i+\delta} \rangle$, independente de i e v . Assim sendo, a equação (3.4) fica

$$\frac{d}{dt} \rho = \lambda(\rho - \Phi) - \rho. \quad (3.7)$$

Usando a aproximação de campo médio simples, dada na equação (2.118) da seção 2.4.3, temos que $\Phi = \rho^2$. Portanto, a equação (3.7) torna-se

$$\frac{d}{dt} \rho = (\lambda - 1)\rho - \lambda\rho^2. \quad (3.8)$$

A solução exata para esta equação quando $\lambda \neq 1$ é

$$\rho = \frac{(\lambda - 1)}{\lambda - D \exp[-(\lambda - 1)t]}, \quad (3.9)$$

em que D é uma constante determinada pelas condições iniciais.

Os comportamentos assintóticos e as soluções estacionárias são:

- $\lambda < 1 \Rightarrow \rho = Ae^{-(1-\lambda)t} \Rightarrow \rho \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 0,$
- $\lambda > 1 \Rightarrow \rho = \frac{\lambda-1}{\lambda} - Be^{-(\lambda-1)t} \Rightarrow \rho \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \frac{\lambda-1}{\lambda}.$

Logo, para $\lambda < 1$ temos a solução estacionária absorvente, já para $\lambda > 1$ temos a solução estacionária ativa, na qual $\rho \neq 0$. Em ambos os casos as

soluções convergem para a solução estacionária através de um decaimento exponencial. Assim, o valor de λ no ponto crítico é

$$\lambda_c = 1, \quad (3.10)$$

sendo que nas proximidades do ponto crítico ρ comporta-se como

$$\rho \sim (\lambda - \lambda_c). \quad (3.11)$$

Se o decaimento de uma função para seu estado estacionário é da forma

$$Ke^{-\frac{t}{\tau_r}}, \quad (3.12)$$

em que K é uma constante, τ_r é denominado o tempo de relaxação. Tanto no caso ativo quanto no absorvente, o tempo de relaxação é

$$\tau_r = |\lambda_c - 1|^{-1}. \quad (3.13)$$

Portanto, nessa aproximação, o expoente crítico associado ao parâmetro de ordem é $\beta = 1$. No ponto crítico, $\lambda_c = 1$, logo temos

$$\frac{d}{dt}\rho = -\rho^2, \quad (3.14)$$

cuja solução é

$$\rho = \frac{1}{t + c} \quad (3.15)$$

e, portanto, para tempos longos

$$\rho \sim t^{-1}. \quad (3.16)$$

Donde vemos que no ponto crítico a relaxação deixa de ser exponencial e o tempo de relaxação diverge.

Aproximação de campo médio com pares

Agora utilizamos uma abordagem um pouco mais sofisticada para analisar as equações (3.4) e (3.6), a chamada aproximação de campo médio com pares. Essa aproximação foi discutida no capítulo 2 e consiste em aproximar as correlações de três ou mais sítios por uma expressão dependente apenas de correlações de dois sítios e de um sítio.

No caso da aproximação de campo médio com pares, a equação (3.7) permanece sem aproximações. Utilizamos a aproximação de campo médio com pares, dada na equação (2.123) da seção 2.4.3, na equação (3.6). Temos, então, o seguinte sistema de equações

$$\frac{d}{dt}\rho = \lambda(\rho - \Phi) - \rho, \quad (3.17)$$

$$\frac{d}{dt}\Phi = 2\frac{\lambda(\zeta - 1)}{\zeta}\frac{(\rho - \Phi)^2}{1 - \rho} + \frac{2\lambda}{\zeta}(\rho - \Phi) - 2\Phi. \quad (3.18)$$

A solução estacionária do conjunto de equações (3.17) e (3.18) é

- $\lambda < \lambda_c \Rightarrow \rho = \Phi = 0,$
- $\lambda > \lambda_c \Rightarrow \rho = \frac{\lambda(\zeta - 1) - \zeta}{\lambda(\zeta - 1) - 1}$ e $\Phi = \frac{(\lambda - 1)\rho}{\lambda}.$

Nesse caso, temos que a transição ocorre em

$$\lambda_c = \frac{\zeta}{\zeta - 1} \quad (3.19)$$

e ρ pode ser reescrito como

$$\rho = \frac{\lambda(\zeta - 1) - \zeta}{\lambda(\zeta - 1) - 1} = \frac{\lambda - \lambda_c}{\lambda - \frac{\lambda_c}{\zeta}}.$$

Dessa forma o comportamento crítico do parâmetro de ordem é o mesmo do campo médio simples $\rho \sim (\lambda - \lambda_c)$.

Na figura 3.1 apresentamos o comportamento da densidade de infectados ρ estacionário em função de λ de acordo com as aproximações de campo médio simples e com pares. Notamos que a região ativa é menor na aproximação

de campo médio com pares. Tipicamente a aproximação de campo médio com pares gera um diagrama de fase com região ativa menor do que a aproximação de campo médio simples, ficando mais próxima dos resultados que se obtêm de simulações em redes, por exemplo. A aproximação de campo médio com pares é melhor do que a simples pois não despreza completamente a espacialidade do problema.

Figura 3.1: Densidade de indivíduos infectados ρ estacionário *versus* taxa de infecção λ nas aproximações de campo médio simples e com pares.

3.1.4 Classe de universalidade

Apresentamos aqui uma pequena discussão sobre a classe de universalidade do modelo, bem como sobre teoria de escala finita, essencial na análise de simulações de Monte Carlo. Neste capítulo introdutório não apresentamos simulações sobre este modelo, mas essas informações são necessárias para as análises feitas nos capítulos 6 e 7. No capítulo 6 tratamos um modelo que recai no processo de contato para alguns parâmetros específicos, já no capítulo 7 procuramos verificar se o modelo investigado pertence à mesma classe de universalidade do processo de contato.

Como já mencionamos, uma das principais características do processo de contato é possuir transição de fase em qualquer dimensão. O processo de contato pertence à classe de universalidade da percolação direcionada. Dessa

forma o comportamento das grandezas relacionadas ao modelo de contato são caracterizadas por expoentes críticos, os quais são os mesmos da percolação direcionada. Apresentamos aqui algumas dessas grandezas importantes que caracterizam o modelo, bem como seus expoentes críticos.

A densidade de partículas/infectados ρ , que é o parâmetro de ordem do modelo, comporta-se nas proximidades do ponto crítico como

$$\rho \sim \epsilon^\beta, \quad (3.20)$$

em que $\epsilon = \lambda - \lambda_c$.

Também na vizinhança do ponto crítico, o comprimento de correlação espacial comporta-se como

$$\xi \sim |\epsilon|^{-\nu_\perp} \quad (3.21)$$

Já a variância tem o seguinte comportamento nas proximidades do ponto crítico

$$\chi \sim |\epsilon|^{-\gamma'} \quad (3.22)$$

Teoria de escala finita

Na região próxima ao ponto crítico o tamanho linear do sistema L escala com o comprimento de correlação ξ . Uma grandeza Q_L deve se comportar, de acordo com a teoria de escala finita, como

$$Q_L(\epsilon) = L^{\Theta/\nu_\perp} F\left(L^{\frac{1}{\nu_\perp}} \epsilon\right) \quad (3.23)$$

em que F é uma função universal e Θ é o expoente que a descreve no limite em que $L \rightarrow \infty$. Em particular quando tomamos o limite $L \rightarrow \infty$ temos a expressão

$$Q_\infty(\epsilon) \sim |\epsilon|^{-\Theta}. \quad (3.24)$$

Seja

$$x_I = \frac{n_I}{N}, \quad (3.25)$$

em que n_I é o número de infectados e N o número de sítios da rede, a variável estocástica associada ao parâmetro de ordem ρ , tal que $\rho = \langle x_I \rangle$. O expoente

associado ao parâmetro de ordem $\rho = \langle x_I \rangle$ no limite em que $L \rightarrow \infty$ é β , portanto a lei de escala finita para o parâmetro de ordem é

$$\rho = L^{-\beta/\nu_\perp} \phi_0(L^{1/\nu_\perp} \epsilon) \quad (3.26)$$

em que ϕ_0 é uma função universal.

Definimos também a grandeza $Q_I = \langle x_I^2 \rangle$. O expoente para esta grandeza, no limite em que $L \rightarrow \infty$ é 2β , logo para lei de escala finita para Q_I , temos:

$$Q_I = L^{\frac{-2\beta}{\nu_\perp}} \phi_1(L^{\frac{1}{\nu_\perp}} \epsilon), \quad (3.27)$$

em que ϕ_1 é uma função universal. Definindo u o cumulante de 2ª ordem reduzido:

$$u = \frac{\langle x_I^2 \rangle - \langle x_I \rangle^2}{\langle x_I \rangle^2}, \quad (3.28)$$

vemos das equações (3.26) e (3.27) que a lei de escala finita para este é

$$u = \phi_2(L^{1/\nu_\perp} \epsilon), \quad (3.29)$$

em que ϕ_2 é uma função universal, portanto u no ponto crítico é uma grandeza universal que não depende do tamanho da rede.

Já o expoente crítico da variância $\chi = L^d (\langle x_I^2 \rangle - \langle x_I \rangle^2)$ para $L \rightarrow \infty$ é $-\gamma'$, logo

$$\chi = L^{\gamma'/\nu_\perp} \phi_3(L^{1/\nu_\perp} \epsilon). \quad (3.30)$$

3.2 Modelo suscetível-infectado-recuperado (SIR)

3.2.1 Introdução

Kermack e McKendrick [32] em 1927 introduziram o modelo suscetível-infectado-recuperado (SIR), dentro do contexto de equações diferenciais, buscando explicar os dados da peste que ocorreu em Mumbai entre 1905 e 1906, na qual nem toda a população foi infectada e cuja duração foi bem menor que o tempo de vida médio de uma pessoa. Duas perguntas que eles procuravam

responder, visando entender melhor a propagação de uma epidemia eram:

- Após o término de uma epidemia havia indivíduos que não foram infectados. Quando se faz um modelo matemático, há alguma razão proveniente da própria dinâmica do modelo que explique tal fato, ou os indivíduos não infectados são necessariamente imunes à doença?
- Quais são as condições necessárias para que haja propagação da epidemia dado um pequeno foco inicial da doença?

Na figura 3.2 apresentamos um gráfico do número de mortes por semana devido à praga em Mumbai, retirada da referência [19]. Kermack e McKendrick obtiveram os dados apresentados nessa figura, e foi buscando explicá-los que definiram o modelo suscetível-infectado-recuperado (SIR).

Figura 3.2: Figura retirada da referência [19]. Mortes por praga em Mumbai entre 17/12/1905 e 21/06/1906, dados de Kermack e McKendrick em 1927.

No modelo suscetível-infectado-recuperado um indivíduo pode ser suscetível (S), infectado (I) ou recuperado/removido (R). Vale notar que recuperado pode ser interpretado como um indivíduo que deixou de ter a doença e passou a ser imune à mesma ou como um indivíduo morto. No caso da epidemia estudada por Kermack e McKendrick vale a segunda interpretação. As transições consideradas neste modelo são:

1. Indivíduos suscetíveis tornam-se infectados por contato com indivíduos infectados;

2. Indivíduos infectados tornam-se recuperados espontaneamente e permanecem imunizados.

Seja N o número total de indivíduos, S o número de suscetíveis, I o número de infectados, R o número de recuperados/removidos, $N = S + I + R$. Seja β a taxa de infecção e γ a taxa de recuperação. O modelo definido por Kermack e McKendrick pode ser expresso pelo seguinte conjunto de equações diferenciais

$$\frac{d}{dt}S = -\beta SI, \quad (3.31)$$

$$\frac{d}{dt}I = \beta SI - \gamma I, \quad (3.32)$$

$$\frac{d}{dt}R = \gamma I. \quad (3.33)$$

Kermack e McKendrick mostraram que nesse modelo existe um limiar a partir do qual ocorre a propagação da infecção; demonstraram também que nessa dinâmica sempre restam indivíduos suscetíveis após o término da epidemia, mesmo sem que existam indivíduos imunes. Logo o modelo respondeu às perguntas 1 e 2.

Da segunda equação vê-se que quando $\frac{\beta S}{\gamma} > 1$ a derivada do número de infectados é positiva, ou seja, o número de infectados aumenta. Nesse sentido foi definida a razão reprodutiva, ou número reprodutivo, $R_0 = \frac{\beta S}{\gamma}$, conceito que se tornou muito importante dentro da epidemiologia [19, 23]. A taxa que um indivíduo infectado gera outro infectado é βS , e $1/\gamma$, o tempo médio que um indivíduo está infectado, logo R_0 pode ser entendido como o número médio de infecções causados por um único indivíduo.

Convém notar que a definição de R_0 não é necessariamente tão direta em outros modelos quanto no modelo suscetível-infectado-recuperado. Por exemplo, em um modelo para descrever a propagação da dengue como o apresentado na referência [61], o cálculo da razão reprodutiva é bem mais complexo.

Modelos estocásticos foram considerados por Bailey [84, 85], todavia esses modelos ainda não consideravam estruturas espaciais. Talvez o primeiro modelo estocástico que leva conta espacialidade para o modelo suscetível-

infectado-recuperado foi definido por Grassberger [89]. Neste artigo o nome dado ao modelo é “General Epidemic Process” (GEP).

Posteriormente foram analisados vários autômatos celulares probabilísticos e modelos estocásticos definidos em rede e regidos por equações mestras. Um caso particularmente interessante é o do autômato celular probabilístico para descrever um sistema predador-presa definido nas referências [47–49]. Esse modelo se reduz ao autômato suscetível-infectado-recuperado para um conjunto específico de parâmetros.

O modelo suscetível-infectado-recuperado (SIR) descrito por uma equação mestra (tempo contínuo) e definido em uma rede regular é o mais relacionado com o trabalho apresentado nessa tese. Várias propriedades deste modelo definido em uma rede quadrada foram exploradas recentemente em [45, 57–60]. O modelo SIR estocástico definido em uma rede foi também estudado [45] como um caso particular do modelo epidemiológico suscetível-infectado-recuperado-suscetível (SIRS), o qual é um modelo interessante do ponto de vista epidemiológico possuindo os mesmos estados do modelo SIR e a seguinte reação adicional: após um determinado tempo o indivíduo removido/recuperado torna-se suscetível novamente espontaneamente.

O caso particular em que o modelo SIRS recai no modelo suscetível-infectado-recuperado SIR ocorre quando a taxa em que indivíduos recuperados se tornam suscetíveis anula-se. Na figura 3.3 apresentamos um esquema com as transições presentes no modelo SIR e no modelo SIRS. No estudo feito em [45] o ponto crítico e os expoentes críticos dinâmicos foram obtidos por meio de simulações dependentes do tempo [5]. Essas foram introduzidas por Grassberger e de La Torre [112].

Posteriormente [57] foram consideradas simulações de Monte Carlo, nas quais se analisou a estatística da distribuição de tamanhos de “aglomerados de sítios R”. Mostrou-se assim que no ponto crítico esta distribuição segue as mesmas formas de escala da teoria de percolação isotrópica usual. Desta maneira, foi localizado o ponto crítico com precisão muito alta. Em [59] foi introduzido o parâmetro de ordem e definida uma nova razão universal entre os momentos da distribuição de probabilidades para o modelo SIR e outros modelos pertencentes à classe de universalidade de percolação dinâmica e

isotrópica.

Mais recentemente o modelo suscetível-infectado-recuperado tem sido estudado em diferentes geometrias [60] e em redes complexas [113].

Figura 3.3: Diagramas ilustrando os processos locais dos modelos suscetível-infectado-recuperado-susceptível (SIRS) e do modelo suscetível-infectado-recuperado (SIR).

Ressaltamos a diferença entre o conceito de propagação de uma doença no processo de contato e no modelo suscetível-infectado-recuperado. No processo de contato não existe imunização, isto é, não há indivíduos que se recuperam ou morrem. O processo de contato pode ser entendido como um modelo simplificado para, por exemplo, uma virose, ou uma gripe comum, doenças nas quais não há imunização, nem mortes. Nesse caso, consideramos que há transmissão da doença e que ocorre um processo endêmico, no qual o sistema atinge um estado estacionário em que há coexistência de indivíduos suscetíveis e infectados. Inversamente consideramos que não ocorre esse processo endêmico quando o sistema atinge um estado absorvente composto apenas de indivíduos suscetíveis.

Já no modelo suscetível-infectado-recuperado considera-se que indivíduos podem se tornar imunes à doença ou morrer. Inevitavelmente para tempos longos o sistema atinge um estado absorvente composto apenas de indivíduos suscetíveis e recuperados. Nesse contexto, consideramos que ocorre propagação da epidemia quando a partir de um pequeno foco de infecção, há espalhamento da epidemia na população, comparável com o número total de indivíduos na população. E no estado absorvente uma parcela apreciável

dos indivíduos está no estado recuperado; consideramos que não há espalhamento quando o foco inicial da epidemia rapidamente desaparece, resultando em um estado absorvente composto essencialmente de indivíduos suscetíveis.

3.2.2 Definição

Apresentamos aqui a definição do modelo suscetível-infectado-recuperado dentro do contexto de modelos estocásticos espacialmente estruturados visto no capítulo 2. Consideramos uma população composta por indivíduos suscetíveis (S), infectados (I) e recuperados/removidos (R). Definimos o modelo em uma rede regular de N sítios em que cada sítio possui ζ vizinhos. A cada sítio i associamos uma variável estocástica η_i que pode assumir os valores 0, 1, 2 associados respectivamente aos estados suscetível (S), infectado (I) e recuperado/removido (R). Dessa forma, o estado do sistema fica definido pelo vetor estocástico $\eta = (\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_N)$.

A evolução temporal do sistema é dada por uma equação mestra e escolhe-se a “dinâmica de um sítio” [2] explicada na subseção 2.4.2. Dessa maneira, a cada instante de tempo um único sítio é sorteado aleatoriamente, em seguida:

1. se o sítio escolhido está ocupado por um indivíduo suscetível (S), então esse pode tornar-se infectado com uma probabilidade bm/ζ , em que m é o número de sítios no estado infectado (I) na primeira vizinhança;
2. se o sítio escolhido está ocupado por um indivíduo infectado (I), este pode torna-se recuperado (R) com probabilidade c espontaneamente;
3. se o sítio escolhido está ocupado por um indivíduo recuperado (R), não ocorre nenhuma transição.

Considerando esses processos, a taxa de transição de um sítio i , para um sistema inicialmente no estado η , é

$$w_i(\eta) = \frac{1}{\mathcal{T}} \left[\delta(\eta_i, 0) \frac{b}{\zeta} \sum_v \delta(\eta_{i+v}, 1) + c \delta(\eta_i, 1) \right]. \quad (3.34)$$

Notamos que $w_i(\eta)$ é uma taxa e por isso está dividida pela escala temporal $\mathcal{T}$, já que a, b e c são probabilidades. Podemos escolher escalar o tempo tal que $\mathcal{T} = 1$. Na figura 3.4 apresentamos um diagrama que sumariza as transições.

Figura 3.4: Diagrama ilustrando as transições existentes no modelo suscetível-infectado-recuperado (SIR).

No modelo suscetível-infectado-recuperado, temos, portanto, que as transições possíveis para um sítio i são $\eta_i = 0 \rightarrow \eta_i = 1$ e $\eta_i = 1 \rightarrow \eta_i = 2$, ou seja, são do tipo $\eta_i = j \rightarrow \eta_i = j + 1$. Como já vimos no capítulo 2, para um modelo estocástico espacialmente estruturado, em que adotamos a dinâmica de “um sítio” e no qual as transições possíveis são do tipo $\eta_i = j \rightarrow \eta_i = j + 1$ [isto é, um modelo no qual $\alpha = 1$, considerando a definição de α dada na equação (2.112)], a equação mestra fica dada pela expressão (2.116) e a evolução temporal de uma grandeza de estado $f(\eta)$ fica dada pela equação (2.117). Dessa forma a equação mestra para o modelo suscetível-infectado-recuperado é

$$\frac{d}{dt}P(\eta, t) = \sum_{i=1}^N [P(\eta^i, t)w_i(\eta^i) - P(\eta, t)w_i(\eta)], \quad (3.35)$$

em que $\eta^i = (\eta_1, \dots, \eta_i^1, \dots, \eta_N)$, $\eta_i^1 = \text{mod}(\eta_i - 1, 3)$ é o antecessor de η_i no ciclo $0 \rightarrow 1 \rightarrow 2 \rightarrow 0$ e $w_i(\eta)$ é dado em (3.34). Já a equação de evolução temporal para a média de uma grandeza de estado $f(\eta)$ é

$$\frac{d}{dt}\langle f(\eta) \rangle = \sum_{i=1}^M \langle [f(\eta^i) - f(\eta)]w_i(\eta) \rangle, \quad (3.36)$$

em que $\eta^i = (\eta_1, \dots, \eta_i^1, \dots, \eta_N)$, $\eta_i^1 = \text{mod}(\eta_i + 1, 3)$ é sucessor de η_i no ciclo

$0 \rightarrow 1 \rightarrow 2 \rightarrow 0$ e $w_i(\eta)$ é dado em (3.34).

3.2.3 Equações de evolução temporal para médias e correlações

Podemos utilizar a equação (3.36) para encontrar a evolução temporal da média das grandezas $f(\eta) = \delta(\eta_j, 0)$ e $f(\eta) = \delta(\eta_j, 1)$. Vale notarmos que, se

$$f(\eta) = f(\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_j, \dots, \eta_N) = \delta(\eta_j, \Omega) \quad (3.37)$$

em que $\Omega = 0, 1$ ou 2 , então

$$f({}^i\eta) = f(\eta_1, \eta_2, \dots, \text{mod}(\eta_i + 1, 3), \dots, \eta_N) = \begin{cases} \delta(\text{mod}(\eta_j + 1, 3), \Omega), & \text{se } i = j \\ \delta(\eta_j, \Omega), & \text{se } i \neq j \end{cases},$$

ou seja,

$$f({}^i\eta) = f(\eta_1, \eta_2, \dots, \text{mod}(\eta_i + 1, 3), \dots, \eta_N) = \begin{cases} \delta(\eta_j, \text{mod}(\Omega - 1, 3)), & \text{se } i = j \\ \delta(\eta_j, \Omega), & \text{se } i \neq j \end{cases},$$

ou, reescrevendo,

$$f({}^i\eta) = \delta(\eta_j, \text{mod}(\Omega - 1, 3))\delta(i, j) + \delta(\eta_j, \Omega)(1 - \delta(i, j)). \quad (3.38)$$

Assim, após algum trabalho algébrico, encontramos a evolução temporal da média das grandezas $f(\eta) = \delta(\eta_j, 0)$ e $f(\eta) = \delta(\eta_j, 1)$. Denotamos $P_i(\Omega) = \langle \delta(\eta_i, \Omega) \rangle$ a probabilidade de o sítio i estar no estado para o qual a variável estocástica η_i assume o valor Ω ($\Omega = 0, 1, 2$) e $P_{i,j}(\Omega_1 \Omega_2) = \langle \delta(\eta_i, \Omega_1) \delta(\eta_j, \Omega_2) \rangle$ a correlação de dois pares de sítios vizinhos estarem um no estado Ω_1 ($\Omega_1 = 0, 1, 2$) e outro no estado Ω_2 ($\Omega_2 = 0, 1, 2$). Dessa forma, encontramos

$$\frac{d}{dt}P_j(0) = -\frac{b}{\zeta} \sum_v P_{j,j+v}(01), \quad (3.39)$$

$$\frac{d}{dt}P_j(1) = \frac{b}{\zeta} \sum_v P_{j,j+v}(01) - cP_j(1). \quad (3.40)$$

Em que $\sum_v$ é a soma sobre os primeiros vizinhos.

Além disso, como cada sítio sempre está em um dos três estados, a expressão para $P_j(2)$ fica

$$P_j(2) = 1 - P_j(0) - P_j(1). \quad (3.41)$$

Supondo uma solução homogênea e isotrópica, obtemos

$$\frac{d}{dt}P(0) = -bP(01), \quad (3.42)$$

$$\frac{d}{dt}P(1) = bP(01) - cP(1), \quad (3.43)$$

$$P(2) = 1 - P(0) - P(1). \quad (3.44)$$

Aproximação de campo médio simples

Das equações (3.42) e (3.43), observamos que as probabilidades de um sítio estar em um determinado estado dependem das correlações de dois sítios, de modo que não podemos encontrar solução para esse sistema diretamente. Uma primeira abordagem é utilizar a aproximação de campo médio simples discutida na subseção 2.4.3, em que as correlações entre os sítios são completamente desprezadas, e, por conseguinte, a espacialidade do problema. Aplicando a aproximação de campo médio simples, dada na equação (2.122), nas equações (3.42) e (3.43) e nomeando $x = P(0)$, $y = P(1)$ e $z = P(2)$ encontramos

$$\frac{d}{dt}x = -bxy, \quad (3.45)$$

$$\frac{d}{dt}y = bxy - cy, \quad (3.46)$$

$$z = 1 - x - y. \quad (3.47)$$

Em que a condição inicial do problema é $x(0) = 1 - h$ e $y(0) = h$, com h muito pequeno.

Das equações (3.45) e (3.46), observamos que $y = 0$ é uma linha fixa do sistema, ou seja, $(x, 0)$ é ponto fixo do sistema $\forall x$, por isso também a jacobiana do sistema tem um autovalor nulo para qualquer par $(x, 0)$.

Por outro lado $\frac{d}{dt}x \leq 0$, logo $x(t) \leq x(0)$ e $\frac{d}{dt}y = y(bx - c) \leq y(bx(0) - c)$. Assim, se $x(0) < \frac{c}{b}$, $\frac{d}{dt}y < 0$ e y decresce até anular-se quando atinge o ponto fixo; se $x(0) > \frac{c}{b}$, y cresce até atingir seu máximo em $x = \frac{c}{b}$, então passa a decrescer até anular-se quando atinge o ponto fixo. De todas as formas, concluímos que, independentemente da condição inicial, para tempos longos, y anula-se.

Em particular dentro do estudo do modelo suscetível-infectado-recuperado partimos da condição inicial $x(0) = 1 - h$ e tomamos o limite de que $h \rightarrow 0$, de modo que analisamos a estabilidade da solução estacionária $(x, y) = (1, 0)$, pelos auto-valores da jacobiana vemos que essa solução é estável se $b < c$. Para $b > c$ outra solução $(x, y) = (x^*, 0)$ com $x^* \neq 1$ passa ser estável.

Podemos encontrar $y(x)$, para tanto, dividimos a equação (3.46) pela equação (3.45). Assumindo que $x(t)$ seja uma função bem comportada encontramos

$$\frac{dy}{dx} = -1 + \frac{c}{bx}. \quad (3.48)$$

Resolvendo a equação acima com as condições iniciais $y(0) = h$ e $x(0) = 1 - h$ obtemos

$$y = 1 - x + \frac{c}{b} \ln \left(\frac{x}{1 - h} \right). \quad (3.49)$$

Para tempos longos $y = 0$. Denotando por $z_\infty = 1 - x_\infty$ a densidade de recuperados no estado estacionário temos que a expressão (3.49) para tempos longos fica

$$0 = z_\infty + \frac{c}{b} \ln \left(\frac{1 - z_\infty}{1 - h} \right). \quad (3.50)$$

No limite em que $h \rightarrow 0$, assumindo $z_\infty \ll 1$ e expandindo a expressão até segunda ordem de z_∞ encontramos

$$0 = 2 \frac{b - c}{c} z_\infty - z_\infty^2, \quad (3.51)$$

assim, concluímos que a transição ocorre em

$$b = c. \quad (3.52)$$

Além disso, nas proximidades da transição vale a seguinte aproximação

$$z_\infty = \frac{2}{c}(b - c). \quad (3.53)$$

Se adotamos uma escala temporal tal que $b + c = 1$, então no ponto crítico

$$c = 1/2, \quad (3.54)$$

e nas proximidades da transição vale a seguinte aproximação

$$z_\infty = \frac{2}{c}(1 - 2c). \quad (3.55)$$

Aproximação de campo médio com pares

Outra possibilidade para transformar (3.42) e (3.43) em um sistema fechado de equações é escrever as expressões para a evolução temporal das correlações de dois sítios e então usar a aproximação de campo médio com pares discutida na subseção 2.4.3, na qual correlações de três ou mais sítios passam a ser expressas em função de correlações de dois sítios e de um sítio.

Assim, aplicamos a expressão para evolução temporal de uma grandeza $f(\eta)$ dada em (3.36) para

$$\begin{aligned} f_a &= \delta(\eta_j, 0)\delta(\eta_k, 0), & f_b &= \delta(\eta_j, 0)\delta(\eta_k, 1), & f_c &= \delta(\eta_j, 0)\delta(\eta_k, 2), \\ f_d &= \delta(\eta_j, 1)\delta(\eta_k, 1), & f_e &= \delta(\eta_j, 1)\delta(\eta_k, 2), & f_f &= \delta(\eta_j, 2)\delta(\eta_k, 2). \end{aligned}$$

Não apresentamos as equações de evolução temporal para as outras possíveis combinações do tipo devido ao fato de que mais à frente assumimos que a solução é homogênea e isotrópica, de forma que $P_{i,j}(\Omega_1\Omega_2) = P_{i,j}(\Omega_2\Omega_1)$.

Vale ressaltarmos que, se

$$f(\eta) = f(\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_j \dots, \eta_N) = \delta(\eta_j, \Omega_1)\delta(\eta_k, \Omega_2) \text{ com } j \neq k \quad (3.56)$$

então

$$f(i\eta) = f(\eta_1, \eta_2, \dots, \text{mod}(\eta_i + 1, 3), \dots, \eta_N) = \begin{cases} \delta(\text{mod}(\eta_j + 1, 3), \Omega_1) \delta(\eta_k, \Omega_2), & \text{se } i = j \\ \delta(\eta_j, \Omega_1) \delta(\text{mod}(\eta_j + 1, 3), \Omega_2), & \text{se } i = k \\ \delta(\eta_j, \Omega_1) \delta(\eta_k, \Omega_2), & \text{se } i \neq j \text{ e } i \neq k \end{cases} ,$$

ou seja,

$$f(i\eta) = f(\eta_1, \eta_2, \dots, \text{mod}(\eta_i + 1, 3), \dots, \eta_N) = \begin{cases} \delta(\eta_j, \text{mod}(\Omega_1 - 1, 3)) \delta(\eta_k, \Omega_2), & \text{se } i = j \\ \delta(\eta_j, \Omega_1) \delta(\eta_j, \text{mod}(\Omega_2 - 1, 3)), & \text{se } i = k \\ \delta(\eta_j, \Omega_1) \delta(\eta_k, \Omega_2), & \text{se } i \neq j \text{ e } i \neq k \end{cases} ,$$

ou, reescrevendo,

$$\begin{aligned} f(i\eta) = f(\eta_1, \eta_2, \dots, \text{mod}(\eta_i + 1, 3), \dots, \eta_N) = \\ \delta(\text{mod}(\eta_j + 1, 3), \Omega_1) \delta(\eta_k, \Omega_2) \delta(i, j) + \\ + \delta(\eta_j, \Omega_1) \delta(\text{mod}(\eta_j + 1, 3), \Omega_2) \delta(i, k) + \\ + \delta(\eta_j, \Omega_1) \delta(\eta_j, \Omega_2) (1 - \delta(i, j)) (1 - \delta(i, k)). \end{aligned} \quad (3.57)$$

Depois de vários cálculos algébricos, assumindo a solução homogênea e isotrópica e lembrando da notação que adotamos para as correlações encontramos

$$\frac{d}{dt} P(00) = \frac{b(\zeta - 1)}{\zeta} (P(100) + P(001)), \quad (3.58)$$

$$\frac{d}{dt} P(01) = -\frac{b}{\zeta} (P(01) + (\zeta - 1)P(101) + (\zeta - 1)P(001)) - cP(01), \quad (3.59)$$

$$\frac{d}{dt} P(02) = -\frac{b}{\zeta} (\zeta - 1)P(102) + cP(01), \quad (3.60)$$

$$\frac{d}{dt} P(11) = +\frac{b}{\zeta} (P(01) + P(10) + (\zeta - 1)P(101) + (\zeta - 1)P(101)) - 2cP(11), \quad (3.61)$$

$$\frac{d}{dt} P(12) = \frac{b}{\zeta} (\zeta - 1)P(102) + cP(11), \quad (3.62)$$

$$\frac{d}{dt} P(22) = 2cP(12). \quad (3.63)$$

Lembramos ainda dos vínculos

$$P(0) = P(00) + P(01) + P(02), \quad (3.64)$$

$$P(1) = P(01) + P(11) + P(12), \quad (3.65)$$

$$P(2) = P(01) + P(11) + P(12), \quad (3.66)$$

$$1 = P(0) + P(1) + P(2). \quad (3.67)$$

Concluimos, portanto, que temos apenas cinco variáveis independentes. Escolhemos como variáveis independentes $x = P(0)$, $y = P(1)$, $u = P(02)$, $v = P(01)$ e $w = P(12)$. Usamos a aproximação de campo médio com pares, vista na equação (2.123) da subseção 2.4.3 nas equações (3.59), (3.60) e (3.62). Desse modo, as equações para a evolução temporal das densidades x e y e das correlações de dois sítios u , v e w ficam

$$\dot{x} = -bv, \quad (3.68)$$

$$\dot{y} = bv - cy, \quad (3.69)$$

$$\dot{u} = -b \frac{(\zeta - 1)}{\zeta} \frac{uv}{x} + cv, \quad (3.70)$$

$$\dot{v} = -\frac{b}{\zeta} v + b \frac{(\zeta - 1)}{\zeta} \frac{v}{x} (x - u - 2v) - cv, \quad (3.71)$$

$$\dot{w} = +b \frac{(\zeta - 1)}{\zeta} \frac{uv}{x} + c(y - v - 2w). \quad (3.72)$$

Partimos de uma condição inicial muito próxima ao ponto fixo $(x, y, u, v, w) = (1, 0, 0, 0, 0)$, neste o jacobiano é

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} 0 & a & 0 & -b & 0 \\ 0 & -c & 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c & 0 \\ 0 & a & 0 & (b(\zeta - 2)/\zeta - c) & 0 \\ 0 & c & 0 & -c & -2c \end{pmatrix}, \quad (3.73)$$

e seus autovalores são $\lambda_1 = 0$, $\lambda_2 = 0$, $\lambda_3 = -c$, $\lambda_4 = -2c$, $\lambda_5 = b(\zeta - 2)/\zeta - c$. Os dois autovalores nulos ocorrem pois todos os pontos do tipo $(x, 0, 0, v, 0)$

são pontos fixos, λ_3 e λ_4 são sempre negativos, $\lambda_5 < 0 \Leftrightarrow c > b(\zeta - 2)/\zeta$, escolhendo a escala temporal tal que $b + c = 1$, $\lambda_5 < 0 \Leftrightarrow (1 - c)(\zeta - 2)/\zeta - c$. Portanto, o ponto fixo $(1, 0, 0, 0, 0)$ é marginalmente estável se $c > c_c = \frac{\zeta - 2}{2(\zeta - 1)}$, para $c < c_c = \frac{\zeta - 2}{2(\zeta - 1)}$ essa solução não é estável e em $c_c = \frac{\zeta - 2}{2(\zeta - 1)}$ ocorre a transição entre os dois regimes. No regime em que esta solução não é estável a epidemia se propaga, mas, novamente, dado tempo suficiente, restam apenas suscetíveis e recuperados. Dessa forma, o ponto crítico na aproximação com pares ocorre em

$$c_c = \frac{\zeta - 2}{2(\zeta - 1)}. \quad (3.74)$$

Convém notar que $\frac{\zeta - 2}{2(\zeta - 1)} < 1/2$, assim concluímos que a região em que há propagação da epidemia é menor na aproximação de campo médio com pares do que na aproximação de campo médio simples. Tal comportamento é esperado, pois, tipicamente, a aproximação de campo médio com pares gera diagramas de fase em que a fase ativa (que no caso do modelo suscetível-infectado-recuperado é a fase em que há propagação da epidemia) é menor.

3.2.4 Classe de universalidade

Esta seção é principalmente baseada no artigo [59]. Apresentamos a relação do modelo suscetível-infectado-recuperado com a percolação, a grandeza universal UP que pode ser usada para o cálculo do parâmetro crítico do modelo, bem como os expoentes para esse modelo na rede quadrada. Esses resultados são importantes para a compreensão das simulações apresentadas no capítulo 5 da tese sobre o modelo suscetível-infectado-recuperado com infecção recorrente.

Definições

Em simulações do modelo suscetível-infectado-recuperado estocástico e definido em uma rede regular podemos obter diversas grandezas que destacamos a seguir. O número de indivíduos recuperados após o sistema atingir o estado

absorvente N_R . O número médio de recuperados S ,

$$S = \langle N_R \rangle. \quad (3.75)$$

A densidade ρ de recuperados,

$$\rho = \frac{S}{N}, \quad (3.76)$$

em que N é o número total de sítios da rede. A média M do número quadrático médio de indivíduos recuperados,

$$M = \langle N_R^2 \rangle. \quad (3.77)$$

A razão U entre o número quadrático médio de indivíduos recuperados e o quadrado da média de indivíduos recuperados,

$$U = \frac{\langle N_R^2 \rangle}{\langle N_R \rangle^2}. \quad (3.78)$$

O parâmetro de ordem P , definido em [59], que é a probabilidade de o aglomerado atingir uma das bordas,

$$P = \frac{\text{“número de vezes que o cluster atinge a borda”}}{\text{“número total de simulações”}}. \quad (3.79)$$

Para encontrarmos as leis de escala finita, a grandeza que pode ser utilizada para determinação do ponto crítico, bem como os expoentes críticos desse modelo precisamos entender a relação entre o modelo suscetível-infectado-recuperado e a percolação isotrópica, explicamos essa relação a seguir.

Relação entre o modelo suscetível-infectado-recuperado e a percolação isotrópica

Usamos como principal referência dessa subseção o artigo [59]. Na teoria de percolação isotrópica definimos N_s o número médio de clusters de tamanho

s e $n_s = \frac{N_s}{N}$ o número médio de clusters de tamanho s por sítio, em que N é número de sítios da rede. A probabilidade de que um sítio ocupado pertença a um cluster de tamanho s é

$$P_s = sn_s. \quad (3.80)$$

A partir de (3.80), o tamanho médio dos clusters S é

$$S = \sum_s sP_s = \sum_s s^2 n_s, \quad (3.81)$$

e a média quadrática do tamanho dos clusters M é

$$M = \sum_s s^2 P_s = \sum_s s^3 n_s. \quad (3.82)$$

O parâmetro de ordem P é a probabilidade de que um sítio pertença ao cluster infinito percolante.

Seja p o parâmetro associado ao problema da percolação e p_c seu valor crítico. Na percolação por sítio, p é a probabilidade de que um sítio esteja ocupado, e na percolação por ligação de que uma ligação esteja feita. Próximo do ponto crítico essas grandezas comportam-se como

$$P \sim \epsilon^\beta, \quad \epsilon > 0, \quad (3.83)$$

$$S \sim |\epsilon|^{-\gamma}, \quad (3.84)$$

$$M \sim |\epsilon|^{-\beta-2\gamma}. \quad (3.85)$$

em que $\epsilon = p - p_c$, β e γ são expoentes críticos associados ao parâmetro de ordem e ao tamanho médio de clusters, respectivamente.

Na referência [57] estão apresentados argumentos e resultados que mostram que os clusters de indivíduos recuperados gerados pela dinâmica estocástica do modelo suscetível-infectado-recuperado (SIR) seguem a estatística da distribuição de clusters da percolação padrão. O tamanho médio do cluster na percolação é identificado com o número médio de recuperados. Isto nos leva a identificar as grandezas P , S e M do modelo SIR definidas na subseção 3.2.4 com as grandezas P , S e M da percolação apresentadas nessa subseção

3.2.4. Consequentemente, o comportamento crítico das grandezas P , S e M do modelo SIR é dado pelas equações (3.83), (3.84) e (3.85) respectivamente, sendo $\epsilon = c - c_c$. Tendo em vista a relação do modelo SIR com a percolação isotrópica, apresentamos hipóteses de teoria de escala finita na subseção 3.2.4.

Comportamento crítico

Passamos, agora, a escrever as leis de escala finita para o modelo suscetível-infectado-recuperado usando a teoria de escala finita [113–118]. A transição de fase é caracterizada por um comprimento de correlação espacial ξ que diverge no ponto crítico e cujo comportamento assintótico é

$$\xi \sim |\epsilon|^{-\nu_\perp}, \quad (3.86)$$

em que $\epsilon = c - c_c$, sendo c_c o valor crítico de c e $\nu_\perp$ o expoente crítico associado ao comprimento de correlação espacial. Aqui utilizamos a notação $\nu_\perp$, em vez de ν , como na percolação isotrópica, porque nós consideramos o crescimento dos clusters do modelo suscetível-infectado-recuperado como um processo dinâmico.

Na região próxima ao ponto crítico o tamanho linear do sistema L escala com o comprimento de correlação ξ . Uma grandeza Q_L deve se comportar, de acordo com a teoria de escala finita, como

$$Q_L(\epsilon) = L^{\Theta/\nu_\perp} F\left(L^{1/\nu_\perp} \epsilon\right) \quad (3.87)$$

em que F é uma função universal e Θ é o expoente que a descreve no limite em que $L \rightarrow \infty$. Em particular, quando tomamos o limite $L \rightarrow \infty$, encontramos a expressão

$$Q_\infty(\epsilon) \sim |\epsilon|^{-\Theta}. \quad (3.88)$$

O expoente associado ao parâmetro de ordem P é β , portanto a lei de escala finita para o parâmetro de ordem é

$$P_L(\epsilon) = L^{-\beta/\nu_\perp} \varphi_0\left(L^{1/\nu_\perp} \epsilon\right), \quad (3.89)$$

em que φ_0 é uma função universal.

Além disso, as grandezas do modelo suscetível-infectado-recuperado (SIR) podem ser relacionadas às grandezas da percolação isotrópica, como vimos na seção 3.2.4. Portanto, temos que nas vizinhas do ponto crítico

$$S \sim |\epsilon|^{-\gamma}, \quad (3.90)$$

$$M \sim |\epsilon|^{-\beta-2\gamma}, \quad (3.91)$$

$$U \sim |\epsilon|^{-\beta}. \quad (3.92)$$

Usando as expressões (3.87) e (3.90), obtemos que número de recuperados escala da seguinte maneira

$$S_L(c) = L^{\gamma/\nu_\perp} \varphi_1(L^{1/\nu_\perp} \epsilon), \quad (3.93)$$

em que φ_1 é uma função universal. Usando as expressões (3.87) e (3.91) temos que o quadrado do número de recuperados escala do seguinte modo

$$M_L(c) = L^{(\beta+2\gamma)/\nu_\perp} \varphi_2(L^{1/\nu_\perp} \epsilon), \quad (3.94)$$

em que φ_2 é uma função universal. Usando as expressões (3.87) e (3.92), encontramos que a grandeza U escala como

$$U_L(c) = L^{\beta/\nu_\perp} \varphi_3(L^{1/\nu_\perp} \epsilon), \quad (3.95)$$

em que φ_3 é uma função universal. No ponto crítico temos que $\epsilon \rightarrow 0$, de modo que as expressões para P , S , M e U ficam dadas respectivamente por:

$$P \sim L^{-\beta/\nu_\perp}, \quad (3.96)$$

$$S \sim L^{\gamma/\nu_\perp}, \quad (3.97)$$

$$M \sim L^{(\beta+2\gamma)/\nu_\perp}, \quad (3.98)$$

$$U \sim L^{\beta/\nu_\perp}. \quad (3.99)$$

Das equações (3.96) e (3.99) vemos que o produto UP das grandezas U e P

não depende de L no ponto crítico. No artigo [59] introduziu-se essa grandeza denominada UP como uma grandeza universal que gera um novo método para o cálculo do ponto crítico no modelo suscetível-infectado-recuperado (SIR) e outros modelos pertencentes à classe de universalidade da percolação isotrópica como o modelo Suscetível-Exposto-Infectado (SEI) [119].

Os valores exatos dos expoentes na rede quadrada são conhecidos do modelo da percolação, $\frac{\beta}{\nu_{\perp}} = \frac{5}{48} = 0,1042$, $\frac{\gamma}{\nu_{\perp}} = \frac{43}{24} = 1,792$ e $\nu_{\perp} = \frac{4}{3}$. No artigo [59], encontrou-se para o modelo definido na rede quadrada $c_c = 0,17650(2)$, $UP = 1,0167(1)$ no ponto crítico na extrapolação para redes infinitas, $\frac{\beta}{\nu_{\perp}} = 0,1048$ e $\frac{\gamma}{\nu_{\perp}} = 1,7923$. Vale notar que, para o modelo suscetível-infectado-recuperado definido na rede quadrada, o valor do ponto crítico foi obtido em [57] com bastante precisão $c_c = 0.1765005(10)$ através de extensivas simulações numéricas utilizando técnica empregada em modelos de percolação.

No capítulo 5 apresentamos resultados que reproduzimos para o modelo suscetível-infectado-recuperado, pois o modelo suscetível-infectado-recuperado com infecção recorrente recai no modelo suscetível-infectado-recuperado para um determinado conjunto de parâmetros.

Capítulo 4

Modelo

suscetível-infectado-recuperado unidimensional

Neste capítulo apresentamos um método exato para analisar o modelo suscetível-infectado-recuperado em uma rede unidimensional. A definição desse modelo, assim como as notações utilizadas para denominar seus estados, as taxas de transição encontram-se na seção 3.2.

4.1 Solução exata em uma rede unidimensional

Consideramos uma rede unidimensional com infinitos sítios, mas localizada sobre uma semi-reta. Essa rede é tal que o primeiro sítio está na posição $n = 1$ e os demais sítios estão à direita deste. Além disso, em $t = 0$, o sítio localizado em $n = 1$ está no estado infectado e todos os outros sítios estão no estado suscetível. Portanto, a epidemia só pode se propagar para a direita. É fácil ver que após o primeiro sítio no estado suscetível todos os sítios à direita deste estão no estado suscetível. Isso ocorre pois nessa rede um sítio só pode passar para o estado infectado por contato com o sítio à esquerda no estado infectado. Nunca ocorre, portanto, um sítio no estado suscetível à esquerda de um sítio no estado infectado.

Seja

$$A_n(\eta) = P_{n-1,n}(10) = \langle \delta(\eta_{n-1},1)\delta(\eta_n,0) \rangle \quad (4.1)$$

a probabilidade de que o n -ésimo sítio seja o primeiro sítio no estado suscetível e de que o $(n-1)$ -ésimo sítio esteja no estado infectado, e seja

$$B_n(\eta) = P_{n-1,n}(20) = \langle \delta(\eta_{n-1},2)\delta(\eta_n,0) \rangle \quad (4.2)$$

a probabilidade de que o n -ésimo sítio seja o primeiro sítio no estado suscetível e de que o $(n-1)$ -ésimo sítio esteja no estado recuperado.

Na figura 4.1 apresentamos um esquema com o estado $\eta(t)$ para qualquer instante, com a condição inicial $\eta(0)$, com a probabilidade $A_n(t)$ e com a probabilidade $B_n(t)$

Figura 4.1: Esquema apresentando em (a) o estado $\eta(t)$, em (b) a condição inicial $\eta(t=0)$, em (c) probabilidade $A_n(t)$ e em (d) probabilidade $B_n(t)$.

Vale notar que se

$$f(\eta) = f(\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_j, \dots, \eta_N) = \delta(\eta_{n-1}, \Omega_1) \delta(\eta_n, \Omega_2) \quad (4.3)$$

então

$$f(i\eta) = f(\eta_1, \eta_2, \dots, \text{mod}(\eta_i + 1, 3), \dots, \eta_N) =$$

$$= \begin{cases} \delta(\text{mod}(\eta_{n-1} + 1, 3), \Omega_1) \delta(\eta_n, \Omega_2), & \text{se } i = n - 1 \\ \delta(\eta_{n-1}, \Omega_1) \delta(\text{mod}(\eta_n + 1, 3), \Omega_2), & \text{se } i = n \\ \delta(\eta_j, \Omega_{n-1}) \delta(\eta_k, \Omega_n), & \text{se } i \neq n - 1 \text{ e } i \neq n \end{cases},$$

ou seja,

$$f(i\eta) = f(\eta_1, \eta_2, \dots, \text{mod}(\eta_i + 1, 3), \dots, \eta_N) =$$

$$= \begin{cases} \delta(\eta_{n-1}, \text{mod}(\Omega_1 - 1, 3)) \delta(\eta_n, \Omega_2), & \text{se } i = n - 1 \\ \delta(\eta_n - 1, \Omega_1) \delta(\eta_n, \text{mod}(\Omega_2 - 1, 3)), & \text{se } i = n \\ \delta(\eta_{n-1}, \Omega_1) \delta(\eta_n, \Omega_2), & \text{se } i \neq n - 1, n \end{cases},$$

ou reescrevendo,

$$f(i\eta) = f(\eta_1, \eta_2, \dots, \text{mod}(\eta_i + 1, 3), \dots, \eta_N) =$$

$$\delta(\eta_{n-1}, \text{mod}(\Omega_1 - 1, 3)) \delta(\eta_n, \Omega_2) \delta(i, n - 1) +$$

$$+ \delta(\eta_{n-1}, \Omega_1) \delta(\eta_n, \text{mod}(\Omega_2 - 1, 3)) \delta(i, n) +$$

$$+ \delta(\eta_{n-1}, \Omega_1) \delta(\eta_n, \Omega_2) (1 - \delta(i, n - 1)) (1 - \delta(i, n)). \quad (4.4)$$

A partir da equação para evolução temporal de uma grandeza de estado para o tipo de modelo considerado (3.36), e usando as definições de A_n e B_n dadas nas equações (4.1) e (4.2), obtemos a evolução temporal de cada uma destas grandezas,

$$\frac{d}{dt} A_n = \frac{d}{dt} \langle \delta(\eta_{n-1}, 1) \delta(\eta_n, 0) \rangle =$$

$$= \sum_i \langle [\delta(\eta_{n-1}, \text{mod}(1 - 1, 3)) \delta(\eta_n, 0) \delta(i, n - 1) + \delta(\eta_{n-1}, 1) \delta(\eta_n, \text{mod}(0 - 1, 3)) \delta(i, n) +$$

$$+ \delta(\eta_{n-1}, 1) \delta(\eta_n, 0) (1 - \delta(i, n - 1)) (1 - \delta(i, n)) - \delta(\eta_{n-1}, 1) \delta(\eta_n, 0)] w_i(\eta) \rangle =$$

$$= \langle [\delta(\eta_{n-1}, 0) \delta(\eta_n, 0) + \delta(\eta_{n-1}, 1) \delta(\eta_n, 2) - 2\delta(\eta_{n-1}, 1) \delta(\eta_n, 0)] w_i(\eta) \rangle \quad (4.5)$$

e

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}B_n &= \frac{d}{dt}\langle \delta(\eta_{n-1},2)\delta(\eta_n,0) \rangle = \\
&= \sum_i \langle [\delta(\eta_{n-1}, \text{mod}(2-1,3))\delta(\eta_n,0)\delta(i,n-1)\delta(\eta_{n-1},2)\delta(\eta_n, \text{mod}(0-1,3))\delta(i,n) + \\
&\quad + \delta(\eta_{n-1},2)\delta(\eta_n,0)(1-\delta(i,n-1))(1-\delta(i,n)) - \delta(\eta_{n-1},2)\delta(\eta_n,0)]w_i(\eta) \rangle = \\
&= \langle [\delta(\eta_{n-1},1)\delta(\eta_n,0) + \delta(\eta_{n-1},2)\delta(\eta_n,2) - 2\delta(\eta_{n-1},2)\delta(\eta_n,0)]w_i(\eta) \rangle
\end{aligned} \tag{4.6}$$

Em que as condições iniciais são $A_n(\eta, t=0) = \delta(n,1)$ e $B_n(\eta, t=0) = 0$.

Substituindo a taxa $w_i(\eta)$ dada na equação (3.34) nas expressões (4.5) e (4.6), fazendo uma série de cálculos algébricos, levando em conta que o primeiro sítio só possui como vizinho o sítio à direita, e que não há sítios infectados à direita de um sítio suscetível obtemos para $n = 1$

$$\frac{d}{dt}A_1 = -\left(c + \frac{b}{2}\right)A_1, \tag{4.7}$$

$$\frac{d}{dt}B_1 = cA_1, \tag{4.8}$$

com $A_1(0) = 1$ e $B_1(0) = 0$, já para $n \geq 2$ temos

$$\frac{d}{dt}A_n = \frac{b}{2}A_{n-1} - \left(c + \frac{b}{2}\right)A_n, \tag{4.9}$$

$$\frac{d}{dt}B_n = cA_n. \tag{4.10}$$

De acordo com a condição inicial adotada e com as regras deste modelo o sítio zero nunca poderá ser ocupado por um indivíduo suscetível, portanto, temos $A_0(t) = B_0(t) = 0$. Dessa forma, as equações (4.9) e (4.10) valem também para o sítio $n = 1$.

Definimos a função geratriz associada

$$g_1(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n x^n = \sum_{n=1}^{\infty} A_n x^n, \text{ pois } A_0 = 0. \tag{4.11}$$

Aplicamos então o método da **função geratriz**. Multiplicamos a equação

(4.9) por x^n e tomamos a somatória em n

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_{n=1}^{\infty} A_n x^n = \frac{b}{2} \sum_{n=1}^{\infty} A_{n-1} x^n - \left(c + \frac{b}{2}\right) \sum_{n=1}^{\infty} A_n x^n, \quad (4.12)$$

lembramos que $A_0 = 0$ e portanto podemos reescrever,

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_{n=1}^{\infty} A_n x^n = \frac{b}{2} \sum_{n=2}^{\infty} A_{n-1} x^n - \left(c + \frac{b}{2}\right) \sum_{n=1}^{\infty} A_n x^n, \quad (4.13)$$

ou, fazendo $n' = n - 1$ na segunda somatória,

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_{n=1}^{\infty} A_n x^n = x \frac{b}{2} \sum_{n'=1}^{\infty} A_{n'} x^{n'} - \left(c + \frac{b}{2}\right) \sum_{n=1}^{\infty} A_n x^n,$$

ou

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_{n=1}^{\infty} A_n x^n = \left[\frac{b}{2} x - \left(\frac{b}{2} + c \right) \right] \sum_{n=1}^{\infty} A_n x^n,$$

onde podemos identificar a definição de $g_1(x, t)$ e temos

$$\frac{\partial}{\partial t} g_1(x, t) = \left[\frac{b}{2} x - \left(\frac{b}{2} + c \right) \right] g_1(x, t). \quad (4.14)$$

Lembramos que para $t = 0$ temos $A_n(0) = \delta(1, n)$, e, portanto, a condição inicial é $g_1(x, 0) = x$. Assim, encontramos

$$g_1(x, t) = x \exp \left(\frac{b}{2} x t \right) \exp \left[- \left(\frac{b}{2} + c \right) t \right]. \quad (4.15)$$

A seguir expandimos a expressão para $g_1(x, t)$, dada em (4.15), em potências de x . A comparação dessa expansão com a definição de $g_1(x, t)$, dada em (4.11) fornece os coeficientes $A_n(t)$

$$A_n(t) = \exp \left[- \left(\frac{b}{2} + c \right) t \right] \left(\frac{bt}{2} \right)^{n-1} \frac{1}{(n-1)!}. \quad (4.16)$$

Substituímos, então, a expressão para $A_n(t)$ na evolução temporal para $B_n(t)$,

dada em (4.10),

$$B_n(t) = \frac{c \left(\frac{b}{2}\right)^{n-1}}{(n-1)!} \int_0^t \exp \left[- \left(\frac{b}{2c} + 1 \right) ct' \right] t'^{n-1} dt'. \quad (4.17)$$

Para resolvermos a integral do lado direito da equação (4.17) utilizamos integrações por partes e o princípio de indução finita.

Lema

$$I_n = \int_0^t t'^n e^{-kt'} dt' = \frac{n!}{k^{n+1}} - \frac{e^{-kt}}{k} \sum_{m=0}^n \frac{n!}{m!} \frac{t^m}{k^{n-m}} \quad (4.18)$$

Primeiro passo da indução, mostramos que vale para $n = 0, 1$

$$I_0 = \int_0^t t'^0 e^{-kt'} dt' = \frac{-e^{-kt'}}{k} t'^0 \Big|_0^t - \int_0^t \frac{-e^{-kt'}}{k} 0 dt' = \frac{-e^{-kt}}{k} + \frac{1}{k} = -\frac{e^{-kt}}{k} \frac{0!}{0!} \frac{t^0}{k^0} + \frac{0!}{k^1}, \quad (4.19)$$

$$I_1 = \int_0^t t'^1 e^{-kt'} dt' = \frac{-e^{-kt'}}{k} t'^1 \Big|_0^t - \int_0^t \frac{-e^{-kt'}}{k} dt' = \frac{-e^{-kt}}{k} t'^1 \Big|_0^t + \frac{1}{k} I_0 = \frac{-e^{-kt} t}{k} - \frac{e^{-kt}}{k^2} + \frac{1}{k^2} = -\frac{e^{-kt}}{k} \left[\frac{1! t^1}{1! k^0} + \frac{1! t^0}{0! k} \right] + \frac{1!}{k^2}. \quad (4.20)$$

Segundo passo, admitindo que vale para n provamos para $n + 1$

$$\begin{aligned} I_{n+1} &= \int_0^t t'^{n+1} e^{-kt'} dt' = \frac{-e^{-kt'}}{k} t'^{n+1} \Big|_0^t + \frac{(n+1)}{k} \int_0^t t'^n e^{-kt'} dt', \\ I_{n+1} &= \int_0^t t'^{n+1} e^{-kt'} dt' = \frac{-e^{-kt'}}{k} t'^{n+1} \Big|_0^t + \frac{(n+1)}{k} I_n, \\ I_{n+1} &= \int_0^t t'^{n+1} e^{-kt'} dt' = \frac{-e^{-kt'}}{k} \frac{(n+1)!}{(n+1)!} \frac{t^{n+1}}{k^{(n+1)-(n+1)}} - e^{-kt} \sum_{m=0}^n \frac{(n+1)!}{m!} \frac{t^m}{k^{n+1-m}} + \frac{(n+1)!}{k^{n+1}}, \\ I_{n+1} &= \int_0^t t'^{n+1} e^{-kt'} dt' = \frac{(n+1)!}{k^{n+1}} - e^{-kt} \sum_{m=0}^{n+1} \frac{(n+1)!}{m!} \frac{t^m}{k^{n+1-m}}. \end{aligned} \quad (4.21)$$

A equação (4.21) demonstra que vale para $n + 1$, de modo que demonstramos (4.18). Em particular no limite $t \rightarrow \infty$, usando uma mudança de variável $u' = kt$, concluímos que a integral pode ser expressa através de uma função gama.

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t t'^n e^{-kt'} dt' = \lim_{u \rightarrow \infty} \frac{1}{k^{n+1}} \int_0^u u'^n e^{-u'} du' = \frac{\Gamma(n+1)}{k^{n+1}} = \frac{n!}{k^{n+1}}. \quad (4.22)$$

Utilizando as equações (4.18) e (4.17) obtemos

$$B_n(t) = \frac{-\exp \left[- \left(\frac{b}{2} + c \right) t \right]}{\frac{b}{2c} + 1} \sum_{m=0}^{n-1} \frac{\left[\left(\frac{b}{2c} + 1 \right) ct \right]^m}{m!} + \frac{2c}{b} \frac{1}{\left(1 + \frac{2c}{b} \right)^n}. \quad (4.23)$$

É importante analisar os valores de $A_n(t)$ e $B_n(t)$ quando $t \rightarrow \infty$, pois neste limite temos as probabilidades estacionárias. A partir das equações (4.16) e (4.23) encontramos que para $t \rightarrow \infty$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} A_n(t) = 0, \quad (4.24)$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} B_n(t) = \frac{2c}{b} \frac{1}{\left(1 + \frac{2c}{b}\right)^n} = \frac{2c}{b} \exp \left\{ -\frac{n}{\left[\ln \left(1 + \frac{2c}{b}\right)\right]^{-1}} \right\} \quad (4.25)$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{B_n(t)}{A_n(t)} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{2c}{b} \frac{1}{\left(1 + \frac{2c}{b}\right)^n} \frac{b^{1-n}}{2} \exp \left[\left(\frac{b}{2c} + 1 \right) ct \right] t^{1-n} \rightarrow \infty. \quad (4.26)$$

Mais a frente, apresentamos uma análise mais detalhada destes resultados. Definimos

$$P_n = A_n + B_n, \quad (4.27)$$

a probabilidade de que o n -ésimo sítio seja o primeiro sítio no estado suscetível. Também definimos o valor médio da posição do primeiro sítio no estado suscetível $\langle n \rangle$,

$$\langle n \rangle = \sum_n n P_n(\eta, t), \quad (4.28)$$

e o valor quadrático médio de n

$$\langle n^2 \rangle = \sum_n n^2 P_n(\eta, t). \quad (4.29)$$

Se encontramos P_n , podemos calcular $\langle n \rangle$, $\langle n^2 \rangle$ e $\frac{d}{dt} \langle n \rangle$, todavia, em vez de somar A_n e B_n e fazer estes cálculos, é mais conveniente encontrar uma função geratriz para $P_n(t)$.

A evolução temporal de P_n é dada pela soma das equações (4.9) e (4.10), esta soma é apresentada abaixo

$$\frac{d}{dt} P_n = \frac{b}{2} (A_{n-1} - A_n) \quad (4.30)$$

Seja $g_2(x, t)$ a função geratriz dada por

$$g_2(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(t) x^n = \sum_{n=1}^{\infty} P_n(t) x^n \text{ pois } P_0 = 0, \quad (4.31)$$

com $|x| < 1$. Aplicamos então o método da função geratriz novamente. Ou seja, multiplicamos a equação (4.30) por x^n , efetuamos a somatória em n , fazemos mudanças de variáveis nos índices tal que identifiquemos $g_2(x, t)$ e chegamos a uma equação diferencial para $g_2(x, t)$

$$\frac{\partial}{\partial t} g_2(x, t) = \frac{b}{2} (x - 1) x \exp\left(\frac{b}{2} x t\right) \exp\left[-\left(\frac{b}{2} + c\right) t\right]. \quad (4.32)$$

A solução dessa equação, com a condição inicial é $g_2(x, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(0) x^n = x$ é

$$g_2(x, t) = x - \frac{(x^2 - x)}{\left[x - \left(1 + \frac{2c}{b}\right)\right]} + \frac{(x^2 - x)}{\left[x - \left(1 + \frac{2c}{b}\right)\right]} \exp\left\{\left[\frac{b}{2} x - \left(\frac{b}{2} + c\right)\right] t\right\}. \quad (4.33)$$

Usando propriedades da função geratriz podemos escrever que

$$x \frac{\partial}{\partial x} g_2(x, t) \Big|_{x=1} = \sum_{n=0}^{\infty} n P_n(t) = \langle n \rangle. \quad (4.34)$$

Se $c \neq 0$,

$$x \frac{\partial}{\partial x} g_2(x, t) \Big|_{x=1} = \sum_{n=0}^{\infty} n P_n(t) = \langle n \rangle = 1 - \frac{b}{2c} (e^{-ct} - 1) = 1 + \frac{b}{2c} - \frac{b}{2c} e^{-ct}, \quad (4.35)$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle n \rangle = 1 + \frac{b}{2c} \quad (4.36)$$

e $v = \frac{d}{dt} \langle n \rangle$ fica dada por

$$v = \frac{d}{dt} \langle n \rangle = \frac{b}{2} e^{-ct}, \quad (4.37)$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} v = 0. \quad (4.38)$$

Se $c = 0$,

$$x \frac{\partial}{\partial x} g(x, t) \Big|_{x=1} = \sum_{n=0}^{\infty} n P_n(t) = \langle n \rangle = 1 + \frac{bt}{2}, \quad (4.39)$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle n \rangle \rightarrow \infty \quad (4.40)$$

e $v = \frac{d}{dt} \langle n \rangle$ fica dada por

$$v = \frac{d}{dt} \langle n \rangle = \frac{b}{2}. \quad (4.41)$$

Agora, vamos analisar o comportamento de $\langle n^2 \rangle$. A partir das propriedades da função geratriz obtemos

$$x \frac{\partial}{\partial x} \left(x \frac{\partial}{\partial x} g_2(x, t) \right) \Big|_{x=1} = \sum_{n=0}^{\infty} n^2 P_n(t) = \langle n^2 \rangle. \quad (4.42)$$

E, portanto,

$$\langle n^2 \rangle = 1 + \frac{3b}{2c} + \frac{b^2}{2c^2} - \left(\frac{3b}{2c} + \frac{b^2}{2c^2} \right) e^{-ct} - \frac{b^2}{2c} t e^{-ct}. \quad (4.43)$$

Se $c = 0$

$$\langle n^2 \rangle = x \frac{\partial}{\partial x} \left(x \frac{\partial}{\partial x} g(x, t) \right) \Big|_{x=1} = 1 + \frac{3bt}{2} + \frac{b^2 t^2}{4}.$$

Se $c \neq 0$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle n^2 \rangle = 1 + \frac{3b}{2c} + \frac{b^2}{2c^2}. \quad (4.44)$$

Também podemos analisar o cumulante de segunda ordem $\frac{\langle n^2 \rangle}{(\langle n \rangle)^2}$. Desse modo, se $c = 0$,

$$\frac{\langle n^2 \rangle}{(\langle n \rangle)^2} = \frac{1 + \frac{3bt}{2} + \frac{b^2 t^2}{4}}{\left(1 + \frac{bt}{2}\right)^2} \quad (4.45)$$

e

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle n^2 \rangle}{(\langle n \rangle)^2} = 1. \quad (4.46)$$

Se $c \neq 0$,

$$\frac{\langle n^2 \rangle}{(\langle n \rangle)^2} = \frac{1 + \frac{3b}{2c} + \frac{b^2}{2c^2} - \left(\frac{3b}{2c} + \frac{b^2}{2c^2} \right) e^{-ct} - \frac{b^2}{c} \frac{te^{-ct}}{2}}{\left[1 - \frac{b}{2c}(e^{-ct} - 1) \right]^2} \quad (4.47)$$

e

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle n^2 \rangle}{(\langle n \rangle)^2} = \frac{1 + \frac{3b}{2c} + \frac{b^2}{2c^2}}{\left[1 + \frac{b}{2c} \right]^2} = \frac{1 + \frac{3b}{2c} + \frac{b^2}{2c^2}}{1 + \frac{b}{c} + \frac{b^2}{4c^2}}. \quad (4.48)$$

Figura 4.2: As soluções foram encontradas exatamente, mas a título de ilustração fizemos os gráficos. (a) $\langle n(t) \rangle$ versus t ; (b) $\dot{n}(t) = \langle \frac{d}{dt} n(t) \rangle$ versus t ; (c) $\langle n^2(t) \rangle$ versus t .

Apresentamos na figura 4.2 os gráficos para $\langle n(t) \rangle$, $\frac{d}{dt} \langle n \rangle$ e $\langle n^2(t) \rangle$ escolhendo uma escala de tempo tal que $b + c = 1$.¹

4.2 Análise dos resultados

$A_n(\eta)$ é a probabilidade de que o n -ésimo sítio seja o primeiro sítio suscetível e de que o $(n - 1)$ -ésimo sítio seja infectado e $B_n(\eta)$ a probabilidade de que o n -ésimo sítio seja o primeiro sítio suscetível e de que o $(n - 1)$ -ésimo sítio seja recuperado. Note que quando o último sítio antes do primeiro sítio suscetível é infectado, a epidemia ainda possui chances de se propagar, todavia se o último sítio antes do primeiro suscetível é recuperado, então a epidemia não mais se propaga. Dessa forma quanto maior $B_n(\eta)$ em relação a $A_n(\eta)$, maior a chance da epidemia parar de se propagar; ora, a menos do caso em que $c = 0$, $\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{B_n}{A_n} \rightarrow \infty$, isso indica fortemente, que salvo pelo caso em que $c = 0$ (no qual os indivíduos não se recuperam), a epidemia tende a se extinguir.

O valor médio da posição do primeiro sítio no estado suscetível $\langle n \rangle$ pode ser entendido como a borda da infecção. Exceto para o caso em $c = 0$, $\langle n \rangle$ converge para um número finito quando $t \rightarrow \infty$, decaindo exponencialmente para esse valor. A expressão $v = \frac{d}{dt} \langle n \rangle$, que pode ser entendida como a "velocidade" da propagação da epidemia, salvo para $c = 0$, v converge para zero quando $t \rightarrow \infty$ também decaindo exponencialmente para esse valor. Analogamente tanto o valor médio do quadrado da posição do primeiro sítio no estado suscetível $\langle n^2 \rangle$, quanto a variância $\langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2$ convergem para números finitos quando $t \rightarrow \infty$.

Tais fatos também indicam que a infecção tem alta probabilidade de ficar confinada numa região finita, mesmo para $t \rightarrow \infty$ quando $c \neq 0$.

No caso em que $c = 0$ os indivíduos não se recuperam de forma que $B_n(t) = 0$ para todo n e $P_n(t) = A_n(t)$. Nesse caso $\langle n \rangle$, o valor médio da posição do primeiro suscetível, diverge quando $t \rightarrow \infty$ e esse crescimento é algébrico ($\langle n \rangle = 1 + \frac{bt}{2}$). v , que pode ser interpretada como a velocidade de propagação da infecção, é constante e igual a $\frac{b}{2}$. Do mesmo modo, tanto o valor médio do quadrado da posição do primeiro sítio no estado suscetível

$\langle n^2 \rangle$, quanto a variância $\langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2$ divergem quando $t \rightarrow \infty$. Dessa forma, nesse caso a epidemia se propaga por toda rede, tal fato é esperado, já que para $c = 0$ os indivíduos não se recuperam.

Portanto, demonstramos que em uma dimensão não há propagação de epidemia e não há transição de fase no modelo suscetível-infectado-recuperado (SIR), o que é consistente com o fato que este modelo pertence à classe de universalidade da percolação isotrópica, pois não existe transição em uma dimensão para a percolação isotrópica.

Capítulo 5

Modelo

suscetível-infectado-recuperado com infecção recorrente

Investigamos o modelo suscetível-infectado-recuperado com infecção recorrente, que foi introduzido na referência [120] dentro do contexto de grupo de renormalização. Analisamos o modelo utilizando a abordagem de modelos estocásticos espacialmente estruturados apresentada no capítulo 2. Apresentamos resultados advindos de aproximações de campo médio e simulações de Monte Carlo para o modelo definido na rede quadrada, os quais estão publicados [1].

5.1 Definição

Da mesma forma que no modelo suscetível-infectado-recuperado (SIR) usual, consideramos uma população, na qual os indivíduos podem estar em três estados, a saber, suscetível (S), infectado (I) e recuperado/removido (R). Definimos o modelo em uma rede com N sítios, em que cada sítio possui ζ vizinhos. A cada sítio i associamos uma variável estocástica η_i , que pode assumir os valores 0, 1, 2 referentes respectivamente aos estados suscetível (S), infectado (I) e recuperado/removido (R). Dessa forma, o estado do sistema fica definido

pelo vetor estocástico $\eta = (\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_N)$. O indivíduo suscetível torna-se infectado cataliticamente com taxa proporcional ao número de primeiros vizinhos infectados. O indivíduo infectado torna-se novamente suscetível ou recuperado. Esses dois últimos processos são espontâneos.

A evolução temporal do sistema é dada por uma equação mestra e escolhe-se a “dinâmica de um sítio” [2] explicada na subseção 2.4.2. Dessa forma, a cada instante de tempo um único sítio é sorteado aleatoriamente, em seguida:

1. se o sítio escolhido está ocupado por um indivíduo suscetível (S) então este pode se tornar infectado com probabilidade bn/ζ , em que n é o número de sítios infectados na primeira vizinhança;
2. se o sítio escolhido está ocupado por um indivíduo infectado (I); então este pode se tornar recuperado (R) com probabilidade c espontaneamente,
3. se o sítio escolhido está ocupado por um indivíduo infectado (I); então este pode se tornar suscetível (S) com probabilidade a espontaneamente;
4. se o sítio escolhido está ocupado por um indivíduo recuperado (R), não ocorre nenhuma transição.

Na figura 5.1 apresentamos um diagrama que sumariza as transições e suas probabilidades.

Figura 5.1: Diagrama ilustrando as transições existentes no modelo suscetível-infectado-recuperado com infecção recorrente.

Uma possível interpretação desse modelo, em termos epidemiológicos, é entender que nem todos os indivíduos infectados adquirem imunidade, de

modo que os indivíduos infectados podem se tornar espontaneamente suscetíveis ou recuperados/removidos. Assim, por exemplo, se $a \gg c$ o indivíduo pode infectar-se e se tornar suscetível várias vezes antes de adquirir imunidade.

Outro modo de interpretar o modelo é entender que o estado recuperado representa apenas os indivíduos mortos. Nesse caso, o modelo oferece uma descrição simplificada para doenças nas quais um indivíduo nunca se torna imunizado, mas pode morrer ou curar-se. Isto é diferente do modelo suscetível-infectado-recuperado usual, pois se neste associamos o estado recuperado exclusivamente a indivíduos mortos, estamos admitindo que o indivíduo que é infectado irá morrer, já que nesse modelo sempre que um indivíduo é infectado, dado tempo suficiente, este passará para o estado recuperado. Por outro lado, no modelo suscetível-infectado-recuperado com infecção recorrente, interpretar um indivíduo no estado recuperado como um indivíduo morto não elimina a possibilidade de cura, dado que parte dos indivíduos suscetíveis que restam no estado estacionário são indivíduos que foram infectados mas se tornaram suscetíveis novamente.

Algumas doenças transmitidas por bactérias, como por exemplo a pneumonia, são exemplos de doenças que podem matar mas que não geram imunização no indivíduo como supomos neste modelo, o qual ainda é bastante simplificado pois, tipicamente, uma vez que o indivíduo já teve a doença uma vez ele pode estar mais fragilizado o que mudaria a taxa de infecção.

Tabela 5.1: Probabilidades de transição de um sítio cíclicas e anticíclicas, em que ζ é o número de vizinhos de um sítio e $\sum_v \delta(\eta_{i+v}, 1)$ é o número de primeiros vizinhos do sítio i no estado estado 1.

transição	probabilidade	transição	probabilidade
$0 \rightarrow 1$	$\frac{b}{\zeta} \delta(\eta_i, 0) \sum_v \delta(\eta_{i+v}, 1)$	$0 \rightarrow 2$	0
$1 \rightarrow 2$	$c \delta(\eta_i, 1)$	$1 \rightarrow 0$	$a \delta(\eta_i, 1)$
$2 \rightarrow 0$	0	$2 \rightarrow 1$	0

Analisando o modelo dentro do contexto apresentado no capítulo 2, percebemos que o modelo suscetível-infectado-recuperado com infecção recorrente

é também um modelo estocástico espacialmente estruturado, regido por uma equação mestra e no qual adotamos a dinâmica de “um sítio”. Esse modelo apresenta transições cíclicas ($\alpha = 1$) e anticíclicas ($\alpha = 2$), em que a definição de α é a que apresentamos no capítulo 2. As probabilidades de transição de um sítio cíclicas e anticíclicas são dadas na tabela 5.1.

Dessa forma, as taxas de transição $w_i^1(\eta)$ e $w_i^2(\eta)$ referentes às transições cíclicas e anticíclicas respectivamente, são

$$w_i^1(\eta) = \frac{1}{\tau} \left[\frac{b}{\zeta} \delta(\eta_i, 0) \sum_v \delta(\eta_{i+v}, 1) + c \delta(\eta_i, 1) \right] \quad (5.1)$$

e

$$w_i^2(\eta) = \frac{1}{\tau} a \delta(\eta_i, 1). \quad (5.2)$$

Notamos que $w_i^1(\eta)$ e $w_i^2(\eta)$ são taxas e por isso estão divididas pela escala temporal τ , já que a , b e c são probabilidades. Podemos escolher escalar o tempo tal que $\tau = 1$.

A equação mestra para o modelo suscetível-infectado-recuperado com infecção recorrente é o caso particular da equação (2.113) vista na subseção 2.4.2 com $\alpha = 1$ e $\alpha = 2$ com taxas dadas pelas expressões (5.1) e (5.2). Logo temos que a equação mestra para este modelo fica

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} P(\eta, t) = \sum_{i=1}^N \{ & [P(\eta_1, \dots, \eta_i^1, \dots, \eta_N; t) w_i^1(\eta_1, \dots, \eta_i^1, \dots, \eta_N) - P(\eta; t) w_i^1(\eta)] \\ & + [P(\eta_1, \dots, \eta_i^2, \dots, \eta_N; t) w_i^2(\eta_1, \dots, \eta_i^2, \dots, \eta_N) - P(\eta; t) w_i^2(\eta)] \}, \end{aligned} \quad (5.3)$$

em que $w_i^1(\eta)$ e $w_i^2(\eta)$ são dadas nas equações (5.1) e (5.2); $\eta_i^1 = \text{mod}(\eta_i - 1, 3)$ (antecessor de η_i no ciclo $0 \rightarrow 1 \rightarrow 2 \rightarrow 0$) e $\eta_i^2 = \text{mod}(\eta_i - 2, 3)$ (sucessor de η_i no ciclo $0 \rightarrow 1 \rightarrow 2 \rightarrow 0$). A equação para a evolução de uma grandeza de estado $f(\eta)$ fica

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle f(\eta) \rangle = \sum_{i=1}^M \langle \{ & [f(\eta_1, \dots, \eta_i^1, \dots, \eta_N) - f(\eta)] w_i^1(\eta) + \\ & + [f(\eta_1, \dots, \eta_i^2, \dots, \eta_N) - f(\eta)] w_i^2(\eta) \} \rangle, \end{aligned} \quad (5.4)$$

em que $w_i^1(\eta)$ e $w_i^2(\eta)$ são dadas em (5.1) e (5.2); $^1\eta_i = \text{mod}(\eta_i + 1, 3)$ (sucessor de η_i no ciclo $0 \rightarrow 1 \rightarrow 2 \rightarrow 0$) e $^2\eta_i = \text{mod}(\eta_i + 2, 3)$ (antecessor de η_i no ciclo $0 \rightarrow 1 \rightarrow 2 \rightarrow 0$).

É interessante também definirmos as taxas de imunização e recuperação efetivas dadas respectivamente por

$$p = \frac{a}{b} \quad (5.5)$$

e

$$q = \frac{c}{b}. \quad (5.6)$$

A redução do número de parâmetros pode ser feita reescalando o tempo.

5.1.1 Casos Particulares

Destacamos aqui dois casos em que este modelo recai em outros modelos já estudados.

Para $a = 0$, o modelo torna-se suscetível-infectado-recuperado (SIR) usual definido no capítulo 3. Convém destacar a seguinte relação

$$q = \frac{c}{b} = \frac{c}{1 - c}. \quad (5.7)$$

Já para $c = 0$, o modelo recai no processo de contato, todavia em outra escala temporal. De fato, comparando as taxas do processo de contato (1) e (2), apresentadas no capítulo 3, com as definições do modelo suscetível-infectado-recuperado com infecção recorrente no caso que em $c = 0$, encontramos a seguinte relação

$$\lambda = \frac{b}{a} = \frac{1}{p}. \quad (5.8)$$

5.2 Equações de evolução temporal para médias e correlações

Interessamo-nos em saber a evolução temporal das densidades de sítios em cada um dos estados. Para tanto, utilizamos a equação (5.4) visando encontrar a evolução temporal da média das gradezas $f(\eta) = \delta(\eta_j, 0)$, $f(\eta) = \delta(\eta_j, 1)$ e $f(\eta) = \delta(\eta_j, 2)$.

Vale notarmos que, se

$$f(\eta) = f(\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_j, \dots, \eta_N) = \delta(\eta_j, \Omega) \quad (5.9)$$

então

$$\begin{aligned} f(\eta_1, \eta_2, \dots, {}^1\eta_i, \dots, \eta_N) &= f(\eta_1, \eta_2, \dots, \text{mod}(\eta_i + 1, 3), \dots, \eta_N) = \\ &= \begin{cases} \delta(\text{mod}(\eta_j + 1, 3), \Omega), & \text{se } i = j \\ \delta(\eta_j, \Omega), & \text{se } i \neq j \end{cases}, \end{aligned}$$

ou seja,

$$\begin{aligned} f(\eta_1, \eta_2, \dots, {}^1\eta_i, \dots, \eta_N) &= f(\eta_1, \eta_2, \dots, \text{mod}(\eta_i + 1, 3), \dots, \eta_N) = \\ &= \begin{cases} \delta(\eta_j, \text{mod}(\Omega - 1, 3)), & \text{se } i = j \\ \delta(\eta_j, \Omega), & \text{se } i \neq j \end{cases}, \end{aligned}$$

ou reescrevendo,

$$\begin{aligned} f(\eta_1, \eta_2, \dots, {}^1\eta_i, \dots, \eta_N) &= f(\eta_1, \eta_2, \dots, \text{mod}(\eta_i + 1, 3), \dots, \eta_N) \\ &= \delta(\eta_j, \text{mod}(\Omega - 1, 3))\delta(i, j) + \delta(\eta_j, \Omega)(1 - \delta(i, j)). \end{aligned} \quad (5.10)$$

Além disso,

$$\begin{aligned} f(\eta_1, \eta_2, \dots, {}^2\eta_i, \dots, \eta_N) &= f(\eta_1, \eta_2, \dots, \text{mod}(\eta_i + 2, 3), \dots, \eta_N) = \\ &= \begin{cases} \delta(\text{mod}(\eta_j + 2, 3), \Omega), & \text{se } i = j \\ \delta(\eta_j, \Omega), & \text{se } i \neq j \end{cases}, \end{aligned}$$

ou seja,

$$\begin{aligned} f(\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_i, \dots, \eta_N) &= f(\eta_1, \eta_2, \dots, \text{mod}(\eta_i + 2, 3), \dots, \eta_N) = \\ &= \begin{cases} \delta(\eta_j, \text{mod}(\Omega - 2, 3)), & \text{se } i = j \\ \delta(\eta_j, \Omega), & \text{se } i \neq j \end{cases}, \end{aligned}$$

ou reescrevendo,

$$\begin{aligned} f(\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_i, \dots, \eta_N) &= f(\eta_1, \eta_2, \dots, \text{mod}(\eta_i + 2, 3), \dots, \eta_N) \\ &= \delta(\eta_j, \text{mod}(\Omega - 2, 3))\delta(i, j) + \delta(\eta_j, \Omega)(1 - \delta(i, j)). \end{aligned} \quad (5.11)$$

Usando as propriedades acima, após algum trabalho algébrico encontramos a evolução temporal da média das grandezas $f(\eta) = \delta(\eta_j, 0)$, $f(\eta) = \delta(\eta_j, 1)$ e $f(\eta) = \delta(\eta_j, 2)$.

Da mesma forma que no modelo suscetível-infectado-recuperado (SIR) usual, denotamos $P_i(\Omega) = \langle \delta(\eta_i, \Omega) \rangle$ a probabilidade de o sítio i estar no estado para o qual a variável estocástica η_i assume o valor Ω ($\Omega = 0, 1, 2$), $P_{i,j}(\Omega_1 \Omega_2) = \langle \delta(\Omega_1, \Omega_2) \rangle$ a correlação de dois pares de sítios vizinhos estarem um no estado Ω_1 ($\Omega_1 = 0, 1, 2$) e outro no estado Ω_2 ($\Omega_2 = 0, 1, 2$). Assim obtemos

$$\frac{d}{dt}P_j(0) = aP_j(1) - \frac{b}{\zeta} \sum_v P_{j,j+v}(01), \quad (5.12)$$

$$\frac{d}{dt}P_j(1) = \frac{b}{\zeta} \sum_v P_{j,j+v}(01) - (a + c)P_j(1), \quad (5.13)$$

$$\frac{d}{dt}P_j(2) = cP_j(1), \quad (5.14)$$

em que $\sum_v$ é a soma sobre os primeiros vizinhos. Como para cada sítio j , η_j vale 0, 1 ou 2, temos também

$$P_j(2) = 1 - P_j(0) - P_j(1). \quad (5.15)$$

Supondo uma solução homogênea e isotrópica, encontramos

$$\frac{d}{dt}P(0) = a(1) - bP(01), \quad (5.16)$$

$$\frac{d}{dt}P(1) = bP(01) - (a + c)P(1), \quad (5.17)$$

$$\frac{d}{dt}P(2) = cP(1), \quad (5.18)$$

$$P(2) = 1 - P(0) - P(1). \quad (5.19)$$

5.2.1 Aproximação de campo médio simples

Das equações (5.16-5.17), observamos que as probabilidades $P(0)$ e $P(1)$ dependem da correlação de dois sítios $P(01)$, de modo que não podemos encontrar solução para esse sistema diretamente. Uma primeira abordagem é utilizar a aproximação de campo médio simples, discutida na subseção 2.4.3, em que as correlações entre os sítios são completamente desprezadas, e, por conseguinte, a espacialidade do problema também é desprezada. Aplicando a aproximação de campo médio simples, dada na equação (2.122), nas equações (5.16-5.18) e nomeando $x = P(0)$, $y = P(1)$ e $z = P(2)$ obtemos

$$\frac{d}{dt}x = ay - bxy, \quad (5.20)$$

$$\frac{d}{dt}y = bxy - (a + c)y, \quad (5.21)$$

$$\frac{d}{dt}z = bcy. \quad (5.22)$$

Lembramos que $x + y + z = 1$, e que apenas duas equações do sistema acima são independentes. Escolhemos como variáveis independentes x e y .

Observando o sistema das equações (5.20) e (5.21) vemos que $y = 0$ é uma linha fixa do sistema, ou seja, $(x, 0)$ é ponto fixo do sistema $\forall x$, por isso também a jacobiana do sistema tem um autovalor nulo para qualquer par $(x, 0)$.

Em particular, dentro do estudo do modelo suscetível-infectado-recuperado com infecção recorrente adotamos condição inicial $x(0) = 1 - h$ e tomamos

o limite de que $h \rightarrow 0$, de modo que analisamos a estabilidade da solução estacionária $(x, y) = (1, 0)$. Através dos auto-valores da jacobiana, concluímos que essa solução é estável se $b < (a + c)$. Para $b > a + c$ outra solução $(x, y) = (x^*, 0)$ com $x^* \neq 1$ passa ser estável.

Admitindo que estamos em uma região em que $x \neq \frac{a}{b}$ e, portanto, $\frac{d}{dt}x \neq 0$, podemos dividir a equação (5.21) pela equação (5.20); supondo também que x seja uma função bem comportada, obtemos

$$\frac{dy}{dx} = \frac{q}{x - p} - 1, \quad (5.23)$$

em que usamos as definições de p e q dadas nas equações (5.5) e (5.6) para simplificar a equação.

Lembrando das condições iniciais $x(0) = 1 - h$ e $y(0) = h$ encontramos

$$y = q \ln \frac{x - p}{1 - h - p} - x + 1. \quad (5.24)$$

Notamos que $\left. \frac{dy}{dx} \right|_{\tilde{x}=p+q} = 0$ e $\left. \frac{d^2y}{dx^2} \right|_{\tilde{x}=p+q} = -\frac{1}{q}$, logo $y(x)$ possui um máximo local em

$$x_{max} = p + q, \quad (5.25)$$

no qual a função $y(x)$ assume o valor

$$y(x_{max}) = q \ln \left(\frac{q}{1 - h - p} \right) - 1. \quad (5.26)$$

Lembramos então que $x \in [0, 1]$, portanto só existe máximo dentro do domínio da função se $p + q < 1$. No caso em que $p + q < 1$, notando que partimos da condição inicial $x(0) = 1 - h$ com h muito pequeno temos que $\left. \frac{d}{dt}y \right|_{t=0} > 0$, logo y aumenta até atingir seu máximo em $x_{max} = p + q$ e então passa diminuir até atingir o ponto fixo $(x, y) = (x_\infty, 0)$. No caso em que $p + q > 1$ temos que $\frac{d}{dt}y = y(bx - a - c) = \frac{y}{b}(x - p - q) \leq \frac{y}{b}(1 - p - q) < 0$ de modo que y diminui até atingir o ponto fixo $(x_\infty, y) = (x_\infty, 0)$. Em ambos casos para tempos longos o sistema atinge um ponto fixo $(x_\infty, y) = (x_\infty, 0)$.

Usando esse fato na equação (5.24) temos

$$0 = q \ln \frac{x_\infty - p}{1 - h - p} - x_\infty + 1. \quad (5.27)$$

Denotando por $z_\infty = 1 - x_\infty$ a densidade de recuperados no estado estacionário, temos

$$z_\infty = -q \ln \frac{1 - z_\infty - p}{1 - h - p}, \quad (5.28)$$

sendo esta expressão válida para $q \neq 0$.

Na figura 5.2 apresentamos a densidade de recuperados no estado estacionário z_∞ *versus* q para diversos valores de h . A transição de fase ocorre apenas no limite em que $h \rightarrow 0$. Entendemos este limite da seguinte maneira, primeiro obtemos a densidade de recuperados estacionária z_∞ para $h \neq 0$, então tomamos o limite $h \rightarrow 0$, a solução correspondente a este limite está indicada por $h = 0^+$ na figura 5.2. Esse procedimento é equivalente a dizer que a condição inicial é uma quantidade infinitesimal de indivíduos infectados.

Figura 5.2: Densidade de indivíduos recuperados no estado estacionário z_∞ como função de q , obtida por aproximação de campo médio simples, para $\frac{q}{p} = \frac{c}{a} = 2$ e diversos valores de h . Por $h = 0^+$ denotamos a solução obtida no limite que $h \rightarrow 0$ da solução dada na equação (5.28).

A transição de fase contínua ocorre para

$$p + q = 1 \Leftrightarrow a + c = b. \quad (5.29)$$

Para explicitarmos isso, escrevemos h como função de z_∞ ,

$$h = 1 - p - (1 - z_\infty - p)e^{\frac{z_\infty}{q}}, \quad (5.30)$$

então expandimos a expressão à direita da equação (5.30) até segunda ordem em z_∞ ,

$$h = \frac{1}{q}(p + q - 1)z_\infty + \frac{1}{2q}z_\infty^2. \quad (5.31)$$

Se $h > 0$, esta equação tem uma solução negativa e uma positiva, sendo esta última dada por

$$z_\infty = (1 - p - q) + \sqrt{(1 - p - q)^2 + 2hq}. \quad (5.32)$$

No limite em que $h \rightarrow 0$ encontramos

$$z_\infty = \begin{cases} 0 & \text{se } p + q \geq 1 \\ 2(1 - p - q) & \text{se } p + q < 1 \end{cases}, \quad (5.33)$$

como mostramos na figura 5.2.

Escrevendo $z \sim (1 - p - q)^\beta$, obtemos $\beta = 1$. No ponto crítico, temos da equação (5.31) que $h = \frac{z_\infty^2}{2q}$. Escrevendo $z_\infty = h^{\frac{1}{\delta}}$ vemos que $\delta = 2$.

Da equação (5.29) observamos que para $q = 0$ a transição de fase ocorre em $p_c = 1$, ou seja, em $\lambda_c = 1$. Isto está de acordo com o fato de que para $q = 0$ o modelo recai no processo de contato, no qual $\lambda_c = 1$ na aproximação de campo médio simples, como visto na equação (3.10).

Também da equação (5.29) notamos que para $p = 0$, ou seja, para $a = 0$, a transição ocorre em $q_c = 1$, isto é, em $b = c$. Isto está de acordo com o fato de que para $p = 0$ o modelo recai no modelo suscetível-infectado-recuperado (SIR) usual, no qual a transição ocorre em $b = c$ na aproximação de campo médio simples, como visto na equação (3.52).

5.2.2 Aproximação de campo médio com pares

Analogamente ao que mostramos para o modelo suscetível-infectado-recuperado (SIR) usual, neste modelo também há outra possibilidade, mais sofisticada, para transformar (5.16) e (5.17) em um sistema fechado de equações. Podemos escrever as expressões para a evolução temporal das correlações de dois sítios, que por sua vez dependem de correlações de três sítios, e então usar a aproximação de campo médio com pares, discutida na subseção 2.4.3, na qual uma correlação de três sítios passa a ser expressa em função de correlações de dois sítios e de um sítio.

Assim, aplicamos a expressão para evolução temporal de uma grandeza $f(\eta)$ dada em (5.4) para

$$\begin{aligned} f_A &= \delta(\eta_j, 0)\delta(\eta_k, 0), & f_B &= \delta(\eta_j, 0)\delta(\eta_k, 1), & f_C &= \delta(\eta_j, 0)\delta(\eta_k, 2), \\ f_D &= \delta(\eta_j, 1)\delta(\eta_k, 1), & f_E &= \delta(\eta_j, 1)\delta(\eta_k, 2), & f_F &= \delta(\eta_j, 2)\delta(\eta_k, 2). \end{aligned}$$

Não apresentamos as equações de evolução temporal para as outras possíveis combinações do tipo devido ao fato de que mais à frente admitimos que a solução é homogênea e isotrópica, de forma que $P_{i,j}(\Omega_1\Omega_2) = P_{i,j}(\Omega_2\Omega_1)$.

Vale ressaltar que, se

$$f(\eta) = f(\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_j, \dots, \eta_N) = \delta(\eta_j, \Omega_1)\delta(\eta_k, \Omega_2) \text{ com } j \neq k \quad (5.34)$$

então

$$\begin{aligned} f(\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_i, \dots, \eta_N) &= f(\eta_1, \eta_2, \dots, \text{mod}(\eta_i + 1, 3), \dots, \eta_N) = \\ &= \begin{cases} \delta(\text{mod}(\eta_j + 1, 3), \Omega_1)\delta(\eta_k, \Omega_2), & \text{se } i = j \\ \delta(\eta_j, \Omega_1)\delta(\text{mod}(\eta_k + 1, 3), \Omega_2), & \text{se } i = k \\ \delta(\eta_j, \Omega_1)\delta(\eta_k, \Omega_2), & \text{se } i \neq j \end{cases} \end{aligned}$$

ou seja,

$$\begin{aligned} f(\eta_1, \eta_2, \dots, {}^1\eta_i, \dots, \eta_N) &= f(\eta_1, \eta_2, \dots, \text{mod}(\eta_i + 1, 3), \dots, \eta_N) = \\ &= \begin{cases} \delta(\eta_j, \text{mod}(\Omega_1 - 1, 3))\delta(\eta_k, \Omega_2), & \text{se } i = j \\ \delta(\eta_j, \Omega_1)\delta(\eta_k, \text{mod}(\Omega_2 - 1, 3)), & \text{se } i = k \\ \delta(\eta_j, \Omega_1)\delta(\eta_k, \Omega_2), & \text{se } i \neq j \end{cases} \end{aligned}$$

ou reescrevendo,

$$\begin{aligned} f(\eta_1, \eta_2, \dots, {}^1\eta_i, \dots, \eta_N) &= f(\eta_1, \eta_2, \dots, \text{mod}(\eta_i + 1, 3), \dots, \eta_N) = \\ &= \delta(\eta_j, \text{mod}(\Omega_1 - 1, 3))\delta(\eta_k, \Omega_2)\delta(i, j) + \delta(\eta_j, \Omega_1)\delta(\eta_k, \text{mod}(\Omega_2 - 1, 3))\delta(i, k) + \\ &\quad + \delta(\eta_j, \Omega_1)\delta(\eta_k, \Omega_2)(1 - \delta(i, j))(1 - \delta(i, k)). \end{aligned} \quad (5.35)$$

Além disso,

$$\begin{aligned} f(\eta_1, \eta_2, \dots, {}^2\eta_i, \dots, \eta_N) &= f(\eta_1, \eta_2, \dots, \text{mod}(\eta_i + 2, 3), \dots, \eta_N) = \\ &= \begin{cases} \delta(\text{mod}(\eta_j + 2, 3), \Omega_1)\delta(\eta_k, \Omega_2), & \text{se } i = j \\ \delta(\eta_j, \Omega_1)\delta(\text{mod}(\eta_k + 2, 3), \Omega_2), & \text{se } i = k \\ \delta(\eta_j, \Omega_1)\delta(\eta_k, \Omega_2), & \text{se } i \neq j \end{cases} \end{aligned}$$

ou seja,

$$\begin{aligned} f(\eta_1, \eta_2, \dots, {}^2\eta_i, \dots, \eta_N) &= f(\eta_1, \eta_2, \dots, \text{mod}(\eta_i + 1, 3), \dots, \eta_N) = \\ &= \begin{cases} \delta(\eta_j, \text{mod}(\Omega_1 - 2, 3))\delta(\eta_k, \Omega_2), & \text{se } i = j \\ \delta(\eta_j, \Omega_1)\delta(\eta_k, \text{mod}(\Omega_2 - 2, 3)), & \text{se } i = k \\ \delta(\eta_j, \Omega_1)\delta(\eta_k, \Omega_2), & \text{se } i \neq j \end{cases} \end{aligned}$$

ou reescrevendo,

$$\begin{aligned} f(\eta_1, \eta_2, \dots, {}^2\eta_i, \dots, \eta_N) &= f(\eta_1, \eta_2, \dots, \text{mod}(\eta_i + 1, 3), \dots, \eta_N) = \\ &= \delta(\eta_j, \text{mod}(\Omega_1 - 2, 3))\delta(\eta_k, \Omega_2)\delta(i, j) + \delta(\eta_j, \Omega_1)\delta(\eta_k, \text{mod}(\Omega_2 - 2, 3))\delta(i, k) + \\ &\quad + \delta(\eta_j, \Omega_1)\delta(\eta_k, \Omega_2)(1 - \delta(i, j))(1 - \delta(i, k)). \end{aligned} \quad (5.36)$$

Após vários cálculos algébricos, obtemos

$$\frac{d}{dt}P_{ij}(00) = a(P_{ij}(10) + P_{ij}(01)) - \frac{b}{\zeta} \left(\sum_{v \neq j} P_{v,ij}(100) + \sum_{v \neq i} P_{ij,v}(001) \right), \quad (5.37)$$

$$\frac{d}{dt}P_{ij}(01) = a(P_{ij}(11) - P_{ij}(01)) - \frac{b}{\zeta} \left(P_{ij}(01) + \sum_{v \neq j} P_{v,ij}(101) + \sum_{v \neq i} P_{ij,v}(001) \right) - cP_{ij}(01), \quad (5.38)$$

$$\frac{d}{dt}P_{ij}(02) = aP_{ij}(12) - \frac{b}{\zeta} \sum_{v \neq j} P_{v,ij}(102) + cP_{ij}(01), \quad (5.39)$$

$$\frac{d}{dt}P_{ij}(11) = -2aP_{ij}(11) + \frac{b}{\zeta} \left(P_{ij}(01) + P_{ij}(10) + \sum_{v \neq j} P_{v,ij}(101) + \sum_{v \neq i} P_{ij,v}(101) \right) - 2cP_{ij}(11), \quad (5.40)$$

$$\frac{d}{dt}P_{ij}(12) = -aP_{ij}(12) + \frac{b}{\zeta} \sum_{v \neq j} P_{v,ij}P(102) + cP_{ij}(11), \quad (5.41)$$

$$\frac{d}{dt}P_{ij}(22) = c(P_{ij}(12) + P_{ij}(21)). \quad (5.42)$$

Novamente, supondo uma solução homogênea e isotrópica encontramos

$$\frac{d}{dt}P(00) = 2aP(01) - \frac{b(\zeta - 1)}{\zeta} (P(100) + P(001)), \quad (5.43)$$

$$\frac{d}{dt}P(01) = a(P(11) - P(01)) - \frac{b}{\zeta} (P(01) + (\zeta - 1)P(101) + (\zeta - 1)P(001)) - cP(01), \quad (5.44)$$

$$\frac{d}{dt}P(02) = aP(12) - \frac{b}{\zeta} (\zeta - 1)P(102) + cP(01), \quad (5.45)$$

$$\frac{d}{dt}P(11) = -2aP(11) + \frac{b}{\zeta} (P(01) + P(10) + (\zeta - 1)P(101) + (\zeta - 1)P(101)) - 2cP(11), \quad (5.46)$$

$$\frac{d}{dt}P(12) = -aP(12) + \frac{b}{\zeta} (\zeta - 1)P(102) + cP(11), \quad (5.47)$$

$$\frac{d}{dt}P(22) = 2cP(12). \quad (5.48)$$

Valem também as seguintes relações

$$P(0) = P(00) + P(01) + P(02), \quad (5.49)$$

$$P(1) = P(01) + P(11) + P(12), \quad (5.50)$$

$$P(2) = P(02) + P(12) + P(22), \quad (5.51)$$

$$1 = P(0) + P(1) + P(2). \quad (5.52)$$

Portanto, concluímos que existem apenas cinco variáveis independentes. Na

análise feita a seguir consideramos como variáveis independentes $x = P(0)$, $y = P(1)$, $u = P(02)$, $v = P(01)$ e $w = P(12)$.

Observando as equações (5.44), (5.45) e (5.47) notamos que $P(01)$, $P(02)$ e $P(12)$ dependem de correlações três sítios. Visando a obtenção de um conjunto de equações fechado usamos a aproximação de campo médio com pares, vista na subseção 2.4.3, e, em particular, na equação (2.123), nas equações (5.44), (5.45) e (5.47). Desse modo encontramos

$$\dot{x} = ay - bv, \quad (5.53)$$

$$\dot{y} = -(a + c)y + bv, \quad (5.54)$$

$$\dot{u} = aw - b \frac{(\zeta - 1)}{\zeta} \frac{uv}{x} + cv, \quad (5.55)$$

$$\dot{v} = a(y - 2v - w) - b(1 - f)v + bf \frac{v}{x}(x - u - 2v) - cv, \quad (5.56)$$

$$\dot{w} = -aw + bf \frac{uv}{x} + c(y - v - 2w), \quad (5.57)$$

em que $f = \frac{\zeta - 1}{\zeta}$ e ζ é o número de coordenação da rede.

É fácil notar que $(x, y, u, v, w) = (x, 0, u, 0, 0)$ é ponto fixo do sistema $\forall x, u$. Em particular, nós partimos de condição inicial próxima a $(x, y, u, v, w) = (1, 0, 0, 0, 0)$. Logo, analisamos a estabilidade desse ponto, se ele for estável o sistema ficará preso no estado absorvente $(x, y, u, v, w) = (1, 0, 0, 0, 0)$; se não, o sistema irá para outro estado.

A jacobiana desse sistema aplicada ao ponto fixo é

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} 0 & a & 0 & -b & 0 \\ 0 & -(a + c) & 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c & a \\ 0 & a & 0 & (2bf - 2a - b - c) & -a \\ 0 & c & 0 & -c & -(a + 2c) \end{pmatrix}. \quad (5.58)$$

Da análise do sinal dos autovalores da jacobiana temos que o ponto fixo $(x, y, u, v, w) = (1, 0, 0, 0, 0)$ perde estabilidade quando

$$(\zeta - 1)p + (\zeta - 2)q = \zeta(p + q)^2. \quad (5.59)$$

Dessa forma, a equação (5.59) fornece a linha de transição, na aproximação de campo médio com pares, entre o regime em que há propagação da epidemia e o regime em que não há.

Para $q = 0$, observamos que a transição ocorre em $p_c = \frac{\zeta-1}{\zeta}$, e, portanto $\lambda_c = \frac{\zeta}{\zeta-1}$. Isto está de acordo com o fato de que para $q = 0$, o modelo recai no processo de contato, no qual $\lambda_c = \frac{\zeta}{\zeta-1}$ na aproximação de campo médio com pares vista na equação (3.19).

Já para $p = 0$, ou seja, para $a = 0$, notamos que a transição ocorre em $q_c = \frac{c_c}{1-c_c} = \frac{\zeta-2}{\zeta}$, de forma que $c_c = \frac{\zeta-2}{2(\zeta-1)}$. Isto está de acordo com o fato de que para $p = 0$ o modelo recai no modelo suscetível-infectado-recuperado (SIR) usual, no qual $c_c = \frac{\zeta-2}{2(\zeta-1)}$ como visto na equação (3.74).

Como de costume, na aproximação de campo médio com pares, a fase inativa (em que não há propagação da epidemia) ocupa uma região maior do diagrama de fase do que na aproximação de campo médio simples, como pode ser visto na figura 5.10, que reúne os diagramas de fase obtidos das aproximações de campo médio simples, com pares e das simulações de Monte Carlo para o modelo definido na rede quadrada.

5.2.3 Integração numérica das aproximações de campo médio

A seguir, apresentamos resultados de integrações numéricas dos sistemas de equações resultantes da aproximação de campo médio simples (5.20-5.22) e da aproximação de campo médio com pares (5.53-5.57).

Nas figuras 5.3-b e 5.3-d mostramos os gráficos das densidades de suscetíveis x , infectados y e recuperados z , obtidos da integração numérica dos sistemas de equações produzidos pelas aproximações de campo médio simples e com pares, respectivamente. Estes gráficos foram feitos para o conjunto de parâmetros $a = 0,2$, $b = 0,75$ e $c = 0,05$, como exemplo de uma solução típica no regime em que há propagação da epidemia.

Nas aproximações de campo médio simples e com pares, a densidade de infectados y tem uma forma de sino e anula-se para tempos longos; já as densidades de suscetíveis x e de recuperados z , para tempos longos, convergem para valores não-nulos.

Figura 5.3: Curvas epidêmicas $-\dot{x}$ e densidades de suscetíveis x , infectados y e recuperados z como função do tempo t , resultantes da integração numérica dos sistemas de equações advindos das aproximações de campo médio simples (5.20-5.22) e com pares (5.53-5.57), para o conjunto de parâmetros $a = 0,2$, $b = 0,75$ e $c = 0,05$.

Na aproximação de campo médio com pares a densidade de suscetíveis x para tempos longos é maior do que na aproximação de campo médio simples, inversamente a densidade de recuperados z para tempos longos e o valor máximo da densidade de infectados são menores do que na aproximação de campo médio simples. Tais características são consistentes com a região em que há propagação da epidemia no diagrama de fases obtido da aproximação de campo médio com pares ser menor do que a obtida na aproximação de campo médio simples.

Nas figuras 5.3-a e 5.3-c apresentamos as curvas epidêmicas resultantes da integração numérica dos sistemas de equações gerados pelas aproximações de campo médio simples e com pares, nesta ordem. A curva epidêmica é a função $-\dot{x}$ e expressa a diferença entre a fração de indivíduos que estão

deixando de ser suscetíveis e tornando-se infectados e a fração de indivíduos que estão deixando de ser infectados e tornando-se suscetíveis.

Nas aproximações de campo médio simples e com pares esta curva tem forma de sino, todavia notamos que a curva obtida da aproximação de campo médio simples tem um pico mais alto e estreito do que a curva gerada pela aproximação de campo médio com pares.

5.3 Simulações de Monte Carlo

Simulamos o modelo suscetível-infectado-recuperado com infecção recorrente utilizando o método de Monte Carlo para o modelo definido em uma rede quadrada com condições periódicas de contorno.

Como este modelo é de não-equilíbrio e possui diversos estados absorventes não podemos calcular todas as grandezas com uma única rodada. Simulamos um determinado número de rodadas. Partindo da mesma condição inicial, cada simulação é interrompida quando o sistema atinge um estado absorvente e então são guardadas as grandezas de interesse, por fim são tomadas as médias das grandezas armazenadas.

As condições iniciais são um sítio ocupado por um indivíduo infectado no centro da rede repleta de sítios ocupados por indivíduos no estado suscetível. O número de rodadas foi entre 10^7 e 10^8 , dependendo da simulação.

Em seguida, descrevemos primeiro um algoritmo que se constitui essencialmente a aplicação das regras do modelo, e depois o algoritmo que de fato usamos, o qual é equivalente ao primeiro e mais eficiente.

5.3.1 Algoritmos

Algoritmo 1 - Descrição das regras do modelo

1. Condição inicial: implementar uma rede quadrada com um indivíduo no sítio central no estado infectado (1) e os demais no estado suscetível (0).
2. Condições de contorno: periódicas.

3. Sorteio: sortear um sítio i da rede aleatoriamente e um número aleatório $\theta \in [0,1]$.
 - (a) Se o indivíduo do sítio i estiver no estado suscetível (0), calcular o número de vizinhos nos primeiros sítios vizinhos que estão no estado infectado (1), $n = \sum_v \delta(\eta_{i+v}, 1)$. Caso $\theta < b \frac{n}{4}$, tornar o indivíduo do sítio i infectado.
 - (b) Se o indivíduo do sítio i estiver no estado infectado e se $\theta < c$ o indivíduo torna-se recuperado; se $c < \theta < c + a$ torna-se suscetível; se nenhuma dessas condições é satisfeita, nada ocorre.
 - (c) Se o indivíduo do sítio i estiver no estado recuperado não são feitas mudanças.
4. Repetir o passo 3 até que restem apenas indivíduos nos estados suscetível (0) e recuperado (2).
5. Calcular grandezas de interesse.
6. Repetir todos os passos anteriores um determinado número de vezes e tomar média das grandezas de interesse.

Se quiséssemos atribuir unidades de tempo, a cada $N = L^2$ sítios sorteados o tempo sofreria o acréscimo de um passo de Monte Carlo.

Algoritmo 2 - Lista de infectados

1. Condição inicial: implementar uma rede quadrada com o sítio central no estado infectado (1) e os demais no estado suscetível (0).
2. Condições de contorno: periódicas.
3. Criar uma lista com as coordenadas dos sítios ocupados por indivíduos infectados.
4. Sortear um sítio i na lista de infectados e um número aleatório $\theta \in [0,1]$.

- (a) Se $\theta < c$ o indivíduo do sítio i torna-se recuperado (2) e o sítio i é tirado da lista de infectados.
 - (b) Se $c < \theta < c + a$ o indivíduo do sítio i torna-se suscetível (0) e o sítio i é tirado da lista de infectados.
 - (c) Se $\theta > c + a$ então um sítio j da vizinhança é sorteado, caso este sítio j esteja ocupado por um indivíduo no estado suscetível (0) o indivíduo deste sítio torna-se infectado (1) e o sítio j é adicionado na lista de sítios infectados.
5. Repetir o passo 4 até que restem apenas indivíduos nos estados suscetível (0) e recuperado (2).
 6. Calcular grandezas de interesse.
 7. Repetir todos os passos anteriores um determinado número de vezes e tomar média das grandezas de interesse.

Para simulações estacionárias, não é necessário levar isso em conta, mas se quiséssemos atribuir unidades de tempo a cada sítio sorteado acrescentaríamos

$$\frac{1 \text{ "passo de Monte Carlo"}}{\text{"tamanho da lista de infectados"}}. \quad (5.60)$$

5.3.2 Grandezas de interesse calculadas

Visamos investigar se o modelo pertence à mesma classe de universalidade do modelo suscetível-infectado-recuperado (SIR) e da percolação isotrópica, bem como encontrar a linha de transição entre a fase em que há propagação da epidemia e a em que não há propagação da epidemia no diagrama de fase. Em vista destes objetivos, simulamos as mesmas grandezas obtidas no modelo SIR no artigo [59] aqui apresentadas na seção 3.2.4. A partir destas podemos encontrar a linha crítica, bem como, os expoentes do modelo.

As grandezas que foram armazenadas nas simulações foram:

1. n_R - número de recuperados no estado absorvente em uma dada rodada,

2. S - número médio de indivíduos recuperados

$$S = \langle n_R \rangle, \quad (5.61)$$

3. z - densidade de recuperados

$$z = \frac{S}{N}, \quad (5.62)$$

em que $N = L^2$ é o número de sítios da rede,

4. M - número quadrático médio de indivíduos recuperados

$$M = \langle n_R^2 \rangle, \quad (5.63)$$

5. U - razão entre número quadrático médio de indivíduos recuperados e o quadrado do número médio de indivíduos recuperados

$$U = \frac{M}{S^2} = \frac{\langle n_R^2 \rangle}{\langle n_R \rangle^2}, \quad (5.64)$$

6. P - probabilidade de o aglomerado de atingir a borda mais próxima da rede (parâmetro de ordem definido em [59]) e

7. UP produto entre as grandezas U e P acima definidas (também introduzida em [59]).

Relembramos as leis de escala finita [59]:

$$z = L^{-2\beta/\nu_\perp} \psi_0(\epsilon L^{1/\nu_\perp}), \quad (5.65)$$

$$U = L^{\beta/\nu_\perp} \psi_1(\epsilon L^{1/\nu_\perp}), \quad (5.66)$$

$$P = L^{-\beta/\nu_\perp} \psi_2(\epsilon L^{1/\nu_\perp}), \quad (5.67)$$

$$UP = \psi(\epsilon L^{1/\nu_\perp}), \quad (5.68)$$

$$S = L^{\gamma/\nu_\perp} \psi_3(\epsilon L^{1/\nu_\perp}). \quad (5.69)$$

Em que L é o tamanho linear da rede, $\epsilon = q - q_c$, sendo q_c o valor de q para

o qual ocorre a transição, ψ , ψ_0 , ψ_1 , ψ_2 e ψ_3 funções universais, β e $\nu_\perp$ expoentes críticos associado ao parâmetro de ordem e comprimento de correlação espacial respectivamente.

Há, ainda, a seguinte relação entre os expoentes

$$d = \frac{2\beta}{\nu_\perp} + \frac{\gamma}{\nu_\perp}. \quad (5.70)$$

Fizemos também algumas simulações em que tomamos médias a cada passo de Monte Carlo; nesse caso as grandezas salvas estão listadas abaixo.

1. $\langle N_{s(t)} \rangle$ número médio de suscetíveis em um instante t .
2. $\langle N_{i(t)} \rangle$ número médio de infectados em um instante t .
3. $\langle N_{r(t)} \rangle$ número médio recuperados em um instante t .

5.3.3 Resultados das simulações estacionárias

Realizamos simulações para $p = 0$, linha de parâmetros na qual o modelo recai no modelo suscetível-infectado-recuperado (SIR) usual. Fizemos simulações para $q = 2p$, com bastante precisão, para determinar os expoentes críticos. Buscando encontrar a linha de transição entre a fase ativa e absorvente via simulações de Monte Carlo fizemos simulações sobre as retas $q = Hp$ variando H . Fizemos, ainda, simulações para $q = 0$, linha de parâmetros na qual o modelo recai no processo de contato, mas esse modelo é simulado de uma maneira diferente da descrita acima. Apresentamos os resultados para o processo de contato na subseção 5.3.4.

Simulações para $p = 0$ (modelo suscetível-infectado-recuperado (SIR) usual)

Na figura 5.4 apresentamos a densidade de recuperados z , o parâmetro de ordem P , o cumulante U e a grandeza UP como função de q , para diversos tamanhos de L . Notamos que nas proximidades do ponto crítico U apresenta um pico. Esse pico se torna mais pronunciado na medida em que redes de tamanhos maiores são consideradas. Como vimos na equação (3.92) essa grandeza diverge no ponto crítico. A grandeza UP apresenta um cruzamento,

mas para estimarmos melhor o valor deste fizemos simulações para mais pontos próximos ao ponto crítico e considerando a rede 1024.

Figura 5.4: (a) Densidade de recuperados z ; (b) Parâmetro de ordem P ; (c) Cumulante U ; (d) Produto UP . Todas as grandezas apresentadas como função de q , sobre a reta $p = 0$ (modelo SIR), para diversos tamanhos de rede.

Na figura 5.5-a apresentamos o cruzamento da grandeza UP considerando mais pontos próximos ao ponto crítico e também a rede 1024, encontramos que o cruzamento ocorre para $q_c = 0,21433(8)$, ou seja, para $c_c = 0,17648(6)$, resultado compatível com o valor apresentado em [59] $c_c = 0,17650(2)$.

Na figura 5.5-b apresentamos os valores em que ocorrem os cruzamentos da grandeza UP entre duas redes de arestas laterais de tamanhos consecutivos, isto é, cruzamento das curvas para $L = 64$ e $L = 128$, $L = 128$ e $L = 256$ e assim sucessivamente, bem como o ajuste destes pontos e a extrapolação para $\frac{1}{L} \rightarrow 0$. Fizemos o ajuste para 10 conjuntos de dados para estimarmos a incerteza. UP possui um valor universal no ponto crítico, nós obtivemos $UP = 1,0167(2)$, o que está de acordo com o valor $1,0167(1)$ apresentado na referência [59] para outros modelos pertencentes à classe de universalidade da percolação isotrópica.

Na figura 5.6 apresentamos os gráficos de $\ln(U)$, $\ln(P)$, $\ln(z)$ e $n(S)$ *versus* $\ln(L)$ para $q_c = 0,21433(8)$. Os valores encontrados para os expoentes estão apresentados nos títulos dos gráficos e são compatíveis com os valores da percolação isotrópica na rede quadrada $\frac{\beta}{\nu_{\perp}} = \frac{5}{48} = 0,10416$, $\frac{2\beta}{\nu_{\perp}} = \frac{5}{24} = 0,20833$. e $\frac{\gamma}{\nu_{\perp}} = \frac{43}{24} = 1,1792$.

Figura 5.5: (a) Gráfico de UP *versus* q na região próxima do ponto crítico; (b) Extrapolação dos valores do cruzamento de UP .

Figura 5.6: (a) $\ln(U)$ versus $\ln(L)$; (b) $\ln(P)$ versus $\ln(L)$; (c) $\ln(z)$ versus $\ln(L)$; (d) $\ln(S)$ versus $\ln(L)$. Gráficos para $q_c = 0,21430(1)$, no título dos gráficos estão destacados os expoentes obtidos destes.

Simulações sobre a reta $q = 2p$

Na figura 5.7 apresentamos a densidade de recuperados z , o parâmetro de ordem P , o cumulante U e a grandeza UP como função de q , para diversos tamanhos de L . A grandeza U , da mesma forma que no modelo suscetível-infectado-recuperado (SIR) usual, quanto maior a rede, mais rapidamente cresce perto do ponto crítico, o que indica, como esperado, que essa grandeza diverge no ponto crítico no limite termodinâmico. Já a grandeza UP , como prevíamos, apresenta um cruzamento para todas as redes.

Na figura 5.8-a apresentamos uma ampliação do cruzamento da grandeza UP , donde obtivemos que o cruzamento ocorre para $q_c = 0,17288(3)$. Nesse ponto de cruzamento, encontramos $UP_{q_c} = 1,0160(5)$, valor compatível com $1,0167(1)$, valor universal de UP no ponto crítico, na rede quadrada, para a classe de universalidade da percolação isotrópica [59].

Na figura 5.8-b apresentamos uma extrapolação dos valores do cruzamento de UP , que indica que no limite termodinâmico $UP = 1,0166(5)$, valor ainda mais próximo do valor universal $1,0167(1)$ [59].

Na figura 5.9 apresentamos os gráficos de $\ln(U)$, $\ln(P)$, $\ln(z)$ e $\ln(S)$ em

função de $\ln(L)$ para alguns parâmetros próximos ao ponto crítico. Em particular no ponto crítico $q_c = 0,17288(3)$, temos que $\frac{\beta}{v_\perp} = 0,105(1)$, $\frac{2\beta}{v_\perp} = 0,209(3)$ e $\frac{\gamma}{v_\perp} = 1,792(1)$, valores compatíveis com os valores da percolação isotrópica na rede quadrada $\frac{\beta}{v_\perp} = \frac{5}{48} = 0,10416$, $\frac{2\beta}{v_\perp} = \frac{5}{24} = 0,20833$. e $\frac{\gamma}{v_\perp} = \frac{43}{24} = 1,791\bar{6}$.

Figura 5.7: (a) Densidade de recuperado z ; (b) Parâmetro de ordem P ; (c) Cumulante U ; (d) Produto UP . Todas as grandezas apresentadas em função parâmetro q , sobre a reta $q = 2p$, para diversos tamanhos de rede.

Figura 5.8: (a) Ampliação do gráfico de UP versus q na região próxima do ponto crítico; (b) Extrapolação dos valores do cruzamento de UP .

Figura 5.9: (a), $\ln(U)$ versus $\ln(L)$; (b) $\ln(P)$ versus $\ln(L)$; (c) $\ln(\rho)$ versus $\ln(L)$; (d) $\ln(S)$ versus $\ln(L)$. Gráficos feitos para alguns parâmetros próximos ao ponto crítico indicados na legenda lateral. Os expoentes colocados no título do gráfico são os obtidos a partir dos ajustes para $q_c = 0,17288(3)$.

Como o produto UP apresenta um cruzamento no ponto crítico e possui valor compatível com o valor universal de UP na classe da percolação isotró-

pica, bem como, os expoentes são compatíveis com os da percolação isotrópica, concluímos que o modelo deve de fato pertencer à classe da percolação isotrópica.

Resultados sobre as retas $q = Hp$

Os expoentes e o valor universal de UP sobre a reta $q = 2p$ já indicam que o modelo pertence à mesma classe de universalidade da percolação isotrópica e do modelo suscetível-infectado-recuperado (SIR) usual. Para fazermos o diagrama de fase e verificarmos que UP também possui o valor universal no ponto crítico para outros parâmetros do modelo, fizemos as simulações para UP em várias linhas $q = Hp$. Como são vários pontos, as simulações aqui foram feitas com redes um pouco menores, e, portanto, a incerteza dos dados é maior.

Na tabela 5.2 apresentamos alguns dos valores de q e p sobre a linha de transição e os valores de UP para estes pares, os quais, dentro dos erros estatísticos, estão de acordo com o valor universal de $UP = 1,0167(1)$ para os modelos da classe de universalidade da percolação isotrópica na rede quadrada.

Notamos que para $q = 0$ o modelo recai no processo de contato, e o valor da transição nesse modelo não pode ser calculado pelo método acima, o valor apresentado para p na tabela é o valor da transição de fase no processo de contato, resultado conhecido, mas que também reproduzimos e apresentamos na subseção 5.3.4.

Tabela 5.2: Valores de $p = \frac{a}{b}$ e $q = \frac{c}{b}$ e UP na linha de transição obtidos das simulações de Monte Carlo na rede quadrada. Os erros estão no último dígito.

p	q	UP	p	q	UP	p	q	UP
0,6065	0		0,2669	0,0942	1,016	0,0836	0,1741	1,015
0,5154	0,0130	1,021	0,2234	0,1118	1,016	0,0731	0,1788	1,015
0,4730	0,0243	1,022	0,1884	0,1256	1,015	0,0614	0,1843	1,015
0,4080	0,0430	1,019	0,1615	0,1384	1,016	0,0416	0,1938	1,015
0,3593	0,0583	1,018	0,1184	0,1579	1,015	0,0252	0,2017	1,015
0,3242	0,0720	1,017	0,0864	0,1728	1,016	0	0,2143	1,017

Figura 5.10: Diagrama de fase. Em vermelho, linha de transição resultante da aproximação de campo médio simples. Em azul, linha de transição produto da aproximação de campo médio com pares. Em magenta, dados obtidos através de simulações de Monte Carlo para o modelo definido na rede quadrada. Em ciano, ajuste aos dados em magenta. Nesse diagrama, as regiões ativas, estão sempre abaixo das linhas de transição.

Salvo para $q = 0$, caso em que o modelo recai no processo de contato, o modelo pertence à mesma classe de universalidade da percolação isotrópica e do modelo suscetível-infectado-recuperado (SIR) usual.

Os resultados numéricos indicam que a linha de transição converge continuamente para o valor da transição no processo de contato conforme q tende a zero. Partindo dessa hipótese, analisamos o comportamento próximo do ponto crítico do processo de contato. Supondo um comportamento do tipo $q \sim (p - p_0)^\phi$, em que p_0 é o ponto crítico no processo de contato e ϕ é o expoente de “crossover”.

Fazendo um ajuste da expressão $\ln q = \phi \ln(p - p_0) - k_1 - k_2(p_0 - p)^k$ obtivemos $\phi = 1,7(1)$, logo a linha crítica é tangente ao eixo p .

Na figura 5.10 apresentamos o diagrama de fase. Mostramos as linhas de transição de acordo com a aproximação de campo médio simples, dada na equação (5.29); a linha de transição conforme a aproximação de campo médio

com pares, dada na equação (5.59); bem como os dados da tabela 5.2, obtidos via simulação de Monte Carlo para o modelo definido na rede quadrada.

5.3.4 Caso particular $c = 0$: Simulações do processo de contato da rede quadrada

Apresentamos o processo de contato no capítulo 3. O modelo suscetível-infectado-recuperado com infecção recorrente recai no processo de contato para $q = 0$. A relação entre as taxas do modelo da forma como foi definido no capítulo 3 e neste capítulo é dada por

$$p = \frac{1}{\lambda}. \quad (5.71)$$

Por completeza, apresentamos aqui as simulações que fizemos do processo de contato definido na rede quadrada, apesar de esses resultados já serem encontrados na literatura [2]. O valor apresentado para p na tabela 5.2 para $q = 0$ é justamente o valor em que ocorre a transição de fase no processo de contato, $p = \frac{1}{\lambda_c}$.

Descrevemos em seguida algoritmos para simular o processo de contato.

Algoritmo 1- Descrição das regras do processo de contato

1. Condição inicial: implementar uma rede quadrada de lado L com o sítio central ocupado por um indivíduo no estado infectado (1) e os demais sítios ocupados por indivíduos no estado suscetível (0).
2. Condições de contorno: periódicas.
3. Sorteio: sortear um sítio i da rede aleatoriamente e um número aleatório $\theta \in [0,1]$.
 - (a) Se o indivíduo do sítio i estiver no estado suscetível (0), calcular o número de vizinhos nos primeiros sítios vizinhos ocupados por indivíduos no estado infectado (1) $n = \sum_v \delta(\eta_{i+v}, 1)$. Caso $\theta < b \frac{n}{4}$, tornar o indivíduo do sítio i infectado.

- (b) Se o sítio i estiver ocupado por um indivíduo no estado infectado e não for o único indivíduo infectado da rede, se $\theta < 1 - b$, o indivíduo torna-se suscetível.
- 4. Salvar dados: A cada L^2 iterações considera-se completo um passo de Monte Carlo. Primeiramente são feitas iterações nas quais o sistema evolui, mas não acumulamos as grandezas de interesse; essa etapa é denominada transiente. Após o transiente, a cada passo de Monte Carlo as grandezas passam a ser acumuladas. Por fim, as grandezas acumuladas são divididas pelo número de passos de Monte Carlo feitos após o transiente.
- 5. Média de simulações: Repete-se esse processo um determinado número de vezes e são tomadas médias dos resultados das simulações.

Algoritmo 2- processo de contato com lista de infectados

1. Condição inicial: implementar uma rede quadrada com o sítio central ocupado por um indivíduo no estado infectado (1) e os demais ocupados por indivíduos no estado suscetível (0).
2. Condições de contorno: periódicas.
3. Criar uma lista com as coordenadas dos sítios ocupados por indivíduos infectados.
4. Criar uma variável tdl com o número de infectados que é inicialmente 1.
5. Sortear um sítio i na lista de infectados e um número aleatório $\theta \in [0,1]$.
 - (a) Se $\theta < (1 - b)$ e $tdl > 1$, subtrai-se 1 de tdl , o indivíduo do sítio i torna-se suscetível (0) e o sítio i é retirado da lista.
 - (b) Caso contrário, sorteia-se um dos vizinhos, se o vizinho estiver ocupado por um indivíduo no estado suscetível (0), adiciona-se 1 a tdl , o indivíduo do sítio vizinho torna-se infectado (1) e o sítio vizinho é adicionado da lista de infectados.

- (c) Soma-se $\frac{1}{t\Delta t}$ a uma variável de tempo τ .
6. Salvar dados: Cada vez que τ passa L^2 , zera-se a variável τ e considera-se completo um passo de Monte Carlo. Primeiramente são feitas iterações nas quais o sistema evolui, mas não acumulamos as grandezas de interesse, essa etapa é denominada transiente. Após o transiente, a cada passo de Monte Carlo as grandezas passam a ser acumuladas. Por fim, as grandezas acumuladas são divididas pelo número de passos de Monte Carlo feitos após o transiente.
 7. Média de simulações: Repete-se todo esse processo um determinado número de vezes e são tomadas médias dos resultados das simulações.

Grandezas de interesse

Na seção 3.1.4 apresentamos algumas das grandezas de interesse no processo de contato a partir das quais podemos encontrar o ponto crítico do modelo e a classe de universalidade do mesmo. Estas são as grandezas que obtivemos em nossas simulações, relembramos aqui suas definições,

1. a fração de indivíduos infectados n_I/N ,
2. a densidade média de indivíduos infectados $\rho = \langle x_I \rangle$, que é o parâmetro de ordem,
3. o cumulante de 2ª ordem reduzida $u = \langle x_I^2 \rangle - \langle x_I \rangle^2$,
4. a variância $\chi = L^d(\langle x_I^2 \rangle - \langle x_I \rangle^2)$,

e a lei de escala finita para cada uma destas,

$$\rho = L^{-\beta/\nu_\perp} f(L^{1/\nu_\perp} \epsilon) \quad (5.72)$$

$$u = u = h(L^{1/\nu_\perp} \epsilon), \quad (5.73)$$

$$\chi = L^{\gamma'/\nu_\perp} j(L^{1/\nu_\perp} \epsilon), \quad (5.74)$$

em que $\epsilon = \lambda - \lambda_c$ e f, g e j são funções universais. Das leis de escalas notamos que podemos utilizar o cruzamento da grandeza u para determinar o ponto

crítico e as grandezas ρ e χ , respectivamente, para encontrar os expoentes β e γ' .

Resultados das simulações

Nas simulações fazemos 10^9 passos de Monte Carlo, desprezamos 10^8 passos de transiente, e a cada passo de Monte Carlo (passado o transiente) acumulamos a razão entre o número de sítios no estado infectado e o número total de sítios N , bem como a razão do número de sítios no estado infectado ao quadrado e N . No fim, tomamos médias destes valores.

Na figura 5.11 apresentamos a densidade de infectados ρ e o cumulante u dado na equação (3.28) *versus* λ para diversos tamanhos de rede. O cruzamento de u ocorre no ponto crítico. O valor encontrado para o ponto crítico foi $\lambda_c = 1,64875(5)$, compatível com valor reportado na referência [2]. Relembrando da relação com os parâmetros do modelo suscetível-infectado-recuperado com infecção recorrente temos que $p = \frac{1}{\lambda_c} = 0,6065$.

Figura 5.11: (a) Densidade ρ ; *versus* λ (b) Cumulante u *versus* λ . Tamanhos das redes indicados na figura.

Na figura 5.12 apresentamos o logaritmo da densidade de infectados ρ *versus* o logaritmo de L para diversos valores de λ . No ponto crítico os pontos

estão sobre uma reta e o ajuste dos dados fornece $\beta/\nu_{\perp} = 0,799(5)$. Usando o valor $\nu_{\perp} = 0,73$ para a percolação direcionada [2], temos $\beta = 0,582(10)$, valor compatível com $\beta = 0,583$ reportado em [2].

Figura 5.12: $\ln(\rho)$ versus $\log(L)$ para diversos valores de λ .

5.3.5 Evolução temporal da média das densidades de suscetíveis, infectados e recuperados e retratos da rede

Apresentamos as densidades médias de suscetíveis, infectados e recuperados, obtidas da média de 100 rodadas das simulações, para o modelo definido em uma rede quadrada de aresta lateral de tamanho $L = 1024$ na figura 5.13. Todos conjuntos de parâmetros são em regiões em que há propagação da epidemia e são tais que e o valor de $b = 0,9$: em (a) $[p,q] = [0;1/9]$, isto é, $[a,b,c] = [0;0,9;0,1]$ e o modelo recai no modelo suscetível-infectado-recuperado (SIR); em (b), $[p,q] = [8/90;2/90]$, ou seja, $[a,b,c] = [0,08;0,9;0,02]$ e, por fim; em (c), $[p,q] = [1/9;0]$, ou seja, $[a,b,c] = [0,1;0,9;0]$ o modelo recai no processo de contato. Comparando as figuras (a) e (b) notamos para um valor maior de a , e, portanto, menor de c , a quantidade de suscetíveis no estado final é maior, bem como valor máximo da densidade de infectados que ocorre durante a propagação da epidemia. Já na figura (c), que recai no processo

de contato a densidade de recuperados é nula e a densidade de infectados converge para um valor constante.

Figura 5.13: Densidades médias de suscetíveis $\langle N_S(t) \rangle / N$, infectados $\langle N_I(t) \rangle / N$ e recuperados $\langle N_R(t) \rangle / N$, obtidas da média de 100 rodadas para o modelo definido em uma rede quadrada de aresta lateral 1024, em função do tempo . Tempo em passo de Monte Carlo.

Na figura 5.14 apresentamos retratos da rede nos instantes $t = 0, 300, 600$ e 900 para diferentes conjuntos de parâmetros. O valor de b foi fixado em 0,9 para todos os conjuntos de parâmetros. Os sítios nos estados suscetível, infectado e recuperado estão representados por sítios brancos, vermelhos e verdes, respectivamente.

Figura 5.14: Comparação dos clusters formados na fase ativa para $b = 0,9$ e diversos valores de a e c .

(a) Clusters no ponto crítico na linha em que $p = 0$ (conjunto de parâmetros em que o modelo torna-se o modelo suscetível-infectado-recuperado (SIR) usual.)

(b) Clusters no ponto crítico na linha em que $q = 2p$.

(c) Clusters no ponto crítico na linha em que $q = 0$, conjunto de parâmetros nos quais o modelo torna-se o o processo de contato.

Figura 5.15: Comparação dos clusters formados sobre a linha de transição de fase para diferentes conjuntos de parâmetros.

Nas quatro primeiras linhas da figura verificamos que quanto maior a , e, portanto, menor c , maior a quantidade de sítios no estado suscetível dentro dos clusters. Notamos também que existem mais sítios no estado infectado na borda quando a é maior. Ambos fatos são consistentes com os resultados obtidos da média de 100 simulações, já que para um b fixo verificamos que

aumentam a quantidade de suscetíveis no estado estacionário e o valor do máximo da média da densidade de infectados. Na última linha temos o caso em que $c = 0$, no qual o modelo recai no processo de contato.

Na figura 5.15 apresentamos retratos da rede para conjuntos de parâmetros sobre a linha crítica: em 5.14-a, um conjunto de parâmetros que recai no modelo suscetível-infectado-recuperado; em 5.14-b, um conjunto de parâmetros com $a \neq 0$ e $c \neq 0$ e em 5.14-c; um conjunto de parâmetros que recai no processo de contato. Notamos que os clusters formados no processo de contato são muito mais esparsos em relação aos outros dois conjuntos de parâmetros. Além disso comparando os clusters na fase ativa com os clusters sobre a linha crítica observamos que os últimos apresentam um formato menos circular, possuindo uma estrutura mais fractal.

5.4 Conclusão

Analizamos o modelo suscetível-infectado-recuperado com infecção recorrente, introduzido em [120] (dentro do contexto de grupo de renormalização), via aproximações de campo médio e simulações de Monte Carlo para o modelo definido na rede quadrada.

Do ponto de vista epidemiológico, no caso em que $a \gg c$, o modelo apresenta os mecanismos básicos para oferecer uma modelagem simplificada da dinâmica de uma doença na qual o indivíduo infecta-se e torna-se suscetível novamente diversas vezes antes de adquirir imunidade ou morrer, donde provém o nome “modelo suscetível-infectado-recuperado com infecção recorrente”.

Outra possível interpretação é entender que se trata de uma modelagem simplificada para a dinâmica de uma doença na qual um indivíduo nunca se torna imunizado, mas pode morrer ou curar-se. Nesse caso, o estado recuperado/removido é associado exclusivamente a indivíduos mortos. No modelo suscetível-infectado-recuperado usual também podemos dizer que todos os indivíduos no estado recuperado estão mortos, mas, como no modelo usual todo indivíduo infectado eventualmente passa para o estado recuperado, te-

mos que essa interpretação implica que não existe a possibilidade de o indivíduo curar-se. Já no modelo suscetível-infectado-recuperado com infecção recorrente, podemos associar o estado recuperado a indivíduos mortos e ainda assim existe a possibilidade de cura, dado que alguns indivíduos infectados tornam-se suscetíveis novamente.

Obtivemos o diagrama de fase por meio de aproximações de campo médio e simulações de Monte Carlo para o modelo definido na rede quadrada. Na aproximação de campo médio simples a linha de transição é $p + q = 1$. Na aproximação de campo médio com pares a linha de transição é $(\zeta - 1)p + (\zeta - 2)q = \zeta(p + q)^2$. Na tabela 5.2 apresentamos os dados pertencentes à linha de transição para o modelo definido na rede quadrada obtidos por simulações de Monte Carlo. Os resultados numéricos indicam que a linha crítica vai continuamente para o ponto crítico do processo de contato; encontramos que a linha crítica é tangente ao eixo p quando $q \rightarrow 0$.

Verificamos que o modelo suscetível-infectado-recuperado com infecção recorrente para $q \neq 0$ pertence à classe de universalidade da percolação isotrópica através do cálculo da grandeza universal UP nas simulações estacionárias na rede quadrada, bem como dos expoentes críticos. Para $q = 0$ o modelo recai no processo de contato, que pertence à classe da percolação direcionada.

Interpretando o modelo estudado nesta tese como um processo de contato, com adição da reação pela qual indivíduos infectados podem se tornar recuperados, então concluímos que c é um parâmetro relevante, ou seja, para $c \neq 0$ o modelo deixa a classe de universalidade da percolação direcionada.

O fato de o modelo suscetível-infectado-recuperado com infecção recorrente pertencer à mesma classe de universalidade da percolação isotrópica, que é também a classe de universalidade do modelo suscetível-infectado-recuperado (SIR) usual confirma a ideia de que pequenas modificações de um modelo não mudam seu comportamento crítico. Em particular nesse modelo, podemos utilizar o argumento de Grassberger [89] segundo o qual o modelo suscetível-infectado-recuperado e pequenas modificações dele tem comportamento similar à percolação isotrópica, incluindo o comportamento crítico.

Capítulo 6

Dinâmica estocástica para duas espécies biológicas e dois nichos ecológicos

Apresentamos, neste capítulo, um modelo que introduzimos, em conjunto com Everaldo Arashiro, para quatro elementos interagentes, a saber, duas espécies biológicas e dois nichos ecológicos. Foi publicado um artigo com estes resultados, seu texto consta no apêndice B. Outro artigo está em elaboração.

No contexto de dinâmica de populações biológicas, o modelo apresentado neste capítulo pode ser entendido como uma modelagem simplificada para a coexistência de duas espécies (ou gêneros, ou dois tipos de populações de um modo geral) que usam diferentes recursos e alteram o meio que ocupam de modos distintos.

Na coexistência de populações biológicas frequentemente existem oscilações nas populações das espécies e alternância de dominância entre estas [25, 26, 103–105]. Em função destas características, neste trabalho o foco de nossa investigação está na análise das oscilações presentes nas soluções encontradas para o modelo.

6.1 Definição

Nesta seção apresentamos a definição formal do modelo sem mencionar a interpretação dentro contexto de dinâmica de populações biológicas, a qual é discutida na seção 6.2.

Desejamos descrever a dinâmica de coexistência de quatro diferentes tipos de elementos interagentes. Para tanto, consideramos os seguintes estados: NA , CA , NB e CB . Introduzimos um modelo estocástico definido em uma rede com N sítios, cada um com ζ vizinhos. A cada sítio i associamos uma variável estocástica η_i que assume os valores 0, 1, 2 e 3, referentes, respectivamente, aos estados NA , CA , NB e CB . Dessa forma, o estado do sistema fica definido pelo vetor estocástico $\eta = (\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_N)$.

A evolução temporal do sistema é dada por uma equação mestra e escolhe-se a dinâmica de “um sítio” [2], explicada na subseção 2.4.2. Dessa forma, a cada instante de tempo um único sítio é sorteado aleatoriamente. Em seguida:

1. se o sítio escolhido está no estado NA , então pode passar para o estado CA , com probabilidade an_{CA}/ζ , em que n_{CA} é o número de vizinhos no estado CA na primeira vizinhança;
2. se o sítio escolhido está no estado CA , então pode passar espontaneamente para o estado NB , com probabilidade b ;
3. se o sítio escolhido está no estado NB , então pode passar para o estado CB , com probabilidade cn_{CB}/ζ , em que n_{CB} é o número de vizinhos no estado CB na primeira vizinhança;
4. se o sítio escolhido está no estado CB , então pode passar espontaneamente para o estado NA , com probabilidade d .

Destacamos que $a + b + c + d = 1$. Considerando esses processos, a taxa de transição de um sítio i , para um sistema inicialmente no estado η é

$$w_i(\eta) = \frac{1}{\mathcal{T}} \left[\delta(\eta_i, 0) \frac{a}{\zeta} \sum_v \delta(\eta_{i+v}, 1) + b\delta(\eta_i, 1) + \delta(\eta_i, 2) \frac{c}{\zeta} \sum_v \delta(\eta_{i+v}, 3) + d\delta(\eta_i, 3) \right], \quad (6.1)$$

em que $\sum_v$ é a soma sobre os primeiros vizinhos do sítio escolhido i . Notamos que $w_i(\eta)$ é uma taxa, e, por isso, está dividida pela escala temporal $\mathcal{T}$, já que a, b, c e d são probabilidades. Podemos escolher uma escala de tempo tal que $\mathcal{T} = 1$. Na figura 6.1 apresentamos um diagrama com as transições existentes no modelo.

Figura 6.1: Diagrama de transições locais. Em (a), indicamos as variáveis estocásticas associadas a cada um dos estados. Em (b), apresentamos a denominação adotada para cada um dos estados.

Como já vimos no capítulo 2, para um modelo estocástico espacialmente estruturado, regido por uma equação mestra, em que adotamos a dinâmica de “um sítio” e as transições são cíclicas, a equação mestra fica dada pela expressão (2.116) e a evolução temporal de uma grandeza de estado $f(\eta)$ pela equação (2.117).

Dessa forma, a equação mestra para este modelo é

$$\frac{d}{dt}P(\eta, t) = \sum_{i=1}^N [P(\eta^i, t)w_i(\eta^i) - P(\eta, t)w_i(\eta)], \quad (6.2)$$

em que $\eta^i = (\eta_1, \dots, \eta_i^1, \dots, \eta_N)$, sendo $\eta_i^1 = \text{mod}(\eta_i - 1, 4)$ o antecessor de η_i no ciclo $0 \rightarrow 1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 0$. A taxa $w_i(\eta)$ é dada na equação (6.1). Já a

equação para a evolução temporal uma grandeza de estado $f(\eta)$ é

$$\frac{d}{dt}\langle f(\eta) \rangle = \sum_{i=1}^N \langle [f(\eta_i^1) - f(\eta)] w_i(\eta) \rangle, \quad (6.3)$$

em que $\eta = (\eta_1, \dots, \eta_i, \dots, \eta_N)$, sendo $\eta_i^1 = \text{mod}(\eta_i + 1, 4)$ o sucessor de η_i no ciclo $0 \rightarrow 1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 0$. A taxa $w_i(\eta)$ é dada na equação (6.1).

Destacamos que se $\eta_i \neq 1$ para todo $i \in \{1, \dots, N\}$, ou seja, se nenhum sítio está no estado CA , a transição $NA \rightarrow CA$ deixa de ocorrer, algumas transições $CB \rightarrow NA$ ainda podem ocorrer, mas, por fim, o ciclo de transições é interrompido e o sistema atinge um estado absorvente, no qual o sistema permanece. Analogamente, se $\eta_i \neq 3$ para todo $i \in \{1, \dots, N\}$, ou seja, se nenhum sítio está no estado CB , a transição $NB \rightarrow CB$ deixa de ocorrer, algumas transições $CA \rightarrow NB$ ainda podem ocorrer, mas, por fim, o ciclo de transições é interrompido e o sistema atinge um estado absorvente. Portanto são ativos os estados em que há coexistência de sítios nos estados CA e CB , e absorventes os estados em que não há.

6.1.1 Mudança de parâmetros

O modelo tem quatro parâmetros, a , b , c e d e o vínculo $a + b + c + d = 1$, de modo que apenas três deles são livres. Diante disso, julgamos interessante introduzir a seguinte parametrização

$$s = (a + b) - (c + d), \quad r_1 = 2(a - b) \quad \text{e} \quad r_2 = 2(c - d), \quad (6.4)$$

cuja inversa é

$$a = \frac{r_1 + s + 1}{4}, \quad b = \frac{-r_1 + s + 1}{4}, \quad c = \frac{r_2 - s + 1}{4}, \quad d = \frac{-r_2 - s + 1}{4}. \quad (6.5)$$

Nos cálculos que apresentamos usamos os parâmetros a , b , c e d ; os diagramas de fase, entretanto, são apresentados em termos dos parâmetros s , r_1 e r_2 , pois com três parâmetros livres podemos fazer diagramas em três dimensões e cortes em duas. Além disso, esses novos parâmetros deixam mais evidentes

as simetrias nas escolhas de a , b , c e d , quando elas existem. Em um diagrama $a \times c$ com b fixo, essas simetrias ficariam escondidas. Em diversas partes do trabalho fixamos $s = 0$, de modo que a parametrização se reduz a

$$a = \frac{r_1 + 1}{4} \quad b = \frac{-r_1 + 1}{4} \quad c = \frac{r_2 + 1}{4} \quad d = \frac{-r_2 + 1}{4}. \quad (6.6)$$

6.2 Interpretação do modelo no contexto de dinâmica de populações

Como dito na apresentação do capítulo, o modelo em questão pode ser entendido como uma modelagem simplificada para a dinâmica de coexistência de duas espécies biológicas (ou gêneros, ou dois tipos populações biológicas genericamente) que utilizam diferentes recursos do meio ambiente e alteram-no de formas distintas. Para essa interpretação ser feita, passamos a entender que um sítio estar no estado $CA(CB)$ é o mesmo que este sítio estar ocupado por uma colônia de um tipo $A(B)$. Além disso, passamos a interpretar um sítio estar no estado $NA(NB)$ como este sítio compreender uma região do nicho do tipo $A(B)$ “desocupado”, ou seja, esta região não possui colônias, mas apresenta condições ambientais favoráveis à colônia do tipo $A(B)$. Com essa interpretação, temos um modelo do tipo “colony based lattice model”, ou seja, um modelo em que cada sítio da rede possui uma colônia de indivíduos ao invés de um indivíduo por sítio. Outro modelo deste tipo pode ser encontrado, por exemplo, em [121].

Quanto às regras locais do modelo, dentro dessa interpretação, passam a significar:

1. em um sítio em que o nicho do tipo A está “desocupado”, há a possibilidade de proliferação de uma colônia do tipo A devido à presença na vizinhança de colônias do tipo A , esse processo ocorre com probabilidade an_{CA}/ζ , em que n_{CA} é o número de primeiros vizinhos ocupados pela colônia A ;
2. uma colônia do tipo A eventualmente altera tanto o ambiente em que

está, que não pode mais sobreviver neste, já a colônia do tipo B , que utiliza distintos recursos, pode, logo neste sítio pode passar a existir um nicho do tipo B “desocupado”, esse processo ocorre com probabilidade b ;

3. em um sítio em que o nicho do tipo B está “desocupado”, há a possibilidade de proliferação de uma colônia do tipo B devido à presença na vizinhança de colônias do tipo B , esse processo ocorre com probabilidade cn_{CB}/ζ , em que n_{CB} é o número de primeiros vizinhos ocupados pela colônia B ;
4. uma colônia do tipo B eventualmente altera tanto o ambiente em que está, que não pode mais sobreviver neste, já a colônia do tipo A , que utiliza distintos recursos, pode, logo neste sítio pode passar a existir um nicho do tipo A “desocupado”, esse processo ocorre com probabilidade d .

Os estados ativos, segundo essa interpretação, são aqueles em que há coexistência das colônias dos tipos A e B . Já os estados absorventes são aqueles em que há extinção. Na coexistência de espécies há possibilidade de oscilações temporais nas populações e alternância de dominância entre as espécies, quando a população de uma espécie aumenta enquanto a outra decresce [25, 26, 103–105]. Nesta investigação buscamos descobrir se o modelo que definimos é capaz de reproduzir essas características.

Finalmente, um conceito importante apresentado em [103, 122] é o de *nicho construção*, ou *construção de nichos*, ou ainda *nicho construtivismo*. Nichos construção podem ser entendidos como a relação entre uma população e o ambiente, em que se leva em conta que a população tem papel ativo na alteração do ambiente. Assim, considera-se que população e ambiente interferem um no outro, alterando-se mutuamente. Nesse sentido, no modelo aqui apresentado uma espécie pode mudar o ambiente a tal ponto que já não pode mais existir nesse, enquanto outra espécie que utiliza outros recursos pode, relacionando-se fortemente com o conceito de nicho construção.

6.3 Equações para a evolução temporal das médias e correlações

Podemos utilizar a equação (6.3) para encontrar a evolução temporal da média das grandezas $f(\eta) = \delta(\eta_j, 0)$, $f(\eta) = \delta(\eta_j, 1)$, $f(\eta) = \delta(\eta_j, 2)$ e $f(\eta) = \delta(\eta_j, 3)$.

Vale notarmos que, se

$$f(\eta) = f(\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_j, \dots, \eta_N) = \delta(\eta_j, \Omega), \quad (6.7)$$

em que $\Omega = 0, 1, 2$ ou 3 , então

$$f({}^i\eta) = f(\eta_1, \eta_2, \dots, \text{mod}(\eta_i + 1, 4), \dots, \eta_N) = \begin{cases} \delta(\text{mod}(\eta_j + 1, 4), \Omega) & \text{se } i = j \\ \delta(\eta_j, \Omega) & \text{se } i \neq j \end{cases},$$

ou seja,

$$f({}^i\eta) = f(\eta_1, \eta_2, \dots, \text{mod}(\eta_i + 1, 4), \dots, \eta_N) = \begin{cases} \delta(\eta_j, \text{mod}(\Omega - 1, 4)) & \text{se } i = j \\ \delta(\eta_j, \Omega) & \text{se } i \neq j \end{cases},$$

ou, reescrevendo,

$$f({}^i\eta) = \delta(\eta_j, \text{mod}(\Omega - 1, 4))\delta(i, j) + \delta(\eta_j, \Omega)(1 - \delta(i, j)). \quad (6.8)$$

Assim, após algum trabalho algébrico, encontramos a evolução temporal da média das grandezas $f(\eta) = \delta(\eta_j, 0)$, $f(\eta) = \delta(\eta_j, 1)$, $f(\eta) = \delta(\eta_j, 2)$ e $f(\eta) = \delta(\eta_j, 3)$. Ademais, denotamos por $P_i(\Omega) = \langle \delta(\eta_i, \Omega) \rangle$ a probabilidade de o sítio i estar no estado para o qual a variável estocástica η_i assume o valor Ω ($\Omega = 0, 1, 2, 3$) e por $P_{i,j}(\Omega_1, \Omega_2) = \langle \delta(\eta_i, \Omega_1) \delta(\eta_j, \Omega_2) \rangle$ a correlação de dois pares de sítios vizinhos estarem um no estado Ω_1 ($\Omega_1 = 0, 1, 2, 3$) e outro no estado Ω_2 ($\Omega_2 = 0, 1, 2, 3$). Dessa forma, as equações ficam

$$\frac{d}{dt}P_j(0) = dP_i(3) - \frac{a}{\zeta} \sum_v P_{i,v}(01), \quad (6.9)$$

$$\frac{d}{dt}P_j(1) = \frac{a}{\zeta} \sum_v P_{j,v}(01) - bP_j(1), \quad (6.10)$$

$$\frac{d}{dt}P_j(2) = bP_i(1) - \frac{c}{\zeta} \sum_v P_{j,v}(23), \quad (6.11)$$

$$\frac{d}{dt}P_j(3) = \frac{c}{\zeta} \sum_v P_{j,v}(23) - dP_i(3). \quad (6.12)$$

Em que $\sum_v$ indica a soma sobre os primeiros vizinhos. Supondo uma solução homogênea e isotrópica, obtemos

$$\frac{d}{dt}P(0) = dP(3) - aP(01), \quad (6.13)$$

$$\frac{d}{dt}P(1) = aP(01) - bP(1), \quad (6.14)$$

$$\frac{d}{dt}P(2) = bP - cP(23), \quad (6.15)$$

$$\frac{d}{dt}P(3) = cP(23) - dP(3). \quad (6.16)$$

6.3.1 Aproximação de campo médio simples

Das equações (6.13-6.16), notamos que as probabilidades de um sítio estar em um determinado estado dependem das correlações de dois sítios; logo, não podemos encontrar uma solução para esse sistema diretamente. Uma primeira abordagem é utilizar a aproximação de campo médio simples, discutida na subseção 2.4.3, em que as correlações entre os sítios são completamente desprezadas, e, por conseguinte, a espacialidade do problema. Por meio da aplicação da aproximação de campo médio simples, dada na equação (2.122), nas equações (6.13-6.16), com a notação $x_0 = P(0)$, $x_1 = P(1)$, $x_2 = P(2)$ e $x_3 = P(3)$, obtemos

$$\frac{d}{dt}x_0 = dx_3 - ax_0x_1, \quad (6.17)$$

$$\frac{d}{dt}x_1 = ax_0x_1 - bx_1, \quad (6.18)$$

$$\frac{d}{dt}x_2 = bx_1 - cx_2x_3, \quad (6.19)$$

$$\frac{d}{dt}x_3 = cx_2x_3 - dx_3. \quad (6.20)$$

Lembramos ainda que

$$x_0 + x_1 + x_2 + x_3 = 1. \quad (6.21)$$

Levando em conta a equação (6.21), para termos um sistema independente de equações necessitamos apenas de três das equações do sistema acima, por exemplo as equações (6.17), (6.18) e (6.19), deixando x_3 dada pela equação (6.21).

No estado estacionário, $\frac{d}{dt}x_0 = \frac{d}{dt}x_1 = \frac{d}{dt}x_2 = 0$. Em vista disto, as soluções estacionárias inativas são $x_1 = x_3 = 0$ e $x_0 + x_2 = 1$. Já a solução estacionária ativa é

$$[x_0, x_1, x_2, x_3] = \left[\frac{b}{a'}, \frac{d(ac - ad - bc)}{ac(b + d)}, \frac{d}{c'}, \frac{b(ac - ad - bc)}{ac(b + d)} \right]. \quad (6.22)$$

As condições $x_i \leq 1$ e $x_i \geq 0$, para $i = 0, 1, 2$ ou 3 fornecem as seguintes restrições para a fase ativa

$$b \geq a, \quad d \geq c, \quad ac \geq ad + bc. \quad (6.23)$$

Em termos dos parâmetros s, r_1 e r_2 , também podemos escrever

$$r_1 \geq 0, \quad r_2 \geq 0, \quad 1 \geq \frac{1 - r_2 - s}{1 + r_2 - s} - \frac{1 - r_1 + s}{1 + r_1 + s}. \quad (6.24)$$

Em particular, quando nos restringimos ao caso em que $s = 0$, ou seja, quando $a + b = c + d$, as condições tornam-se

$$r_1 \geq 0, \quad r_2 \geq 0, \quad 1 \leq r_1 + r_2 + 3r_1r_2. \quad (6.25)$$

A partir dos autovalores da jacobiana $\mathbf{J}$ do sistema (6.17-6.20), podemos analisar a estabilidade do estado ativo. Considerando as variáveis na ordem (x_1, x_2, x_3, x_0) , $\mathbf{J}$ ficada dada por

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} -ax_0 - b & 0 & 0 & ax_1 \\ b & -cx_3 & -cx_2 & 0 \\ 0 & cx_3 & cx_2 - d & 0 \\ -ax_0 & 0 & d & -ax_1 \end{pmatrix}. \quad (6.26)$$

Um dos autovalores é zero, pois uma das equações é redundante, de modo que precisamos apenas de três equações para caracterizar o sistema. Os outros autovalores são raízes da equação

$$\tilde{\lambda}^3 + A\tilde{\lambda}^2 + B\tilde{\lambda} + C = 0, \quad (6.27)$$

em que

$$A = b - ax_0 + d - ax_2 + ax_1 + cx_3, \quad (6.28)$$

$$B = abx_1 + (b - a(x_0 - x_1))(d - c(x_2 - x_3)) + cdx_3, \quad (6.29)$$

$$C = abx_1[d - c(x_2 - x_3)] + cdx_3[b - a(x_0 - x_1)]. \quad (6.30)$$

Como na solução ativa $ax_0 = b$ e $cx_2 = d$, temos

$$A = ax_1 + cx_3, \quad (6.31)$$

$$B = abx_1 + acx_1x_3 + cdx_3, \quad (6.32)$$

$$C = acx_1x_3(b + d), \quad (6.33)$$

em que x_1 e x_3 ficam dados por (6.22).

A equação (6.27) possui uma solução real $\tilde{\lambda}_0$ e um par de soluções complexas conjugadas $\tilde{\lambda}_r \pm \tilde{\lambda}_i$; convém notar que no caso em que $\tilde{\lambda}_i = 0$ temos duas raízes reais, uma com multiplicidade dois. Se $\tilde{\lambda}_0 < 0$ e $\tilde{\lambda}_r < 0$ a solução ativa é estável, e se, além disso, $\tilde{\lambda}_i \neq 0$, então a solução apresenta oscilações transientes. O limite da região na qual há oscilações transientes ocorre para $\tilde{\lambda}_i \rightarrow 0$. Neste caso, a equação (6.27) reduz-se a

$$(\tilde{\lambda} - \tilde{\lambda}_0)(\tilde{\lambda} - \tilde{\lambda}_r)^2 = 0. \quad (6.34)$$

Comparando as equações (6.27) e (6.34) obtemos as relações

$$A = -\tilde{\lambda}_0 - \tilde{\lambda}_r, \quad (6.35)$$

$$B = 2\tilde{\lambda}_0\tilde{\lambda}_r + \tilde{\lambda}_r^2, \quad (6.36)$$

$$C = -\tilde{\lambda}_0\tilde{\lambda}_r^2. \quad (6.37)$$

Vemos então que A , B e C são relacionados; eliminando $\tilde{\lambda}_0$ e $\tilde{\lambda}_r$ das equações (6.35-6.37), encontramos

$$(27C + 2A^3 - 9AB)^2 = 4(A^2 - 3B)^3. \quad (6.38)$$

Substituindo os valores A , B , C e D em termos de a , b , c e d , usando a parametrização definida em (6.4) para o caso particular em que $s = 0$, obtemos a linha de transição entre a fase em que há oscilações transientes e a fase em que não há. Para o caso especial em que $s = 0$ e $r_1 = r_2$, ou seja, $a = c$ e $b = d$, temos que a fase absorvente ocorre para $r = r_1 = r_2 < 1/3$, a fase ativa para $r = r_1 = r_2 > 1/3$. Dentro da fase ativa, encontramos que existe oscilação transiente para $1/3 < r = r_1 = r_2 < 17/19$ e não existe oscilação para $1 > r = r_1 = r_2 > 17/19$.

Nas figuras 6.2 e 6.3 apresentamos as soluções estacionárias para as densidades x_0 , x_1 , x_2 e x_3 *versus* r_1 , nos intervalos em que a solução estável é a solução ativa; em ambas as figuras fixamos $s = 0$. Na figura 6.2 escolhemos fixar $r_2 = 0,5$ e variamos r_1 ; e na figura 6.3 tomamos $r_2 = r_1$.

Figura 6.2: Densidades x_0 , x_1 , x_2 e x_3 *versus* r_1 , para $s = 0$ e $r_2 = 0,5$, no intervalo em que a solução estável é a ativa, na aproximação de campo médio simples.

Na figura 6.2 notamos que para $r_1 < 0,5$ a densidade x_3 de colônias do

tipo B ; é maior do que a densidade x_1 de colônias do tipo A , e para $r_1 > 0,5$ inverte-se a situação.

Figura 6.3: Densidades x_0 , x_1 , x_2 e x_3 versus r_1 , para $s = 0$ e $r_2 = r_1$, no intervalo em que a solução estável é a ativa, na aproximação de campo médio simples. A curva azul não aparece pois está sob a curva verde, e a curva preta não aparece pois está sob a curva vermelha.

Já na figura 6.3, as densidades das colônias são iguais entre si assim como as densidades dos nichos, ou seja, $x_0 = x_2$ e $x_1 = x_3$.

Na figura 6.4 apresentamos o diagrama de fase para $s = 0$, isto é, para o plano em que $a + b = c + d$. Acima da curva vermelha, que é a linha crítica, temos a região na qual as soluções de campo médio simples estáveis são as ativas. Estas apresentam oscilações transientes em toda região entre a curva vermelha e a curva azul indicada na figura; já no interior da região delimitada pela curva azul convergem para o ponto fixo sem oscilações. As outras curvas da figura 6.4 são resultados da aproximação de campo médio com pares que apresentamos na próxima seção.

6.3.2 Aproximação de campo médio com pares

Um melhor tratamento das equações (6.9-6.11), visando também obter um sistema fechado de equações, consiste em escrever as expressões para a evolução

temporal das correlações de dois sítios e utilizar a aproximação de campo médio com pares. As correlações de dois sítios dependem das correlações de três sítios; todavia, usando a aproximação de campo médio com pares discutida na subseção 2.4.3, é possível aproximar correlações de três sítios por uma expressão que depende apenas de correlações de dois e de um sítio; pode-se encontrar, dessa maneira, um sistema fechado de equações para as correlações de um e dois sítios.

Assim, aplicamos a expressão para evolução temporal de uma grandeza $f(\eta)$, dada na equação (6.3), para

$$\begin{aligned} f_1 &= \delta(\eta_j, 0)\delta(\eta_k, 0), & f_2 &= \delta(\eta_j, 0)\delta(\eta_k, 1), & f_3 &= \delta(\eta_j, 0)\delta(\eta_k, 2), \\ f_4 &= \delta(\eta_j, 0)\delta(\eta_k, 3), & f_5 &= \delta(\eta_j, 1)\delta(\eta_k, 1), & f_6 &= \delta(\eta_j, 1)\delta(\eta_k, 2), \\ f_7 &= \delta(\eta_j, 1)\delta(\eta_k, 3), & f_8 &= \delta(\eta_j, 2)\delta(\eta_k, 2), & f_9 &= \delta(\eta_j, 2)\delta(\eta_k, 3). \end{aligned}$$

Não apresentamos as equações de evolução temporal para as outras possíveis combinações do tipo devido ao fato de que mais à frente assumimos que a solução é homogênea e isotrópica, de forma que $P_{i,j}(\Omega_1\Omega_2) = P_{i,j}(\Omega_2\Omega_1)$.

Isso dito, se

$$f(\eta) = f(\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_j, \dots, \eta_N) = \delta(\eta_j, \Omega_1)\delta(\eta_k, \Omega_2) \text{ com } j \neq k, \quad (6.39)$$

em que Ω_1 e Ω_2 assumem valores em $\{0, 1, 2, 3\}$, então

$$f(i\eta) = f(\eta_1, \eta_2, \dots, \text{mod}(\eta_i + 1, 4), \dots, \eta_N) = \begin{cases} \delta(\text{mod}(\eta_j + 1, 4), \Omega_1)\delta(\eta_k, \Omega_2), & \text{se } i = j \\ \delta(\eta_j, \Omega_1)\delta(\text{mod}(\eta_j + 1, 4), \Omega_2), & \text{se } i = k \\ \delta(\eta_j, \Omega_1)\delta(\eta_k, \Omega_2), & \text{se } i \neq j \text{ e } i \neq k \end{cases},$$

ou seja,

$$f(i\eta) = f(\eta_1, \eta_2, \dots, \text{mod}(\eta_i + 1, 4), \dots, \eta_N) = \begin{cases} \delta(\eta_j, \text{mod}(\Omega_1 - 1, 4))\delta(\eta_k, \Omega_2), & \text{se } i = j \\ \delta(\eta_j, \Omega_1)\delta(\eta_j, \text{mod}(\Omega_2 - 1, 4)), & \text{se } i = k \\ \delta(\eta_j, \Omega_1)\delta(\eta_k, \Omega_2), & \text{se } i \neq j \text{ e } i \neq k \end{cases},$$

ou, reescrevendo,

$$\begin{aligned}
 f({}^i\eta) &= f(\eta_1, \eta_2, \dots, \text{mod}(\eta_i + 1, 4) \dots \eta_N) = \\
 &\quad \delta(\text{mod}(\eta_j + 1, 4), \Omega_1) \delta(\eta_k, \Omega_2) \delta(i, j) + \\
 &\quad + \delta(\eta_j, \Omega_1) \delta(\text{mod}(\eta_j + 1, 4), \Omega_2) \delta(i, k) + \\
 &\quad + \delta(\eta_j, \Omega_1) \delta(\eta_j, \Omega_2) (1 - \delta(i, j)) (1 - \delta(i, k)).
 \end{aligned} \tag{6.40}$$

Depois de vários cálculos algébricos, e mantendo a notação que adotamos para a correlação, encontramos

$$\frac{d}{dt} P_{j,k}(00) = d[P_{j,k}(30) + P_{j,k}(03)] - \frac{a}{\zeta} \left[\sum_{k \neq k} P_{k,j,k}(100) + \sum_{\bar{k} \neq j} P_{j,k,\bar{k}} P(001) \right], \tag{6.41}$$

$$\frac{d}{dt} P_{j,k}(22) = b[P_{j,k}(12) + P_{j,k}(21)] - \frac{c}{\zeta} \left[\sum_{k \neq k} P_{k,j,k}(322) + \sum_{\bar{k} \neq j} P_{j,k,\bar{k}} P(223) \right], \tag{6.42}$$

$$\frac{d}{dt} P_{j,k}(11) = \frac{a}{\zeta} (P_{j,k}(01) + P_{k,j}(10)) + \frac{a}{\zeta} \left[\sum_{k \neq k} P_{k,j,k}(101) + \sum_{\bar{k} \neq j} P_{j,k,\bar{k}} P(101) \right] - 2bP_{j,k}(11), \tag{6.43}$$

$$\frac{d}{dt} P_{j,k}(33) = \frac{c}{\zeta} (P_{j,k}(23) + P_{k,j}(32)) + \frac{c}{\zeta} \left[\sum_{k \neq k} P_{k,j,k}(323) + \sum_{\bar{k} \neq j} P_{j,k,\bar{k}} P(323) \right] - 2dP_{j,k}(33), \tag{6.44}$$

$$\frac{d}{dt} P_{j,k}(01) = dP_{j,k}(31) - bP_{j,k}(01) + \frac{a}{\zeta} \left[\sum_{k \neq j} P_{j,k,\bar{k}}(001) - P_{j,k}(01) - \sum_{k \neq k} P_{k,j,k}(101) \right], \tag{6.45}$$

$$\frac{d}{dt} P_{j,k}(23) = bP_{j,k}(13) - dP_{j,k}(23) + \frac{c}{\zeta} \left[\sum_{\bar{k} \neq j} P_{j,k,\bar{k}}(223) - P_{j,k}(23) - \sum_{k \neq k} P_{k,j,k}(323) \right], \tag{6.46}$$

$$\frac{d}{dt} P_{j,k}(02) = dP_{j,k}(32) + bP_{j,k}(01) - \frac{a}{\zeta} \sum_{k \neq k} P_{(k,j,k)}(102) - \frac{c}{\zeta} \sum_{\bar{k} \neq j} P_{j,k,\bar{k}}(023), \tag{6.47}$$

$$\frac{d}{dt} P_{j,k}(13) = -(b + d)P_{j,k}(13) + \frac{a}{\zeta} \sum_{k \neq k} P_{(k,j,k)}(103) + \frac{c}{\zeta} \sum_{\bar{k} \neq j} P_{j,k,\bar{k}}(123), \tag{6.48}$$

$$\frac{d}{dt} P_{j,k}(03) = d(P_{j,k}(33) - P_{j,k}(03)) - \frac{a}{\zeta} \sum_{k \neq k} P_{k,j,k}(103) + \frac{c}{\zeta} \sum_{\bar{k} \neq j} P_{j,k,\bar{k}}(023), \tag{6.49}$$

$$\frac{d}{dt} P_{j,k}(12) = b(P_{j,k}(11) - P_{j,k}(12)) + \frac{a}{\zeta} \sum_{k \neq k} P_{k,j,k}(102) - \frac{c}{\zeta} \sum_{\bar{k} \neq j} P_{j,k,\bar{k}}(123). \tag{6.50}$$

Novamente, assumindo uma solução homogênea e isotrópica, obtemos

$$\frac{d}{dt} P(00) = 2 \left[dP(03) - \frac{a(\zeta - 1)}{\zeta} P(001) \right], \tag{6.51}$$

$$\frac{d}{dt} P(22) = 2 \left[bP(12) - \frac{c(\zeta - 1)}{\zeta} P(223) \right], \tag{6.52}$$

$$\frac{d}{dt}P(11) = 2\left[\frac{a}{\zeta}P(01) + \frac{a(\zeta-1)}{\zeta}P(101) - bP(11)\right], \quad (6.53)$$

$$\frac{d}{dt}P(33) = 2\left[\frac{c}{\zeta}P(23) + \frac{c(\zeta-1)}{\zeta}P(323) - dP(33)\right], \quad (6.54)$$

$$\frac{d}{dt}P(01) = dP(13) - bP(01) + \frac{a}{\zeta}[(\zeta-1)(P(001) - P(101)) - P(01)], \quad (6.55)$$

$$\frac{d}{dt}P(23) = bP(13) - dP(23) + \frac{c(\zeta-1)}{\zeta}[P(223) - P(323)] - \frac{c}{\zeta}P(23), \quad (6.56)$$

$$\frac{d}{dt}P(02) = dP(32) + bP(01) - \frac{a(\zeta-1)}{\zeta}P(102) - \frac{c(\zeta-1)}{\zeta}P(023), \quad (6.57)$$

$$\frac{d}{dt}P(13) = -(b+d)P(13) + \frac{a(\zeta-1)}{\zeta}P(103) + \frac{c(\zeta-1)}{\zeta}P(123), \quad (6.58)$$

$$\frac{d}{dt}P(03) = d(P(33) - P(03)) - \frac{a(\zeta-1)}{\zeta}P(103) + \frac{c(\zeta-1)}{\zeta}P(023) \quad (6.59)$$

$$\frac{d}{dt}P(12) = b(P(11) - P(12)) + \frac{a(\zeta-1)}{\zeta}P(102) - \frac{c(\zeta-1)}{\zeta}P(123). \quad (6.60)$$

Há ainda as relações (6.61-6.64) entre as correlações de dois sítios e o vínculo (6.65),

$$P(11) + P(12) + P(13) + P(14) = P(1), \quad (6.61)$$

$$P(12) + P(22) + P(23) + P(24) = P(2), \quad (6.62)$$

$$P(13) + P(23) + P(33) + P(34) = P(3), \quad (6.63)$$

$$P(14) + P(24) + P(34) + P(44) = P(4). \quad (6.64)$$

$$P(1) + P(2) + P(3) + P(4) = 1. \quad (6.65)$$

Escolhemos, portanto, como variáveis independentes, $P(0)$, $P(1)$, $P(3)$, $P(00)$, $P(11)$, $P(33)$, $P(01)$, $P(13)$ e $P(23)$. Em seguida, aplicamos a aproximação de campo médio com pares, vista na subseção 2.4.3, e em particular na equação (2.123), nas equações (6.51), (6.53), (6.54), (6.55), (6.58) e (6.56). Além disso, fazemos uso também das relações (6.61-6.65). Em particular, para o caso em que $a = c$ e $b = d$, denotando por $x_0 = P(0)$, $x_1 = P(1)$, $x_3 = P(3)$, $x_{00} = P(00)$, $x_{11} = P(11)$, $x_{33} = P(33)$, $x_{01} = P(01)$, $x_{13} = P(13)$ e $x_{23} = P(23)$, obtemos

$$\frac{d}{dt}x_0 = bx_3 - ax_{01}, \quad (6.66)$$

$$\frac{d}{dt}x_1 = ax_{01} - bx_1, \quad (6.67)$$

$$\frac{d}{dt}x_3 = ax_{23} - bx_3, \quad (6.68)$$

$$\frac{d}{dt}x_{00} = 2 \left[bx_{03} - \frac{a(\zeta - 1)}{\zeta} \frac{x_{00}x_{01}}{x_0} \right], \quad (6.69)$$

$$\frac{d}{dt}x_{11} = 2 \left[\frac{a}{\zeta} x_{01} + \frac{a(\zeta - 1)}{\zeta} \frac{x_{01}^2}{x_0} - bx_{11} \right], \quad (6.70)$$

$$\frac{d}{dt}x_{33} = 2 \left[\frac{a}{\zeta} x_{23} + \frac{a(\zeta - 1)}{\zeta} \frac{x_{23}^2}{x_1} - bx_{33} \right], \quad (6.71)$$

$$\frac{d}{dt}x_{01} = bx_{13} - bx_{01} + \frac{a(\zeta - 1)}{\zeta} \frac{x_{01}}{x_0} (x_{00} - x_{01}) - \frac{a}{\zeta} x_{01}, \quad (6.72)$$

$$\frac{d}{dt}x_{23} = bx_{13} - bx_{23} + \frac{a}{\zeta} (\zeta - 1) \frac{x_{23}}{x_2} (x_{22} - x_{23}) - \frac{a}{\zeta} x_{23}, \quad (6.73)$$

$$\frac{d}{dt}x_{13} = -2bx_{13} + \frac{a(\zeta - 1)}{\zeta} \frac{x_{01}x_{03}}{x_0} + \frac{a(\zeta - 1)}{\zeta} \frac{x_{12}x_{23}}{x_2}, \quad (6.74)$$

em que

$$x_2 = 1 - x_0 - x_1 - x_3, \quad (6.75)$$

$$x_{12} = x_1 - x_{01} - x_{11} - x_{13}, \quad (6.76)$$

$$x_{03} = x_3 - x_{13} - x_{23} - x_{33}, \quad (6.77)$$

$$x_{02} = x_0 - x_{01} - x_{03}, \quad (6.78)$$

$$x_{22} = x_2 - x_{02} - x_{12} - x_{23}. \quad (6.79)$$

Para encontrar as soluções estacionárias fazemos com que todas as derivadas temporais acima se anulem. Resolvemos o sistema de equações obtido observando que, devido à simetria do sistema, $x_{11} = x_{33}$. Após vários cálculos algébricos, encontramos para as soluções estacionárias

$$x_0 = \frac{b(\zeta - 1)}{a(\zeta - 2) - 2b}; \quad (6.80)$$

$$x_1 = x_3 = \frac{1}{2} \frac{a(\zeta - 2) - 2b\zeta}{a(\zeta - 2) - 2b}, \quad (6.81)$$

$$x_{01} = x_{23} = \frac{b}{a} P(1) = \frac{b}{a} \frac{1}{2} \frac{a(\zeta - 2) - 2b\zeta}{a(\zeta - 2) - 2b}, \quad (6.82)$$

$$x_{11} = x_{33} = \frac{(a - 2b)(a(\zeta - 2) - 2b\zeta)}{4a(a(\zeta - 2) - 2b)}, \quad (6.83)$$

$$x_{13} = \frac{(a(\zeta - 2) - 2b\zeta)^2}{4a(\zeta - 2)(a(\zeta - 2) - 2b)}, \quad (6.84)$$

$$x_{00} = \frac{b^2 \zeta^2}{a(\zeta - 2)(a(\zeta - 2) - 2b)}. \quad (6.85)$$

Figura 6.4: Diagrama de fase $r_1 - r_2$ obtido por meio de aproximações de campo médio no plano $s = 0$, ou seja, no plano em que $a + b = c + d$. Na aproximação de campo médio simples: (i) — representa a linha de transição entre a fase ativa e a fase absorvente, sendo que a fase ativa fica acima de —; (ii) — representa a separação entre as soluções que convergem sem oscilações para um valor e as em que as oscilações são transientes, sendo que no interior de — estão as soluções que convergem sem oscilações para o ponto fixo. Na aproximação de campo médio com pares: (i)— representa a transição entre a fase ativa e a fase absorvente, sendo que a fase ativa fica acima de —; (ii) a região — representa as soluções que convergem para um valor sem oscilações transientes, já a região entre a curva — e a região — representa as soluções em que as oscilações são transientes. Tanto nas aproximação de campo médio simples quanto na aproximação de campo médio com pares não existem oscilações no estado estacionário.

Apresentamos na figura 6.4 o diagrama de fase para $s = 0$, ou seja, para o plano $a + b = c + d$. Já comentamos sobre as curvas resultantes da aproximação de campo médio simples apresentadas nesse diagrama; na aproximação de campo médio com pares, as soluções ativas e estáveis estão acima da curva preta. Obtivemos a curva preta da seguinte maneira: encontramos numericamente as soluções estacionárias para um grande conjunto de parâmetros, e analisamos a estabilidade das soluções por meio dos autovalores da jacobiana do sistema. Assim, na região acima da curva preta temos soluções ativas e estáveis, sendo que na região magenta não há oscilações transientes e entre a curva preta e a região magenta há. Lembramos que a solução que encontramos analiticamente para campo médio com pares vale para $a = c$ e $b = d$, isto é, vale para $s = 0$ e $r_1 = r_2$, que é a diagonal do plano $s = 0$.

Notamos que como estamos no plano $s = 0$, temos que $a + b = c + d = \frac{1}{2}$. Para $r_1 = 2(a - b) = 1$, temos $a = \frac{1}{2}$ e $b = 0$; dessa forma, a reação espontânea na qual CA passa a ser NB deixa de existir. O modelo então se reduz a um modelo do tipo suscetível-infectado-recuperado (SIR) apresentado no capítulo 3, pois, uma vez que um sítio atinge o estado CA , não sai mais dele, assim como no modelo suscetível-infectado-recuperado (SIR), um sítio que atinge o estado recuperado não sai mais dele. Analogamente, quando $r_2 = 2(c - d) = 1$ temos $c = \frac{1}{2}$ e $d = 0$, e a reação espontânea na qual CB passa a ser NA deixa de existir. Novamente, o modelo reduz-se a um do tipo suscetível-infectado-recuperado (SIR). A diferença é que, em vez de existirem apenas uma reação catalítica e uma espontânea, há duas catalíticas e uma espontânea. Além disso, no modelo suscetível-infectado-recuperado (SIR) propriamente dito, a transição advinda da aproximação de campo médio com pares ocorre para $c_{sir} = 1/3$ e $b_{sir} = 2/3$, logo o parâmetro de infecção é o dobro do parâmetro de recuperação. No nosso caso, quando temos $b = 0$, o parâmetro de “infecção” (parâmetro da reação catalítica) é c , e o de “recuperação” (parâmetro da reação espontânea) d . Como temos $c + d = 1/2$, segue que na transição temos $c = 1/3$ e $d = 1/6$. Lembramos ainda que $r_2 = 2(c - d)$, de modo que a transição ocorre para $r_2 = 1/3$. Analogamente, quando $r_2 = 1$, a transição ocorre para $r_1 = 1/3$. Com efeito, no gráfico da figura 6.4, a linha crítica da aproximação de campo médio com pares intersecta a linha $r_1 = 1$ em $r_2 = 1/3$, e a linha

$r_2 = 1$ em $r_1 = 1/3$.

6.4 Função de correlação e densidade espectral

Nas soluções advindas das aproximações de campo médio simples e com pares encontramos soluções que apresentam oscilações transientes, isto é, oscilações amortecidas. Nas próximas seções definimos a equação mestra de “nascimento e morte” associada ao modelo, bem como investigamos o modelo definido na rede quadrada por simulações de Monte Carlo, sendo ambas investigações focalizadas no estudo das oscilações que podem existir nas soluções. Para esta investigação a função de correlação temporal e a densidade espectral são conceitos importantes, portanto apresentamos aqui uma pequena discussão sobre estes. O uso dessas ferramentas para a análise de oscilações em modelos de dinâmica de populações foi feito, por exemplo, na referência [55].

6.4.1 Função de correlação temporal

Seja uma série temporal $X = X_1, X_2, \dots, X_N$, cujos elementos são separados por um intervalo de tempo constante e cuja média é $\bar{X}$. A autocorrelação entre dois elementos separados por τ intervalos de tempo é

$$C_{XX,\tau} = \frac{\sum_{i=1}^{N-\tau} (X_i - \bar{X})(X_{i+\tau} - \bar{X})}{\sum_{i=1}^{N-\tau} (X_i - \bar{X})^2}. \quad (6.86)$$

Sejam duas séries temporais $X = X_1, X_2, \dots, X_N$ e $Y = Y_1, Y_2, \dots, Y_N$, cujos elementos são separados por intervalos de tempo contantes e iguais para ambas as séries, e cujas médias são $\bar{X}$ e $\bar{Y}$, respectivamente. A correlação cruzada entre um elemento da série X e um elemento da série Y separados por τ intervalos de tempo é

$$C_{XY,\tau} = \frac{\sum_{i=1}^{N-\tau} (X_i - \bar{X})(Y_{i+\tau} - \bar{Y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{N-\tau} (X_i - \bar{X})^2 \sum_{i=1}^{N-\tau} (Y_i - \bar{Y})^2}}. \quad (6.87)$$

Analisar os gráficos das funções correlações temporais $C_{XX,\tau}$ e $C_{XY,\tau}$ em função do tempo de atraso τ pode fornecer diversas informações sobre a série temporal. Mencionamos aqui algumas delas que são importantes para nossa análise.

Quando a autocorrelação de uma série é uma exponencial pura então as flutuações presentes na série são constituídas apenas de ruído. Já se a autocorrelação oscila e há um decaimento na amplitude, existem oscilações e este comportamento é chamado de quasi-ciclo. Se a amplitude da autocorrelação converge para zero para longos tempos de atraso τ , o comportamento é denominado quasi-ciclo com perda de fase. Se após um decaimento inicial, a autocorrelação passa a oscilar com amplitude praticamente constante, o comportamento é denominado quasi-ciclo com memória da fase [16]. Em particular, quando analisamos um modelo espacializado, temos que o comportamento de quasi-ciclo com perda de fase reflete a existência de oscilações locais e o comportamento de quasi-ciclo com memória de fase reflete a presença de oscilações globais [44]. Outro ponto importante é que se a função de autocorrelação temporal apresenta oscilações temporais com uma determinada frequência, a série temporal oscila nesta mesma frequência [123].

6.4.2 Análise espectral

A análise espectral é importante quando se procura identificar a existência ou inexistência de periodicidade em uma série de dados. De forma simples, a ideia da análise espectral é decompor uma série temporal em componentes senoidais, paralelamente a essa decomposição, há a decomposição correspondente da autocorrelação da série temporal.

Não apresentamos aqui os detalhes do formalismo matemático envolvido, nem dos algoritmos utilizados, pois fogem ao escopo desta tese; buscamos nesta subseção apenas apresentar o conceito de densidade espectral e como podemos utilizá-lo para verificar se existe periodicidade nos resultados de nossas simulações.

Para introduzir o conceito de densidade espectral é interessante citarmos o teorema de Wiener–Khinchin–Bochner, o qual é bastante geral e pode ser

apresentado com diferentes notações e abordagens (vide referências [6, 123–125]). Um caso particular deste teorema diz que a densidade espectral $S(\omega)$ de uma função $X(t)$, cuja autocorrelação é $R(t)$, é

$$S(\omega) = \int R(t)e^{-i\omega t} dt, \quad (6.88)$$

e inversamente

$$R(\tau) = \frac{1}{2\pi} \int S(\omega)e^{i\omega\tau} d\omega. \quad (6.89)$$

Para a análise de nossas simulações é importante compreender que $S(\omega)d\omega$ representa a contribuição das frequências angulares no intervalo $(\omega, \omega + d\omega)$ para a variância total da série. Logo, um pico na densidade espectral em uma frequência angular $\tilde{\omega}$ significa que a função possui um caráter oscilatório de frequência angular $\tilde{\omega}$.

Nos gráficos que apresentamos nas próximas seções a densidade espectral será mostrada em função da frequência $f = \omega/2\pi$. No caso das simulações que fizemos, temos séries finitas; para o cálculo da densidade espectral recorreremos ao uso da *Fast Fourier Transform* da autocorrelação, bem como ao método *Welch* [126]. Ambos os métodos são bem estabelecidos e implementados diretamente em diversas linguagens, como Python, de modo que não transcrevemos seus algoritmos aqui.

6.5 Processo estocástico do tipo “nascimento e morte”

Passamos agora a analisar o modelo definido como um processo estocástico do tipo “nascimento e morte”. Primeiramente apresentamos a equação mestra do tipo “nascimento e morte” bem como o limite do contínuo e expansão desta que levam a uma equação de Fokker-Planck. Em seguida mostramos os resultados das simulações para o processo tipo “nascimento e morte”. No artigo [44] uma investigação deste tipo foi feita para o modelo predador-presa.

6.5.1 Definição da equação mestra do tipo “nascimento e morte” e equação de Fokker-Planck

Uma abordagem possível para tratar o sistema em questão é baseada na construção de uma equação mestra do tipo “nascimento e morte” associada ao modelo. Assim como na aproximação de campo médio simples, neste tratamento desprezamos a espacialidade do problema, pois nas transições catalíticas deixamos de considerar a interação de um sítio com sua primeira vizinhança, e passamos a levar em conta a interação entre todos os elementos do sistema. Todavia, diferentemente da aproximação de campo médio, neste caso temos uma dinâmica estocástica na qual o número de elementos de cada tipo é uma variável estocástica que caracteriza o sistema e o ruído é levado em conta.

O tratamento utilizado aqui é feito seguindo o formalismo apresentado na subseção 2.3.2 para processos estocásticos do tipo “nascimento morte” de M variáveis estocásticas, em particular, neste caso temos $M = 4$. Chamamos de n_0, n_1, n_2 e n_3 o número de elementos nos estados NA, CA, NB e CB e N o número total de elementos. O estado do sistema fica definido pelo vetor estocástico $\mathbf{n} = (n_0, n_1, n_2, n_3)$. Assim como no diagrama 6.1 há quatro reações, aqui existem quatro processos possíveis:

- (i) $n_0 \rightarrow n_0 - 1$ e $n_1 \rightarrow n_1 + 1$,
- (ii) $n_1 \rightarrow n_1 - 1$ e $n_2 \rightarrow n_2 + 1$,
- (iii) $n_2 \rightarrow n_2 - 1$ e $n_3 \rightarrow n_3 + 1$,
- (iv) $n_3 \rightarrow n_3 - 1$ e $n_0 \rightarrow n_0 + 1$.

Lembrando das reações deste modelo sumarizadas na figura 6.1, vemos que os processos (ii) e (iv) são espontâneos. Como um elemento no estado NA pode ir para o estado CA com probabilidade b , e existem n_1 elementos no estado CA , a taxa do processo (ii) é $\omega_2 = bn_1$. Analogamente, a taxa para o processo (iv) é $\omega_3 = dn_3$.

Os processos (i) e (iii) são catalíticos. Analisando o processo (i) vemos que existem n_0 elementos no estado NA que podem se tornar elementos

CA, além disso, esse processo catalítico possui taxa proporcional à fração de elementos CA em todo sistema, a saber, n_1/N , logo a taxa do processo (i) é $\omega_1 = an_0n_1/N$. Analogamente, a taxa do processo (iii) é $\omega_3 = cn_2n_3/N$.

Resumindo

$$\text{Taxa do processo (i)} \quad \omega_0(\mathbf{n}) = an_0 \frac{n_1}{N}, \quad (6.90)$$

$$\text{Taxa do processo (ii)} \quad \omega_1(\mathbf{n}) = bn_1, \quad (6.91)$$

$$\text{Taxa do processo (iii)} \quad \omega_2(\mathbf{n}) = cn_2 \frac{n_3}{N}, \quad (6.92)$$

$$\text{Taxa do processo (iv)} \quad \omega_3(\mathbf{n}) = n_3d. \quad (6.93)$$

Portanto, a equação mestra do tipo “nascimento e morte”, que governa a evolução temporal da distribuição de probabilidade $P(\mathbf{n})$ é dada por

$$\frac{d}{dt}P(\mathbf{n}) = \sum_{i=0}^3 [\omega_i(\mathbf{n} - \mathbf{e}^i)P(\mathbf{n} - \mathbf{e}^i) - \omega_i(\mathbf{n})P(\mathbf{n})], \quad (6.94)$$

em que $\mathbf{e}^i$ é um dos vetores $\mathbf{e}^0 = (-1,1,0,0)$, $\mathbf{e}^1 = (0, -1,1,0)$, $\mathbf{e}^2 = (0,0, -1,1)$ e $\mathbf{e}^3 = (1,0,0, -1)$.

Já, a evolução temporal da média $\langle F(\mathbf{n}) \rangle$ de uma grandeza $F(\mathbf{n})$ é dada por

$$\sum_{i=0}^3 \langle [F(\mathbf{n} + \mathbf{e}^i) - F(\mathbf{n})]\omega_i(\mathbf{n}) \rangle \quad (6.95)$$

Aplicando a equação (6.95) para as funções $G_0(n) = n_0$, $G_1(n) = n_1$, $G_2(n) = n_2$ e $G_3(n) = n_3$ obtemos

$$\frac{d}{dt}\langle n_0 \rangle = -\langle \omega_0(n) \rangle + \langle \omega_3(n) \rangle, \quad (6.96)$$

$$\frac{d}{dt}\langle n_1 \rangle = -\langle \omega_1(n) \rangle + \langle \omega_0(n) \rangle, \quad (6.97)$$

$$\frac{d}{dt}\langle n_2 \rangle = -\langle \omega_2(n) \rangle + \langle \omega_1(n) \rangle, \quad (6.98)$$

$$\frac{d}{dt}\langle n_3 \rangle = -\langle \omega_3(n) \rangle + \langle \omega_2(n) \rangle. \quad (6.99)$$

Ou seja,

$$\frac{d}{dt}\langle n_0 \rangle = -\frac{a}{N}\langle n_0 n_1 \rangle + d\langle n_3 \rangle, \quad (6.100)$$

$$\frac{d}{dt}\langle n_1 \rangle = -b\langle n_1 \rangle + \frac{a}{N}\langle n_0 n_1 \rangle, \quad (6.101)$$

$$\frac{d}{dt}\langle n_2 \rangle = -\frac{c}{N}\langle n_2 n_3 \rangle + b\langle n_1 \rangle, \quad (6.102)$$

$$\frac{d}{dt}\langle n_3 \rangle = -d\langle n_3 \rangle + \frac{c}{N}\langle n_2 n_3 \rangle. \quad (6.103)$$

Como mostramos na seção 2.3.3, para valores grandes de N , podemos considerar o limite do contínuo da equação mestra do tipo “nascimento e morte” (6.94) cuja expansão até ordem de $1/N$ gera uma equação de Fokker-Planck. Para tanto, inicialmente definimos as variáveis estocásticas $x_i = n_i/N$, com i assumindo os valores 0, 1, 2 ou 3, o vetor estocástico $\mathbf{x} = (x_0, x_1, x_2, x_3)$ e a distribuição de probabilidades $\varrho(\mathbf{x}, t)$. Desse modo, a equação (6.94) fornece

$$\frac{\partial}{\partial t}\varrho(\mathbf{x}) = N \sum_{k=0}^3 [\zeta_k(\mathbf{x} - \mathbf{e}^k/N)\varrho(\mathbf{x} - \mathbf{e}^k/N) - \zeta_k(\mathbf{x})\varrho(\mathbf{x})], \quad (6.104)$$

em que $\zeta_k = \omega_k(\mathbf{n})/N$. Para valores grandes de N , a expansão até primeira ordem de $1/N$ resulta em

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\varrho(\mathbf{x}, t) = \sum_{k=0}^3 \Big\{ & -\frac{\partial}{\partial x_k} [(\zeta_{mod(k-1,4)}(\mathbf{x}) - \zeta_k(\mathbf{x}))\varrho(\mathbf{x}, t)] + \\ & \frac{1}{2N} \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} [(\zeta_{mod(k-1,4)}(\mathbf{x}) + \zeta_k(\mathbf{x}))\varrho(\mathbf{x}, t)] \\ & - \frac{1}{N} \frac{\partial^2}{\partial x_k \partial x_{mod(k+1,4)}} (\zeta_k(\mathbf{x})\varrho(\mathbf{x}, t)) \Big\}. \end{aligned} \quad (6.105)$$

A equação de Fokker-Planck (6.105) é associada à seguinte equação de Langevin

$$\frac{d}{dt}x_k = \zeta_{mod(k-1,4)}(\mathbf{x}) - \zeta_k(\mathbf{x}) + \vartheta_{mod(k-1,4)}(t) - \vartheta_k(t), \quad (6.106)$$

válida para $k = 0, 1, 2$ ou 3 e na qual $\vartheta_k(t)$ é um ruído branco gaussiano com

as seguintes propriedades

$$\langle \vartheta_k(t) \rangle = 0, \quad (6.107)$$

$$\langle \vartheta_k(t) \vartheta_j(t') \rangle = \frac{\zeta_k}{N} \delta_{k,j} \delta(t - t'). \quad (6.108)$$

No limite que $N \rightarrow \infty$, o ruído desaparece, restando apenas a parte determinística do conjunto de equações de Langevin. Esse coincide com o sistema de equações obtido da aproximação de campo médio simples (6.17-6.20), cujos pontos fixos podem ser nós atrativos, nós repulsivos ou focos. Em particular quando são os pontos focos, existem oscilações amortecidas, ou seja, no transiente antes de a solução convergir para o ponto fixo há oscilações. Quando passamos a considerar os termos de ruído, para os parâmetros em que o ponto fixo seria um foco, a solução deixa de convergir para o ponto fixo, e passam a existir oscilações não amortecidas. Dessa forma, da análise das equações de Langevin, esperamos que nos resultados advindos das simulações da equação mestra do tipo “nascimento e morte” existam parâmetros para os quais identifiquemos a presença de oscilações não amortecidas.

Vale também destacar que, muito embora o ruído desapareça para $N \rightarrow \infty$, populações reais são finitas, logo podemos, para certas análises, considerar valores de N grandes porém finitos para descrevê-las.

6.5.2 Resultados das simulações do processo do tipo “nascimento e morte”

Passamos agora a apresentar os resultados das simulações da equação mestra do tipo “nascimento e morte”. Na figura 6.5-a apresentamos a série temporal da densidade x_1 *versus* tempo t para os parâmetros $s = 0$ e $r = r_1 = r_2 = 0,5; 0,7$ e $0,9$. Já na figura 6.5-b mostramos a autocorrelação C_{11} da série temporal da densidade x_1 *versus* tempo de atraso τ para os mesmos parâmetros.

Figura 6.5: (a) Densidade x_1 versus tempo t ; (b) Autocorrelação C_{11} para a série temporal da densidade x_1 versus tempo de atraso τ . Para todas as curvas foi considerado $s = 0$.

Figura 6.6: Densidade espectral da série temporal da densidade x_1 em função da frequência, em escala linear em (a) e escala logarítmica em (b). Para todas as curvas $s = 0$.

Para $r = r_1 = r_2 = 0,5$ e $0,7$ a autocorrelação constitui-se de oscilações

amortecidas cujas amplitudes decaem a zero para longos tempos de atraso τ . Este tipo de autocorrelação é típico de um comportamento denominado quasi-ciclo com perda de fase [16], no qual existem oscilações com ruído. Com efeito, como previmos da análise das equações de Langevin, para alguns conjuntos de parâmetros as soluções encontradas das simulações da equação mestra do tipo “nascimento e morte” existem oscilações não amortecidas. Recordando que as densidades x_1 e x_3 podem ser interpretadas como densidades de colônias dos tipos A e B , constatamos que o modelo definido como um processo do tipo “nascimento e morte” possui mecanismos suficientes para gerar cenários em que existem oscilações das populações.

Por outro lado, para $r = r_1 = r_2 = 0,9$, a autocorrelação é uma exponencial pura, de modo que não há oscilações, nesse caso, as flutuações são constituídas apenas de ruído.

Na figura 6.6 apresentamos a densidade espectral da série temporal da densidade x_1 em escalas linear e logarítmica em função da frequência. Notamos que, conforme o esperado, para $r = r_1 = r_2 = 0,5$ e $0,7$ as densidades espectrais possuem um pico, pois existem oscilações; já para $r = r_1 = r_2 = 0,9$ não há a presença de um pico, porque não existe oscilação nesse caso.

Em particular, para $r_1 = r_2 = 0,7$, apresentamos na figura 6.7 densidades x_1 e x_3 *versus* tempo t , suas autocorrelações e a correlação cruzada entre as séries temporais dessas como função do tempo de atraso τ , para analisarmos como as densidades x_1 e x_3 estão relacionadas.

Como esperado, para $r_1 = r_2$ as densidades oscilam em torno da mesma média, assim ora temos $x_1 > x_3$, ora $x_3 > x_1$. Além disso, notamos que em diversos momentos quando a densidade $x_1(x_3)$ cresce, a densidade $x_3(x_1)$ decresce. Dentro do contexto de dinâmicas de populações biológicas, em que x_1 e x_3 são densidades de colônias dos tipos A e B , respectivamente, essa segunda característica é muito significativa pois mostra que o modelo possui mecanismos suficientes para gerar o cenário de alternância de dominância entre as espécies [25, 26, 103–105]. As autocorrelações das séries são essencialmente as mesmas, de forma que ambas as densidades x_1 e x_3 oscilam com a mesma frequência característica.

Figura 6.7: (a) Densidades x_1 e x_3 *versus* tempo t ; (b) Autocorrelações C_{11} e C_{33} e correlação cruzada C_{13} para as séries temporais das densidades x_1 e x_3 em função do tempo de atraso τ . Os valores dos parâmetros são $s = 0$ e $r_1 = r_2 = 0,7$.

Figura 6.8: (a) Densidades x_1 e x_3 *versus* tempo t ; (b) Autocorrelações C_{11} e C_{33} e correlação cruzada C_{13} para as séries temporais das densidades x_1 e x_3 em função do tempo de atraso τ . Os valores dos parâmetros são $s = 0$ e $r_1 = 0,7$ e $r_2 = 0,8$.

A correlação cruzada possui comportamento análogo ao da autocorrelação, entretanto, como as oscilações não são em fase, o máximo não ocorre para $\tau = 0$.

Na figura 6.8-a apresentamos séries temporais das densidades x_1 e x_3 para $s = 0$, $r_1 = 0,7$ e $r_2 = 0,8$. Nesse caso, na maior parte do tempo $x_1 > x_3$, embora existam alguns instantes em que $x_3 > x_1$. Novamente notamos que frequentemente quando a densidade $x_1(x_3)$ cresce, a densidade $x_3(x_1)$ decresce. Portanto, este é outro exemplo de conjuntos de parâmetros no qual observamos alternância de dominância entre as espécies. Neste caso, todavia, as densidades oscilam em torno de médias próximas, porém distintas.

Na figura 6.8-b apresentamos as autocorrelações C_{11} e C_{33} e correlação cruzada C_{13} para as séries temporais das densidades x_1 e x_3 em função do tempo de atraso τ para $s = 0$, $r_1 = 0,7$ e $r_2 = 0,8$. Atentamos que, mais uma vez, as autocorrelações que apresentam oscilações amortecidas cujas amplitudes convergem a zero para longos tempos de atraso τ , assim sendo, novamente temos o comportamento quasi-ciclo com perda de fase já descrito anteriormente, no qual coexistem oscilações e ruído. Outra vez o comportamento da correlação cruzada é similar ao da autocorrelação.

6.6 Simulações de Monte Carlo

Nesta seção apresentamos o algoritmo e os resultados das simulações de Monte Carlo para o modelo definido na rede quadrada. Aqui denotamos por x_1 e x_3 as densidades de sítios nos estados CA e CB , que, como vimos, podem ser interpretadas como as densidades de colônias dos tipos A e B . Primeiramente, mostramos resultados sobre as séries temporais obtidas por simulações de uma única rodada, feitas para investigarmos se o modelo apresenta oscilações das populações das espécies e alternância de dominância entre estas. Depois apresentamos a comparação entre resultados obtidos da médias de várias rodadas e soluções encontradas nas aproximações de campo médio simples e com pares.

6.6.1 Algoritmo

Representamos a rede por uma matriz de lado L ; cada posição do vetor é um sítio da rede. Os números 0, 1, 2 e 3 ficam associados aos estados NA , CA , NB e CB .

1. Condição inicial: implementar uma rede bidimensional de L^2 sítios, em que cada sítio tem seu estado inicial sorteado e todos estados possuem a mesma probabilidade de serem sorteados.
2. Condições de contorno: periódicas.
3. Uma iteração: sortear um sítio i da rede aleatoriamente e um número aleatório $\theta \in [0,1]$. Em seguida,
 - (a) se o sítio i está no estado NA (0), calcula-se o número n_{CA} de primeiros vizinhos no estado CA (1). Se $\theta < \frac{an_{CA}}{2}$ então o sítio i passa para o estado 2.
 - (b) se o sítio i está no estado CA (1), se $\theta < b$ então o sítio i passa para o estado NB (2).
 - (c) se o sítio i está no estado NB (2), calcula-se o número n_{CB} de primeiros vizinhos no estado CB (3). Se $\theta < \frac{cn_{CB}}{2}$ então o sítio i passa para o estado CB (3).
 - (d) se o sítio i está no estado CB (3), se $\theta < d$ então o sítio i passa para o estado NA (0).
 - (e) Mantém-se um contador do número de sítios no estado CA (1). Se esse contador vai a zero, sorteia-se um sítio j , se o sítio j não estiver no estado CB (3) o sítio j passa para o estado CA (1).
 - (f) Mantém-se um contador do número de sítios no estado CB (3), se esse contador vai a zero, sorteia-se um sítio j , se o sítio j não tiver no estado CA (1) o sítio j passa para o estado CB (3).
4. Salvar dados: A cada L^2 iterações considera-se completo um passo de Monte Carlo. Primeiramente são feitas iterações nas quais o sistema

evolui, mas não guardamos as grandezas de interesse, essa etapa é denominada transiente. Após o transiente, a cada passo de Monte Carlo as grandezas são salvas.

6.6.2 Análise de séries temporais e correlações

Em todas as simulações descartamos um transiente de 10^6 passos de Monte Carlo. As simulações foram feitas para redes quadradas de $L \times L$ sítios, com $L = 40$ e $L = 80$. Primeiramente apresentamos alguns resultados sobre linha $s = 0$ e $r_1 = r_2$, ou seja, para $a = c$ e $b = d$; em seguida mostramos dois exemplos para $s = 0$ e $r_1 \neq r_2$, isto é, para $a + b = c + d$, mas $a \neq c$ e/ou $b \neq d$.

Caso especial $s = 0$ e $r_1 = r_2$

Apresentamos inicialmente resultados sobre a linha em que $s = 0$ e $r_1 = r_2$, sobre esta linha temos que a média da densidade de sítios no estado CA é igual à média da densidade de sítios no estado CB, ou seja, $\langle x_1 \rangle = \langle x_3 \rangle$.

Nas figuras 6.9 e 6.10 apresentamos, para redes de quadradas de aresta lateral $L = 40$ e $L = 80$, respectivamente, a densidade x_1 *versus* tempo; a autocorrelação C_{11} da série temporal da densidade x_1 *versus* tempo de atraso τ ; e a correlação cruzada C_{13} das séries temporais das densidades x_1 e x_3 *versus* tempo de atraso τ , para diversos valores de $r = r_1 = r_2$. Comparando os resultados para as redes quadradas de aresta lateral $L = 40$ e $L = 80$ verificamos que aumentar o tamanho da rede, diminui a amplitude das flutuações, mas não altera a função de autocorrelação. Explicamos mais adiante o porquê desse comportamento, o qual, vale notar, é encontrado em diversos modelos [54, 55, 127, 128].

Observamos nas figuras 6.9-b e 6.10-b que a autocorrelação C_{11} para valores menores de $r = r_1 = r_2$ apresenta oscilações amortecidas, com amplitude que converge a zero para tempos longos (comportamento denominado quasi-ciclo com perda de fase); conforme $r = r_1 = r_2$ aumenta, o decaimento da amplitude da autocorrelação C_{11} passa a ser cada vez mais rápido, até que para valores suficientemente altos de $r = r_1 = r_2$ a autocorrelação passa a

ser uma exponencial pura (regime em que só existem flutuações e não há oscilações).

Figura 6.9: (a) Densidade x_1 versus tempo t ; (b) Autocorrelação para a série temporal da densidade x_1 versus tempo de atraso τ ; (c) Correlação cruzada das séries temporais das densidades x_1 e x_3 versus tempo de atraso τ . Resultados obtidos para o modelo definido em uma rede quadrada de aresta lateral $L = 40$, os valores de $r = r_1 = r_2$ estão indicados na figura.

Figura 6.10: (a) Densidade x_1 versus tempo t ; (b) Autocorrelação para a série temporal da densidade x_1 versus tempo de atraso τ ; (c) Correlação cruzada das séries temporais das densidades x_1 e x_3 versus tempo de atraso τ . Resultados obtidos para o modelo definido em uma rede quadrada de aresta lateral $L = 80$, os valores de $r = r_1 = r_2$ estão indicados na figura.

Figura 6.11: Densidade espectral da série temporal da densidade x_1 em escala linear em (a) e logarítmica em (b). Para todas as curvas $s = 0$ e $r = r_1 = r_2$.

Portanto, do mesmo modo que nos resultados obtidos da equação mestra do tipo “nascimento e morte”, nos resultados das simulações de Monte Carlo para o modelo definido na rede quadrada também há conjuntos de parâmetros em que existem oscilações com ruído e outros em que há somente ruído. Como já mencionamos, isso é importante pois significa que o modelo possui ingredientes suficientes para que existam oscilações das populações.

Vale mencionar que, embora não tenhamos apresentado nos gráficos 6.9, ??, 6.11 para valores ainda menores de $r = r_1 = r_2$ o sistema cai no estado absorvente não apresentando oscilações.

Na figura 6.11 apresentamos para diferentes valores de parâmetros as densidades espectrais para as séries temporais da densidade x_1 . Na medida que r aumenta, o pico na densidade espectral torna-se cada vez menos pronunciado. Isso é consistente com o fato de que conforme r aumenta, mais rapidamente a amplitude das autocorrelações decresce. Em particular, a fim de analisarmos a relação entre as densidades x_1 e x_3 , apresentamos aqui mais detalhes sobre um dos conjuntos de parâmetros sobre essa linha, a saber, $r = 0,78$. Nas figuras 6.12 e 6.13 mostramos os gráficos para redes de aresta lateral $L = 40$ e $L = 80$, respectivamente.

Figura 6.12: (a) Densidades x_1 e x_3 *versus* tempo t ; (b) Autocorrelações C_{11} e C_{33} das séries temporais das densidades x_1 e x_3 e correlação cruzada C_{13} de ambas as séries *versus* tempo de atraso τ . Resultados para os parâmetros $r_1 = r_2 = 0,78$ para o modelo definido em uma rede de aresta lateral $L = 40$.

Figura 6.13: (a) Densidades x_1 e x_3 *versus* tempo t ; (b) Autocorrelações C_{11} e C_{33} das séries temporais das densidades x_1 e x_3 e correlação cruzada C_{13} de ambas as séries *versus* tempo de atraso τ . Resultados para os parâmetros $r_1 = r_2 = 0,78$ para o modelo definido em uma rede de aresta lateral $L = 80$.

Nas figuras 6.12-a e 6.13-a mostramos as densidades x_1 e x_3 *versus* tempo t . Para os dois tamanhos de rede vemos que as densidades oscilam em torno da mesma média, assim, ora a densidade x_1 é maior, ora a densidade x_3 é maior. Além do mais, verificamos que, mais uma vez, frequentemente quando a densidade $x_1(x_3)$ cresce, a densidade $x_3(x_1)$ decresce. Dessa forma, lembrando que x_1 e x_3 podem ser interpretadas como as densidades de colônias dos tipos A e B , verificamos que o modelo definido na rede quadrada também gera cenários em que há alternância entre as espécies.

Nas figuras 6.12-b e 6.13-b apresentamos as autocorrelações das séries temporais das densidades x_1 e x_3 , bem como a correlação cruzada entre estas como função do tempo de atraso τ . Verificamos que a autocorrelação para série temporal da densidade x_3 é essencialmente a mesma da densidade x_1 , de modo que ambas as séries temporais apresentam oscilações de mesma frequência. A correlação cruzada novamente apresenta comportamento similar ao das autocorrelações. A partir dos gráficos das autocorrelações estimamos que para $r = r_1 = r_2 = 0,78$ o período típico é 117(9) passos de Monte Carlo.

Comparando as figuras 6.12-a e 6.13-a vemos que quanto maiores as redes, menores ficam as amplitudes das oscilações. Mais especificamente, a amplitude média das oscilações é proporcional à $1/\sqrt{(N)} = 1/L$, em que N é o número de sítios da rede e L a lateral desta. Esse comportamento foi reportado em diversos trabalhos [54, 55, 127, 128], e sua ocorrência é explicada pelo fato de que oscilações existentes são locais, isto é, o sistema todo não oscila com a mesma fase, o que leva a uma diminuição na amplitude da oscilação das densidades quando o sistema é considerado como um todo. Já a função de autocorrelação e a função correlação cruzada não mudam com o tamanho da rede, pois ainda que o sistema não oscile todo com a mesma fase, existe uma frequência de oscilação típica, a qual é detectada pelas correlações.

Dois exemplos para $s = 0$ e $r_1 \neq r_2$

Primeiramente mostramos resultados para o caso em que $r_1 = 0,78$ e $r_2 = 0,80$ para redes de aresta lateral $L = 40$ e 80 . Nas figuras 6.14-a e 6.15-a apresentamos as densidades x_1 e x_3 *versus* tempo t . Já nas figuras 6.14-b e

6.15-b apresentamos as autocorrelações das séries temporais das densidades x_1 e x_3 , bem como a correlação cruzada entre estas *versus* tempo de atraso τ .

As autocorrelações novamente possuem oscilações amortecidas cujas amplitudes convergem a zero para tempos longos, caracterizando o comportamento de quasi-ciclo com perda de fase já discutido [16]. Logo também para esse caso temos oscilações na presença de ruído. Coerentemente com a existência de oscilações detectada pela análise das autocorrelações, temos que a densidade espectral apresenta um pico, como pode se ver na figura 6.16, o que mostra que existe uma frequência típica para a oscilação do sistema. Tanto do gráfico das correlações, quanto da densidade espectral estimamos um período típico de 100(10) passos de Monte Carlo.

Nas séries temporais, novamente, vemos que frequentemente quando a densidade $x_1(x_3)$ cresce, a densidade $x_3(x_1)$ decresce, para este conjunto de parâmetros as oscilações são em torno de médias distintas, mas ainda relativamente próximas. Lembrando que as densidades x_1 e x_3 podem ser interpretadas como densidades de colônias dos tipos *A* e *B*, temos mais um conjunto de parâmetros que gera o cenário de alternância de dominância entre as espécies. Outra vez observamos que aumentar o tamanho da rede não altera as autocorrelações, mas faz com que diminua a amplitude das oscilações, tal comportamento foi explicado na seção anterior e como já mencionamos esse fenômeno foi notado em diversos trabalhos [54, 55, 127, 128].

Em seguida mostramos o caso em que $r_1 = 0,70$ e $r_2 = 0,96$. Nas figuras 6.17-a e 6.18-a apresentamos as densidades x_1 e x_3 , para redes de arestas laterais $L = 40$ e 80 , respectivamente. Já nas figuras 6.17-b e 6.18-b apresentamos as autocorrelações das séries temporais das densidades x_1 e x_3 , bem como a correlação cruzada de ambas para redes de arestas laterais $L = 40$ e 80 , respectivamente.

As autocorrelações outra vez apresentam oscilações amortecidas, com amplitudes convergindo a zero para tempos longos, caracterizando o comportamento de quasi-ciclo com perda de fase [16]. Convém notar que $\tau \leq 200$ nos gráficos 6.14-b e 6.15-b, enquanto $\tau \leq 2000$ nos gráficos 6.17-b e 6.18-b, donde concluímos que o decaimento é mais lento para este segundo exemplo.

Figura 6.14: (a) Densidades x_1 e x_3 *versus* tempo t ; (b) Autocorrelações C_{11} e C_{33} das séries temporais das densidades x_1 e x_3 e correlação cruzada C_{13} de ambas as séries *versus* tempo de atraso τ . Resultados para $r_1 = 0,78$ e $r_2 = 0,80$ para o modelo definido em uma rede de aresta lateral $L = 40$.

Figura 6.15: (a) Densidades x_1 e x_3 *versus* tempo t ; (b) Autocorrelações C_{11} e C_{33} das séries temporais das densidades de x_1 e x_3 e correlação cruzada C_{13} de ambas as séries *versus* tempo de atraso τ . Resultados para $r_1 = 0,78$ e $r_2 = 0,80$ para o modelo definido em uma rede de aresta lateral $L = 80$.

Figura 6.16: Densidade espectral das séries temporais das densidades x_1 e x_3 em função da frequência, em escala linear em (a) e logarítmica em (b). Gráficos para os parâmetros $r_1 = 0,78$ e $r_2 = 0,80$.

Consistentemente com a existência de oscilações detectada pela análise das correlações, temos que a densidade espectral, apresentada na figura 6.19, apresenta um pico, o que mostra que existe frequência típica para a oscilação do sistema. Tanto dos gráficos das autocorrelações, quanto da densidade espectral estimamos um período típico de 500(5) passos de Monte Carlo, período cinco vezes maior que o encontrado no primeiro exemplo.

Para este conjunto de parâmetros as médias são bastante distintas e claramente $x_3 > x_1$. Entretanto, também nesse caso é possível verificar oscilações, e, outra vez, vemos que, frequentemente, quando a densidade $x_1(x_3)$ cresce, a densidade $x_3(x_1)$ decresce. Dessa forma, lembrando que x_1 e x_3 podem ser entendidas como densidades de colônias dos tipos A e B , temos um exemplo de um conjunto de parâmetros para o qual ocorre alternância de dominância entre as espécies, ainda que as médias de densidades de duas colônias sejam bastante distintas. Novamente notamos que aumentar o tamanho da rede não altera as autocorrelações, mas faz com que diminua a amplitude das oscilações.

Figura 6.17: (a) Densidades x_1 e x_3 versus tempo t ; (b) Autocorrelações C_{11} e C_{33} das séries temporais das densidades x_1 e x_3 e correlação cruzada C_{13} de ambas as séries versus tempo de atraso τ . Resultados para $r_1 = 0,70$ e $r_2 = 0,96$ para o modelo definido em uma rede de aresta lateral $L = 40$.

Figura 6.18: (a) Densidades x_1 e x_3 versus tempo t ; (b) Autocorrelações C_{11} e C_{33} das séries temporais das densidades x_1 e x_3 e correlação cruzada C_{13} de ambas as séries versus tempo de atraso τ . Resultados para $r_1 = 0,70$ e $r_2 = 0,96$ para o modelo definido em uma rede de aresta lateral $L = 80$.

Figura 6.19: Densidade espectral das séries temporais das densidades x_1 e x_3 em função da frequência, em escala linear em (a) e logarítmica em (b). Gráficos para os parâmetros $s = 0$ e $r_1 = 0,70$ e $r_2 = 0,96$.

Diversos outros parâmetros também apresentam oscilações nas séries temporais, cujos gráficos não são expostos aqui por basicamente não acrescentarem mais informação à análise do que as que já apresentamos aqui.

6.6.3 Densidade média de CA e CB sobre a linha de parâmetros $s = 0$ e $r_1 = r_2$

Tomando a média de diversas simulações, obtivemos a densidade média $\langle x_1 \rangle$ e $\langle x_3 \rangle$ referentes aos estados CA e CB .

Na figura 6.20, apresentamos um gráfico comparando resultados das densidades médias obtidas por aproximações de campo médio e por simulações de Monte Carlo sobre a linha $s = 0$ e $r_1 = r_2$, ou seja, sobre a linha $a = c$ e $b = d$. Notamos que, como de costume, a fase ativa nas simulações de Monte Carlo para o modelo definido na rede quadrada é menor do que na aproximação de campo médio com pares, que por sua vez é menor do que na aproximação de campo médio simples.

Figura 6.20: Densidades médias $\langle x \rangle = \langle x_1 \rangle = \langle x_2 \rangle$ versus $r = r_1 = r_2$ para $s = 0$.

6.7 Conclusão

Introduzimos um modelo estocástico de quatro estados para a dinâmica estocástica de duas espécies biológicas e dois nichos ecológicos. O modelo possui quatro estados CA , CB , NA e NB , que interpretamos como colônias do tipo A e B , e nichos “desocupados” dos tipos A e B . Supusemos que os recursos que as colônias necessitam são diferentes bem como as formas como elas alteram o ambiente são distintas. Assim sendo, as regras de transição do modelo que definimos são tais que em um nicho “desocupado” do tipo $A(B)$ há a possibilidade de proliferação de uma colônia $A(B)$ devido à presença na vizinhança de colônias do tipo $A(B)$. Eventualmente uma colônia $A(B)$ não pode mais sobreviver na região pois cessam os recursos, mas a colônia do tipo $B(A)$ pode, já que utiliza recursos distintos. Logo uma colônia do tipo $A(B)$ pode desaparecer espontaneamente deixando no seu lugar um nicho do tipo $B(A)$ “desocupado”. As soluções ativas dentro dessa interpretação são as soluções em que há coexistência de colônias e as inativas são aquelas em que há extinção.

Na aproximação de campo médio simples, obtivemos as soluções estacionárias ativa e absorvente. Encontramos a linha de transição entre as fases ativa

e inativa no diagrama de fase $r_1 - r_2$ e a expressão que fornece a separação dentro da região ativa das soluções em que existem oscilações transientes e das que não existem. Esses resultados estão mostrados, respectivamente, nas equações (6.22), (6.25) e (6.38).

Encontramos a solução estacionária para as equações obtidas da aproximação de campo médio com pares sobre a linha $s = 0$ e $r_1 = r_2$, ou seja, na linha em que $a = c$ e $b = d$, a qual está apresentada nas equações (6.80-6.85). Para obtermos a linha de transição completa de acordo com aproximação de campo médio de pares, encontramos os pontos fixos numericamente e analisamos sua estabilidade de forma a determinar em que região as soluções ativas são estáveis. Fizemos uma análise numérica dos autovalores, a partir da qual determinamos as regiões em que há oscilações transientes. O diagrama de fase obtido para as aproximações de campo médio simples e com pares está apresentado na figura 6.4.

Em outra abordagem tratamos o problema com base na equação mestra do tipo “nascimento e morte” associada ao modelo (6.94). A expansão dessa equação para valores grandes do tamanho total da população N gera uma equação de Fokker-Plack (6.105) que é associada a conjunto de equações de Langevin (6.106). No limite em que $N \rightarrow \infty$, resta apenas a parte determinística das equações de Langevin, as quais se reduzem às equações obtidas da aproximação de campo médio simples (6.17-6.20). Todavia, populações reais são finitas, de modo que podemos considerar em algumas análises valores de N grandes, porém finitos, para descrevê-las. Fazendo simulações para a equação mestra de “nascimento e morte” para alguns conjuntos de parâmetros, encontramos algumas soluções em que as autocorrelações apresentam oscilações amortecidas, com amplitude convergindo para zero para tempos de atraso longos, o que caracteriza o comportamento de quasi-ciclo com perda de fase [16], no qual existem oscilações com ruído. Isso é consistente com o fato de que as soluções das equações de campo médio apresentam oscilações amortecidas (pontos fixos que são focos) e a introdução de ruído impede que as soluções converjam para o foco, gerando oscilações não amortecidas. Para outros conjuntos de parâmetros, todavia, a autocorrelação é apenas uma exponencial pura, e nesses casos as flutuações são constituídas apenas de ruído. A análise

da densidade espectral foi consistente com a análise das autocorrelações.

Fazendo simulações de Monte Carlo para o modelo definido na rede quadrada novamente encontramos alguns conjuntos de parâmetros em que há oscilações com ruído, pois mais uma vez obtivemos autocorrelações apresentam oscilações amortecidas, com amplitude convergindo para zero para tempos de atraso longos, típicas do comportamento denominado quasi-ciclo com perda de fase. Já para outros conjuntos de parâmetros, as autocorrelações são exponenciais puras, casos em que as flutuações são constituídas apenas de ruído.

Definimos o modelo buscando verificar se é possível gerar cenários em que existem oscilações das populações das espécies e alternância de dominância entre as espécies, pois essas características estão presentes em muitos sistemas [25, 26, 103–105]. Com efeito, concluímos que o modelo possui elementos suficientes para encontrarmos essas características nas séries temporais das densidades de colônias. Tanto nas análises feitas a partir da equação mestra do tipo “nascimento e morte”, quanto nas realizadas através das simulações de Monte Carlo para o modelo definido na rede quadrada, encontramos conjuntos de parâmetros em que há oscilações. Para alguns conjuntos de parâmetros que oscilam em torno da mesma média ou de médias próximas ora a densidade de colônias do tipo A é maior, ora a densidade x_3 de colônias do tipo B é maior. Já para conjuntos de parâmetros em que as médias são claramente distintas, a densidade de uma das colônias é sempre maior do que da outra. Além disso, tanto para oscilações em torno de médias próximas quanto para oscilações em torno de médias distantes, frequentemente quando a densidade $x_1(x_3)$ de colônias do tipo $A(B)$ cresce, a densidade de colônias $x_3(x_1)$ do tipo $B(A)$ decresce, ou seja, ocorre alternância de dominância entre as espécies.

Convém ressaltar que no sentido de entender o papel do ruído nas oscilações a abordagem da equação mestra do tipo “nascimento e morte” é mais simples e suficiente para a compreensão do fenômeno, sendo mais apropriada para esta análise. Por outro lado quando se quer considerar a distribuição espacial das colônias faz-se necessário um modelo espacialmente estruturado.

Por fim, para o modelo estocástico espacialmente estruturado obtivemos resultados por meio de simulações de Monte Carlo para o caso em que os

parâmetros são $s = 0$ e $r = r_1 = r_2$ (linha diagonal no diagrama $r_1 - r_2$); de modo que apresentamos a comparação dos resultados para as densidades médias advindos das aproximações de campo médio e da simulação do modelo definido na rede quadrada (figura 6.20). Verificamos que a fase ativa nas simulações de Monte Carlo para o modelo definido na rede quadrada é menor do que na aproximação de campo médio com pares, que por sua vez é menor do que na aproximação de campo médio simples.

Capítulo 7

Dinâmica estocástica para duas espécies biológicas e dois nichos ecológicos incluindo difusão

Neste capítulo apresentamos a investigação da dinâmica estocástica para duas espécies biológicas e dois nichos ecológicos (definida no capítulo 6), incluindo um processo de difusão local.

A dispersão, isto é, a movimentação dos elementos biológicos pelo espaço disponível, é uma questão importante na descrição de dinâmicas de populações biológicas como tem sido ressaltado por vários autores [22, 26, 104, 121]. Portanto, entendemos que é relevante levarmos em conta no nosso modelo (definido no capítulo 6) o processo de difusão, o qual fornece mobilidade às colônias e aos recursos disponíveis.

Investigamos o modelo para o caso unidimensional por meio de simulações de Monte Carlo. Primeiramente apresentamos resultados de simulações de séries temporais. Nesta parte do trabalho novamente o foco está em verificar se o modelo é capaz de gerar cenários em que há oscilações das populações das espécies e alternância de dominância. Analisamos também retratos dos estados da rede para instantes subsequentes. Mostramos ainda os resultados obtidos da média de diversas simulações de Monte Carlo. Esses resultados são importantes nas transições de fase de não-equilíbrio no modelo. Obtivemos o

diagrama de fase do modelo e a classe de universalidade a que pertence.

7.1 Definição

Na dinâmica estocástica para duas espécies biológicas e dois nichos ecológicos incluindo difusão consideramos os mesmos estados do modelo definido no capítulo 6. Já nas regras de transição, adicionamos o processo de difusão local entre sítios vizinhos, desse modo, a cada instante de tempo um sítio é sorteado aleatoriamente, em seguida,

1. com probabilidade μ ocorre difusão;
2. caso não ocorra difusão, então:
 - (a) se o sítio escolhido está ocupado por um elemento NA , este pode se tornar um elemento CA , com probabilidade an_{CA}/ζ , em que n_{CA} é o número de vizinhos no estado CA na primeira vizinhança;
 - (b) se sítio escolhido está ocupado por um elemento CA , este pode se tornar espontaneamente um elemento NB , com probabilidade b ;
 - (c) se o sítio escolhido está ocupado por um elemento NB , este pode se tornar um elemento CB , com probabilidade cn_{CB}/ζ , em que n_{CB} é o número de vizinhos no estado CB na primeira vizinhança;
 - (d) se o sítio escolhido está ocupado por um elemento CB , este pode se tornar espontaneamente um elemento NA , com probabilidade d .

A normalização passa então a ser $\mu + (1 - \mu)(a + b + c + d) = 1$. Nossas simulações foram feitas para $\mu = 1/2$.

7.2 Simulações de Monte Carlo

Nesta seção apresentamos o algoritmo e os resultados das simulações de Monte Carlo para o modelo incluindo difusão em uma rede unidimensional. Assim como no capítulo 6, denotamos por x_1 e x_3 as densidades de sítios

nos estados CA e CB , as quais podem ser entendidas como as densidades de colônias dos tipos A e B . Apresentamos resultados sobre as séries temporais obtidas de simulações de uma rodada, feitas para identificarmos se o modelo apresenta oscilações das densidades das populações das espécies e alternância de dominância entre estas. Mostramos também resultados das simulações no estado estacionário nas quais tomamos médias de várias rodadas, feitas para obtenção do diagrama de fase e da classe de universalidade do modelo.

7.2.1 Algoritmos

Os algoritmos dos dois tipos de simulações realizados possuem uma base comum, são diferentes os dados armazenados e o número de rodadas realizadas.

Representamos a rede por um vetor, cada posição do vetor representa um sítio da rede. Os números 0, 1, 2 e 3 ficam associados aos estados NA , CA , NB e CB .

1. Condição inicial: implementar uma rede unidimensional L sítios, em que cada sítio tem seu estado inicial sorteado e todos estados possuem à mesma probabilidade de serem sorteados.
2. Condições de contorno: periódicas.
3. Uma iteração: sortear um sítio i da rede aleatoriamente e um número aleatório $\theta \in [0,1]$.
 - (a) Se $\theta < 1/2$, ocorre difusão, ou seja, troca-se estado do sítio i e do sítio $i + 1$
 - (b) Se $\theta \geq 1/2$: sortear um número aleatório $\tilde{\theta}$ e seguir o seguinte procedimento
 - i. se o sítio i está no estado NA (0), calcula-se o número n_{CA} de primeiros vizinhos no estado CA (1). Se $\tilde{\theta} < \frac{an_{CA}}{2}$ então o sítio i passa para o estado CA (1).
 - ii. se o sítio i está no estado CA (1), se $\tilde{\theta} < b$, então o sítio i passa para o estado NB (2).

- iii. se o sítio i está no estado NB (2), calcula-se o número n_{CB} de primeiros vizinhos no estado CB (3). Se $\tilde{\theta} < \frac{cn_{CB}}{2}$, então o sítio i passa para o estado CB (3).
- iv. se o sítio i está no estado CB (3), se $\tilde{\theta} < d$ então o sítio i passa para o estado NA (0).
- (c) Mantém-se um contador do número de sítios no estado CA (1). Se esse contador vai a zero, sorteia-se um sítio j , se o sítio j não estiver no estado CB (3) o sítio j passa para o estado CA (1).
- (d) Mantém-se um contador do número de sítios no estado CB (3), se esse contador vai a zero, sorteia-se um sítio j , se o sítio j não tiver no estado CA (1) o sítio j passa para o estado CB (3).
- 4. A cada L iterações considera-se completo um passo de Monte Carlo.
- 5. Transiente: são feitas simulações em que o sistema evolui mas não são armazenadas grandezas a cada passo de Monte Carlo.
- 6. Nas simulações de uma rodada, após o transiente, a cada passo de Monte Carlo salva-se as densidades de cada estado.
- 7. Nas simulações que são médias de várias rodadas, para cada rodada primeiramente descarta-se o transiente, e então a cada passo de Monte Carlo acumula-se as grandezas de interesse. Por fim, as grandezas acumuladas são divididas número de passos de Monte Carlo realizados após o transiente. Repete-se todo esse processo um determinado número de vezes e são tomadas médias dos dados obtidos de cada rodada.

7.2.2 Análise de séries temporais e correlações

Em todas as simulações descartamos um transiente de 10^6 passos de Monte Carlo. As simulações foram feitas para redes de L sítios, com $L = 1600$ e $L = 3200$. Da mesma forma que no capítulo 6, primeiramente apresentamos alguns resultados sobre a linha $s = 0$ e $r_1 = r_2$, ou seja, sobre a linha em que $a = c$ e $b = d$, em seguida mostramos alguns exemplos para $s = 0$ e $r = r_1 \neq r_2$, isto é, para $a + b = c + d$, mas $a \neq c$ e/ou $b \neq d$.

Caso especial $s = 0$ e $r = r_1 = r_2$

Nas figuras 7.1 e 7.2 apresentamos, para redes unidimensionais de tamanhos $L = 1600$ e $L = 3200$, respectivamente, a densidade x_1 *versus* tempo t ; a autocorrelação C_{11} da série temporal da densidade x_1 *versus* tempo de atraso τ ; e a correlação cruzada C_{13} das séries temporais das densidades x_1 e x_3 *versus* tempo de atraso τ , para diversos valores de $r = r_1 = r_2$.

Comparando os resultados para as redes unidimensionais de tamanhos $L = 1600$ e $L = 3200$ verificamos que, mais uma vez, aumentar o tamanho da rede, diminui a amplitude das flutuações, mas não altera a função de autocorrelação. As diferenças nas amplitudes das flutuações são menores do que as vistas no capítulo anterior, porque na rede unidimensional quando dobramos o tamanho da rede L , dobramos o número de sítios, já na rede quadrada, quando dobramos a aresta lateral da rede L , quadruplicamos o número de sítios.

Da mesma forma que vimos nas simulações para o modelo sem difusão definido rede quadrada, observamos nas figuras 7.1-b e 7.2-b que a autocorrelação temporal C_{11} , para valores menores de r , apresenta oscilações amortecidas (comportamento denominado quasi-ciclo com perda de fase, no qual há oscilações com ruído); conforme r aumenta, o decaimento da amplitude da autocorrelação C_{11} passa a ser cada vez mais rápido, até que para valores suficientemente altos de r a autocorrelação passa a ser uma exponencial pura (regime em que só existem flutuações e não há oscilações). Outra vez, vale mencionar que, embora não tenhamos mostrado no gráfico, para valores ainda menores de r o sistema cai no estado absorvente não apresentando oscilações.

Portanto, também no modelo unidimensional incluindo difusão, há conjuntos de parâmetros em que existem oscilações com ruído e outros em que há somente ruído. Frisamos aqui que existirem conjuntos de parâmetros para os quais há oscilações é uma das características essenciais que procuramos reproduzir com este modelo do ponto de vista da modelagem de coexistência de espécies.

Em particular, apresentamos aqui mais detalhes sobre um dos conjuntos de parâmetros sobre essa linha, a saber, $s = 0$ e $r_1 = r_2 = 0,80$, para analisarmos

como as densidades x_1 e x_3 estão relacionadas.

Nas figuras 7.3-a e 7.4-a mostramos as densidades x_1 e x_3 *versus* tempo t , para redes de tamanhos $L = 1600$ e 3200 , respectivamente. Notamos que, mais uma vez, como as densidades oscilam em torno da mesma média, ora temos $x_1 > x_3$, ora $x_3 > x_1$. Além disso, também verificamos que, frequentemente, quando a densidade $x_1(x_3)$ cresce, a densidade $x_3(x_1)$ decresce. Recordamos que a segunda característica é muito relevante, pois, tendo em vista que x_1 e x_3 podem ser entendidas como as densidades de colônias dos tipos A e B , significa que modelo possui conjuntos parâmetros para os quais há alternância de dominância entre as espécies.

Nas figuras 7.3-b e 7.4-b apresentamos as autocorrelações das séries temporais x_1 e x_3 , bem como a correlação cruzada entre estas. As autocorrelações de ambas as séries são essencialmente as mesmas, e a correlação cruzada apresenta comportamento análogo. A partir das autocorrelações estimamos um período típico $160(10)$ passos de Monte Carlo.

Lembramos que a amplitude das oscilações diminui com o tamanho da rede porque as oscilações existentes são locais, ou seja, o sistema todo não oscila com a mesma fase, o que leva a uma diminuição na amplitude da oscilação das densidades quando o sistema é considerado como um todo. Já as autocorrelações permanecem as mesmas para diferentes tamanhos de rede, pois ainda que o sistema não esteja todo em fase, existe uma frequência característica das oscilações que a função de autocorrelação é capaz de detectar.

Figura 7.1: (a) Densidade x_1 versus tempo; (b) Autocorrelação para a série temporal de x_1 em função do tempo de atraso τ ; (c) Correlação cruzada das séries temporais das densidades x_1 e x_3 versus tempo de atraso τ . Resultados obtidos para rede unidimensional de tamanho $L = 1600$. Para todas as curvas $s = 0$ e os valores de $r = r_1 = r_2$ estão indicados na figura.

Figura 7.2: a) Densidade x_1 versus tempo; (b) Autocorrelação para a série temporal de x_1 em função do tempo de atraso τ ; (c) Correlação cruzada das séries temporais das densidades x_1 e x_3 versus tempo de atraso τ . Resultados obtidos para rede unidimensional de tamanho $L = 3200$. Para todas as curvas $s = 0$ e os valores de $r = r_1 = r_2$ estão indicados na figura.

Figura 7.3: (a) Densidades x_1 e x_3 versus tempo t ; (b) Autocorrelações C_{11} e C_{33} e correlação cruzada C_{13} para as séries temporais das densidades x_1 e x_3 em função do tempo de atraso τ . Os valores dos parâmetros são $s = 0$ e $r_1 = r_2 = 0,80$, tamanho da rede $L = 1600$.

Figura 7.4: (a) Densidades x_1 e x_3 versus tempo t ; (b) Autocorrelações C_{11} e C_{33} e correlação cruzada C_{13} para as séries temporais das densidades x_1 e x_3 em função do tempo de atraso τ . Os valores dos parâmetros são $s = 0$ e $r_1 = r_2 = 0,80$, tamanho da rede $L = 3200$.

Dois exemplos para $s = 0$ e $r = r_1 \neq r_2$

Primeiramente apresentamos resultados para o caso em que $r_1 = 0,80$ e $r_2 = 0,82$. Nas figuras 7.5-a e 7.6-a apresentamos as densidades x_1 e x_3 *versus* tempo t , para redes de tamanhos $L = 1600$ e 3200 , respectivamente. Já nas figuras 7.5-b e 7.6-b mostramos as autocorrelações das séries temporais x_1 e x_3 , bem como a correlação entre estas como função do tempo de atraso τ , para redes de tamanhos $L = 1600$ e 3200 , respectivamente.

As autocorrelações novamente possuem oscilações amortecidas, com amplitude convergindo a zero para tempos longos, caracterizando o comportamento de quasi-ciclo com perda de fase já discutido [16]. Logo, nesse caso também temos oscilações na presença de ruído. Estimamos um período típico de 162(9) passos de Monte Carlo. Nas séries temporais, mais uma vez, vemos que frequentemente quando a densidade $x_1(x_3)$ cresce, a densidade $x_3(x_1)$ decresce, para estes parâmetros as oscilações são em torno de médias distintas, mas ainda relativamente próximas.

Apresentamos também o caso em que $r_1 = 0,80$ e $r_2 = 0,85$. Nas figuras 7.7-a e 7.8-a apresentamos as densidades x_1 e x_3 *versus* tempo t , para redes de tamanhos $L = 1600$ e 3200 , respectivamente. Já nas figuras 7.7-b e 7.8-b apresentamos as autocorrelações das séries temporais x_1 e x_3 , bem como a correlação cruzada de ambas densidades x_1 e x_3 em função do tempo de atraso τ , para redes de tamanhos $L = 1600$ e 3200 , respectivamente.

As autocorrelações, outra uma vez, possuem oscilações amortecidas, caracterizando o comportamento de quasi-ciclo com perda de fase [16], no qual coexistem oscilações e ruído. Estimamos um período típico de 180(10) passos de Monte Carlo. Nesse caso, as médias são bastante distintas e claramente $x_3 > x_1$, ainda assim, frequentemente quando a densidade $x_1(x_3)$ cresce, a densidade $x_3(x_1)$ decresce.

Das comparações entre as figuras 7.5 e 7.6, e entre as figuras 7.7 e 7.8, vemos, mais uma vez, que aumentar o tamanho da rede em nada altera as correlações, mas diminui a amplitude das flutuações.

Figura 7.5: (a) Densidades x_1 e x_3 *versus* tempo t ; (b) Autocorrelações C_{11} e C_{33} das séries de x_1 e x_3 e correlação cruzada C_{13} de ambas as séries *versus* tempo de atraso τ . Resultados para os parâmetros $s = 0$ $r_1 = 0,80$ e $r_2 = 0,82$ e rede unidimensional de tamanho $L = 1600$.

Figura 7.6: (a) Densidades x_1 e x_3 *versus* tempo t ; em (b) autocorrelações C_{11} e C_{33} das séries de x_1 e x_3 e correlação cruzada C_{13} de ambas as séries *versus* tempo de atraso τ . Resultados para os parâmetros $s = 0$ $r_1 = 0,80$ e $r_2 = 0,82$ e rede unidimensional de tamanho $L = 3200$.

Figura 7.7: (a) Densidades x_1 e x_3 versus tempo t ; (b) Autocorrelações C_{11} e C_{33} das séries de x_1 e x_3 e correlação cruzada C_{13} de ambas as séries versus tempo de atraso τ . Resultados para os parâmetros $s = 0$ $r_1 = 0,80$ e $r_2 = 0,85$ e rede unidimensional de tamanho $L = 1600$.

Figura 7.8: (a) Densidades x_1 e x_3 versus tempo t ; (b) Autocorrelações C_{11} e C_{33} das séries de x_1 e x_3 e correlação cruzada C_{13} de ambas as séries versus tempo de atraso τ . Resultados para os parâmetros $s = 0$ $r_1 = 0,80$ e $r_2 = 0,85$ e rede unidimensional de tamanho $L = 1600$.

Sumarizando, encontramos, para diferentes conjuntos de parâmetros, os mesmos tipos de comportamentos para processo do tipo “nascimento e morte”, para o modelo definido na rede quadrada sem difusão, e para o modelo com difusão definido na rede unidimensional. Isto é, para determinados conjuntos de parâmetros há oscilações com ruído e para outras apenas ruído. Nas soluções em que há oscilações, também verificamos que quando a densidade $x_1(x_3)$ cresce, a densidade $x_3(x_1)$ decresce, de forma que, interpretando x_1 e x_3 como densidades de colônias dos tipos A e B , podemos dizer que ocorre alternância de dominância entre as espécies.

7.2.3 Grandezas de interesse nas simulações no estado estacionário

Nas simulações de Monte Carlo em que tomamos as médias de várias rodadas calculamos:

1. as médias densidades de sítios nos estados CA (1) e CB (3), denotadas por $\langle x_1 \rangle$ e $\langle x_3 \rangle$;
2. as médias do quadrado das densidades de sítios nos estados CA (1) e CB (3) chamadas de $\langle x_1^2 \rangle$ e $\langle x_3^2 \rangle$;
3. os cumulantes $\langle x_1^2 \rangle / \langle x_1 \rangle^2$ e $\langle x_3^2 \rangle / \langle x_3 \rangle^2$;
4. as variâncias $\chi_1 = L(\langle x_1 \rangle^2 - \langle x_1^2 \rangle)$ e $\chi_3 = L(\langle x_3 \rangle^2 - \langle x_3^2 \rangle)$.

Convém notar que o cumulante de segunda ordem de x_1 é $\kappa_2(x_1) = \langle x_1^2 \rangle - \langle x_1 \rangle^2$ e o de primeira $\kappa_1(x_1) = \langle x_1 \rangle$, assim o cumulante que calculamos se relaciona com esses cumulantes da seguinte forma

$$\frac{\langle x_1^2 \rangle}{\langle x_1 \rangle^2} = \frac{\kappa_2(x_1)}{\kappa_1^2(x_1)} + 1. \quad (7.1)$$

Analogamente,

$$\frac{\langle x_3^2 \rangle}{\langle x_3 \rangle^2} = \frac{\kappa_2(x_3)}{\kappa_1^2(x_3)} + 1. \quad (7.2)$$

A razão $\frac{\kappa_2}{\kappa_1^2}$ denomina-se cumulante de segunda ordem reduzido.

Para investigar a qual classe de universalidade pertence o modelo fizemos, primeiramente, simulações sobre a linha em que $r_1 = r_2$ e $s = 0$, ou seja, sobre linha em que $a = c$ e $b = d$. Sobre esta linha, no estado estacionário, temos que (i) as médias das densidades de sítios nos estados $CA(1)$ e $CB(3)$ são as mesmas, ou seja, $\langle \bar{x} \rangle = \langle x_1 \rangle = \langle x_3 \rangle$ e (ii) as médias dos quadrados das densidades de sítios nos estados $CA(1)$ e $CB(3)$ também são as mesmas, isto é, $\langle \bar{x}^2 \rangle = \langle x_1^2 \rangle = \langle x_3^2 \rangle$.

Nossa hipótese é de que o modelo seja da classe de universalidade da percolação direcionada. Se este for o caso, valem as relações de escala

$$\frac{\langle \bar{x}^2 \rangle}{\langle \bar{x} \rangle^2} = \Psi_0(L^{1/\nu_\perp} \epsilon), \quad (7.3)$$

$$\langle \bar{x} \rangle = L^{-\beta/\nu_\perp} \Psi_1(L^{1/\nu_\perp} \epsilon), \quad (7.4)$$

$$\chi = L(\langle \bar{x} \rangle^2 - \langle \bar{x}^2 \rangle) = L^{\gamma'/\nu_\perp} \Psi_2(L^{1/\nu_\perp} \epsilon). \quad (7.5)$$

Dessa forma, o cumulante $\langle \bar{x}^2 \rangle / \langle \bar{x} \rangle^2$ deve apresentar um cruzamento no ponto crítico, de modo que pode ser utilizado para o estudo transição de fase. No artigo [52], por exemplo, o estudo da transição de fase no processo de contato unidimensional foi feito através da análise do cumulante de segunda ordem reduzido. Além disso, das relações de escala (7.4) e (7.5), respectivamente, temos que, sobre o ponto crítico, $\ln(\langle \bar{x} \rangle)$ versus $\ln L$ forma reta de inclinação $-\beta$ e $\ln \chi = \ln(L(\langle \bar{x} \rangle^2 - \langle \bar{x}^2 \rangle))$ versus $\ln L$ forma uma reta de inclinação γ' .

7.2.4 Simulações no estado estacionário

Resultados para $s = 0$ e $r = r_1 = r_2$

Primeiramente apresentamos resultados sobre a linha $s = 0$ e $r = r_1 = r_2$, ou seja, sobre a linha em que $a = c$ e $b = d$. Na figura 7.9-a apresentamos a densidade $\langle \bar{x} \rangle = \langle x_1 \rangle = \langle x_3 \rangle$ em função de r . Já nas figuras 7.9-b e 7.9-c mostramos o cumulante $\langle \bar{x}^2 \rangle / \langle \bar{x} \rangle^2 = \langle x_1^2 \rangle / \langle x_1 \rangle^2 = \langle x_3^2 \rangle / \langle x_3 \rangle^2$ em função de r , sendo a última figura uma ampliação na região em que ocorre o cruzamento. Os

resultados apresentados na figura 7.9 são para redes relativamente pequenas, mas que já fornecem o comportamento das curvas, o cumulante $\langle \bar{x}^2 \rangle / \langle \bar{x} \rangle^2$ apresenta um cruzamento para todos os tamanhos de rede, e o parâmetro de ordem $\langle \bar{x} \rangle$ apresenta duas regiões distintas, para valores pequenos de r quanto maior o tamanho da rede mais próximo de zero tornam-se as curvas e para valores grandes de r as curvas convergem para a mesma função.

Nos gráficos das figuras 7.10, 7.11 e 7.12 apresentamos resultados para parâmetros mais próximos do ponto crítico para redes maiores considerando médias de 100 simulações de 10^8 passos de Monte Carlo e transiente de 10^7 passos de Monte Carlo.

Na figura 7.10 apresentamos o gráfico do cumulante $\langle \bar{x}^2 \rangle / \langle \bar{x} \rangle^2 = \langle x_1^2 \rangle / \langle x_1 \rangle^2 = \langle x_3^2 \rangle / \langle x_3 \rangle^2$ na região mais próxima ao ponto onde ocorre o das curvas para cruzamento para $\langle \bar{x}^2 \rangle / \langle \bar{x} \rangle^2$. Nesse caso consideramos redes de tamanhos entre 320 e 20480. Isto é, consideramos redes de tamanhos suficientemente grandes. Desse gráfico estimamos que o ponto crítico sobre a linha $s = 0$ e $r_1 = r_2$ assume o valor $r_c = 0,73970(2)$.

Na figura 7.11 apresentamos $\ln(\langle \bar{x} \rangle) = \ln(\langle x_1 \rangle) = \ln(\langle x_3 \rangle)$ e $\ln[L(\langle \bar{x} \rangle^2 - \langle \bar{x}^2 \rangle)] = \ln[L(\langle x_1 \rangle^2 - \langle x_1^2 \rangle)] = \ln[L(\langle x_3 \rangle^2 - \langle x_3^2 \rangle)]$ como função de $\ln(L)$ para diversos pontos próximos ao ponto crítico. No ponto crítico espera-se $\ln(\langle \bar{x} \rangle)$ *versus* $\ln L$ e $\ln(L(\langle \bar{x} \rangle^2 - \langle \bar{x}^2 \rangle))$ *versus* $\ln L$ formem retas. Desses gráficos já notamos que para os parâmetros $r = 0,73969$, $r = 0,73970$ e $r = 0,73970$ ajustes de retas são possíveis.

Na figura 7.12 apresentamos $\ln(\langle \bar{x} \rangle) = \ln(\langle x_1 \rangle) = \ln(\langle x_3 \rangle)$ e $\ln[L(\langle \bar{x} \rangle^2 - \langle \bar{x}^2 \rangle)] = \ln[L(\langle x_1 \rangle^2 - \langle x_1^2 \rangle)] = \ln[L(\langle x_3 \rangle^2 - \langle x_3^2 \rangle)]$ *versus* $\ln(L)$ para os parâmetros $r = 0,73969$, $r = 0,73969$, $r = 0,73970$ e $r = 0,73971$, retirando as duas redes de menor tamanho. As retas na figura são os resultados dos ajustes lineares feitos.

Destes ajustes concluímos que no ponto crítico $r_c = 0,73970(2)$ temos $\beta/\nu_\perp = 0,252(5)$ e $\gamma/\nu_\perp = 0,488(10)$, valores compatíveis com os valores dos expoentes para o modelo da percolação direcionada definido em uma rede unidimensional $\beta/\nu_\perp = 0,25207(1)$ e $\gamma/\nu_\perp = 0,49586(1)$ [2].

Figura 7.9: Em (a), $\langle \bar{x} \rangle = \langle x_1 \rangle = \langle x_3 \rangle$ versus $r = r_1 = r_2$; em (b), cumulante $\frac{\langle \bar{x}^2 \rangle}{\langle \bar{x} \rangle^2}$ versus $r = r_1 = r_2$; em (c), ampliação do gráfico apresentando em (b) na região do cruzamento.

Figura 7.10: $\frac{\langle \bar{x}^2 \rangle}{\langle \bar{x} \rangle^2}$ versus $r = r_1 = r_2$ na região próxima ao cruzamento para redes de tamanhos entre 320 e 20480.

Figura 7.11: (a), $\ln(\langle \bar{x} \rangle)$ versus $\ln L$; (b) $\ln(L(\langle \bar{x}^2 \rangle - \langle \bar{x} \rangle^2))$ versus $\ln L$.

Figura 7.12: (a) $\ln(\langle \bar{x} \rangle)$ versus $\ln L$; (b) $\ln L(\langle \bar{x}^2 \rangle - \langle \bar{x} \rangle^2)$ versus $\ln L$. Ambos gráficos feitos para parâmetros próximos do ponto crítico. As retas nos gráficos são resultados dos ajustes lineares feitos.

Resultados para r_1 fixo no plano $s = 0$.

Para construirmos o diagrama de fase fizemos simulações para diversos valores de r_1 fixados, para cada r_1 fixado podemos determinamos o ponto crítico r_{2c} encontrando o valor de r_{2c} em que o cumulante $\langle x_1^2 \rangle / \langle x_1 \rangle^2$ apresenta um cruzamento para todos os tamanhos de rede. Usamos para isso redes de 320 até 20480.

Não apresentamos aqui os gráficos para cada um dos valores de r_1 fixado, pois são semelhantes, exemplificamos com os gráficos para $r_1 = 0,85$. Na figura 7.13-a mostramos a densidade $\langle x_1 \rangle$ versus r_2 , na figura 7.13-(b), o cumulante $\frac{\langle x_1^2 \rangle}{\langle x_1 \rangle^2}$ versus r_2 , e na figura 7.13-(c) a ampliação do gráfico apresentando em 7.13-(b) na região do cruzamento.

Do cruzamento do cumulante $\frac{\langle x_1^2 \rangle}{\langle x_1 \rangle^2}$ estimamos que o ponto crítico sobre a reta $r_1 = 0,85$ assume o valor $r_{2c} = 0,6969(1)$. Para $r_2 < r_{2c}$ temos a fase absorvente, na qual quanto maior a rede, mais próximo de zero a densidade $\langle x_1 \rangle$ torna-se; já para $r_2 > r_{2c}$ temos a fase ativa, na qual a densidade $\langle x_1 \rangle$ não se anula, e portanto, há coexistência dos estados CA(1) e CB(3).

A fase ativa é a em que existe um estado ativo no qual coexistem sítios nos estados $CA(1)$ e $CB(3)$ e a fase absorvente é a fase em que deixam de ocorrer transições e não há sítios nos estados CA e CB . Ou seja, a fase ativa é a que há coexistência das colônias dos tipos A e B e a fase absorvente a que há extinção.

Na tabela 7.1 apresentamos para cada r_1 fixado, o valor de r_{2c} para o qual o cumulante $\frac{\langle x_1^2 \rangle}{\langle x_1 \rangle^2}$ apresenta um cruzamento, bem como o valor do próprio cumulante neste cruzamento.

Devemos notar também que existe uma simetria no modelo, pois trocar o conjunto de parâmetros $[a, b, c, d] = [\gamma_1, \gamma_2, \delta_1, \delta_2]$ pelo conjunto de parâmetros $[a, b, c, d] = [\delta_1, \delta_2, \gamma_1, \gamma_2]$ gera um sistema com as mesmas reações apenas trocando os estados $NA(0)$ por $NB(2)$ e $CA(1)$ por $CB(3)$. Em particular, no plano que estamos estudando $s = 0$, fazer essa troca de parâmetros é o mesmo que trocar r_1 por r_2 , ou seja, refletir em relação à diagonal. Portanto, para cada ponto pertencente à linha que separa as fases absorvente e ativa $(r_1, r_2) = (p_1, p_2)$ há outro ponto também pertencente à mesma linha $(r_1, r_2) = (p_2, p_1)$.

Na figura 7.14 apresentamos o diagrama de fase obtido a partir das simulações para r_1 fixo, incluindo também o ponto $(r_1, r_2) = (0,73970(2), 0,73970(2))$, obtido das simulações para $r_1 = r_2$. Lembrando das expressões para a , b , c e d para $s = 0$ dadas na equação 6.6, temos $r_1 = 1 \Rightarrow b = 0$ e $r_2 = 1 \Rightarrow d = 0$, portanto, para $r_1 = 1$ e $r_2 < 1$, dado tempo suficiente não há sítios no estado CB . Analogamente para $r_2 = 1$ e $r_1 < 1$, dado tempo suficiente não há sítios no estado CA ; já se $r_1 = r_2 = 1$, dado tempo suficiente todos os sítios passam a ser CA ou CB . Dessa forma, temos que o ponto $(r_1, r_2) = (1, 1)$ também pertence à linha de transição. Fizemos então uma interpolação a partir dos dados obtidos das simulações e do ponto $(r_1, r_2) = (1, 1)$ apresentada em verde na figura 7.14 para delimitarmos a região ativa. Como método de interpolação utilizamos o B-spline cúbico, escolhemos essa interpolação, pois é uma interpolação relativamente simples que nos garante uma curva suave. De modo simples, um B-spline cúbico é uma interpolação composta de polinômios de ordem 3, cada um valendo para um determinado domínio.

Figura 7.13: (a) Densidade $\langle x_1 \rangle$ versus r_2 ; (b) Cumulante $\frac{\langle x_1^2 \rangle}{\langle x_1 \rangle^2}$ versus r_2 ; (c) Ampliação do gráfico apresentando em (b) na região do cruzamento. Gráficos para a linha em que $s = 0$ e $r_1 = 0,85$. Nesta linha, encontramos para o valor do ponto crítico $r_{2c} = 0,6969(1)$.

Tabela 7.1: Valores para r_{2c} em simulações para r_1 fixo.

r_1	r_{2c}	$\langle x_1^2 \rangle / \langle x_1 \rangle^2$ em r_{2c}
0,75	0,7302(1)	1,23(3)
0,80	0,7020(2)	1,22(7)
0,85	0,6969(2)	1,24(4)
0,90	0,7157(4)	1,25(6)
0,95	0,7688(8)	1,24(6)
0,97	0,8074(26)	1,24(10)

Figura 7.14: Pares (r_1, r_2) pertencentes à linha de transição obtidos pelo cruzamento da grandeza $\frac{\langle x_1^2 \rangle}{\langle x_1 \rangle^2}$, interpolação utilizando método spline dos dados. Fase ativa coexistência dos estados CA e CB interpretados como colônias dos tipos A e B . Fase absorvente: não há coexistência dos estados CA e CB .

7.2.5 Retratos da rede em função do tempo

Fizemos simulações para uma rede de tamanho 160, nas quais a cada passo de Monte Carlo salvamos o estado da rede de modo que pudemos construir gráficos com retratos da rede em função do tempo. Indexando os sítios de 0 a 159, adotamos a seguinte condição inicial:

- $0 < i < 79$ e $i \neq 39$, estado NA , ou seja, $\eta_i = 0$;
- $i = 39$, estado CA , ou seja, $\eta_i = 1$;
- $80 < i < 159$ e $i \neq 119$, estado NB , ou seja, $\eta_i = 2$;
- $i = 119$, estado CB , ou seja, $\eta_i = 3$.

Figura 7.15: Sítios da rede nos estados NA , CA , NB , CB em azul, preto, verde e vermelho, respectivamente, *versus* tempo para $s = 0$ e $r_1 = r_2 = 0,80$, conjunto de parâmetros dentro da região ativa do diagrama de fase.

Interpretando CA e CB como colônias e NA e NB como nichos “desocupados” dos tipos A e B , adotar essa condição inicial é interessante pois podemos observar como são formados os clusters das colônias A e B a partir de uma condição inicial em que há apenas duas pequenas colônias iniciais cercadas de regiões com as condições ambientais das quais necessitam.

Na figura 7.16 apresentamos retratos da rede em função do tempo para $s = 0$ e $r_1 = r_2 = 0,73970$, conjunto de parâmetros pertencente à linha crítica. Na figura 7.15 apresentamos retratos da rede em função do tempo para $s = 0$ e $r_1 = r_2 = 0,80$, conjunto de parâmetros dentro da região ativa do diagrama de fase.

Notamos que para o conjunto de parâmetros pertencente à linha crítica os clusters de colônias são mais esparsos e fragmentado, em ambos os casos apesar de termos adotado uma condição inicial em que as colônias estão bastante separadas após um transiente há colônias dos dois tipos por toda a rede.

Figura 7.16: Sítios da rede nos estados NA , CA , NB , CB em azul, preto, verde e vermelho, respectivamente, *versus* tempo para $s = 0$ e $r_1 = r_2 = 0,73970$, conjunto de parâmetros dentro da região ativa do diagrama de fase.

7.3 Conclusão

Investigamos, através de simulações de Monte Carlo, a dinâmica estocástica de duas espécies biológicas e dois nichos ecológicos incluindo difusão em uma rede unidimensional.

Adicionar difusão ao modelo espacialmente estruturado é uma das maneir-

ras de incluir mais diretamente no modelo a possibilidade de movimentação das populações. Isto é interessante, pois do ponto de vista biológico, a dispersão das populações é uma questão importante para muitos autores [22, 26, 104, 121]. Em [104], por exemplo, é considerada a alternância de dominância entre duas espécies de peixes, sendo, nesse caso, a possibilidade dos elementos moverem-se essencial. Já em [121], é analisada a migração de colônias de formigas em um modelo de rede. No capítulo sobre estrutura de populações do livro “Ecology” [22], é discutida a migração das populações biológicas e a forma como essas ficam distribuídas no espaço. No livro “Ant Ecology” [26] sobre ecologia de formigas, também são discutidas as maneiras com que as colônias de formigas se dispersam.

Nas simulações de uma rodada encontramos resultados qualitativamente iguais aos obtidos para o modelo sem difusão definido na rede quadrada e para o processo de “nascimento e morte”. Mudam os conjuntos de parâmetros, mas continuam existindo dois casos possíveis: (i) um no qual coexistem oscilações e ruído, denominado quasi-ciclo com perda de fase, sendo caracterizado por uma função de autocorrelação que apresenta oscilações amortecidas; (ii) outro no qual as flutuações são constituídas essencialmente de ruído, caracterizado por uma função de autocorrelação com decaimento exponencial puro.

Além disso, encontramos que nas soluções em que existem oscilações frequentemente quando a densidade $x_1(x_3)$ cresce, a densidade $x_3(x_1)$ decresce. Como já notamos no capítulo 6, dentro da interpretação em que x_1 e x_3 são densidades de colônias dos tipos A e B , isso significa que nas soluções em que há oscilações também ocorre alternância de dominância entre as espécies. Vale notarmos que esse comportamento aparece tanto para conjuntos de parâmetros para os quais densidades das populações oscilam em torno de médias iguais ou próximas, quanto para conjuntos de parâmetros para os quais as densidades das populações oscilam em torno de médias distantes. Em particular, no caso em que as médias são próximas, temos que ora $x_1 > x_3$ e ora $x_3 > x_1$.

A partir de simulações de Monte Carlo estacionárias concluímos que a dinâmica estocástica para duas espécies biológicas e dois nichos ecológicos in-

cluindodifusão pertence à classe de universalidade da percolação direcionada. É interessante notar que com a adição do processo de difusão, essa dinâmica se torna um modelo que mesmo em uma dimensão apresenta transição de fase.

A partir das simulações de Monte Carlo em que tomamos médias de diversas rodadas, encontramos o diagrama de fase do modelo apresentado na figura 7.14, pois a transição ocorre nos pontos em que há o cruzamento do cumulante $\langle x_1^2 \rangle / \langle x_1 \rangle^2$ para diversos tamanhos de rede. Devido ao tempo que essas simulações tomam para ser feitas com precisão, $r_1 = 0,97$ foi o maior valor para o qual obtivemos o valor crítico de r_2 . Fizemos também uma interpolação das simulações, tendo em vista que o ponto $(r_1, r_2) = (1, 1)$ pertence à linha de transição. Do ponto de vista biológico a fase ativa é aquela na qual as soluções apresentam coexistência das colônias dos tipos A e B e a fase absorvente é aquela na qual ocorre extinção.

Por fim, apresentamos retratos da rede em função do tempo, para um conjunto de parâmetros sobre a linha crítica e para um conjunto de parâmetros dentro da região ativa. Notamos que na linha crítica as colônias estão mais esparsas e fragmentadas.

Capítulo 8

Conclusões

Nesta tese investigamos modelos irreversíveis motivados por dinâmicas de populações biológicas. Para tanto utilizamos dinâmicas estocásticas, em particular, adotamos as seguintes abordagens (i) modelos estocásticos definidos em redes regulares de N sítios, com evolução temporal dada por uma equação mestra e dinâmica de “um sítio”; (ii) modelos estocásticos caracterizados pelo número de elementos em cada um dos M estados possíveis, com evolução temporal fornecida por uma equação mestra do tipo “nascimento e morte”.

Da perspectiva da mecânica estatística de não-equilíbrio, nossa pesquisa tem como principais objetivos caracterizar os estados estacionários dos modelos irreversíveis estudados, determinar se existem transições de fase e a qual classe de universalidade estes modelos pertencem. Sob o olhar da modelagem de dinâmicas de populações biológicas, buscamos propor e analisar modelos que contenham as características essenciais dos problemas biológicos em que estamos interessados.

O primeiro resultado desta tese é a solução exata do modelo suscetível-infectado-recuperado (SIR) estocástico e definido em uma rede unidimensional, na qual utilizamos o método da função geratriz. Demonstramos, pelas expressões encontradas analiticamente, que não há transição de fase em uma rede unidimensional, o que está de acordo com modelos pertencentes à classe de universalidade da percolação isotrópica usual.

Investigamos também o modelo suscetível-infectado-recuperado com in-

fecção recorrente. Considera-se uma população composta por indivíduos suscetíveis (S), infectados (I) e recuperados/removidos (R). Além dos processos existentes no modelo suscetível-infectado-recuperado (SIR) usual, a saber, o processo catalítico $S \rightarrow I$ e o espontâneo $I \rightarrow R$, neste modelo adiciona-se o processo $I \rightarrow S$ espontâneo. Quando a probabilidade a de o indivíduo tornar-se novamente suscetível é muito maior do que a probabilidade c de o indivíduo tornar-se recuperado/removido, este modelo pode ser pensado como uma modelagem simplificada para uma doença na qual a imunização não ocorre logo após a primeira infecção, de modo que os processos $S \rightleftharpoons I$ ocorrem várias vezes antes de o indivíduo se tornar imune (ou morrer) pelo processo $I \rightarrow R$. Outra interpretação é entender que se trata de uma modelagem para uma doença em que não há imunização, mas que podem ocorrer mortes e ainda assim a possibilidade de o indivíduo curar-se.

Obtivemos o diagrama de fase para o modelo nas aproximações de campo médio simples e com pares, bem como para o modelo definido na rede quadrada através de simulações de Monte Carlo. Concluimos que o modelo pertence à classe de universalidade da percolação isotrópica, salvo quando se anula probabilidade c de o indivíduo recuperar-se, caso no qual o modelo recai no processo de contato, que pertence à classe de universalidade da percolação direcionada. Se entendemos o modelo como o processo de contato, com adição do processo $I \rightarrow R$ com probabilidade c , então c é um parâmetro relevante. Isto é, para $c \neq 0$ o modelo deixa a classe de universalidade da percolação direcionada e passa para a classe de universalidade da percolação isotrópica. Os resultados sobre este modelo estão publicados no artigo [1].

Introduzimos um modelo para uma dinâmica de coexistência de duas espécies biológicas e dois nichos ecológicos, considerando que as duas espécies utilizam recursos diferentes do meio ambiente e alteram-no de formas distintas. O modelo possui quatro estados NA , CA , NB e CB . Na interpretação dentro do contexto de coexistência de duas espécies biológicas entendemos um sítio estar no estado $CA(CB)$, como a região referente a este sítio estar ocupada por uma colônia de um tipo $A(B)$. Além disso, interpretamos um sítio estar no estado $NA(NB)$, como a região referente a este sítio estar com o nicho do tipo $A(B)$ desocupado, ou seja, esta região não possui colônias,

mas apresenta condições ambientais favoráveis à colônia do tipo $A(B)$. As regras de transição do modelo são tais que em um nicho desocupado do tipo $A(B)$ há a possibilidade de proliferação de uma colônia do tipo $A(B)$ devido à presença de vizinhos de colônias do tipo $A(B)$; por outro lado, eventualmente uma colônia do tipo $A(B)$ não pode mais sobreviver na região pois cessam os recursos, mas a colônia do tipo $B(A)$ pode, pois os recursos que esta utiliza são diferentes; logo, uma colônia do tipo $A(B)$ pode desaparecer espontaneamente deixando no seu lugar um nicho do tipo $B(A)$ desocupado.

Fizemos aproximações de campo médio simples e com pares, analisamos a equação mestra do tipo “nascimento e morte” associada ao modelo e realizamos simulações de Monte Carlo para o modelo definido em uma rede quadrada. Nas aproximações de campo médio apenas há oscilações transientes. Já os resultados das simulações de Monte Carlo na rede quadrada e da equação mestra do tipo “nascimento e morte” são qualitativamente os mesmos. Para alguns conjuntos de parâmetros a autocorrelação apresenta oscilações amortecidas; nestes casos temos comportamento denominado quasi-ciclo com perda de fase [16], no qual coexistem oscilações e ruído; já para outros conjuntos de parâmetros, a autocorrelação é apenas uma exponencial pura, casos nos quais as flutuações são constituídas essencialmente de ruído. Além do mais, nas séries temporais nas quais existem oscilações, frequentemente quando a densidade de colônias do tipo $A(B)$ aumenta a do tipo $B(A)$ diminui, ou seja, ocorre alternância de dominância entre as espécies. Em particular, quando essas oscilações ocorrem em torno da mesma média ou de médias próximas, temos que ora a densidade de sítios ocupados pela colônia de uma espécie é maior, ora a de outra é maior. Portanto, concluímos que tanto na abordagem da equação mestra do tipo “nascimento e morte” quanto na das simulações de Monte Carlo para o modelo definido na rede quadrada, o modelo possui mecanismos suficientes para gerar cenários em que existem oscilações das populações e alternância de dominância entre as espécies, características frequentemente encontradas na natureza [25, 26, 103–105].

A abordagem considerando o processo de “nascimento e morte” é mais simples, com simulações que demandam menos tempo, sendo mais apropriada quando o foco é entender a contribuição do ruído estocástico para o

modelo. Verificamos que para os conjuntos de parâmetros em que na aproximação de campo médio simples as soluções possuem oscilações amortecidas (pontos fixos do tipo foco), na abordagem da equação mestra do tipo “nascimento e morte” as soluções apresentam oscilações não amortecidas. Entendemos a razão disto quando lembramos que as equações de Langevin, associadas à equação de Fokker-Planck, obtida no limite de populações grandes da equação mestra do tipo “nascimento morte”, são constituídas das equações da aproximação de campo médio simples mais termos de ruído. Dessa forma, as oscilações não amortecidas surgem porque o ruído impede que as soluções converjam para o ponto fixo.

É interessante ressaltarmos que no modelo definido na rede quadrada as interações são locais, ainda assim ocorrem oscilações das populações das espécies e alternância entre estas. O modelo definido na rede quadrada, apesar de mais complexo, é mais adequado se há interesse na distribuição espacial das colônias.

Investigamos ainda a dinâmica de coexistência de duas espécies biológicas e dois nichos ecológicos com acreção de difusão em uma rede unidimensional. Adicionar difusão ao modelo espacialmente estruturado é uma das maneiras de incluir mais diretamente no modelo a possibilidade de movimentação das populações, o que é interessante, já que ponto de vista biológico a dispersão das populações é uma questão importante para muitos autores [22, 26, 104, 121]. Primeiramente fizemos simulações de Monte Carlo de uma rodada para analisar as oscilações, obtivemos resultados qualitativamente iguais aos do modelo definido na rede quadrada sem difusão e aos do processo do tipo “nascimento e morte”. Depois fizemos simulações em que tomamos médias de diversas rodadas; a partir destas, concluímos que modelo pertence à classe de universalidade da percolação direcionada e encontramos o diagrama de fase.

Desse modo, nesta tese, investigamos modelos estocásticos irreversíveis dentro dos contextos da mecânica estatística de não-equilíbrio e da modelagem das características básicas de algumas dinâmicas de populações biológicas.

Bibliografia

- [1] F. M. Ruziska, T. Tomé, M. J. de Oliveira, “Susceptible–infected–recovered model with recurrent infection”, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* **2017**, 467, 21, [//www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378437116306264](http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378437116306264).
- [2] T. Tomé, M. J. de Oliveira, *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade*, 2^a ed., Edusp, **2014**.
- [3] T. Tomé, M. J. de Oliveira, *Stochastic Dynamics and Irreversibility*, Springer, **2015**.
- [4] T. Tomé, *Tese de livre docência: Irreversibilidade: Modelos de Rede com Dinâmicas Estocásticas*, Instituto de Física da Universidade de São Paulo, **1996**, <http://www.teses.usp.br/teses/disponiveis/livredocencia/43/tde-21072011-093501/pt-br.php>.
- [5] J. Marro, R. Dickman, *Nonequilibrium Phase Transitions in Lattice Models*, 1st, Cambridge University Press, **1999**.
- [6] N. G. Van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*, 3rd ed., Elsevier, **2007**.
- [7] C. Gardiner, *Stochastic Methods, A Handbook for the Natural and Social Sciences*, Springer, **2009**.
- [8] R. B. Schinazi, *Classical and Spatial Stochastic Processes with Applications to Biology*, 2nd. ed., Springer, **2014**.
- [9] H. Risken, *The Fokker-Planck Equation, Methods of Solution and Applications*, 2nd ed., Springer-Verlag, **1989**.

- [10] V. Privman, *Nonequilibrium statistical mechanics in one dimension*, Cambridge University Press, **2005**.
- [11] M. Henkel, H. Hinrichsen, S. Lübeck, *Non-equilibrium Phase Transitions, vol. 1*, Springer, **2008**.
- [12] M. Henkel, M. Pleimling, *Non-Equilibrium Phase Transitions, vol.2*, Springer, **2010**.
- [13] S. Lübeck, "Universal Scaling Behavior of non-equilibrium phase transitions", *International Journal of Modern Physics B* **2004**, 18, 3977, <http://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/S0217979204027748>.
- [14] G. Ódor, "Universality classes in nonequilibrium lattice systems", *Reviews of Modern Physics* **2004**, 76, 663, <http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.76.663>.
- [15] N. T. J. Bailey, *The Elements of Stochastic Processes with Applications to the Natural Sciences*, Wiley, **1964**.
- [16] R. M. Nisbet, W. C. S. Gurney, *Modelling Fluctuating Populations*, Wiley, **1982**.
- [17] R. M. Nisbet, W. C. S. Gurney, *Modelling Fluctuating Populations*, Blackburn Press, **2003**.
- [18] E. P. Odum, *Ecologia*, Editora Guanabara, **1983**.
- [19] A. Hastings, *Population Biology, Concepts and Models*, Springer, **1997**.
- [20] E. Renshaw, *Modelling Biological Populations in Space and Time*, Cambridge University Press, **1991**.
- [21] M. S. Bartlett, *Population Models in Ecology and Epidemiology*, Methuen, **1960**.
- [22] E. R. Ricklefs, G. L. Miller, *Ecology*, Freeman, **2000**.
- [23] M. J. Keeling, P. Rohani, *Modeling Infectious Diseases in Human and Animals*, Princeton University Press, **2008**.
- [24] E. R. Ricklefs, *A Economia da Natureza*, 6ª ed., Guanabara Koogan, **2010**.

- [25] M. Begon, C. R. Townsend, J. L. Harper, *Ecology: from Individuals do Ecosystems*, 4th ed, Blackwell, **2006**.
- [26] L. Lach, C. L. Parr, K. L. Abott (eds.), *Ant Ecology*, Oxford University Press, **2010**.
- [27] R. Durrett, S. Levin, "The Importance of Being Discrete (and Spatial)", *Theoretical Population Biology* **1994**, 46, 363, <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S004058098471032X>.
- [28] A. J. Lotka, "Undamped oscillations derived from the law of mass action", *Journal of the American Chemical Society* **1920**, 42, 1595, <http://dx.doi.org/10.1021/ja01453a010>.
- [29] A. J. Lotka, "Analytical note on certain rhythmic relations in organic systems", *Proceedings of the National Academy of Sciences* **1920**, 6, 410.
- [30] A. J. Lotka, *Elements of Mathematical Biology*, Dover, **1924**.
- [31] V. Volterra, *Leçons sur la Théorie de la Lutte pour la Vie*, Gauthier-Villars, **1924**.
- [32] W. O. Kermack, A. G. McKendrick, "A Contribution to the Mathematical Theory of Epidemics", *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical Physical and Engineering Sciences* **1927**, 115, 700, <http://rspa.royalsocietypublishing.org/content/115/772/700>.
- [33] C. T. Codeço, "Endemic and epidemic dynamics of cholera: the role of the aquatic reservoir", *BMC Infectious Diseases* **2001**, 1, 1, <http://dx.doi.org/10.1186/1471-2334-1-1>.
- [34] R. Levins, "Some Demographic and Genetic Consequences of Environmental Heterogeneity for Biological Control", *Bulletin of the Entomological Society of America* **1969**, 15, 237, <http://dx.doi.org/10.1093/besa/15.3.237>.
- [35] A. Hastings, S. Harrison, "Metapopulation Dynamics and Genetics", *Annual Review of Ecology and Systematics* **1994**, 25, 167, <http://dx.doi.org/10.1146/annurev.es.25.110194.001123>.

- [36] I. Hanski, M. E. Gilpin, *Metapopulation Biology: Ecology, Genetics and Evolution*, Academic Press, **1997**.
- [37] I. Hanski, *Metapopulation Ecology*, Oxford, **1999**.
- [38] I. Hanski, O. E. Gaggiotti, *Ecology, Genetics and Evolution of Metapopulations*, Elsevier Academic Press, **2004**.
- [39] I. Hanski, O. Ovaskainen, "The metapopulation capacity of a fragmented landscape", *Nature* **2000**, 404, 755.
- [40] O. Ovaskainen, K. Sato, J. Bascompte, I. Hanski, "Metapopulation Models for Extinction Threshold in Spatially Correlated Landscapes", *Journal of Theoretical Biology* **2002**, 215, 95, <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022519301925020>.
- [41] J. E. Keymer, P. Galajda, M. C., P. S., A. R. H., "Bacterial metapopulations in nanofabricated landscapes", *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* **2006**, 103, 46.
- [42] J.-C. Li, Z.-W. Dong, R.-W. Zhou, Y.-X. Li, Z.-W. Qian, "The stochastic resonance for the incidence function model of metapopulation", *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* **2017**, 476, 70, <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378437117301814>.
- [43] M. L. Mann Manyombe, B. Tsanou, J. Mbang, S. Bowong, "A metapopulation model for the population dynamics of anopheles mosquito", *Applied Mathematics and Computation* **2017**, 307, 71, <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0096300317301509>.
- [44] T. Tomé, M. J. de Oliveira, "Role of noise in population dynamics cycles", *Physical Review E* **2009**, 79, 061128, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.79.061128>.
- [45] D. R. de Souza, T. Tomé, "Stochastic lattice gas model describing the dynamics of the SIRS epidemic process", *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* **2010**, 389, 1142, <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378437109009091>.

- [46] T. Tomé, J. R. D. de Felício, "Probabilistic cellular automaton describing a biological immune system", *Physical Review E* **1996**, 53, 3976, <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.53.3976>.
- [47] K. C. De Carvalho, T. Tomé, "Self-organized patterns of coexistence out of a predator-prey cellular automaton", *International Journal of Modern Physics C* **2006**, 17, 1647, <http://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/S0129183106010005>.
- [48] E. Arashiro, T. Tomé, "The threshold of coexistence and critical behaviour of a predator-prey cellular automaton", *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **2007**, 40, 887, <http://stacks.iop.org/1751-8121/40/i=5/a=002>.
- [49] T. Tomé, K. C. de Carvalho, "Stable oscillations of a predator-prey probabilistic cellular automaton: a mean-field approach", *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **2007**, 40, 12901, <http://stacks.iop.org/1751-8121/40/i=43/a=005>.
- [50] K. C. de Carvalho, T. Tomé, "Anisotropic probabilistic cellular automaton for a predator-prey system", *Brazilian Journal of Physics* **2007**, 37, 466, http://www.sbfisica.org.br/bjp/files/v37_466.pdf.
- [51] C. Argolo, P. Barros, T. Tomé, E. Arashiro, I. Gleria, M. L. Lyra, "Threshold of coexistence and critical behavior of a predator-prey stochastic model in a fractal landscape", *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* **2016**, 2016, 083204, <http://stacks.iop.org/1742-5468/2016/i=8/a=083204>.
- [52] T. Tomé, M. J. de Oliveira, "Stationary distribution of finite-size systems with absorbing states", *Physical Review E* **2005**, 72, 026130, <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.72.026130>.
- [53] T. Tomé, M. de Oliveira, "Nonequilibrium Model for the Contact Process in an Ensemble of Constant Particle Number", *Physical Review Letters* **2001**, 86, 5643, <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.86.5643>.

- [54] J. E. Satulovsky, T. Tomé, “Stochastic lattice gas model for a predator-prey system”, *Physical Review E* **1994**, 49, 5073, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.49.5073>.
- [55] E. Arashiro, A. L. Rodrigues, M. J. de Oliveira, T. Tomé, “Time correlation function in systems with two coexisting biological species”, *Physical Review E* **2008**, 77, 061909, <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.77.061909>.
- [56] Á. L. Rodrigues, T. Tomé, “Reaction-Diffusion Stochastic Lattice Model for a Predator-Prey System”, *Brazilian Journal of Physics* **2008**, 38, 87, http://www.sbfisica.org.br/bjp/files/v38_87.pdf.
- [57] T. Tomé, R. M. Ziff, “Critical behavior of the susceptible-infected-recovered model on a square lattice”, *Physical Review E* **2010**, 82, 051921, <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.82.051921>.
- [58] D. de Souza, *Modelagem de problemas da dinâmica de populações por meio da dinâmica estocástica*, Instituto de Física da Universidade de São Paulo, **2009**, <http://www.teses.usp.br/teses/disponiveis/43/43134/tde-14042010-150808/pt-br.php>.
- [59] D. R. de Souza, T. Tomé, R. Ziff, “A new scale-invariant ratio and finite-size scaling for the stochastic susceptible–infected–recovered model”, *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* **2011**, 2011, P03006, <http://stacks.iop.org/1742-5468/2011/i=03/a=P03006>.
- [60] D. R. Souza, *Tese de doutorado: Transições de fase em modelos estocásticos para descrever epidemias*, Universidade de São Paulo, **2012**, <http://www.teses.usp.br/teses/disponiveis/43/43134/tde-26032013-131452/pt-br.php>.
- [61] D. R. de Souza, T. Tomé, S. T. R. Pinho, F. R. Barreto, M. J. de Oliveira, “Stochastic dynamics of dengue epidemics”, *Physical Review E* **2013**, 87, 012709, <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.87.012709>.

- [62] A. H. O. Wada, T. Tomé, M. J. de Oliveira, “Critical properties of the susceptible-exposed-infected model on a square lattice”, *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* **2015**, 2015, P04014, <http://stacks.iop.org/1742-5468/2015/i=4/a=P04014>.
- [63] U. C. Täuber, “Population oscillations in spatial stochastic Lotka–Volterra models: a field-theoretic perturbational analysis”, *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **2012**, 45, 405002, <http://stacks.iop.org/1751-8121/45/i=40/a=405002>.
- [64] H. Shih, N. Goldenfeld, “Path-integral calculation for the emergence of rapid evolution from demographic stochasticity”, *Physical Review E* **2014**, 90, 050702, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.90.050702>.
- [65] R. Pastor-Satorras, C. Castellano, P. Van Mieghem, A. Vespignani, “Epidemic processes in complex networks”, *Reviews of Modern Physics* **2015**, 87, 925, <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.87.925>.
- [66] R. Pastor-Satorras, A. Vespignani, “Epidemic Spreading in Scale-Free Networks”, *Phys. Rev. Lett.* **2001**, 86, 3200–3203, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.86.3200>.
- [67] R. Pastor-Satorras, A. Vespignani, “Immunization of complex networks”, *Phys. Rev. E* **2002**, 65, 036104, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.65.036104>.
- [68] R. Pastor-Satorras, A. Vespignani, “Epidemic dynamics in finite size scale-free networks”, *Phys. Rev. E* **2002**, 65, 035108, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.65.035108>.
- [69] M. Boguñá, R. Pastor-Satorras, A. Vespignani, “Absence of Epidemic Threshold in Scale-Free Networks with Degree Correlations”, *Phys. Rev. Lett.* **2003**, 90, 028701, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.90.028701>.

- [70] S. C. Ferreira, C. Castellano, R. Pastor-Satorras, "Epidemic thresholds of the susceptible-infected-susceptible model on networks: A comparison of numerical and theoretical results", *Physical Review E* **2012**, 86, 041125, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.86.041125>.
- [71] A. S. Mata, S. C. Ferreira, "Multiple transitions of the susceptible-infected-susceptible epidemic model on complex networks", *Physical Review E* **2015**, 91, 012816, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.91.012816>.
- [72] R. S. Ferreira, S. C. Ferreira, "Critical behavior of the contact process on small-world networks", *The European Physical Journal B* **2013**, 86, 462, <http://dx.doi.org/10.1140/epjb/e2013-40534-0>.
- [73] R. Juhász, "Critical behavior of models with infinite disorder at a star junction of chains", *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* **2014**, 8, 08005.
- [74] M. L. Almeida, A. Macedo-Filho, G. A. Mendes, L. R. da Silva, E. L. Albuquerque, U. L. Fulco, "Critical properties of the contact process on a scale-free homophilic network", *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* **2016**, 2016, 043202, <http://stacks.iop.org/1742-5468/2016/i=4/a=043202>.
- [75] A. S. Mata, S. C. Ferreira, R. Pastor-Satorras, "Effects of local population structure in a reaction-diffusion model of a contact process on metapopulation networks", *Physical Review E* **2013**, 88, 042820, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.88.042820>.
- [76] S. C. Ferreira, R. S. Sander, R. Pastor-Satorras, "Collective versus hub activation of epidemic phases on networks", *Physical Review E* **2016**, 93, 032314, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.93.032314>.
- [77] G. Szabó, G. A. Sznaider, "Phase transition and selection in a four-species cyclic predator-prey model", *Physical Review E* **2004**, 69, 031911, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.69.031911>.

- [78] J. Vukov, A. Szolnoki, G. Szabó, "Diverging fluctuations in a spatial five-species cyclic dominance game", *Physical Review E* **2013**, 88, 022123, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.88.022123>.
- [79] Z. Wang, Z. Wang, X. Zhu, J. J. Arenzon, "Cooperation and age structure in spatial games", *Physical Review E* **2012**, 85, 011149, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.85.011149>.
- [80] A. F. Lütz, S. Risau-Gusman, J. J. Arenzon, "Intransitivity and coexistence in four species cyclic games", *Journal of Theoretical Biology* **2013**, 317, 286, <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022519312005632>.
- [81] C. Rulquin, J. J. Arenzon, "Globally synchronized oscillations in complex cyclic games", *Phys. Rev. E* **2014**, 89, 032133, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.89.032133>.
- [82] A. Cazaubiel, A. F. Lütz, J. J. Arenzon, "Spatial organization, grouping strategies and cyclic dominance in asymmetric predator-prey games", *ArXiv e-prints* **2016**.
- [83] A. Lütz, A. Cazaubiel, J. Arenzon, "Cyclic Competition and Percolation in Grouping Predator-Prey Populations", *Games* **2017**, 8, 10, <http://dx.doi.org/10.3390/g8010010>.
- [84] N. Bailey, "The total size of a general stochastic epidemic", *Biometrika* **1953**, 40, 177–185.
- [85] N. T. J. Bailey, *The Mathematical Theory of Epidemics*, Hafner, **1967**.
- [86] K. Dietz, "Epidemics and Rumours: A Survey", *Journal of the Royal Statistical Society: Series A* **1967**, 130, 505, http://www.jstor.org/stable/2982521?seq=1#page_scan_tab_contents.
- [87] D. Mollison, "Spatial contact models for ecological and epidemic spread", *Journal of the Royal Statistical Society: Series B* **1977**, 39, 283, http://www.jstor.org/stable/2985089?origin=JSTOR-pdf&seq=1#page_scan_tab_contents.

- [88] N. T. J. Bailey, *The mathematical theory of infectious diseases and its applications*, 2nd ed., Charles Griffin e Company Limited London, **1975**.
- [89] P. Grassberger, "On the critical behavior of the general epidemic process and dynamical percolation", *Mathematical Biosciences* **1983**, 63, 157–172, <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0025556482900360>.
- [90] R. Durrett, S. Levin, "Lessons on Pattern Formation from Planet WATTOR", *Journal of Theoretical Biology* **2000**, 205, 201, <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022519300920617>.
- [91] T. Antal, M. Droz, "Phase transitions and oscillations in a lattice prey-predator model", *Physical Review E* **2001**, 63, 056119, <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.63.056119>.
- [92] T. Antal, M. Droz, A. Lipowski, G. Ódor, "Critical behavior of a lattice prey-predator model", *Physical Review E* **2001**, 64, 036118, <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.64.036118>.
- [93] H. Berry, "Monte carlo simulations of enzyme reactions in two dimensions: fractal kinetics and spatial segregation.", *Biophysical Journal* **2002**, 83, 1891, <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC1302281/>.
- [94] G. Camelo-Neto, S. Coutinho, "Forest-fire model with resistant trees", *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* **2011**, 2011, P06018, <http://stacks.iop.org/1742-5468/2011/i=06/a=P06018>.
- [95] U. C. Täuber, "Stochastic population oscillations in spatial predator-prey models", *Journal of Physics: Conference Series* **2011**, 319, 012019, <http://stacks.iop.org/1742-6596/319/i=1/a=012019>.
- [96] A. Szolnoki, M. Perc, G. Szabo, "Defense Mechanisms of Empathetic Players in the Spatial Ultimatum Game", *Physical Review Letters* **2012**, 109, 078701, <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.109.078701>.
- [97] S. Chen, U. C. Täuber, "Non-equilibrium relaxation in a stochastic lattice Lotka–Volterra model", *Physical Biology* **2016**, 13, 025005, <http://stacks.iop.org/1478-3975/13/i=2/a=025005>.

- [98] G. M. Nakamura, A. C. P. Monteiro, G. C. Cardoso, A. S. Martinez, "Efficient method for comprehensive computation of agent-level epidemic dissemination in networks", *Scientific Reports* **2007**.
- [99] T. E. Harris, "Contact Interactions on a Lattice", *Annals of Probability* **1974**, 2, 969, <http://dx.doi.org/10.1214/aop/1176996493>.
- [100] H. K. Janssen, "On the nonequilibrium phase transition in reaction-diffusion systems with an absorbing stationary state", *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter* **1981**, 42, 151–154, <http://link.springer.com/article/10.1007%2FBF01319549>.
- [101] P. Grassberger, "On phase transitions in Schlögl's second model", *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter* **1982**, 47, 365–374, <http://link.springer.com/article/10.1007%2FBF01313803?LI=true>.
- [102] G. Grinstein, Z.-W. Lai, D. A. Browne, "Critical phenomena in a nonequilibrium model of heterogeneous catalysis", *Physical Review A* **1989**, 40, 4820, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.40.4820>.
- [103] A. Gontijo, *Dissertação de mestrado: Estudo e modelagem das dinâmicas estruturais de assembléias de formigas tropicais em diferentes escalas ecológica*, Universidade Federal de Ouro Preto, **2009**, <http://www.repositorio.ufop.br/handle/123456789/3029>.
- [104] H. Nakata, S. Funakoshi, M. Nakamura, "Alternating dominance of postlarval sardine and anchovy caught by coastal fishery in relation to the Kuroshio meander in the Enshu-nada Sea", *Fisheries Oceanography* **2000**, 9, 248, <http://dx.doi.org/10.1046/j.1365-2419.2000.00140.x>.
- [105] J. Alheit, A. Bakun, "Population synchronies within and between ocean basins: Apparent teleconnections and implications as to physical-biological linkage mechanisms", *Journal of Marine Systems* **2010**, 79, Impact of climate variability on marine ecosystems: A comparative approach, 267, <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0924796309000840>.

- [106] R. Kikuchi, "A Theory of Cooperative Phenomena", *Physical Review* **1951**, 81, 988, <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.81.988>.
- [107] H. Mamada, F. Takano, "New Approximate Method for Ising System", *Journal of the Physical Society of Japan* **1968**, 25, 675–686, <http://dx.doi.org/10.1143/JPSJ.25.675>.
- [108] R. Dickman, "Kinetic phase transitions in a surface-reaction model: Mean-field theory", *Physical Review A* **1986**, 34, 4246, <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.34.4246>.
- [109] T. Tomé, M. J. de Oliveira, M. A. Santos, "Non-equilibrium Ising model with competing Glauber dynamics", *Journal of Physics A: Mathematical and General* **1991**, 24, 3677, <http://stacks.iop.org/0305-4470/24/i=15/a=033>.
- [110] K. Binder, D. W. Heermann, *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics*, Springer, **2002**.
- [111] T. M. Liggett, *Interacting Particle Systems*, Springer, **1985**.
- [112] P. Grassberger, A. de la Torre, "Reggeon field theory (Schlögl's first model) on a lattice: Monte Carlo calculations of critical behaviour", *Annals of Physics* **1979**, 122, 373, <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0003491679902070>.
- [113] M. E. J. Newman, "Spread of epidemic disease on networks", *Physical Review E* **2002**, 66, 016128, <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.66.016128>.
- [114] D. Stauffer, A. Aharony, *Introduction to Percolation Theory*, London: Taylor e Francis, **1994**.
- [115] C. D. Lorenz, R. M. Ziff, "Precise determination of the bond percolation thresholds and finite-size scaling corrections for the sc, fcc, and bcc lattices", *Physical Review E* **1998**, 57, 230, <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.57.230>.

- [116] M. J. Lee, "Pseudo-random-number generators and the square site percolation threshold", *Physical Review E* **2008**, 78, 031131, <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.78.031131>.
- [117] X. Feng, Y. Deng, H. W. J. Blote, "Percolation transitions in two dimensions", *Physical Review E* **2008**, 78, 031136, <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.78.031136>.
- [118] D. Stauffer, "Scaling theory of percolation clusters", *Physics Reports* **1979**, 54, 1, <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0370157379900607>.
- [119] A. O. W. Wada, T. Tomé, M. J. de Oliveira, "Critical properties of the susceptible-exposed-infected model on a square lattice", *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* **2015**, 2015, P04014, <http://stacks.iop.org/1742-5468/2015/i=4/a=P04014>.
- [120] T. Ohtsuki, T. Keyes, "Kinetic growth percolation: Epidemic processes with immunization", *Physical Review A* **1986**, 33, 1223, <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.33.1223>.
- [121] M. Nakamaru, Y. Beppu, K. Tsuji, "Does disturbance favor dispersal? An analysis of ant migration using the colony-based lattice model", *Journal of Theoretical Biology* **2007**, 248, 288, <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022519307002196>.
- [122] R. Lewontin, *The Triple Helix Gene, Organism, and Environment*, Harvard University Press, **2000**.
- [123] C. Chatfield, *The analysis of time series an introduction, fifth edition*, Chapman e Hall/CRC, **1997**.
- [124] P. A. Morettin, C. M. C. Toloi, *Análise de séries temporais*, Editora Edgard Blücher LTDA, **2004**.
- [125] D. Champeney, *A handbook of Fourier theorems*, Cambridge University Press, **1987**.

- [126] P. Welch, "The use of fast Fourier transform for the estimation of power spectra: A method based on time averaging over short, modified periodograms", *IEEE Transactions on Audio and Electroacoustics* **1967**, 15, 70, <http://ieeexplore.ieee.org/document/1161901/>.
- [127] A. Lipowski, "Oscillatory behavior in a lattice prey-predator system", *Physical Review E* **1999**, 60, 5179, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.60.5179>.
- [128] S. Morita, K. Tainaka, "Undamped oscillations in prey-predator models on a finite size lattice", *Population Ecology* **2006**, 48, 99, <http://dx.doi.org/10.1007/s10144-006-0257-0>.

Apêndice A

Artigo publicado sobre modelo suscetível-infectado-recuperado com infecção recorrente

Segue o artigo publicado sobre o modelo suscetível-infectado-recuperado com infecção recorrente.

Susceptible–infected–recovered model with recurrent infection

Flávia M. Ruziska, Tânia Tomé*, Mário J. de Oliveira

Instituto de Física, Universidade de São Paulo, Rua do Matão, 1371, 05508-090 São Paulo, SP, Brazil

HIGHLIGHTS

- A stochastic lattice model describing an epidemiological system is studied.
- The dynamics is based on the rules of the susceptible–infected–recovered model.
- The stationary states are obtained by Monte Carlo and mean-field approaches.
- The analysis is focused on the critical behavior of non-equilibrium phase transitions.

ARTICLE INFO

Article history:

Received 2 August 2016

Received in revised form 4 September 2016

Available online 5 October 2016

Keywords:

Epidemic models

Nonequilibrium phase transitions

Dynamic percolation

SIR model

ABSTRACT

We analyze a stochastic lattice model describing the spreading of a disease among a community composed by susceptible, infected and removed individuals. A susceptible individual becomes infected catalytically. An infected individual may, spontaneously, either become recovered, that is, acquire a permanent immunization, or become again susceptible. The critical properties including the phase diagram is obtained by means of mean-field theories as well as numerical simulations. The model is found to belong to the universality class of dynamic percolation except when the recovering rate vanishes in which case the model belongs to the directed percolation universality class.

© 2016 Elsevier B.V. All rights reserved.

1. Introduction

The spreading of diseases and, more generally, the dynamics of populations are described by models that can be characterized as being deterministic or stochastic, space structured or non-space structured [1–9]. An important model that has been studied by each one of these approaches is the so-called susceptible–infected–recovered (SIR) model [5–22]. The SIR model describes the spreading of a disease in a community in which individuals acquire permanent immunization. A susceptible (S) individual becomes infected (I) by the contact with an infected individual, a process interpreted as a catalytic reaction, $S + I \rightarrow I + I$. An infected individual may eventually recover from the disease becoming recovered (R) forever, acquiring thus a permanent immunization, a process described by the spontaneous reaction $I \rightarrow R$.

Starting from a single infected individual in a community of susceptible individuals, a disease described by the SIR model will spread if the rate of infection is high enough. The infected individuals will eventually become recovered and the whole community will be composed by the recovered individuals and the remaining susceptible individuals. If the infection rate is small the disease will not spread. The passage from non spreading to spreading regime is regarded as a phase transition from a phase with a vanishing density of recovered, in the thermodynamic limit, to a phase with a nonzero density of recovered. The critical behavior of this transition places the SIR model into the universality class of the dynamical percolation (DyP)

* Corresponding author.

E-mail address: ttome@if.usp.br (T. Tomé).

Fig. 1. Illustration of the SIR model (A), the model studied here (B) and the SIS model (C). In the three models, the reaction $S \rightarrow I$ is catalytic and the other reactions, $I \rightarrow R$ and $I \rightarrow S$, are spontaneous. When $a = 0$, the (B) model reduces to the SIR model and when $c = 0$, the (B) model reduces to the SIS model.

[12–16]. We remark that the stationary critical behavior of models belonging to the DyP universality class is the same as that of the isotropic percolation [20–23].

The SIR model can be extended by the addition of one more process in several ways [8], by including, for instance, processes describing vaccination [8], or the influence of resource constraints [24,25]. If we include the spontaneous reaction $R \rightarrow S$, which means that the individuals do not acquire a permanent immunization, it becomes the susceptible–infected–recovered–susceptible (SIRS) model [18]. If we include the spontaneous reaction $I \rightarrow S$, it becomes a model in which the infected individuals may spontaneously recover from the disease becoming again susceptible, that is, a model in which the infection is recurrent [15], which is the object of our analysis, here.

In the model we analyze, illustrated in Fig. 1, a susceptible becomes infected by a catalytic reaction, $S + I \rightarrow I + I$, with infection rate b . Some infected individuals become recovered spontaneously, $I \rightarrow R$, with a recovering rate c , acquiring a permanent immunization; and some become again susceptible spontaneously, $I \rightarrow S$, with a recurrence rate a . When $c = 0$, there is no recovered individuals and the model reduces to the susceptible–infected–susceptible model (SIS), which is equivalent to the contact process [9,16,26]. The critical behavior of the contact process belongs to the universality class of directed percolation (DP) [16,26] and we may say that when $c = 0$, the critical behavior of the present model belongs to the DP universality class. When $c \neq 0$ and $a \neq 0$, the model is expected to be in the same universality class of the SIR model, that is the DyP universality class. Our results indeed confirm this expectation.

We consider the model defined on a regular lattice where each site of the lattice is occupied by just one individual that can be susceptible, infected or recovered. We analyze the model by the use of mean-field theories, at the level of one-site and two-site approximations. We also performed numerical simulations on a square lattice and construct the phase diagram.

2. Model

The model studied here is a stochastic lattice model defined as follows. Each site of a regular lattice can be occupied by a susceptible (S) individual, or by an infected (I) individual or by a recovered (R) individual. A susceptible individual becomes infected catalytically with rate proportional to b . More precisely, if a site i of the lattice is in state S, then it becomes I with rate bn_i/k where n_i is the number of infected individuals in the neighborhood of site i , defined as the nearest neighbor sites of site i , and k is the number of sites of the neighborhood. An infected individual becomes spontaneously either recovered with rate c or susceptible with rate a .

When $a = 0$ and $c \neq 0$, the model becomes the susceptible–infected–recovered (SIR) model, for which an infected individual eventually recovers from the disease acquiring a permanent immunization. The recovered individual does not transmit the disease, remaining forever in this condition. When $c \neq 0$ and $a \neq 0$, an infected individual may become again susceptible, but, eventually, an infected individual may recover from the disease becoming immune forever. In particular, when $a \gg c$, the processes $S \rightleftharpoons I$ will occur several times and eventually I becomes R.

Once the transition rates are defined, we may set up the master equation that gives the time evolution of the probability of $P(\eta)$ of a given configuration η , defined as the collection of variables η_i that give the state of each site of the lattice. The variable η_i takes the values 0, 1 or 2, according to whether site i is occupied by a susceptible, an infected or a recovered individual, respectively. From the master equation it is possible to write down the time evolution of several marginal probability distributions, $P(\eta_i)$, $P(\eta_i, \eta_j)$, and so on. The time evolution equations for P_S , P_I and P_R , which are the densities of susceptible, infected and recovered individuals, are given by

$$\frac{d}{dt}P_S = aP_I - bP_{SI}, \quad (1)$$

$$\frac{d}{dt}P_I = -(a + c)P_I + bP_{SI}, \quad (2)$$

$$\frac{d}{dt}P_R = cP_I, \quad (3)$$

where P_{SI} denotes the probability that a pair of neighboring sites: one occupied by a susceptible and the other by an infected. These equations can be understood by considering each one of the three reactions that define the model. The spontaneous reaction $I \rightarrow S$ gives a contribution aP_I to the increase in P_S and the same contribution to the decrease in P_I . Similarly, the spontaneous reaction $I \rightarrow R$ gives a contribution cP_I to the increase in P_R and the same contribution to the decrease in P_I . To

Fig. 2. (a) Densities of susceptible x , infected y and recovered z individuals versus time t , and (b) epidemic curve, $\Gamma = -dx/dt$ versus t , obtained from simple mean-field approach for $a = 0.2$, $b = 0.4$ and $c = 0.1$. The starting condition is $x = 1 - h$, $y = h$ and $h = 0.001$.

find the contribution coming from the catalytic reaction $S \rightarrow I$ to the increase in P_I we argue as follows. Each neighbor of a site of type I gives a contribution equal to $(b/k)P_{IS}$. Since the number of neighbors is k , the total contribution of this reaction is bP_{IS} . A similar reasoning will lead us to the same contribution to the decrease in P_S .

The present model has been defined as having three parameters: a , b , and c . By rescaling the time it is possible to reduce the number of parameter to two. We thus introduce the parameters p and q , understood as the effective immunization and recovery rates, defined by

$$p = \frac{a}{b}, \quad q = \frac{c}{b}, \quad (4)$$

and when convenient we use these two parameters instead of a , b and c .

3. Simple mean-field approximation

Eqs. (1)–(3) do not form a closed set of equations for P_S , P_I and P_R due to the presence of the two site probability P_{SI} on the right-hand side of these equations. However, we may close the equations by a truncation scheme which consists in the simple mean-field approximation $P(\eta_1, \eta_2) = P(\eta_1)P(\eta_2)$. Using the definitions $P_S = x$, $P_I = y$, and $P_R = z$ we may write $P_{SI} = P_S P_I = xy$, and the time evolution equations become

$$\frac{dx}{dt} = ay - bxy, \quad (5)$$

$$\frac{dy}{dt} = -(a + c)y + bxy, \quad (6)$$

$$\frac{dz}{dt} = cy. \quad (7)$$

Notice that $x + y + z = 1$ implying that only two equations are independent.

We start our analysis by numerically integrating the set of Eqs. (5)–(7). A typical solution for x , y and z as functions of time, is shown in Fig. 2(a), for a given set of values of a , b and c , corresponding to the spreading and disease regime. The density of infected individuals has a bell shape and vanishes for large enough times. The densities of susceptible and recovered individuals, on the other hand, approaches finite values when $t \rightarrow \infty$, as seen in Fig. 2(a). Another quantity that characterizes the dynamics of the spreading of the disease is the quantity defined by $\Gamma = -dx/dt$, which is understood as the difference between the fraction of susceptible sites becoming infected and the infected ones becoming susceptible. The plot of Γ versus time, the epidemic curve, is shown in Fig. 2(b) and has also a bell shape, with Γ vanishing when $t \rightarrow \infty$.

Now we turn to the stationary solutions of the set of Eqs. (5)–(7). One stationary solution corresponds to an absorbing state with no infected nor recovered individuals, that is, $x = 1$, $y = 0$ and $z = 0$, characterizing a non-spreading regime. A linear stability analysis of this state leads to the conclusion that this absorbing state is stable as long as $b < a + c$. When this condition is not met another stationary solution appears for which $x \neq 1$, $y = 0$ and $z \neq 0$, as we will see below. This state corresponds to a spreading regime. Thus we are faced with a phase transition that occurs when $b = a + c$, or $p + q = 1$, between an absorbing state, identified as the non-spreading regime, and an active state, identified as the spreading regime.

To solve the evolution equations for the densities, it is convenient to divide Eq. (6) by (5) to get

$$\frac{dy}{dx} = \frac{q}{x - p} - 1. \quad (8)$$

Fig. 3. Density of recovered individuals z , at the stationary state, as a function of $q = c/b$ obtained from simple mean-field approximation, for $q/p = c/a = 2$ and for several values of h . From bottom to top the values of h are: 0^+ (see text), 0.001, 0.01, and 0.05.

Assuming that initially there is no recovered individual but only susceptible and infected individuals then at $t = 0$, $x = 1 - h$, $y = h$ and $z = 0$, where h is the initial density of infected. Solving Eq. (8) with this initial condition we find

$$y = q \ln \frac{x - p}{1 - h - p} - x + 1, \quad (9)$$

an expression that may be understood as a constant of motion. To get the stationary solution it suffices to remember that in the limit $t \rightarrow \infty$, the infected individuals disappear, that is, $y \rightarrow 0$, as long as $c \neq 0$ ($q \neq 0$), so that the stationary density of susceptible individuals are given by the equation

$$x = q \ln \frac{x - p}{1 - h - p} + 1. \quad (10)$$

In the context of mean-field approach, the order parameter is defined as the density of recovered individuals z , which in the stationary state is related to the density of susceptible individuals x by $z = 1 - x$. From Eq. (10) we find the following expression for the order parameter at the stationary state,

$$z = -q \ln \frac{1 - z - p}{1 - h - p}, \quad (11)$$

valid for $q \neq 0$. In Fig. 3, we plot z versus q for several values of h . It is worth mentioning that the phase transition occurs only when $h \rightarrow 0$, a limit that should be understood as follows. First we obtain z for a nonzero value of h and after that we take the limit $h \rightarrow 0$, a solution indicated in Fig. 3 by $h = 0^+$. This procedure amounts to say that at the beginning there is an infinitesimal small seed of infected individuals.

The continuous phase transition happens when $p + q = 1$, or $a + c = b$. To see this, we write h as a function of z ,

$$h = 1 - p - (1 - z - p) e^{z/q}, \quad (12)$$

and then expand the expression on the right-hand side of Eq. (12) in powers of z Up to second order in z , we get

$$h = \frac{1}{q}(p + q - 1)z + \frac{1}{2q}z^2. \quad (13)$$

If $h > 0$, this equation has one positive and one negative solution. The positive is given by

$$z = (1 - p - q) + \sqrt{(1 - p - q)^2 + 2hq}. \quad (14)$$

If now we take the limit $h \rightarrow 0$, we find $z \rightarrow 0$ if $p + q \geq 1$ but $z = 2(1 - p - q) > 0$ if $p + q < 1$, as shown in Fig. 3. Writing $z \sim (1 - p - q)^\beta$, we see that $\beta = 1$. At the critical point, we find from (13) that $h = z^2/2q$. Writing, $z \sim h^{1/\delta}$, we see that $\delta = 2$.

4. Pair mean-field approximation

A better approach can be obtained by the use of the pair mean-field approximation [21]. In this approach, unlike to what happens in the simple mean-field approximation, the possible correlation between neighboring sites are properly taken

into account. We start by writing down the evolution equations of the two-site correlations $P(\eta_i, \eta_j)$ where i and j are two nearest neighbor sites of the regular lattice. From the master equation, we find the following equations

$$\frac{d}{dt}P_{SI} = aP_{II} - aP_{SI} - cP_{SI} - b(1-f)P_{SI} + bfP_{SSI} - bfP_{ISI}, \quad (15)$$

$$\frac{d}{dt}P_{SR} = aP_{IR} + cP_{SI} - bfP_{ISR}, \quad (16)$$

$$\frac{d}{dt}P_{IR} = -aP_{IR} + cP_{II} - cP_{IR} + bfP_{ISR}, \quad (17)$$

where $f = (k-1)/k$ and k is the lattice coordination number.

To understand how the terms on the right-hand side of these equations are obtained, let us take a look at the contributions of each one of the three reactions that define the model. We will consider only the contributions to the equation for P_{SI} , the probability that site 0 of the lattice is in state S and site 1 is in state I. A similar reasoning can be used to get the contributions related to the other equations. The spontaneous reaction $I \rightarrow S$ gives a contribution equal to aP_{II} to the increase in P_{SI} , and a contribution equal to aP_{SI} to the decrease in P_{SI} . The spontaneous reaction $I \rightarrow R$ gives a contribution equal to cP_{SI} to the decrease in P_{SI} .

To find the contribution to the increase in P_{SI} coming from the catalytic reaction $S \rightarrow I$ we argue as follows. Let site 0 be in state S, and site 1 in state S. Each neighbor of site 0 which is in state I gives a contribution equal to $(b/k)P_{SSI}$. Since the number of neighbors is $k-1$, the total contribution is bfP_{SSI} . The contribution to the decrease in P_{SI} is obtained by setting site 0 in state S and site 1 in state I. Each neighbor of site 0 which is in state I, except site 1, gives a contribution equal to $(b/k)P_{ISI}$. But the number of neighbors is $k-1$, and we get a contribution equal to bfP_{ISI} to the decrease in P_{SI} . The neighboring site 1, being in state I, gives a contribution equal to $(b/k)P_{SI} = b(1-f)P_{SI}$ to the decrease in P_{SI} .

In the pair mean-field approximation we use the approximation $P(\eta_i, \eta_j, \eta_k) = P(\eta_i, \eta_j)P(\eta_j, \eta_k)/P(\eta_j)$ where i and k are distinct nearest neighbor sites of site j . Using the notation $x = P_S$ and $y = P_I$ as before and $u = P_{SR}$, $v = P_{SI}$ and $w = P_{IR}$, we write $P_{ISI} = v^2/x$, $P_{SSI} = (x-v-u)v/x$, $P_{ISR} = vu/x$, where we have taken into account that $P_{SS} = P_S - P_{SI} - P_{SR} = x - v - u$. Eqs. (1) and (2) are written as

$$\frac{dx}{dt} = ay - bv, \quad (18)$$

$$\frac{dy}{dt} = -(a+c)y + bv, \quad (19)$$

whereas Eqs. (15)–(17) are written as

$$\frac{dv}{dt} = a(y - 2v - w) - cv - b(1-f)v + bf(x - 2v - u)\frac{v}{x}, \quad (20)$$

$$\frac{du}{dt} = aw + cv - bf\frac{vu}{x}, \quad (21)$$

$$\frac{dw}{dt} = -aw + c(y - v - 2w) + bf\frac{vu}{x}, \quad (22)$$

where we have taken into account that $P_{II} = P_I - P_{IS} - P_{IR} = y - v - w$. We are left with five equations in five unknowns.

To find the phase transition line we analyze the stability of the trivial stationary solution $x = 1$, $y = 0$, $u = 0$, $v = 0$ and $w = 0$. Up to linear terms, the set of evolution equations is written as

$$\frac{dx}{dt} = ay - bv, \quad (23)$$

$$\frac{dy}{dt} = -(a+c)y + bv, \quad (24)$$

$$\frac{dv}{dt} = ay + (2bf - 2a - b - c)v - aw, \quad (25)$$

$$\frac{du}{dt} = cv + aw, \quad (26)$$

$$\frac{dw}{dt} = cy - cv - (a+2c)w. \quad (27)$$

From the eigenvalues of the Jacobian matrix, we see that this solution becomes unstable when

$$(k-1)p + (k-2)q = k(p+q)^2. \quad (28)$$

Fig. 4. (a) Phase diagram in the variable $q = c/b$ versus $p = a/b$, for simple mean-field (smf), pair mean-field (pmf) with $k = 4$ and simulation (sim) on a square lattice. The absorbing state, or non-spreading regime, is located above the transition line and the active state, or spreading regime, below. (b) Critical line obtained by numerical simulations in the variables $\ln q$ versus $\ln(p_0 - p)$ where $q = c/b$ and $p = a/b$, and $p_0 = 0.606532$ is the critical value of p at $c = 0$.

Therefore, Eq. (28) gives the transition line from the spreading to non-spreading regime of the present model in the pair mean-field approximation, as shown in Fig. 4. When $q = 0$, the critical point is given by $p = (k - 1)/k$ which gives the critical point of the contact model in the pair approximation. When $p = 0$, the critical point is given by $q = (k - 2)/k$, which gives the critical point of the SIR model in the pair approximation. As usual, the pair approximation gives a phase diagram with the absorbing phase occupying a larger region of the phase diagram when compared with the simple mean field approximation.

5. Numerical simulations

We have performed numerical simulations of the model on a square lattice with periodic boundary conditions. The initial condition is a lattice full of susceptible individuals except for one site occupied by an infected individual placed at the center of the lattice. The algorithm we use was defined as follows. At each time step an infected site is chosen from a list of infected sites. (1) With probability c' , the chosen site I becomes R; (2) with probability a' , the chosen site I becomes S; (3) with the complementary probability $b' = 1 - a' - c'$, a neighboring site of the chosen site is chosen at random. If the neighboring site is S then it becomes I; otherwise nothing happens. After performing this procedure the time is increased by a value that is equal to the inverse of the number of sites in the list of infected sites and the list is updated.

The relation between a' , b' , c' and the rates a , b , c are as follows

$$a' = \frac{a}{a + b + c}, \quad b' = \frac{b}{a + b + c}, \quad c' = \frac{c}{a + b + c}, \quad (29)$$

and the relation with the parameters p and q are $p = a'/b'$, $q = c'/b'$.

Several quantities were measured, such as n_S , n_I and n_R , the numbers of susceptible, infected and recovered sites, respectively. The density $z = \langle n_R \rangle / L^2$ of recovered individuals at the stationary state versus q is shown in Fig. 5(a) for several values of L . According to finite size scaling theory developed in Ref. [22], the density z at the stationary state is expected to behave around the critical point as

$$z = L^{-2\beta/\nu_\perp} \Phi_0(\varepsilon L^{1/\nu_\perp}), \quad (30)$$

where Φ_0 is a universal function and ε is the deviation from the critical point, and β and $\nu_\perp$ are the critical exponents related to the order parameter and the spatial correlation length, respectively. Fig. 5(b) shows z versus L for several values of the parameter q along $q = 2p$. The slope of the log-log plot at the critical point equals $-2\beta/\nu_\perp$. As we will see below, the critical point along $q = 2p$ occurs at $q_c = 0.17288(3)$. From the data points of Fig. 5(b) we find $2\beta/\nu_\perp = 0.209(3)$ which should be compared with the exact value for isotropic percolation in two dimensions, $2\beta/\nu_\perp = 5/24 = 0.20833$.

Another useful quantity, related to the second moment of n_R is the ratio

$$U = \frac{\langle n_R^2 \rangle}{\langle n_R \rangle^2}. \quad (31)$$

According to finite size scaling theory developed in Ref. [22], the quantity U behaves as

$$U = L^{\beta/\nu_\perp} \Phi_1(\varepsilon L^{1/\nu_\perp}), \quad (32)$$

Fig. 5. (a) Density z of recovered individuals, at the stationary state, as a function of q , along the line $q = 2p$ of the phase diagram, for several values of L indicated. (b) z versus L for several values of q indicated.

Fig. 6. (a) U versus L and (b) P versus L for several values of q indicated along $q = 2p$.

where Φ_1 is a universal function. Fig. 6(a) shows U versus L for several values of q along $q = 2p$. The slope at the critical value $q_c = 0.17288(3)$ gives $\beta/\nu_\perp = 0.105(1)$ which should be compared with the exact value for isotropic percolation in two dimensions, $\beta/\nu_\perp = 5/48 = 0.10416$.

We have also determined the quantity P , interpreted as the order parameter, and defined as follows [22]. Let B be the number of runs such that the border of the final cluster of recovered sites reaches the boundaries of the square lattice. The quantity P is defined as the ratio B/R where R is total number of runs. In the case of periodic boundary conditions, used here, the boundaries are interpreted as the two vertical and horizontal lines at a distance $L/2$ from the center of the lattice, where an infected site was placed at the beginning. Around the critical point P behaves as

$$P = L^{-\beta/\nu_\perp} \Phi_2(\varepsilon L^{1/\nu_\perp}), \quad (33)$$

where Φ_2 is a universal function. Fig. 6(b) shows P versus L for several values of q along $q = 2p$. The slope at the critical value $q_c = 0.17288(3)$ gives $\beta/\nu_\perp = 0.105(1)$ which should be compared with the exact value for isotropic percolation in two dimensions, $\beta/\nu_\perp = 5/48 = 0.10416$.

Taking into account the critical behavior of U and P , given by Eqs. (32) and (33), it follows that the behavior of UP around the critical point is [22]

$$UP = \Phi(\varepsilon L^{1/\nu_\perp}), \quad (34)$$

where $\Phi = \Phi_1 \Phi_2$ is a universal function. We may conclude that the curves of UP as a function of the parameter p and q , for different values of L , will cross at the critical point, if L is large enough [22]. In other words, $\Phi(0) = \Phi_c$ does not depend on L as can be seen in Fig. 7. From this figure we obtain that the critical value is $q_c = 0.17288(3)$ and $UP = 1.0160(5)$, in agreement with that of the SIR model and other isotropic percolation models $UP = 1.0167(1)$ [22].

The crossing of UP procedure was used to determine the critical line shown in Fig. 4. The values of q and p at the critical line are shown in Table 1 together with the corresponding value of UP , which is a universal quantity at the critical point. As can be seen in this table the critical values of UP are, within the statistical errors, in agreement with that of the SIR model.

Fig. 7. UP versus c for several values of L indicated.

Table 1

Values of $p = a/b$, $q = c/b$ and UP at the critical transition line, obtained from numerical simulations on a square lattice. The errors are in the last digit.

p	q	UP	p	q	UP	p	q	UP
0.6065	0		0.2669	0.0942	1.016	0.0836	0.1741	1.015
0.5154	0.0130	1.021	0.2234	0.1118	1.016	0.0731	0.1788	1.015
0.4730	0.0243	1.022	0.1884	0.1256	1.016	0.0614	0.1843	1.015
0.4080	0.0430	1.019	0.1615	0.1384	1.016	0.0416	0.1938	1.015
0.3593	0.0583	1.018	0.1184	0.1579	1.015	0.0252	0.2017	1.015
0.3242	0.0720	1.017	0.0864	0.1728	1.016	0	0.2143	1.017

The critical behavior of the present model shows that it belongs to the DyP universality class, except when $q = 0$. In this case the model reduces to the contact process which belongs to a different universality class, namely the DP universality class. We have also performed numerical simulations along $q = 0$ and determined the stationary properties. The critical properties are found to be identical to the contact model [9,16]. In particular the critical point p_0 is found to be $p_0 = 0.605532(1)$. We remark that our numerical results indicate that the critical line, shown in Fig. 4 goes continuously into this point when $q \rightarrow 0$. Assuming that is indeed the case, it is worthwhile to find the behavior of the critical line around the point corresponding to the contact critical point $(p, q) = (p_0, 0)$. We assume the following behavior

$$q \sim (p_0 - p)^\phi, \quad (35)$$

where ϕ is the crossover exponent given. A fitting on the data points of Fig. 4 using an expression of the type $\ln q = \phi \ln(p_0 - p) - k_1 - k_2(p_0 - p)^{k_3}$ gives $\phi = 1.7(1)$, implying that the axis- p is tangent to the critical line.

6. Conclusion

We have analyzed a stochastic lattice model for the spreading of disease which is a modification of the SIR model by the introduction of recurrent infection. In addition to the two processes of the SIR model, $S + I \rightarrow I + I$ and $I \rightarrow R$, the model displays a third process $I \rightarrow S$. The phase diagram was obtained by means of simple and pair mean field approximations as well as numerical simulations on a square lattice. When the recurrence rate is nonzero the infected individual may become again a susceptible individual, but, eventually, an infected individual may recover from the disease becoming immune forever. In epidemiology terms, this model for $a \gg c$ can be seen as a model which can be understood as a simplified version for the spreading of a disease in which the process $S \rightleftharpoons I$ occurs many times before the occurrence of the process $I \rightarrow R$, in which case the individual acquires a permanent immunization. The recurrent infection is relevant to those diseases for which the full immunization is achieved after the infection has been acquired more than once.

It is found that the critical properties place the model in the DyP universality class except when the rate c of reaction $I \rightarrow R$ vanishes, in which case the model reduces to the SIS, equivalent to the contact model. In this case, the model belongs to the DP universality class. If we interpret the model studied here as the contact process with the addition of the process $I \rightarrow R$, then we may conclude that the parameter c is a relevant parameter. That is, for $c \neq 0$, the model leaves the DP universality class.

The DyP universal critical behavior of the model studied here confirms the idea that some modifications of a model does not change the critical behavior. Here, the modification is the introduction of recurrent infection in the SIR model. In the present case we can use moreover the argument of Grassberger [12] according to which the SIR model and slight modifications of the SIR model have stationary behavior similar to isotropic percolation, including the critical behavior.

References

- [1] N.T.J. Bailey, *The Mathematical Theory of Epidemics*, Hafner, New York, 1957.
- [2] M.S. Bartlett, *Stochastic Population Models in Ecology and Epidemiology*, Methuen, London, 1960.
- [3] R.M. Nisbet, W.S.C. Gurney, *Modelling Fluctuating Populations*, Wiley, New York, 1982.
- [4] R.M. Anderson, R.M. May, *Infectious Diseases of Humans*, Oxford University Press, Oxford, 1991.
- [5] E. Renshaw, *Modelling Biological Population in Space and Time*, Cambridge University Press, Cambridge, 1991.
- [6] D. Mollison (Ed.), *Epidemic Models*, Cambridge University Press, Cambridge, 1995.
- [7] A. Hastings, *Population Biology: Concepts and Models*, Springer, New York, 1996.
- [8] M.J. Keeling, P. Rohani, *Modeling Infectious Diseases in Humans and Animals*, Princeton University Press, Princeton, 2008.
- [9] T. Tomé and, M.J. de Oliveira, *Stochastic Dynamics and Irreversibility*, Springer, 2015.
- [10] W.O. Kermack, A.G. McKendrick, *Proc. R. Soc. Lond. Ser. A* 115 (1927) 700.
- [11] N.T.J. Bailey, *Biometrika* 40 (1953) 177.
- [12] P. Grassberger, *Math. Biosci.* 62 (1983) 157.
- [13] J.L. Cardy, *J. Phys. A* 16 (1983) L709.
- [14] J.L. Cardy, P. Grassberger, *J. Phys. A* 18 (1985) L267.
- [15] T. Ohtsuki, T. Keyes, *Phys. Rev. A* 33 (1986) 1223.
- [16] M. Henkel, H. Hinrichsen, S. Lübeck, *Non-Equilibrium Phase Transitions*, in: *Absorbing Phase Transitions*, vol. I, Springer, Dordrecht, 2008.
- [17] E. Arashiro, T. Tomé, *J. Phys. A* 40 (2007) 887.
- [18] D.R. Souza, T. Tomé, *Physica A* 389 (2010) 1142.
- [19] R. da Silva, H.A. Fernandes, *J. Stat. Mech.* (2015) P06011.
- [20] T. Tomé and, R.M. Ziff, *Phys. Rev. E* 82 (2010) 051921.
- [21] T. Tomé, M.J. de Oliveira, *J. Phys. A* 44 (2011) 095005.
- [22] D.R. de Souza, T. Tomé, R.M. Ziff, *J. Stat. Mech.* (2011) P03006.
- [23] A.H.O. Wada, T. Tomé, M.J. de Oliveira, *J. Stat. Mech.* (2015) P04014.
- [24] V. Colizza, A. Barrat, M. Barthélemy, A.-J. Valleron, A. Vespignani, *PLoS Med.* 4 (2007) e13.
- [25] L. Böttcher, O. Woolley-Meza, N.A.M. Araújo, H.J. Herrmann, D. Helbing, *Sci. Rep.* 5 (2015) 16571.
- [26] J. Marro, R. Dickman, *Nonequilibrium Phase Transitions in Lattice Models*, Cambridge University Press, Cambridge, 1999.

Apêndice B

Artigo publicado sobre a dinâmica para duas espécies biológicas e dois nichos ecológicos

Segue o artigo publicado sobre a dinâmica estocástica para duas populações biológicas e dois nichos ecológicos.

Stochastic dynamics for two biological species and ecological niches

Flávia M. Ruziska^a, Everaldo Arashiro^b, Tânia Tomé^{a,*}

^a Instituto de Física, Universidade de São Paulo, Rua do Matão, 1371, 05508-090 São Paulo, SP, Brazil

^b Instituto de Matemática, Estatística e Física, Universidade Federal do Rio Grande, Av. Itália, km 8, 96203-900 Rio Grande, RS, Brazil

HIGHLIGHTS

- Biological motivated models treated by means of stochastic dynamics.
- The role of noise in the description of population biology oscillations.
- Stochastic spatial-structured model with four states describing the alternating dominance between two biological species.
- Cyclic dominance.

ARTICLE INFO

Article history:

Received 1 May 2017

Received in revised form 28 June 2017

Available online 4 August 2017

Keywords:

Population biology models

Birth and death master equation

Stochastic dynamics

Space-structured models

ABSTRACT

We consider an ecological system in which two species interact with two niches. To this end we introduce a stochastic model with four states. Our analysis is founded in three approaches: Monte Carlo simulations of the model on a square lattice, mean-field approximation, and birth and death master equation. From this last approach we obtain a description in terms of Langevin equations which show in an explicit way the role of noise in population biology. We focus mainly on the description of time oscillations of the species population and the alternating dominance between them. The model treated here may provide insights on these properties.

© 2017 Elsevier B.V. All rights reserved.

1. Introduction

The dynamics of populations in biology is often described by deterministic models such as the Lotka–Volterra model [1]. However, if we wish to take into account, in an explicit way, the fluctuations in the number of individuals of each species that are observed in population biology, we should use stochastic models [1–6]. These stochastic models can be space structured or non-space structured. In the first case we find stochastic lattice models, which are defined on a lattice in which each site has a stochastic variable that describes each biological individual [6–18]. For instance, in the case of the predator–prey model each site can be occupied by a predator, by a prey or can be empty. Also, there are stochastic lattice models in which each site is occupied by a colony instead of an individual, called colony-based lattice models [19], which is the type of model that we consider here. In the non-space structured stochastic models, the state of the whole system is described by the number of colonies of each biological species, an approach called birth-and-death process [6,10,11,20].

In the present article we are concerned with an ecological issue related to the dynamics of cyclic dominance between species. The issue of cyclic dominance has been treated in the context of game theory [21–25]. However, here we develop an approach which can be formally connected to the problem of species and their environments, treated by Lewontin [26] and

* Corresponding author.

E-mail address: ttome@if.usp.br (T. Tomé).

Fig. 1. Reactions: $1 \rightarrow 2$ and $3 \rightarrow 4$ are catalytic and $2 \rightarrow 3$ and $4 \rightarrow 1$ are spontaneous.

known as niche construction [27]. That is, species colonies can survive, develop and alter different environments, which are dynamically modified by the presence of the species. Specifically, we consider two biological species whose individuals group themselves into colonies. In our model each site of the lattice can be occupied by one of the two types of species colonies, which we call type A and B. The species colony A (B) proliferates and survives for a certain time in niche A (B) and eventually disappears leaving a modified niche B (A). Thus in our model, each site of a lattice may be a niche of type A (state 1), or can be occupied by a colony A (state 2), or may be a niche of type B (state 3), or can be occupied by a colony B (state 4). The local dynamics is cyclic as can be seen in Fig. 1: a site in state 1 becomes state 2, which in turn becomes 3; and a site in state 3 becomes state 4, which in turn becomes 1. Details of the dynamics will be explained further on.

The stochastic lattice model will be analyzed by means of dynamic mean-field approximation and Monte Carlo simulations. Our results show that, depending on the set of the parameters of the model, the following states can be attained: an absorbing state where both species are extinct, and active states where both species survive. The active states can be of two types: one where the densities of each species are constant in time; and an active state where both population densities oscillate in time and show alternating dominance. The mean-field results show only damped oscillations. From the Monte Carlo simulations for finite systems, it was also detected an active state where both population densities oscillate in time with the same characteristic frequency. The amplitude of the oscillations decay with $1/\sqrt{N}$, where N is the system size. However, oscillations always occur at a local level. And due to the dynamic character of the oscillations in the system the most appropriated way to characterize them is through time correlation functions associated to the densities of each species. These quantities show a clearer scenario of the time oscillations.

We have also analyzed the model within the birth and death stochastic approach. In this case, there are only four dynamic variables which are: the number of colonies of type A, the number of niches of type A, the number of colonies of type B, and the number of niches of type B. From this approach we get qualitatively the same conclusions stated above.

This article is organized as follows. In Section 2 we describe the model and present Monte Carlo simulations. The master equation and mean-field approximation are described in Section 3. Properties of the system and a phase diagram are presented in this section. In Section 4 we introduce a birth and death approach. Particularly we analyze the oscillations by means of the time correlations functions of the species densities. We discuss and summarize our results in Section 5.

2. Model and Monte Carlo simulations

Each site of a lattice can be in one of the four states, denoted 1, 2, 3, and 4, representing, respectively a niche of type A, a colony of species A, a niche of type B, and a colony of species B, as shown in Fig. 1. The dynamics is defined as follows. A certain site is chosen at random. The following procedure is applied: (a) if the chosen site is in state 1, it becomes 2 with probability a times the fraction of nearest neighbor sites in state 2; (b) if it is in state 2, it becomes 3 with probability b ; (c) if it is in state 3, it becomes 4 with probability c times the fraction of nearest neighbor sites in state 4; and (d) if it is in state 4, it becomes 1 with probability d . As initial condition, we choose a completely random configuration, that is, a configuration in which each site of the lattice can be in one of the four states with equal probability. We choose the parameters a , b , c and d in such a way that their sum is equal to one, $a + b + c + d = 1$. In addition we analyze the case in which $a + b = c + d$. This allows us to use the following parametrization

$$a = (1 + r_1)/4, \quad b = (1 - r_1)/4, \quad c = (1 + r_2)/4, \quad d = (1 - r_2)/4, \quad (1)$$

where r_1 and r_2 are the two new independent parameters.

Starting from the initial random configuration, we have performed the simulations on a square lattice with $L \times L$ sites. We used $L = 80$ with periodic boundary conditions. After discarding the first 10^5 Monte Carlo steps we determine for each Monte Carlo step the densities x_1 , x_2 , x_3 , and x_4 , of niches of type A, colonies of species A, niches of type B, and colonies of species B, respectively. We have also determined the time correlation function $C_{k\ell}$ related to the colonies k and ℓ , defined by

$$C_{k\ell}(t, t_0) = \frac{\langle x_k(t_0)x_\ell(t_0 + t) \rangle - \langle x_k(t_0) \rangle \langle x_\ell(t_0) \rangle}{\sigma_k \sigma_\ell} \quad (2)$$

where t_0 is the waiting time and t is the observing time, and

$$\sigma_k = \sqrt{\langle x_k(t_0)x_k(t_0) \rangle - \langle x_k(t_0) \rangle \langle x_k(t_0) \rangle} \quad (3)$$

Fig. 2. Monte Carlo simulations of the model defined on a square lattice. (a) Density x_2 of colony A as a function of time t . (b) Time correlation C_{22} for colony A as a function of the observation time t . The values of the parameters are $r_2 = r_1 = 0.85, 0.90$, and 0.95 .

Figs. 2 and 3 show the densities of the colonies x_2 and x_4 as functions of time. In Fig. 2, we see that the densities display time oscillations with noise, characterized by an oscillatory exponential of the correlation, called phase forgetting quasi-cycles [4], as well as noise without oscillations, characterized by a pure exponential decay of the correlation. In Fig. 3, the densities display only phase forgetting quasi-cycle behavior.

3. Master equation and mean-field approximation

To set up a master equation, we start by associating to each site of a lattice a variable η_i that takes the values 1, (niche of type A), 2 (colony of type A), 3 (niche of type B), and 4 (colony of type B). The local transitions were defined above and are as follows: (a) catalytic reaction $1 \rightarrow 2$ with rate a (b) spontaneous reaction $2 \rightarrow 3$ with rate b ; (c) catalytic reaction $3 \rightarrow 4$ with rate c ; (d) spontaneous reaction $4 \rightarrow 1$ with rate d . These transitions, understood as reactions, are shown in Fig. 1. Let us denote by $w_i(\eta)$ the transition rate from $\eta_i \rightarrow \eta_i + 1 \pmod{4}$. Whenever the state 0 appears, it should be understood as state 4. According to these rules, it is given by

$$w_i(\eta) = \delta(\eta_i, 1) \frac{a}{\zeta} \sum_{j(i)} \delta(\eta_j, 2) + b \delta(\eta_i, 2) + \delta(\eta_i, 3) \frac{c}{\zeta} \sum_{j(i)} \delta(\eta_j, 4) + d \delta(\eta_i, 4) \quad (4)$$

where the summation is over the nearest neighbors of site i , and a, b, c and d are parameters, and ζ is the number of nearest neighbors. In the case of a square lattice, $\zeta = 4$.

The master equation, which gives the time evolution of the probability $P(\eta, t)$ of state $\eta = \{\eta_i\}$ at time t is given by

$$\frac{d}{dt} P(\eta, t) = \sum_i \{w_i(\eta^i) P(\eta^i, t) - w_i(\eta) P(\eta, t)\} \quad (5)$$

where η^i is the state obtained from η by changing the stochastic variable η_i , associated to site i , to $\eta_i - 1 \pmod{4}$.

Fig. 3. (a) Densities x_2 and x_4 of colonies A and B as functions of time t , obtained by Monte Carlo simulations on a square lattice of linear size $L = 80$. (b) Time auto-correlations C_{22} and C_{44} , and cross-correlation C_{24} as functions of the observation time t . The values of the parameters are $r_1 = 0.78$ and $r_2 = 0.80$.

From the master equation we get the following expression for the time evolution of the average $\langle A(\eta) \rangle$ of a generic state function $A(\eta)$:

$$\frac{d}{dt} \langle A(\eta) \rangle = \sum_i \langle \{A(\eta^i) - A(\eta)\} w_i(\eta) \rangle. \quad (6)$$

Let us consider the time evolution of the marginal probabilities $P(1)$, $P(2)$, $P(3)$ and $P(4)$, which are respectively the probability of a given site being in states 1, 2, 3, and 4. Assuming translational invariance and isotropy properties, and using Eqs. (4), (5), and (6), we get

$$\frac{d}{dt} P(1) = dP(4) - aP(12) \quad (7)$$

$$\frac{d}{dt} P(2) = aP(12) - bP(2) \quad (8)$$

$$\frac{d}{dt} P(3) = bP(2) - cP(34) \quad (9)$$

$$\frac{d}{dt} P(4) = cP(34) - dP(4) \quad (10)$$

where $P(12)$ is the probability of a given site is in state 1 and a nearest neighbor in state 2. Similarly, we define $P(34)$.

Here we approximate a two site probability by a product of one site probabilities, that is, $P(\eta_i, \eta_j) = P(\eta_i)P(\eta_j)$. Using the notation $x_1 = P(1)$, $x_2 = P(2)$, $x_3 = P(3)$, and $x_4 = P(4)$, we may write, in this approximation,

$$\frac{dx_1}{dt} = dx_4 - ax_1x_2 \quad (11)$$

$$\frac{dx_2}{dt} = ax_1x_2 - bx_2 \quad (12)$$

$$\frac{dx_3}{dt} = bx_2 - cx_3x_4 \quad (13)$$

$$\frac{dx_4}{dt} = cx_3x_4 - dx_4. \quad (14)$$

In the stationary state, one solution is $x_2 = 0, x_4 = 0$. The other is the active state, given by

$$x_1 = \frac{b}{a} \quad x_2 = \frac{d(ac - bc - ad)}{ac(b + d)} \quad (15)$$

$$x_3 = \frac{d}{c} \quad x_4 = \frac{b(ac - bc - ad)}{ac(b + d)} \quad (16)$$

The conditions $x_1 \leq 1, x_3 \leq 1, x_2 \geq 0$, and $x_4 \geq 0$, give the following restrictions for the active state,

$$b \leq a, \quad d \leq c \quad ac \geq bc + ad. \quad (17)$$

In terms of the parameters r_1 and r_2 , defined in Eq. (1), the active state is given by

$$0 \leq r_1, \quad 0 \leq r_2 \quad 3r_1r_2 + r_1 + r_2 - 1 \geq 0. \quad (18)$$

To analyze the stability of the active state we determine the eigenvalues of the Hessian

$$H = \begin{pmatrix} ax_1 - b & 0 & 0 & ax_2 \\ b & -cx_4 & -cx_3 & 0 \\ 0 & cx_4 & cx_3 - d & 0 \\ -ax_1 & 0 & d & -ax_2 \end{pmatrix}. \quad (19)$$

One eigenvalue is zero. The others are given by the equation

$$\lambda^3 + A\lambda^2 + B\lambda + C = 0 \quad (20)$$

where

$$A = [b - a(x_1 - x_2)] + [d - c(x_3 - x_4)] \quad (21)$$

$$B = abx_2 + cdx_4 + [d - c(x_3 - x_4)][b - a(x_1 - x_2)] \quad (22)$$

$$C = abx_2[d - c(x_3 - x_4)] + cdx_4[b - a(x_1 - x_2)]. \quad (23)$$

Taking into account that $ax_1 = b$ and $cx_3 = d$ then

$$A = ax_2 + cx_4 \quad (24)$$

$$B = abx_2 + cdx_4 + acx_2x_4 \quad (25)$$

$$C = acx_2x_4(b + d). \quad (26)$$

Let us assume that the cubic equation (20) has one pair of complex conjugate roots $\alpha \pm i\beta$. Then the other root should be real, which we call λ_0 . If $\alpha < 0$ and $\lambda_0 < 0$ and in addition $\beta \neq 0$ the active state is characterized by an oscillating behavior. The limit of stability occurs when $\beta \rightarrow 0$. In this case the cubic equation (20) should be of the type $(\lambda - \lambda_0)(\lambda - \alpha)^2 = 0$, which implies that A, B and C are connected to α and λ_0 by

$$A = -2\alpha - \lambda_0 \quad (27)$$

$$B = \alpha^2 + 2\alpha\lambda_0 \quad (28)$$

$$C = -\alpha^2\lambda_0 \quad (29)$$

and, therefore, there is a relation among them. To get this relation we eliminate α and λ_0 from these three equations to find

$$(27C + 2A^3 - 9AB)^2 = 4(A^2 - 3B)^3. \quad (30)$$

Replacing the values of A, B, C , and D in terms of a, b, c , and d and using the parametrization defined in Eq. (1), we get the line of separation between the active oscillating and the active non-oscillating states as shown in the phase diagram of Fig. 4. For the special cases where $r_2 = r_1$, we have: (a) absorbing state, $r_1 \leq 1/3$; (b) active state, $r_1 > 1/3$; (b1) oscillating active occurs when $1/3 < r_1 < 17/19$; and (b2) non-oscillating active when $1 > r_1 > 17/19$. The behavior of the densities of colonies and niches as functions of r_1 are shown in Fig. 5.

Fig. 4. Phase diagram in the variables r_1 and r_2 showing the absorbing (Ab) and active (Ac) regions. The active region is divided into two subregions, which are associated to the oscillating and non-oscillating behavior (the small region on the upper right corner).

Fig. 5. Densities as a function of r_1 for $r_2 = 0.5$. Species A (x_2) dominates over species B (x_4) when $r_1 > 0.5$.

4. Birth and death approach

Here we consider a stochastic approach in which the state of the system is taken to be the number of each type of species colonies and each type of niches. We denote by n_1 and n_3 the number of niches of type A and B, respectively, and by n_2 and n_4 the number of colonies of type A and B, respectively. We assume the following transition rules:

$$n_1 \rightarrow n_1 - 1 \quad n_2 \rightarrow n_2 + 1 \quad \text{rate} \quad w_1 = an_1 \frac{n_2}{N} \quad (31)$$

$$n_2 \rightarrow n_2 - 1 \quad n_3 \rightarrow n_3 + 1 \quad \text{rate} \quad w_2 = bn_2 \quad (32)$$

$$n_3 \rightarrow n_3 - 1 \quad n_4 \rightarrow n_4 + 1 \quad \text{rate} \quad w_3 = cn_3 \frac{n_4}{N} \quad (33)$$

$$n_4 \rightarrow n_4 - 1 \quad n_1 \rightarrow n_1 + 1 \quad \text{rate} \quad w_4 = dn_4 \quad (34)$$

where a, b, c , and d are parameters, as before, and N is the total number of niches and colonies, that is $n_1 + n_2 + n_3 + n_4 = N$.

Fig. 6. (a) Density x_2 of colony A as a function of time t . (b) Time correlation C_{22} for colony A as a function of the observation time t . The values of the parameters are $r_2 = r_1 = 0.5, 0.7$, and 0.9 . Results obtained from the birth and death stochastic approach.

Let us define the vector $n = (n_1, n_2, n_3, n_4)$. The master equation, which governs the time evolution of the probability distribution $P(n)$, is given by

$$\frac{d}{dt}P(n) = \sum_{i=1}^4 \{w_i(n - e_i)P(n - e_i) - w_i(n)P(n)\} \quad (35)$$

where e_i is one of the vectors $e_1 = (-1, 1, 0, 0)$, $e_2 = (0, -1, 1, 0)$, $e_3 = (0, 0, -1, 1)$, and $e_4 = (1, 0, 0, -1)$.

The time evolution of the average $\langle F(n) \rangle$ of a certain state function $F(n)$ is given by

$$\frac{d}{dt}\langle F(n) \rangle = \sum_{i=1}^4 \langle [F(n + e_i) - F(n)]w_i(n) \rangle. \quad (36)$$

We consider now the equations for the time evolution of the variables $\langle n_1 \rangle$, $\langle n_2 \rangle$, $\langle n_3 \rangle$, and $\langle n_4 \rangle$. They are given by

$$\frac{d}{dt}\langle n_1 \rangle = -\langle w_1(n) \rangle + \langle w_4(n) \rangle \quad (37)$$

$$\frac{d}{dt}\langle n_2 \rangle = \langle w_1(n) \rangle - \langle w_2(n) \rangle \quad (38)$$

$$\frac{d}{dt}\langle n_3 \rangle = \langle w_2(n) \rangle - \langle w_3(n) \rangle \quad (39)$$

$$\frac{d}{dt}\langle n_4 \rangle = -\langle w_4(n) \rangle + \langle w_3(n) \rangle. \quad (40)$$

We now wish to analyze the master equation in the regime of large N . In this case it is possible to transform the master equation into a Fokker–Planck equation. To this end, we define the variables $x_i = n_i/N$ and consider the probability

Fig. 7. (a) Densities x_2 and x_4 of colonies A and B as functions of time t . (b) Time correlations C_{22} , C_{44} , C_{24} , as functions of the observation time t . The values of the parameters are $r_1 = 0.7$ and $r_2 = 0.8$. Results obtained from the birth and death stochastic approach.

distribution $\rho(x) = \rho(x_1, x_2, x_3, x_4)$ such that

$$\frac{d}{dt}\rho(x) = N \sum_{i=1}^4 \{\alpha_i(x - e_i/N)\rho(x - e_i/N) - \alpha_i(x)\rho(x)\} \quad (41)$$

where we have defined $\alpha_i(x) = w_i(n)/N$. For large N we can write as

$$\frac{d}{dt}\rho = \sum_{i=1}^4 \left(-\frac{\partial}{\partial x_i} [(\alpha_{i-1} - \alpha_i)\rho] + \frac{1}{2N} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} [(\alpha_i + \alpha_{i-1})\rho] - \frac{1}{N} \frac{\partial^2(\alpha_i \rho)}{\partial x_i \partial x_{i+1}} \right) \quad (42)$$

which is a Fokker–Planck equation, where

$$\alpha_1 = ax_1x_2 \quad \alpha_2 = bx_2 \quad \alpha_3 = cx_3x_4 \quad \alpha_4 = dx_4. \quad (43)$$

To this Fokker–Planck equation corresponds the following Langevin equation

$$\frac{dx_i}{dt} = \alpha_{i-1} - \alpha_i + \zeta_{i-1}(t) - \zeta_i(t) \quad (44)$$

where ζ_i are white Gaussian noises with the following properties

$$\langle \zeta_i(t) \rangle = 0 \quad \langle \zeta_i(t) \zeta_j(t') \rangle = \frac{\alpha_i}{N} \delta_{ij} \delta(t - t'). \quad (45)$$

In the limit $N \rightarrow \infty$, the noise vanishes and only the deterministic part of the Langevin equations remains. The Langevin equation reduces then to the mean-field equations obtained previously in Section 3. However, in real populations the total number of individuals is finite. Thus the appropriate description of biological population should be described by a finite, although large, N .

In Figs. 6 and 7 we show the density of colonies as a function of time after the transient regime. We see that the stochastic fluctuations are present. Moreover, the amplitude of the fluctuations is proportional to $1/\sqrt{N}$ which is a consequence of the noise part of the Langevin equations.

The next step is to analyze the type of fluctuations. To this end we determine the correlation function, defined by Eq. (2). Fig. 6 shows the time correlation calculated by using Eq. (2) for several values of the parameters. For $r_2 = r_1 = 0.5$ and 0.7 , the correlation has an oscillatory exponential decay. This means that the population density oscillates with noise, a behavior called phase-forgetting quasi cycle, consisting of damped oscillations with exponential amplitude decay at long observation time [4]. For $r_2 = r_1 = 0.9$, the correlation is a pure exponential decay. This means that the population densities has a pure noise fluctuation.

5. Conclusion

We have analyzed a model describing the dynamics of two species and their niches. This study was performed by means of Monte Carlo simulations on a square lattice, mean-field approximation and a stochastic birth and death process. The results obtained by the three approaches are qualitatively in agreement. However, we wish to point out that the birth and death approach is perhaps the simplest and more appropriate approach if we want just to consider the noise behavior observed in population densities. We have focused on the noisy time oscillating behavior of the population. Of course, if we want to look for the spatial distribution of species, we have to use the spatial-structured stochastic models.

We have observed that under certain circumstances the model is able to describe the oscillatory alternating of dominance [28] of one species over the other. In fact, from Figs. 3 and 7, we can see that at various instants of time the densities of colonies of species A (B) increases (decreases) as the densities of colony B (A) decreases (increases). This model may provide insights on the scenario of alternating dominance and oscillatory behavior of different species in an ecosystem. For example, in marine ecosystems the alternations in dominance and oscillations related to two species of fish is a relevant problem that has been analyzed by different authors [29,30]. Another example comes from the alternating dominance exhibited by various species of ants in tropical rain forests [31,32]. In a future work we will consider also the effect of dispersion in the present population dynamics. This will be done by using the spatial structured stochastic model and by the inclusion of diffusion processes. The dispersion is recognized as an important factor in describing the dynamics of species population as remarked by several authors [29,33,31].

Acknowledgment

F. M. R. wishes to acknowledge the Brazilian Agency FAPESP (2012/22929-9) for financial support.

References

- [1] A. Hastings, *Population Biology: Concepts and Models*, Springer, New York, 1996.
- [2] R. Durrett, S. Levin, *Theor. Popul. Biol.* 46 (1994) 363.
- [3] M.S. Bartlett, *Stochastic Population Models in Ecology and Epidemiology*, Methuen, London, 1960.
- [4] R.M. Nisbet, W.C.S. Gurney, *Modelling Fluctuating Populations*, Blackburn Press, 2003.
- [5] E. Renshaw, *Modelling Biological Population in Space and Time*, Cambridge University Press, Cambridge, 1991.
- [6] T. Tomé, M.J. de Oliveira, *Stochastic Dynamics and Irreversibility*, Springer, 2015.
- [7] J.E. Satulovsky, T. Tomé, *Phys. Rev. E* 49 (1994) 5073.
- [8] E. Arashiro, T. Tomé, *J. Phys. A* 40 (2007) 887.
- [9] E. Arashiro, A.L. Rodrigues, M.J. de Oliveira, T. Tomé, *Phys. Rev. E* 77 (2008) 061909.
- [10] T. Tomé, M.J. de Oliveira, *Phys. Rev. E* 79 (2009) 061128.
- [11] D.R. Souza, T. Tomé, *Phys. A* 389 (2010) 1142.
- [12] U.C. Täuber, *J. Phys. A* 45 (2012) 405002.
- [13] J. Vukov, A. Szolnoki, G. Szabó, *Phys. Rev. E* 88 (2013) 022123.
- [14] A.F. Lütz, S. Risau-Guzman, J.J. Arenzon, *J. Theoret. Biol.* 317 (2013) 286.
- [15] S. Fukui, K.S. Araki, *PLoS One* 9 (2014) 116111.
- [16] S. Chen, U.C. Täuber, *Phys. Biol.* 13 (2016) 025005.
- [17] C. Argolo, P. Barros, T. Tomé, E. Arashiro, I. Gleria, M.L. Lyra, *J. Stat. Mech.* (2016) P083204.
- [18] F. Keesen, A. Castro e Silva, E. Arashiro, C.F.S. Pinheiro, *Ecol. Model.* 344 (2017) 38.
- [19] M. Nakamaru, Y. Beppu, K. Tsuji, *J. Theoret. Biol.* 248 (2007) 288.
- [20] R.B. Schinazi, *Classical and Spatial Stochastic Processes with Applications To Biology*, second ed., Springer, New York, 2014.
- [21] G. Szabó, G.A. Sznaider, *Phys. Rev. E* 69 (2004) 031911.
- [22] G. Szabó, *J. Phys. A* 38 (2005) 6689.
- [23] G. Szabó, A. Szolnoki, *Phys. Rev. E* 77 (2008) 011906.
- [24] C. Rulquin, J.J. Arenzon, *Phys. Rev. E* 89 (2014) 032133.
- [25] A. Cazaubiel, A.F. Lütz, J.J. Arenzon, *arXiv*:1611.09624.
- [26] R. Lewontin, *The Triple Helix: Gene, Organism, and Environment*, Harvard University Press, 2000.
- [27] J. Odlin-Smee, D.H. Erwin, E.P. Palkovacs, M.W. Feldman, K.N. Laland, *Q. Rev. Biol.* 88 (2013) 3.
- [28] M. Begon, C.R. Townsend, J.L. Harper, *Ecology: From Individuals Do Ecosystems*, Blackwell, 2006.
- [29] H. Nakata, S. Funakoshi, M. Nakamura, *Fish. Oceanogr.* 9 (2000) 248.
- [30] J. Alheit, A. Bakun, *J. Mar. Syst.* 79 (2010) 267.
- [31] L. Lach, C.L. Parr, K.L. Abott (Eds.), *Ant Ecology*, Oxford University Press, 2010.
- [32] A.B. Gontijo, *Estudo e modelagem das dinâmicas estruturais de assembleias de formigas tropicais em diferentes escalas ecológicas*, Master Thesis, Universidade Federal de Ouro Preto, 2009.
- [33] E.R. Ricklefs, G.L. Miller, *Ecology*, Freeman, 2000.