

19/12/95

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO  
INSTITUTO DE FÍSICA

# MODELO ESTOCÁSTICO PARA UM SISTEMA PREDADOR-PRESA

Javier Eduardo Satulovsky



---

Tese apresentada ao Instituto de  
Física da Universidade de São  
Paulo para obtenção do título de  
Doutor em Ciências

---

Banca Examinadora :

Profª. Dra. Tânia Tomé Martins de Castro (orientadora)

Profª. Dra. Vera B. Henriques

Prof. Dr. José R. Drugowich de Felício

Prof. Dr. Nelson I. Tanaka

Prof. Dr. Paulo Bisch

*Tânia L. Castro.*

*Iberê Luiz Caldas*

Prof. Iberê Luiz Caldas  
Presidente da Comissão de Pós-Graduação

SÃO PAULO

1995

SBI-IFUSP



305M810T2356

A Elsa e Ricardo

# Agradecimentos

Quero expressar meus sinceros agradecimentos, em primeiro lugar, à Profa. Tânia Tomé Martins de Castro, minha orientadora, cuja paciência para comigo me surpreendeu em mais de uma oportunidade. Também aos Professores do Grupo de Mecânica Estatística do IFUSP, pelo constante apoio e respeito com que fui tratado.

De uma forma que hoje não posso avaliar plenamente, têm contribuído para minha formação amigos e colegas de pós-graduação. São só alguns deles: Kaline Coutinho, Francisco Barbosa e sua família, Claudio Shida, Mauro Copelli, Silvia Kuva, Mário Tamashiro, Marcos Yamaguti, Inés e Ricardo Sauerwein. Mário e Marcos tornaram o meu tortuoso relacionamento com os seres de silício numa história com final feliz (talvez, seja certo, Marcos, ... “Os computadores também amam”).

Preciso dedicar um parágrafo a duas pessoas que São Paulo me apresentou, e com as quais espero nunca perder contato. São eles Cristiano R. de Mattos e Roberta Simonetti. Para ambos, gostaria de fazer minhas estas palavras,

... For just as a new friend enriches our spirit, not so much by what he gives us of himself, as by what he causes us to discover in our own selves, something which, if we had never known him, would have lain in us undeveloped, ...

Miguel de Unamuno,  
Salamanca, Abril de 1921.

Agradeço à FAPESP (Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo) pelo apoio financeiro.

# Resumo

Neste trabalho introduzimos e estudamos um modelo estocástico de gás de rede para descrever a evolução de um sistema de partículas interagentes que representam duas espécies: *presas e predadores*. As presas se reproduzem autocataliticamente ocupando sítios vazios de uma rede. Os predadores também se reproduzem autocataliticamente mas às expensas das presas, e morrem via aniquilação espontânea. As regras locais e irreversíveis do modelo, de dois parâmetros, são inspiradas no modelo de Lotka-Volterra e no processo de contato. No regime estacionário o modelo apresenta três fases. A primeira corresponde a um estado absorvente em que as presas cobrem toda a rede. A segunda é caracterizada por valores médios não nulos das densidades de cada espécie. À medida que variamos os parâmetros dentro dessa fase surgem oscilações locais nas densidades. A segunda fase está separada da primeira através de uma linha de transição de fases cinética contínua. Essa linha crítica encontra-se na classe de universalidade da percolação dirigida em  $d + 1$  dimensões, com exceção de um ponto terminal que pertence à classe de universalidade da percolação ordinária. A terceira fase corresponde a um outro estado absorvente em que as duas espécies foram exterminadas. A transição da segunda para a terceira fase é contínua e também pertence à classe de universalidade da percolação dirigida em  $d + 1$  dimensões. Os resultados foram obtidos por meio de simulações computacionais bem como através de métodos analíticos aproximados.

# Abstract

In this work, we introduce and study a stochastic lattice gas model for the evolution of an interacting particle system describing two species: prey and predators. Prey undergo autocatalytic reproduction on empty sites of a lattice. Predators also reproduce autocatalytically at the expense of prey, as well as suffer spontaneous annihilations. The irreversible local rules of the model, involving two parameters, are inspired both in the Lotka-Volterra model and the contact process. In the stationary regime, the model shows three phases. The first one is associated to an absorbing state in which the lattice is completely covered by prey. The second one is characterized by finite values of the density of each species. As we tune the parameters values inside that phase, local oscillations in the population densities start to appear. The second phase is reached from the first one through a line of continuous kinetic phase transitions. The line belongs to the universality class of directed percolation in  $d + 1$  dimensions, except for its terminal point, which belongs to the universality class of ordinary percolation. The third phase corresponds to another absorbing state completely devoided of particles. The transition from the second to the third phase is continuous and also belongs to universality class of directed percolation in  $d + 1$  dimensions. The model has been studied by means of computer simulations as well as by using approximate analytical technics.

# Índice

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
1.1	Sistemas fora do equilíbrio . . . . .	1
1.2	Sistemas de partículas interagentes. O Processo de Contato . . . . .	2
1.3	Programa desta tese . . . . .	4
<b>2</b>	<b>Descrição estocástica de processos irreversíveis</b>	<b>6</b>
2.1	A Equação mestra . . . . .	6
2.2	Balanço detalhado, simetria e soluções assintóticas da equação mestra . . .	7
<b>3</b>	<b>Modelo estocástico de gas de rede para um sistema predador-presa</b>	<b>10</b>
3.1	Introdução . . . . .	10
3.2	Dinâmica do sistema . . . . .	10
3.3	Equação mestra e equações de evolução para as correlações . . . . .	14
<b>4</b>	<b>Estados estacionários espacialmente homogêneos</b>	<b>17</b>
4.1	Introdução . . . . .	17
4.2	Aproximação de campo médio simples ( $n = 1$ ) . . . . .	18
4.3	Aproximação de campo médio com pares ( $n = 2$ ) . . . . .	20
<b>5</b>	<b>Simulações de Monte Carlo</b>	<b>24</b>
5.1	O algoritmo . . . . .	24
5.2	Diagrama de fases preliminar . . . . .	25
<b>6</b>	<b>Instabilidades espaço-temporais</b>	<b>31</b>
6.1	Equações de campo médio simples para correlações não-homogêneas . . . .	31
6.2	Diagrama de fases do sistema não homogêneo na aproximação de pares . .	33
<b>7</b>	<b>Comportamento crítico</b>	<b>38</b>
7.1	Introdução . . . . .	38
7.2	Simulações dependentes do tempo. . . . .	40

7.3 Resultados de simulações dependentes do tempo . . . . .	42
7.4 A região do estado absorvente de vazio. . . . .	48
<b>8 Propagação de ondas e equações de reação-difusão</b>	<b>55</b>
8.1 Introdução: oscilações espaço-temporais e ondas químicas . . . . .	55
8.2 Existem soluções de onda viajante no nosso modelo? . . . . .	58
8.3 Velocidades assintóticas de propagação . . . . .	64
<b>9 Conclusões</b>	<b>67</b>
<b>Apêndice A O modelo de Lotka-Volterra</b>	<b>69</b>
<b>Apêndice B Soluções da equação mestra na aproximação de pares</b>	<b>72</b>
<b>Apêndice C Duas relações entre expoentes e simulações na região subcrítica</b>	<b>73</b>
C.1 Duas relações entre expoentes críticos . . . . .	73
C.2 Simulações de Monte Carlo na região subcrítica com uma fonte . . . . .	74
<b>Apêndice D Soluções de onda viajante na equação de Fisher</b>	<b>77</b>
<b>Bibliografia</b>	<b>81</b>

# Capítulo 1

## Introdução

### 1.1 Sistemas fora do equilíbrio

Os sistemas fora do equilíbrio são um campo em aberto e o seu estudo representa um desafio, tanto pela variedade de comportamentos que eles apresentam, como pela ausência de uma teoria unificada para descrevê-los.

No regime estacionário, existem fluxos de matéria e energia através destes sistemas. Assim, sem uma função de energia livre, os métodos usuais da Mecânica Estatística não são aplicáveis, devendo-se recorrer à uma descrição explícita da dinâmica para definir cada modelo.

Mas existem também assombrosas semelhanças com os sistemas em equilíbrio termodinâmico. A medida que certos parâmetros de controle são variados (por exemplo a taxa com que os reagentes são fornecidos numa reação química), observa-se, em vários modelos, a existência de *transições de fase cinéticas*. Com isto denotamos uma dependência singular das propriedades dos estados estacionários com os parâmetros. Muitas destas transições envolvem a emergência de novos níveis de organização, fato de grande relevância em Física e Biologia [Nicolis e Prigogine, 1977]. Associando parâmetros de ordem aos estados estacionários, observa-se que alguns modelos apresentam transições de fase contínuas (capítulo 7). Nas proximidades destas transições deixam de existir comprimentos característicos, e têm lugar singularidades, com expoentes críticos associados. Existem classes de universalidade bem definidas, já conhecidas em outras áreas, como em matéria condensada (percolação dirigida [Blase, 1977a]), partículas elementares (teoria de campos de Regge [Brower *et al.*, 1978]), reações químicas autocatalíticas (primeiro e segundo modelo de Schlögl [Schlögl, 1972]), e na modelagem epidemiológica (processo de contato [Harris, 1974]). No capítulo 7 mencionaremos uma conjectura bastante geral sobre o comportamento crítico dos sistemas fora de equilíbrio.

Os *sistemas de partículas interagentes* (SPI, ver próxima seção) têm um im-

portante papel tanto para testar como para gerar novas idéias na área. O modelo que proporemos nesta tese é um SPI irreversível com duas espécies. As regras locais de nosso modelo estão inspiradas no modelo de *Lotka-Volterra* (apêndice A), conhecido há muito tempo em biologia teórica, e ponto de partida, ainda hoje, para modelagens mais realistas. Assim, frequentemente nos referiremos às partículas em termos de *presas* e *predadores*. Porém, o trabalho não tem como finalidade reproduzir ou predizer o comportamento de populações biológicas, a terminologia representa apenas uma alegoria.

Está claro que nosso objeto de estudo será uma simplificação dramática de qualquer sistema real que se pretenda modelar. Mas é esta simplicidade que lhe confere um caráter abstrato e geral, um dos motivos pelos quais os SPI são um paradigma para o estudo de sistemas fora de equilíbrio. Nossas partículas, clássicas, poderão ter o tamanho de uma molécula (reações químicas), de um vírus (epidemias em tecidos celulares), ou tamanho macroscópico (modelagem ecológica).

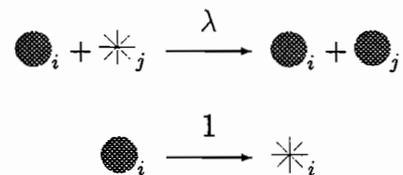
## 1.2 Sistemas de partículas interagentes. O Processo de Contato

Os sistemas de partículas interagentes (SPI) [Liggett, 1985] são processos markovianos nos quais o tempo é contínuo. Estes processos transcorrem num espaço de configuração de partículas. Em outras palavras, o processo está caracterizado por um conjunto de variáveis de ocupação associadas a cada sítio de uma rede,  $\sigma_i$  ( $i \in Z^d$ ,  $\sigma_i = 0, 1, \dots, n$ ). O processo é normalmente definido fornecendo as taxas com que cada transição tem lugar. Estas transições podem ser interpretadas como a aniquilação e criação de partículas. As regras locais que definem as transições podem admitir estados absorventes: estados tais que se o sistema atingir um deles, permanecerá nesse estado para sempre. Como o número de partículas é geralmente infinito, um número infinito delas poderá estar efetuando transições em intervalos de tempo arbitrariamente pequenos. Em outras palavras, restrito a regiões finitas, o sistema não pode apresentar transições que ocorram num mesmo instante de tempo.

O Processo de Contato (PC) pode-se classificar como o protótipo de sistema de partículas interagentes fora de equilíbrio, pelo fato de ser o modelo mais simples (mesmo quando unidimensional e com uma só espécie) apresentando um comportamento não trivial (transição contínua para um estado absorvente). O PC foi estudado originalmente pelo matemático Harris [Harris, 1974], e surge na física por duas vias. Uma delas foi como um modo de calcular os expoentes críticos de transições de fase que têm lugar em processos de espalhamento de hádrons [Brower *et al.*, 1978] (o modelo pertence à mesma classe de universalidade do anterior, mas a conexão com o processo de espalhamento

não é trivial). A outra via, da área das reações físico-químicas, está relacionada com a construção do primeiro modelo de Schlögl [Schlögl, 1972] na rede.

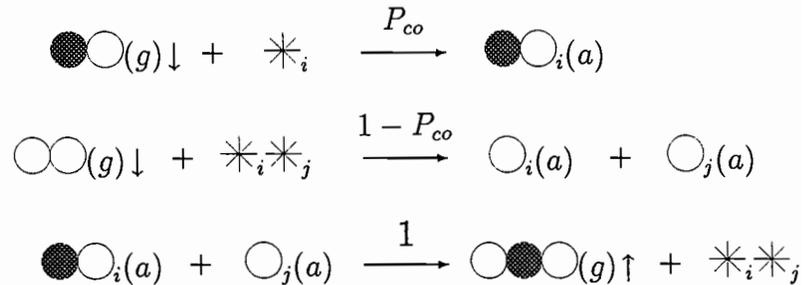
No PC,  $\sigma_i$  assume os valores 0 ou 1 representando sítios que se encontram vazios (sádios) ou ocupados por uma partícula (infectados). Cada partícula gera novas partículas com uma taxa  $\lambda$ . Elas aparecem aleatoriamente na vizinhança de qualquer partícula geradora. De modo que a taxa de criação de partículas num sítio vazio da rede é igual a  $n\lambda/\zeta$  (onde  $\zeta = 2d$ , e  $n$  é o número de partículas vizinhas a esse sítio). Este tipo de regra local é chamada comumente na literatura de *reprodução autocatalítica* (inspirado na linguagem das reações químicas), no sentido que a presença de sítios infectados favorece a *reação* na qual eles mesmos se reproduzem (eles são, simultaneamente, catalizadores e produtos da reação). Assim, os sítios infectados (círculos cheios no diagrama abaixo, ●) aparecem tanto sendo reagentes como catalizadores da reação. As partículas desaparecem a uma taxa unitária, independente do estado dos vizinhos (Os sítios vazios estão representados no diagrama abaixo por estrelas, ✱).



Este modelo apresenta estados ativos (com valores estacionários não nulos na densidade de partículas) para  $d \geq 1$  e  $\lambda \geq \lambda_c(d)$ , e cai num estado *absorvente de vazio* (AV) para valores de  $\lambda$  menores (observemos o fato não trivial de que este tipo de modelos, com interações locais, podem apresentar transições de fase também em dimensão 1). Trabalhos numéricos (simulações de Monte Carlo e expansões em séries temporais) caracterizam a transição como contínua, tomando como parâmetro de ordem a densidade de partículas na rede. Assim, na transição uni-dimensional sabemos, de resultados obtidos mediante expansões em séries [Brower *et al.*, 1978], que  $\lambda_c \cong 3.299$  e  $\beta \cong 0.277 \pm 0.001$  (o que o enquadra na classe de universalidade da Teoria de Campos de Regge ou na classe de Percolação dirigida em 2 dimensões).

Quando mais de uma espécie é introduzida, mesmo em modelos com apenas um parâmetro, comportamentos mais complexos são observados. Talvez o mais popular destes modelos seja o ZGB [Ziff *et al.*, 1986], proposto em 1986 por Ziff, Gulari e Barshad, para descrever a oxidação do monóxido de carbono (CO) em superfícies catalíticas (típicamente Pt). O parâmetro de controle no ZGB está relacionado com a pressão parcial do CO e do oxigênio (O) no estado gasoso (probabilidade de adsorção de cada espécie na superfície). Denotando o átomo de carbono (C) por bolas cheias (●), o O por bolas brancas (○), e

os sítios vazios da superfície por estrelas (\*), o processo vem representado pelas seguintes reações



onde os índices  $i, j$  indicam primeiros vizinhos na rede (superfície),  $(g)$  denota um elemento em estado gasoso,  $(a)$  um elemento adsorvido, e  $P_{co}$  é proporcional a pressão parcial de  $CO$  na fase gasosa (observemos que os valores acima das flechas são probabilidades, enquanto que no diagrama do PC são taxas). O primeiro processo representa a adsorção de  $CO$ , o segundo a adsorção de uma molécula de  $O_2$  e a sua simultânea dissociação, e o terceiro representa a reação de oxidação do  $CO$  e a desadsorção instantânea do  $CO_2$  resultante.

O ZGB apresenta duas transições de fase cinéticas para estados *envenenados* (sem produção de dióxido de carbono,  $CO_2$ ) nos quais a superfície fica coberta por  $CO$  e  $O$  respectivamente. Definindo como parâmetros de ordem as densidades de cada espécie na superfície, a primeira das transições é descontínua, enquanto que a segunda é contínua. O comportamento crítico desta segunda transição gerou grande interesse poucos anos depois do modelo ser proposto [Jensen *et al.*, 1990].

Outros modelos de carácter irreversível foram construídos inspirados no PC. É importante notar que vários desses modelos estão dentro da classe de universalidade do PC.

### 1.3 Programa desta tese

Esta tese trata de um modelo estocástico de gás de rede com duas espécies que se reproduzem autocataliticamente. A segunda espécie, que se reproduz às expensas da primeira, também morre espontaneamente.

No capítulo 2 faremos uma breve resenha da descrição de processos estocásticos markovianos em termos de equações mestras, para no capítulo 3 estabelecer as regras dinâmicas que definem nosso modelo, obter sua equação mestra, e o sistema hierárquico de equações diferenciais associadas às correlações espaciais.

No capítulo 4 obteremos soluções aproximadas do mencionado sistema hierárquico, o que nos permitirá construir o diagrama de fases do modelo na aproximação

de campo médio simples e de pares. No capítulo 5 poderemos comparar estes resultados com simulações de Monte Carlo. Dentro da aproximação de pares, no capítulo 6 tentaremos entender as oscilações locais vistas nas simulações em termos de instabilidades espaço-temporais que emergem nas equações de evolução das correlações.

O capítulo 7 será dedicado a abordar a questão da classe de universalidade das transições de fase cinéticas do modelo para o estado absorvente de presas e o estado absorvente de vazio. Para o cálculo de expoentes críticos associados as transições fizemos amplo uso da técnica de simulações dependentes do tempo.

Uma *digressão* de caráter biológico será feita no capítulo 8, especificamente estudaremos a propagação de ondas em equações de reação-difusão obtidas a partir de nosso modelo de gás de rede na aproximação de campo médio simples. Este tipo de ondas é observado nas simulações de Monte Carlo feitas numa região do diagrama de fases do modelo, e tem relação direta com as oscilações locais nas densidades.

Reservaremos o capítulo 9 para fazer comentários finais.

# Capítulo 2

## Descrição estocástica de processos irreversíveis

### 2.1 A Equação mestra

Os processos markovianos contínuos [Gardiner, 1985] são frequentemente estudados mediante equações de Fokker-Planck. Em sistemas que tratam da evolução de um certo número de objetos individuais ou partículas, porém, com frequência é mais conveniente uma descrição em termos de transições finitas ou descontínuas (*jump processes*). Para este tipo de problemas, um tratamento mediante o uso da equação mestra é mais apropriado.

A equação mestra é frequentemente derivada como uma forma diferencial da equação de Chapman-Kolmogorov. Esta última expressa uma relação entre as probabilidades de transição que deve ser obedecida por todo processo estocástico markoviano. Por conveniência, seguindo Van Kampen [Van Kampen, 1981], assumiremos um processo homogêneo. Assim, a equação de Chapman-Kolmogorov se expressa como

$$W_{t_3-t_1}(\sigma_3|\sigma_1) = \sum_{\sigma_2} W_{t_3-t_2}(\sigma_3|\sigma_2)W_{t_2-t_1}(\sigma_2|\sigma_1), \quad (2.1)$$

onde  $t_1 < t_2 < t_3$  são três instantes de tempo,  $W_{t'-t}(\sigma'|\sigma)$  denota a probabilidade de transição do estado  $\sigma$  a tempo  $t$  para o estado  $\sigma'$  a tempo  $t'$ , e a somatória é feita sobre os possíveis estados intermediários que ligam  $\sigma_1$  a  $\sigma_2$ .

Assumamos agora que  $\Delta t = t_3 - t_2$  é muito pequeno. Em primeira ordem em  $\Delta t$ ,  $W_{\Delta t}(\sigma_3|\sigma_2)$  pode-se escrever como

$$W(\sigma_3, t_3|\sigma_2, t_2) = W_{\Delta t}(\sigma_3|\sigma_2) = F(\Delta t) \delta_{\sigma_3\sigma_2} + \Delta t w(\sigma_3, \sigma_2) \quad (2.2)$$

onde  $w(\sigma_3, \sigma_2)$  é a probabilidade por unidade de tempo de uma transição do estado  $\sigma$  para o estado  $\sigma'$ . A forma da função  $F(\Delta t)$  pode-se determinar pela condição

$$\sum_{\sigma_3} W_{\Delta t}(\sigma_3|\sigma_2) = 1, \quad (2.3)$$

que fornece

$$F(\Delta t) = 1 - \Delta t \sum_{\sigma_3} w(\sigma_3, \sigma_2). \quad (2.4)$$

Substituindo 2.4 em 2.1, e chamando agora  $t = t_2 - t_1$ , obtemos

$$\frac{W_{t+\Delta t}(\sigma_3|\sigma_1) - W_t(\sigma_3|\sigma_1)}{\Delta t} = \sum_{\sigma_2} \{w(\sigma_3, \sigma_2)W_t(\sigma_2|\sigma_1) - w(\sigma_2, \sigma_3)W_t(\sigma_3|\sigma_1)\}. \quad (2.5)$$

Assim, tomando o limite de  $\Delta t \rightarrow 0$  o termo esquerdo de 2.5 se tornará uma derivada com respeito a  $t$ . Chamemos  $\sigma = \sigma_3$ ,  $\sigma' = \sigma_2$ , e observemos que podemos pensar  $W_t(\sigma_3|\sigma_1) = P(\sigma, t)$  de um processo tal que a condição inicial seja  $P(\sigma, t=0) = \delta_{\sigma\sigma_1}$ . Assim chegamos finalmente à forma da equação mestra,

$$\frac{dP(\sigma, t)}{dt} = \sum_{\sigma'} \{w(\sigma, \sigma')P(\sigma', t) - w(\sigma', \sigma)P(\sigma, t)\}, \quad (2.6)$$

que pode ser interpretada como uma equação de balanço para  $P(\sigma, t)$ .

## 2.2 Balanço detalhado, simetria e soluções assintóticas da equação mestra

A parte crucial no comportamento assintótico das soluções de uma equação mestra são as taxas de transição (o número de transições por unidade de tempo) do estado  $\sigma$  ao estado  $\sigma'$ :  $w(\sigma', \sigma)$ . Elas determinam importantes questões, como por exemplo: à medida em que  $t \rightarrow \infty$ , convergirão todas as soluções para uma única distribuição estacionária?

Por motivos de espaço, nos limitaremos a enunciar parcialmente alguns resultados que nos são de interesse. Uma discussão completa sobre este tema se encontra em [Van Kampen, 1981]. Definindo a matriz  $W$ , por

$$W(\sigma, \sigma') = w(\sigma, \sigma') - \delta\sigma\sigma' \left( \sum_{\sigma''} w(\sigma'', \sigma) \right), \quad (2.7)$$

podemos escrever a equação 2.6 na forma

$$\frac{\partial P(t)}{\partial t} = WP(t), \quad (2.8)$$

onde  $P(t)$  é a matriz coluna cujos elementos são  $P(\sigma, t)$ , que admite a solução formal

$$P(t) = \exp^{tW} P(0). \quad (2.9)$$

A matriz  $\mathcal{W}$  admite sempre, no mínimo, um autovetor à direita de autovalor zero,

$$\mathcal{W}P_0 = 0, \quad (2.10)$$

onde  $P_0$  é um vetor tal que suas componentes,  $P_0(\sigma)$ , representam as probabilidades estacionárias de cada estado. Pode existir mais de um autovetor à direita, e na medida que todos tenham componentes com o mesmo sinal, corresponderão à distribuições estacionárias da equação mestra. Vejamos sob quais condições o autovetor à direita é único.

Dizemos que uma matriz  $\mathcal{W}$  é *reduzível* na medida que, mediante permutação dos índices que denotam os estados do sistema, possamos levá-la a uma forma

$$\begin{pmatrix} \mathcal{A} & \mathcal{D} \\ 0 & \mathcal{B} \end{pmatrix}, \quad (2.11)$$

onde 0 denota a matriz nula, e  $\mathcal{A}$  deve ser uma matriz do tipo  $\mathcal{W}$  (quadrada). Pode-se ver facilmente que, dada uma distribuição inicial de probabilidade, esta *flui* dos estados percorridos pelos índices de  $\mathcal{B}$ , que serão *transientes*, para os estados percorridos pelos índices da matriz  $\mathcal{A}$  que serão *coletores* da probabilidade.

Uma situação análoga acontece se a matriz  $\mathcal{W}$  puder ser levada à forma *separável*,

$$\begin{pmatrix} \mathcal{A} & 0 & \mathcal{D} \\ 0 & \mathcal{B} & \mathcal{E} \\ 0 & 0 & \mathcal{C} \end{pmatrix}. \quad (2.12)$$

Novamente,  $\mathcal{A}$  e  $\mathcal{B}$  são matrizes  $\mathcal{W}$ . A diferença com o caso anterior é que quando o sistema começar num estado *transiente* (associado à matriz  $\mathcal{C}$ ),  $P(\sigma, t)$  poderá, a tempos longos, *fluir* tanto para os estados associados à  $\mathcal{A}$  assim como para os associados à  $\mathcal{B}$ .

Voltemos agora a questão anterior sobre o comportamento assintótico das soluções. No caso em que a matriz  $\mathcal{W}$  não seja do tipo reduzível nem do tipo separável, pode-se demonstrar as propriedades enumeradas a seguir:

- A solução estacionária de 2.10 é única.
- Se  $P(t=0)$  é uma distribuição de probabilidade (normalizada e positiva), continuará como tal a tempos posteriores. Mais ainda, convergirá para a solução estacionária para  $t \rightarrow \infty$ .

Denotando por  $-\lambda$  os autovalores da matriz  $\mathcal{W}$ , então

- A parte real dos  $\lambda$ 's é não negativas, ou seja,  $Re(\lambda) \geq 0$ .

Uma última propriedade está associada à simetria da matriz  $\mathcal{W}$ . Se existir balanceamento detalhado, ou seja, se por unidade de tempo existem tantas transições do estado  $\sigma$  a  $\sigma'$  como de  $\sigma'$  a  $\sigma$ ,

$$w(\sigma', \sigma)P(\sigma) = w(\sigma, \sigma')P(\sigma'), \quad (2.13)$$

é possível levar a matriz  $W$  a uma forma simétrica [Haken, 1978]. Nesse caso

- Todos os  $\lambda$ 's são reais e não negativos.

Nosso modelo, por ser microscopicamente irreversível, não obedecerá o balanceamento detalhado. Mais ainda, como veremos no capítulo 3, a matriz  $\mathcal{W}$  de nosso modelo será do tipo separável. É importante observar que algumas das propriedades acima enumeradas podem não ser válidas para sistemas infinitos (limite termodinâmico). Estados que são transientes em sistemas finitos podem deixar de sê-los em sistemas infinitos, como é o caso do estado ativo no PC [Harris, 1974, Liggett, 1985].

# Capítulo 3

## Modelo estocástico de gas de rede para um sistema predador-presa

### Suas regras locais e equação mestra

#### 3.1 Introdução

O modelo de Lotka-Volterra (MLV) será descrito brevemente na próxima seção. Só mencionaremos aqui que ele serviu de motivação para propor as regras dinâmicas de nosso modelo. O MLV não tem hoje muita aplicação em si próprio, porém é o ponto de partida de quase todos os modelos mais realistas que são motivo de estudo de populações biológicas.

Os modelos de gás de rede têm hoje muita importância em biologia teórica, em particular, na área da modelagem ecológica. São discretos espacialmente e as interações dos indivíduos são de curto alcance. Isto representa um aspecto muito realista da modelagem, pois cada indivíduo interage com seu meio ambiente local. Eles também conseguem levar em conta o espaço como um recurso limitador para o crescimento das espécies. Uma consequência deste tipo de tratamento é a observação de padrões espaciais para determinados tipos de regras locais.

Embora o MLV tenha servido como inspiração para propormos as regras locais, podemos olhar nosso modelo como uma das generalizações mais simples do PC (ver 1.2). Um modo possível de generalizar o PC seria incorporando mais um estado e introduzindo o mínimo número de parâmetros adicionais (associados a regras locais). Estas regras são descritas na próxima seção.

#### 3.2 Dinâmica do sistema

O sistema consiste numa rede hipercúbica de  $N$  sítios com condições de contorno periódicas, porém nossa análise se restringiu majoritariamente a  $d = 2$ . As variáveis dinâmicas

associadas a cada sítio podem assumir três valores, correspondentes a três estados que representaremos no futuro indistintamente por meio de um símbolo, um número ou uma letra .

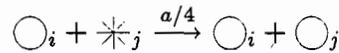
\*  $\mapsto$  vazio ou 0.

○  $\mapsto$  presa ou 1, que também representaremos pela letra A .

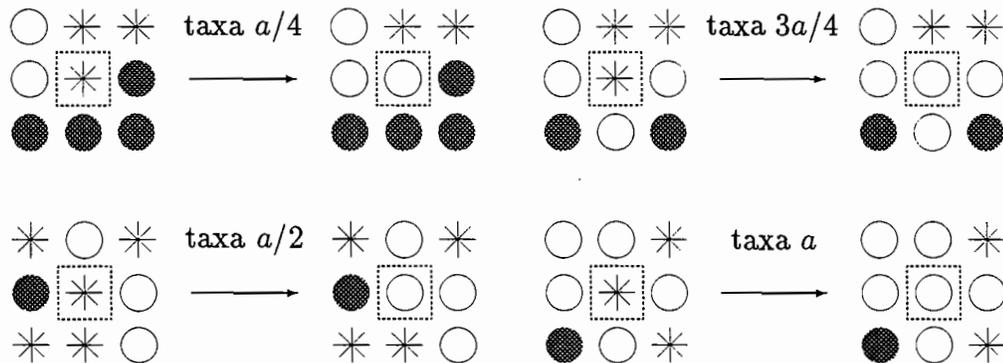
●  $\mapsto$  predador ou 2, que representaremos também pela letra B.

O tempo é contínuo e a dinâmica é do tipo de Glauber [Glauber, 1963], no sentido em que a atualização da rede é feita escolhendo aleatoriamente um único sítio a cada instante de tempo. As partículas do sistema evoluem de acordo as seguintes regras markovianas locais

- autocatálise de presas:



As presas tentam gerar novas presas com uma taxa  $a$  em sítios vizinhos próximos da rede aleatoriamente escolhidos. Esta regra modela presas se reproduzindo às expensas de sítios vazios. A seguir damos alguns exemplos das taxas com que o sítio vazio envolvido por um quadrado pontilhado, num instante de tempo dado, acaba sendo ocupado por uma presa.

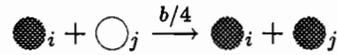


De modo geral, a probabilidade de transição por unidade de tempo de um sítio  $i$  que se encontra vazio será

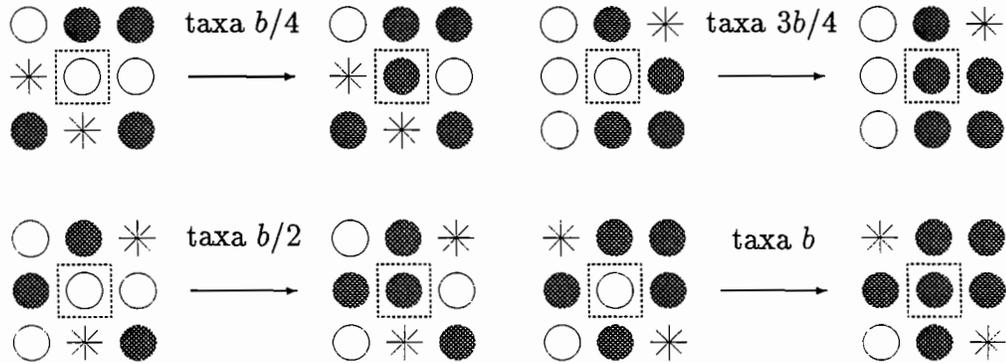
$$w_i(\sigma_i = *) = \frac{a}{\zeta} \sum_{\delta} \delta(\sigma_{i+\delta}, \bigcirc), \tag{3.1}$$

onde a soma é realizada nos  $\zeta$  vizinhos mais próximos ( $\zeta = 2d$ , número de coordenação da rede) e  $\delta(x, y)$  é a função delta de Kronecker.

- autocatálise de predadores:



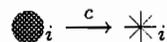
Do mesmo modo que na regra anterior, os predadores tentam gerar novos predadores em sítios vizinhos próximos da rede com uma taxa  $b$ . A diferença é que eles se reproduzem às expensas das presas e não de sítios vazios. Exemplos análogos dos valores das taxas de transição são agora



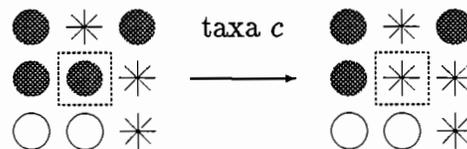
Dado um sítio  $i$  ocupado por uma presa, sua taxa de transição para predador será

$$w_i(\sigma_i = \circ) = \frac{b}{\zeta} \sum_{\delta} \delta(\sigma_{i+\delta}, \bullet). \quad (3.2)$$

- morte espontânea de predadores:



De modo similar ao PC, os predadores podem passar a ser sítios vazios com uma taxa  $c$ . O processo independe da vizinhança do sítio

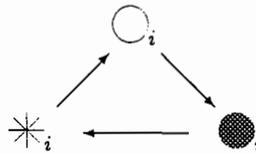


Neste último caso, a expressão da probabilidade de transição por unidade de tempo deste processo é

$$w_i(\sigma_i = \bullet) = c. \quad (3.3)$$

As regras estabelecidas pretendem reproduzir os mecanismos do MLV, mas está claro que equações como A.1 nunca serão obtidas a partir de modelos de gás de rede. A rede leva em conta o espaço como recurso limitador para as espécies. Assim, por exemplo, na ausência de predadores, a densidade de presas crescerá exponencialmente num caso, mas atingirá o valor um em forma assintótica no outro.

Nossas regras locais são altamente irreversíveis: se um sítio  $i$  trocar o seu estado, nunca poderá reverter este processo sem passar antes por outro estado. O diagrama abaixo mostra as transições permitidas de um sítio  $i$ . Das três flechas, duas representam transições autocatalíticas, enquanto que a horizontal ( $\ast \leftarrow \bullet$ ) representa a aniquilação espontânea.

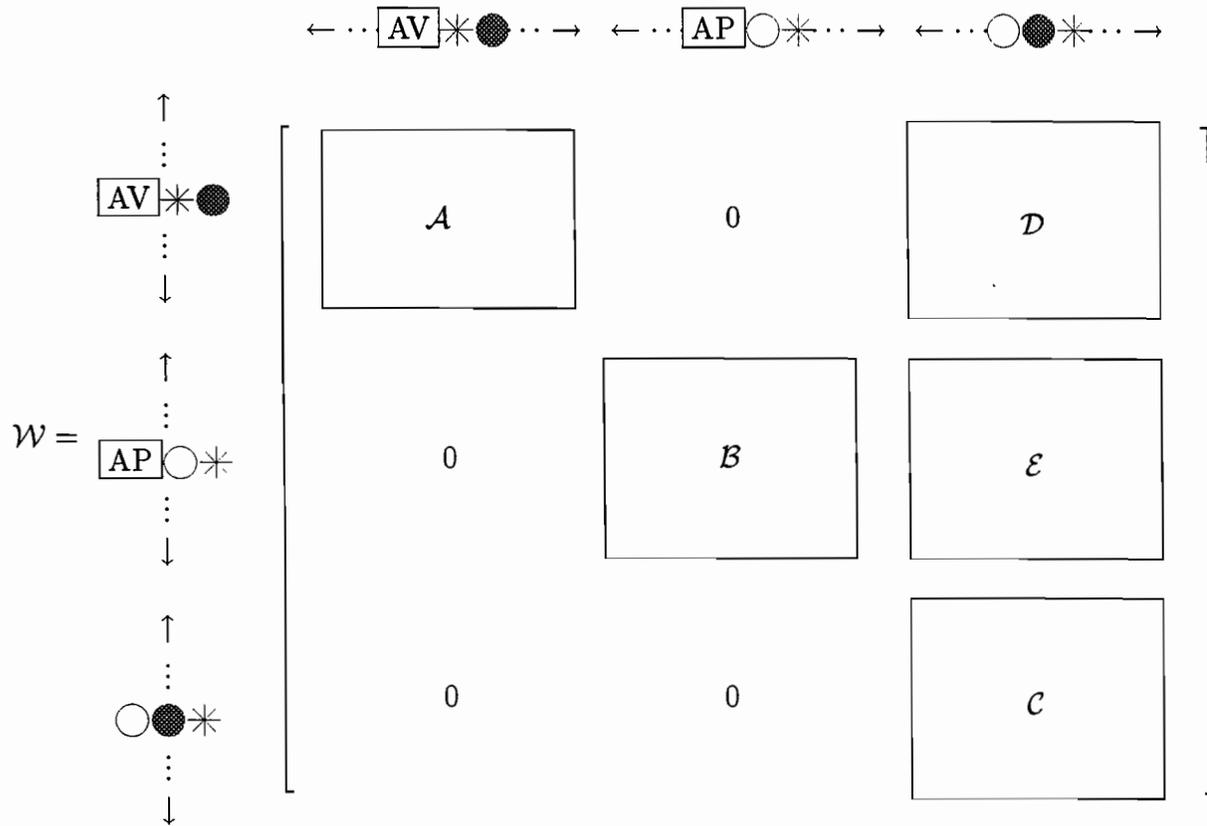


Podemos já antecipar que nosso modelo admitirá dois estados peculiares: um estado *absorvente de presas* (AP) no qual a rede estará completamente coberta por presas, e um estado *absorvente de vazio* (AV) caracterizado pela ausência total de partículas na rede. Chamamos a estes estados de absorventes pois caso o sistema os atinja, nunca mais conseguirá sair. Sem dúvida são soluções estacionárias da equação mestra. Gostaríamos de saber sobre quais condições o sistema atinge os estados absorventes assintoticamente, e se existem outras soluções não triviais.

Façamos agora um comentário a respeito da matriz  $\mathcal{W}$  do modelo (capítulo 2.2). Rotulemos os estados  $\sigma$  e  $\sigma'$  de  $\mathcal{W}$  de modo que num primeiro grupo se encontrem todos os estados que não possuam presas (o AV incluído). No diagrama a seguir denotamos esquematicamente os índices desse grupo de estados como  $\dots \boxed{\text{AV}} \ast \bullet \dots$ . Posteriormente, rotulemos um segundo grupo com todos os estados nos quais exista ao menos uma presa, mas nenhum predador (o AP incluído). Para os índices deste grupo utilizamos  $\dots \boxed{\text{AP}} \circ \ast \dots$ . E finalmente, num terceiro grupo, incluímos todos os demais estados, ou seja, aqueles nos quais existe ao menos uma presa e um predador. Denotamos os índices deste grupo como  $\dots \circ \bullet \ast \dots$ . Está claro que se o sistema efetuar uma transição para o primeiro grupo, o destino final será o estado AV, enquanto que se a transição for para o segundo grupo o destino final será o estado AP. A partir da forma de nossa matriz, observamos que é precisamente a forma de 2.12, em que os elementos de  $\mathcal{A}$  ligam estados dentro do primeiro grupo, os elementos de  $\mathcal{B}$  ligam estados dentro do segundo, e os elementos de  $\mathcal{C}$  ligam estados dentro do terceiro.

Como  $\mathcal{D}$  e  $\mathcal{E}$  terão elementos positivos, podemos antecipar que, pelo menos para redes pequenas, um estado originalmente no terceiro grupo acabará sendo coletado

no primeiro grupo (e finalmente no AV) ou no segundo grupo (e finalmente no AP), com uma probabilidade que dependerá dos elementos de  $\mathcal{D}$  e  $\mathcal{E}$  (que por sua vez dependerão dos parâmetros  $a$ ,  $b$ , e  $c$ ).



Porém, no limite termodinâmico, e dependendo da dimensionalidade da rede, assim como dos valores de  $a$ ,  $b$ , e  $c$ , a evolução temporal da probabilidade de um estado que inicialmente pertence ao terceiro grupo poderá, em princípio, ter três tipos de comportamento. Num deles, fluirá para o estado AV com probabilidade 1. Num outro, fluirá para o estado AP com probabilidade 1. E num último caso, a probabilidade de, a tempos longos, acabar em qualquer dos dois primeiros grupos de estados será zero, e um estado originalmente no terceiro grupo convergirá para uma distribuição de probabilidade de estados pertencentes a esse grupo.

### 3.3 Equação mestra e equações de evolução para as correlações

Por ser o processo markoviano,  $P(\sigma, t)$  obedece uma equação mestra

$$\frac{d}{dt}P(\sigma, t) = \sum_{i=1}^N \{w_i(A_i(\sigma))P(A_i(\sigma), t) - w_i(\sigma)P(\sigma, t)\}, \quad (3.4)$$

onde por  $A_i(\sigma)$  denotamos um estado obtido a partir de  $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$  fazendo uma permutação anticíclica de  $\sigma_i$  ( $2 \rightarrow 1 \rightarrow 0 \rightarrow 2$ ). Ou seja,  $A_i(\sigma) = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma'_i, \dots, \sigma_N)$  com  $\sigma'_i = \text{mod}((\sigma_i - 1) + 3, 3)$ . Utilizando as expressões 3.1, 3.2 e 3.3, podemos escrever de maneira geral

$$w_i(\sigma_i) = \frac{a}{4}\delta(\sigma_i, 0) \sum_e \delta(\sigma_{i+e}, 1) + \frac{b}{4}\delta(\sigma_i, 1) \sum_e \delta(\sigma_{i+e}, 2) + c\delta(\sigma_i, 2), \quad (3.5)$$

onde a soma é feita sobre os quatro primeiros vizinhos de um sítio numa rede quadrada.

Pela dependência linear nos parâmetros que têm as taxas de transição, observamos, a partir da equação mestra, que o processo é invariante por mudanças da escala no tempo do tipo  $a \rightarrow \alpha a$ ,  $b \rightarrow \alpha b$ , e  $c \rightarrow \alpha c$  ( $\alpha > 0$ ). Assim, usamos a restrição  $a + b + c = 1$ . Isto equivale a ter um parâmetro a menos, de modo que podemos representar os estados do sistema por pontos no plano do espaço de parâmetros  $a$ ,  $b$ , e  $c$ . Este plano passa pelos pontos  $(1, 0, 0)$ ,  $(0, 1, 0)$ , e  $(0, 0, 1)$ . Assim, em muitas das figuras apresentadas no futuro usaremos os parâmetros:  $p$  e  $c$ . Estes são equivalentes aos anteriores estando definidos através das relações:  $a = 1/2 - p - c/2$ ,  $b = 1/2 + p - c/2$ , e  $c = c$ .

Sabemos que o valor esperado de uma função de estado do sistema  $\langle F(\sigma) \rangle$  é

$$\langle F(\sigma) \rangle = \sum_{\sigma} F(\sigma)P(\sigma, t). \quad (3.6)$$

Usando a equação mestra 3.4 e a expressão explícita para a probabilidade de transição em 3.5, podemos escrever a evolução temporal de  $\langle F(\sigma) \rangle$  como

$$\frac{d}{dt} \langle F(\sigma) \rangle = \sum_{i=1}^N \langle [F(C_i(\sigma)) - F(\sigma)]w_i(\sigma) \rangle. \quad (3.7)$$

Por  $C_i(\sigma)$  denotamos o estado obtido a partir de  $\sigma$  por uma permutação cíclica da variável  $\sigma_i$  ( $0 \rightarrow 1 \rightarrow 2 \rightarrow 0$ ), ou seja  $C_i(\sigma) = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma'_i, \dots, \sigma_N)$  com  $\sigma'_i = \text{mod}(\sigma_i + 1, 3)$ .

De particular interesse será estudar os valores médios de certas funções que descrevem a correlação de dois, três, e mais sítios na rede. Queremos calcular o valor médio de expressões do tipo

$$\begin{aligned} P_i(\alpha) &= \langle \delta(\sigma_i, \alpha) \rangle, \\ P_{ij}(\alpha\beta) &= \langle \delta(\sigma_i, \alpha)\delta(\sigma_j, \beta) \rangle, \\ P_{ijk}(\alpha\beta\gamma) &= \langle \delta(\sigma_i, \alpha)\delta(\sigma_j, \beta)\delta(\sigma_k, \gamma) \rangle, \\ &\dots \end{aligned} \quad (3.8)$$

onde as variáveis  $\alpha$ ,  $\beta$ , e  $\gamma$  podem assumir quaisquer dos valores 0, 1, ou 2. Usando 3.5 podemos escrever as equações da evolução temporal para estas probabilidades na forma

$$\frac{d}{dt}P_i(1) = \frac{a}{\zeta} \sum_{\delta} P_{i,i+\delta}(01) - \frac{b}{\zeta} \sum_{\delta} P_{i,i+\delta}(12), \quad (3.9)$$

$$\frac{d}{dt}P_i(2) = \frac{b}{\zeta} \sum_{\delta} P_{i,i+\delta}(21) - cP_i(2), \quad (3.10)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}P_{ij}(01) = & -\frac{a}{\zeta} \sum_{\substack{\delta \\ (i+\delta \neq j)}} (P_{i+\delta,ij}(101) + P_{ij}(01)) + cP_{ij}(21) \\ & + \frac{1}{\zeta} \sum_{\substack{\delta \\ (j+\delta \neq i)}} (aP_{ij,j+\delta}(010) - bP_{ij,j+\delta}(012)), \end{aligned} \quad (3.11)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}P_{ij}(12) = & \frac{1}{\zeta} \sum_{\substack{\delta \\ (i+\delta \neq j)}} (aP_{i+\delta,ij}(102) - bP_{i+\delta,ij}(212)) \\ & + \frac{b}{\zeta} \sum_{\substack{\delta \\ (j+\delta \neq i)}} P_{ij,j+\delta}(112) - \left(\frac{b}{\zeta} + c\right)P_{ij}(12), \end{aligned} \quad (3.12)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}P_{ij}(02) = & cP_{ij}(22) - \frac{a}{\zeta} \sum_{\substack{\delta \\ (i+\delta \neq j)}} P_{i+\delta,ij}(102) + \frac{b}{\zeta} \sum_{\substack{\delta \\ (j+\delta \neq i)}} P_{ij,j+\delta}(012) \\ & - cP_{ij}(02). \end{aligned} \quad (3.13)$$

As correlações que acabamos de escrever são entre primeiros vizinhos na rede. Elas formam um sistema hierárquico de equações. Ou seja, para saber a evolução das correlações de um sítio,  $P_i(\alpha)$ , precisamos conhecer também as de dois sítios,  $P_{ij}(\alpha\beta)$ . Para conhecer as de dois sítios precisamos as de três sítios,  $P_{ijk}(\alpha\beta\gamma)$ , e assim por diante.

O sistema 3.9 à 3.13, juntamente com equações análogas para correlações de ordem maior, constituem um conjunto de equações hierárquicas equivalente à equação mestra. O truncamento do sistema de equações (tema do próximo capítulo) é um ponto de partida para obter soluções aproximadas do problema.

# Capítulo 4

## Estados estacionários espacialmente homogêneos

### Uma análise de campo médio dinâmica

#### 4.1 Introdução

Neste capítulo apresentaremos um método de truncamento do sistema 3.9 via um esquema particular [Mamada e Takano, 1968, Kikuchi, 1951, Dickman e Tomé, 1991]. O método consiste em desprezar correlações de *clusters* a partir de um certo tamanho, desprezando assim flutuações, o que implica na sua natureza de campo médio. O termo ‘dinâmica’ está relacionado com as correlações a que nos referimos, as quais caracterizam estados estacionários que não são estados de equilíbrio.

Chamaremos truncamento de ordem  $n$  ao procedimento pelo qual aproximaremos correlações de ordem  $n + 1$  em termos de correlações de ordem  $n$ . Suporemos que os *clusters* de sítios sobre os quais calculamos as correlações tenham um *núcleo*, e uma *fronteira*. Tomemos dois sítios,  $i_1$ , e  $i_n$ , de modo que eles estejam em extremos *opostos* da fronteira do cluster. Queremos aproximar a expressão  $P(\sigma_{i_1} \sigma_{i_2} \dots \sigma_{i_n}) = P(\sigma_{i_2} \dots \sigma_{i_n})P(\sigma_{i_1} | \sigma_{i_2} \dots \sigma_{i_n})$ . O último termo é a probabilidade condicional do sítio  $i_1$  se encontrar no estado  $\sigma_{i_1}$  quando sabemos que seus vizinhos imediatos são  $\sigma_{i_2} \dots \sigma_{i_n}$ . Por estar  $i_1$  distante de  $i_n$ , pensando no caso de um cluster suficientemente grande e comprimentos de correlação finitos, o conhecimento do estado de  $i_n$  não deveria ter grande influência na determinação do estado de  $i_1$ . Assim surge a idéia de aproximar  $P(\sigma_{i_1} | \sigma_{i_2} \dots \sigma_{i_n}) \approx P(\sigma_{i_1} | \sigma_{i_2} \dots \sigma_{i_{n-1}})$ . Reconstruindo as expressões podemos escrever

$$P(\sigma_{i_1} \sigma_{i_2} \dots \sigma_{i_n}) \approx \frac{P(\sigma_{i_1} \sigma_{i_2} \dots \sigma_{i_{n-1}})P(\sigma_{i_2} \sigma_{i_3} \dots \sigma_{i_n})}{P(\sigma_{i_2} \sigma_{i_3} \dots \sigma_{i_{n-1}})} \quad (4.1)$$

A continuação analisamos dois casos concretos que esclarecerão qualquer dúvida respeito à implementação destas idéias.

## 4.2 Aproximação de campo médio simples ( $n = 1$ )

Nesta aproximação obtém-se um sistema fechado de equações para as correlações de um sítio  $P_i(\alpha)$ . Para isto escrevemos as correlações de dois sítios,  $P_{ij}(\alpha\beta)$  como  $P_i(\alpha)P_j(\beta)$ . Das três correlações de um sítio,  $P_i(0)$ ,  $P_i(1)$ , e  $P_i(2)$ , só duas são independentes, dado que  $P_i(0) = 1 - P_i(1) - P_i(2)$ . Escolhendo como variáveis independentes  $P_i(1)$ , a densidade de presas, e  $P_i(2)$ , a densidade de predadores, a evolução temporal delas é

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}P_i(1) &= \frac{a}{\zeta}P_i(0) \sum_{\delta} P_{i+\delta}(1) - \frac{b}{\zeta}P_i(1) \sum_{\delta} P_{i+\delta}(2), \\ \frac{d}{dt}P_i(2) &= \frac{b}{\zeta}P_i(2) \sum_{\delta} P_{i+\delta}(1) - cP_i(2).\end{aligned}\tag{4.2}$$

Para poder resolver este sistema, simplificamos ainda mais o sistema 4.2 procurando soluções espacialmente homogêneas (ver capítulo 8). Ou seja, aquelas para as quais  $P_i(1) = P_j(1)$ ,  $P_i(2) = P_j(2)$ , para todo  $i$  e  $j$  com  $i \neq j$ . Nesse caso denotamos  $P_i(1) = x$ ,  $P_i(2) = y$ , e  $P_i(0) = 1 - x - y$ . E o sistema 4.2 se torna

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= a(1 - x - y)x - bxy, \\ \frac{dy}{dt} &= bxy - cy.\end{aligned}\tag{4.3}$$

A forma destas equações é semelhante à forma das equações da cinética química, nas quais as espécies encontram-se tão diluídas que pode-se considerar as densidades respectivas como constantes no espaço. Façamos algumas observações sobre 4.3. Ela lembra o sistema original do MLV. A diferença consiste no termo  $(1 - x - y)$  que dá conta do espaço vazio com que contam as presas para se reproduzir. Este faz o papel de recurso limitador. Assim, mesmo na aproximação mais simples, o modelo de rede leva em conta aspectos relevantes que não se consideram nas equações do tipo da cinética química. O fato de levar em conta o espaço vacante em sistemas de espécies que interagem ‘intra’ e ‘inter’-competitivamente tem sido observado como um fator que favorece o incremento da complexidade no comportamento do sistema [Solé *et al.*, 1992].

As equações 4.3 têm dois pontos fixos triviais,  $(x, y) = (1, 0)$  e  $(x, y) = (0, 0)$ . Eles correspondem ao estado *absorvente de presas* (AP) e ao estado *absorvente de vazio* (AV) respectivamente. O motivo dos nomes escolhidos para denominar estes estados foi discutido nos capítulos 2 e 3. Fizemos uma análise de estabilidade linear em torno das duas soluções. Esta mostrou que o estado AV é sempre instável, enquanto que o estado AP é estável na região I do diagrama de fase mostrado na figura 4.1

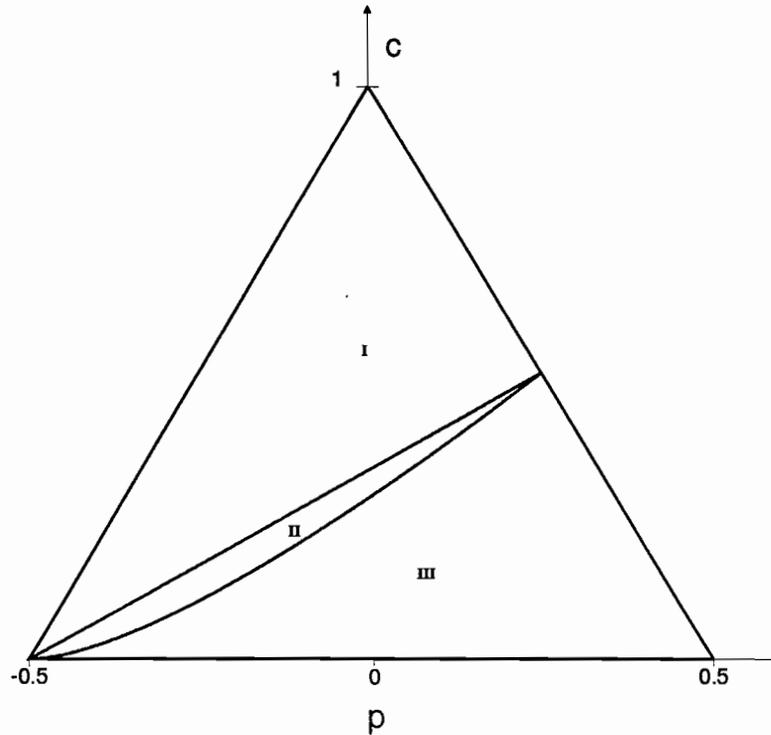


Figura 4.1: Diagrama de fase do modelo segundo a aproximação de campo médio simples. Nos pontos por baixo da linha crítica definida por  $c = (2p + 1)/3$ , o estado AP é instável, dando lugar a pontos fixos não triviais, para os quais  $0 < x < 1$  e  $0 < y < 1$ , ou seja representando estados ativos do sistema. As expressões para os valores estacionários de  $x$  e  $y$ , nos estados ativos, são

$$\begin{aligned} x &= \frac{c}{b}, \\ y &= \frac{a(b-c)}{b(a+b)}. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Dentro dos estados ativos podemos distinguir dois tipos, de acordo com a maneira que o sistema atinge seu estado final estacionário após ser perturbado. Na região II, o sistema volta com um amortecimento exponencial da perturbação. O ponto fixo é um nodo assintoticamente estável (os autovalores obtidos na análise linear de estabilidade são reais). No entanto, na região III os mencionados autovalores adquirem uma componente imaginária e os pontos fixos tornam-se focos assintoticamente estáveis. Por uma pequena perturbação o sistema retorna para o ponto fixo realizando infinitas oscilações amortecidas no tempo. A linha que separa a região II e III está definida implicitamente por  $ac = 4b(b - c)$ , onde  $a$ ,  $b$  e  $c$  estão definidas em termos de  $p$  e  $c$  como se indicara em 3.3.

### 4.3 Aproximação de campo médio com pares ( $n = 2$ )

Esta aproximação consiste em escrever as correlações de três sítios em termos daquelas de dois e um sítio. Neste caso, a equação 4.1 resulta na seguinte expressão para a probabilidade de um *cluster* de três sítios.

$$P_{ijk}(\alpha\beta\gamma) = \frac{P_{ij}(\alpha\beta)P_{jk}(\beta\gamma)}{P_j(\beta)}, \quad (4.5)$$

onde  $i$  e  $k$  são os primeiros vizinhos do sítio  $j$ .

Mais uma vez procuramos soluções homogêneas de 3.9. Esta vez pediremos que elas sejam isotrópicas, no sentido que  $P_{ij}(\alpha\beta) = P_{ij}(\beta\alpha)$ . Neste caso podemos dispensar os índices em  $P_i(\alpha)$  e  $P_{ij}(\alpha\beta)$ . Temos três correlações de um sítio,  $P(\alpha)$ , ( $\alpha = 0, 1, 2$ ) e nove de dois sítios,  $P(\alpha\beta)$ , ( $\alpha, \beta = 0, 1, 2$ ). Porém, só cinco delas são independentes. Escolhemos estas últimas como sendo  $P(1) = x$ , a densidade de presas,  $P(2) = y$ , a densidade de predadores,  $P(01) = u$ ,  $P(12) = v$ , e  $P(02) = w$ .

A forma das equações para estas variáveis resulta

$$\frac{dx}{dt} = au - bv, \quad (4.6)$$

$$\frac{dy}{dt} = bv - cy, \quad (4.7)$$

$$\frac{du}{dt} = \frac{(\zeta - 1)}{\zeta} \left( a \frac{(qu - u^2)}{z} - b \frac{uv}{x} \right) + cv - \frac{a}{\zeta} u, \quad (4.8)$$

$$\frac{dv}{dt} = \frac{(\zeta - 1)}{\zeta} \left( a \frac{uw}{z} + b \frac{(rv - v^2)}{x} \right) - \frac{b}{\zeta} v - cv, \quad (4.9)$$

$$\frac{dw}{dt} = \frac{(\zeta - 1)}{\zeta} \left( b \frac{uv}{x} - a \frac{uw}{z} \right) + c(s - w), \quad (4.10)$$

onde  $z = P(0) = 1 - x - y$ ,  $q = P(00) = z - u - w$ ,  $r = P(11) = x - u - v$ , e  $s = P(22) = y - v - w$ .

No caso em que  $\zeta = 2$ , uma rápida inspeção na forma das equações permite ver que a única solução admissível como estado estacionário é o estado AP. Mencionemos que resultados exatos em uma dimensão [Andjel e Schinazi, 1994] predizem este comportamento. Quando  $\zeta = 4$ , o sistema admite como solução os dois estados estacionários triviais: o AP,  $(x, y, z, u, v, w) = (1, 0, 0, 0, 0)$ , e o AV,  $(x, y, z, u, v, w) = (0, 0, 0, 0, 0)$ . A análise de estabilidade linear revela que o estado AV continua sendo instável, enquanto que o estado AP tem uma região de estabilidade definida no diagrama de fases. Esta indica-se como a região I no diagrama de fase da figura 4.2. O estado AP torna-se instável numa linha crítica de pontos que separa a região I e II. Os pontos pertencentes às regiões II, III e IV são pontos fixos não triviais ( $0 < x < 1$  e  $0 < y < 1$ ).

Afortunadamente, foi possível obter analiticamente a solução para os pontos fixos não triviais. A expressão dos valores estacionários como função dos parâmetros é comprida e não permite um análise qualitativa simples, por esse motivo preferimos escrevê-las no apêndice B. Para o caso de  $p = 0$  ( $a = b$ ) a figura 4.3 mostra a dependência dos valores estacionários de  $x$ ,  $y$  e  $z$  como função de  $c$ .

O diagrama de fases está desenhado na figura 4.2. À medida em que  $c$  decresce para um  $p$  fixo na figura 4.2 três tipos de pontos fixos vão sendo obtidos. As regiões II e III são análogas às encontradas na figura 4.1. A diferença é que aqui em vez de ter-se dois autovalores tem-se cinco. De toda forma, o comportamento está regido pelo autovalor dominante, ou seja, aquele de maior parte real, e que portanto dominará o decaimento de uma perturbação para tempos longos.

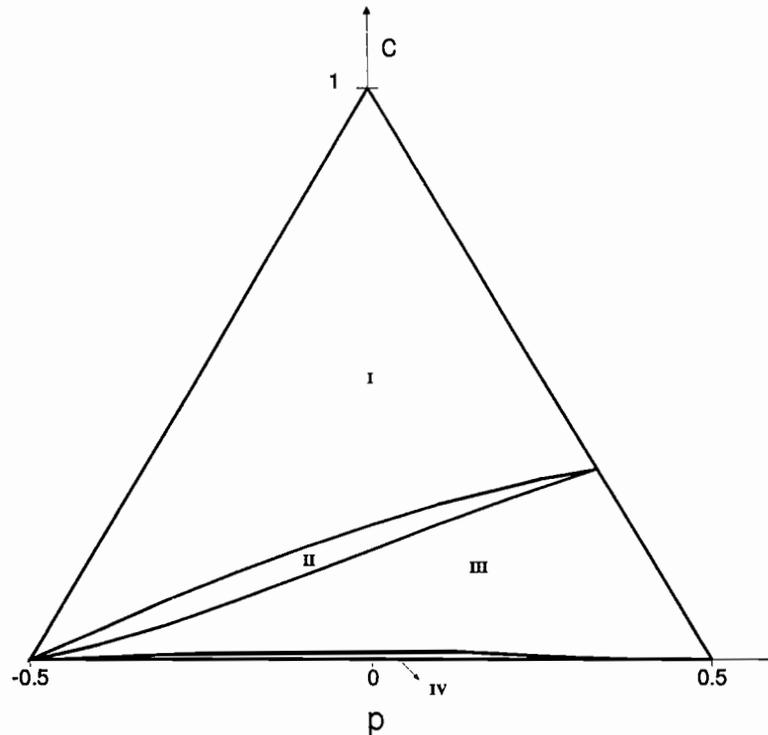


Figura 4.2: Diagrama de fases do modelo segundo a aproximação de campo médio com pares.

Na figura 4.4, pode-se apreciar a parte real do autovalor dominante,  $\gamma$ , e também sua parte imaginária ao quadrado,  $\omega^2$ , para diferentes valores de  $c$  quando  $p = 0$ . Claramente identificam-se nela as regiões II e III. Mas olhando com detalhe para baixos valores de  $c$ , observamos que a parte real do autovalor dominante troca de sinal. O foco assintoticamente estável torna-se instável e dá lugar a uma bifurcação de Hopf. Para valores de  $c$  menores do que aquele no qual se anula a parte real ( $\gamma$ ), o comportamento do sistema

é descrito através de ciclos limite.

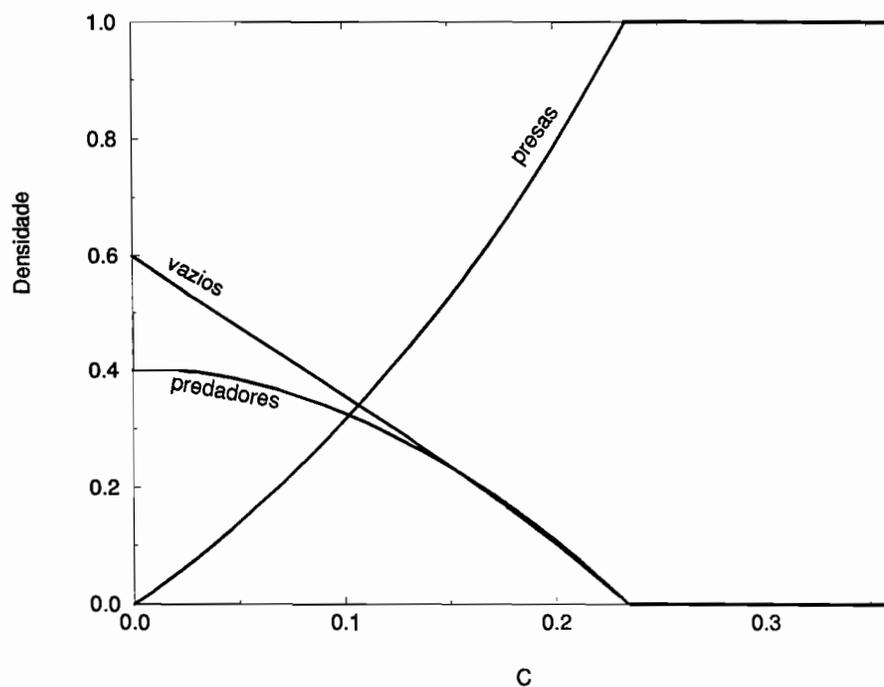


Figura 4.3: Densidades estacionárias como funções de  $c$ , para  $p = 0$ .

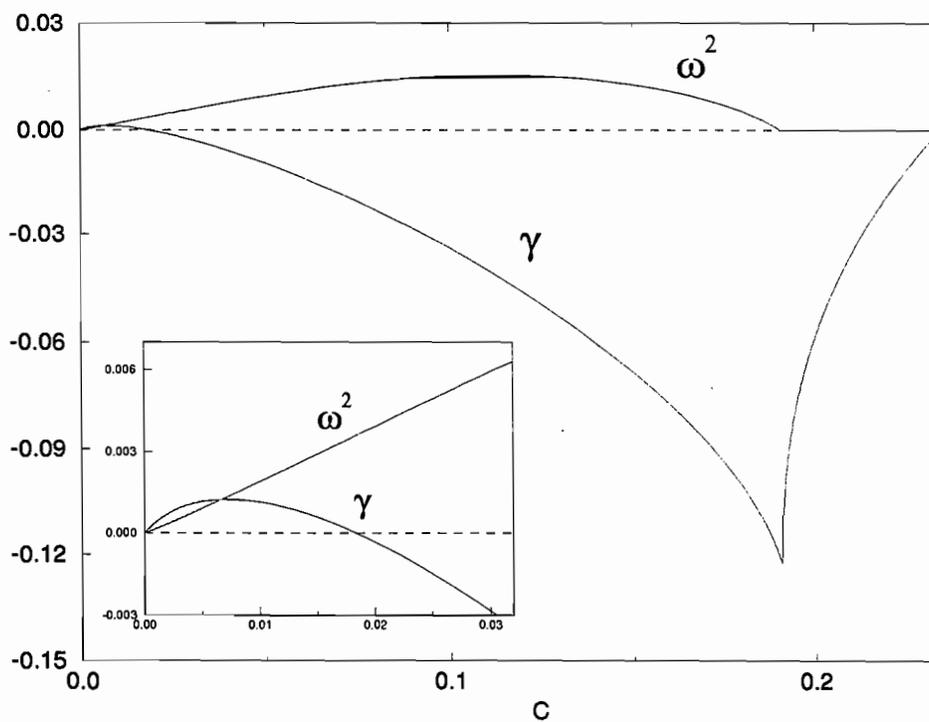


Figura 4.4: Valor da parte real ( $\gamma$ ) e imaginária ao quadrado ( $\omega^2$ ) do autovalor dominante.

Isto pode ser evidenciado iterando numericamente o sistema 4.6 à 4.10. Na figura 4.5 encontra-se desenhado o valor de  $x$  versus  $y$  ao longo do tempo. Dependendo da condição inicial ( $A$  e  $B$  respectivamente), o sistema evolui acercando-se para uma órbita assintoticamente estável. Cada ponto da região IV do diagrama de fases da figura 4.2 representa um ciclo limite. Desta forma, a aproximação de campo médio com pares é capaz de prever oscilações nas densidades das populações de presas e predadores. Neste aspecto, o comportamento lembra o do modelo original (apêndice A), mas o tipo de oscilações aqui observado tem estabilidade assintótica orbital. Como veremos no capítulo 6, quando estudaremos os efeitos de perturbações não homogêneas sobre os estados estacionários, a região IV se encontra dentro de uma outra região, na qual o sistema apresenta instabilidades espaciais. Observemos também que a análise de campo médio realizada prevê que a frequência das oscilações varia como  $\omega \sim \sqrt{c}$  para valores suficientemente pequenos de  $c$ .

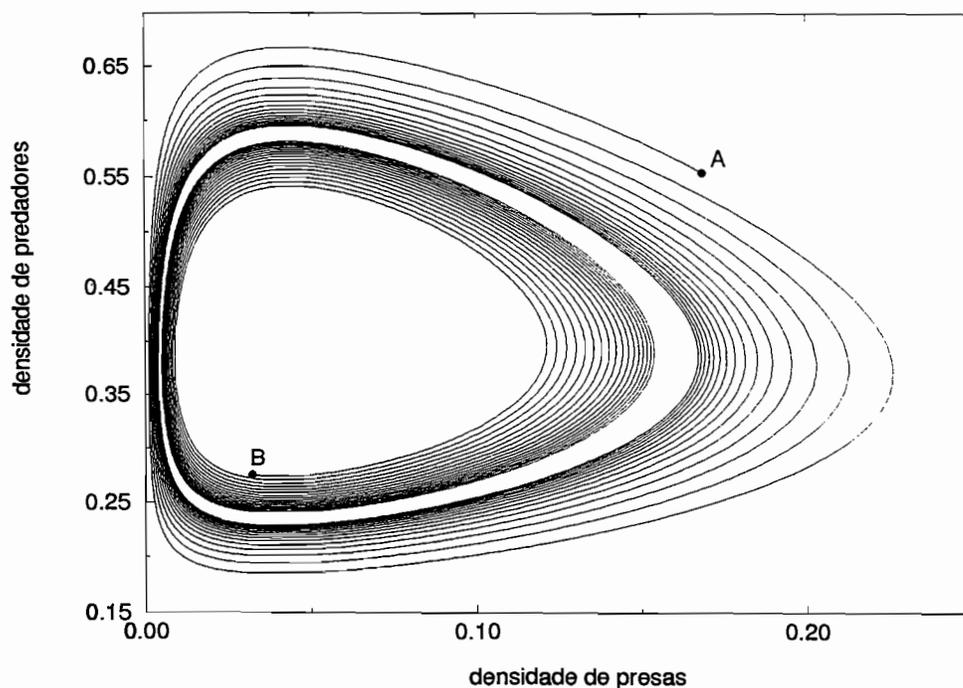


Figura 4.5: Ciclo limite da região IV do diagrama de fases. A e B representam duas condições iniciais diferentes.

# Capítulo 5

## Simulações de Monte Carlo

### O diagrama de fases em redes finitas

#### 5.1 O algoritmo

As simulações numéricas foram feitas em redes quadradas com condições periódicas de contorno. Devemos aclarar que utilizamos o nome de simulações de Monte Carlo, por ser um termo de uso corrente na área, mas não tem em princípio relação alguma com o algoritmo de Metropolis ou similares. A maioria das simulações apresentadas neste capítulo foram feitas em redes de  $100 \times 100$  sítios.

A condição inicial utilizada em cada rodada foi a rede preenchida aleatoriamente com predadores, presas e sítios vazios. Em todas as simulações realizadas (menos num conjunto específico de parâmetros que se tratará mais adiante) o estado final atingido pelo sistema independeu dos valores das densidades iniciais.

Cada passo da simulação é feito da seguinte forma:

- Escolhe-se um sítio aleatoriamente na rede.
- Verifica-se o conteúdo do sítio escolhido. De acordo com o conteúdo:
  - Se o sítio estiver vazio, se escolhe um número aleatoriamente. Caso ele seja menor que  $an_a/\zeta$ , onde  $n_a$  é o número de sítios vizinhos ocupados por presas, o sítio é preenchido com uma presa. Caso contrário permanece vazio.
  - Se houver uma presa, se escolhe um número aleatoriamente. Caso ele seja menor que  $bn_b/\zeta$ , onde  $n_b$  é o número de sítios vizinhos ocupados por predador, o sítio passa a ser ocupado por um predador. Caso contrário permanece como presa.
  - Se houver um predador, se escolhe um número ao acaso. Caso ele seja menor que  $c$ , o sítio é desocupado. Caso contrário permanece ocupado por um predador.

- Incrementa-se o tempo em  $1/N$ , (onde  $N$  é o número de sítios na rede) e registra-se o valor das densidades de predadores e presas.
- Volta-se ao início do procedimento.

## 5.2 Diagrama de fases preliminar

Os resultados obtidos nas simulações [Satulovsky e Tomé, 1994], em uma dimensão, coincidem com o predito pelo campo médio de pares e os resultados exatos [Andjel e Schinazi, 1994], no sentido de que o estado AP ocupa todo o diagrama de fases.

Em duas dimensões, os resultados podem-se resumir na figura 5.1. O diagrama tem caráter preliminar [Satulovsky e Tomé, 1994] dado que, por ter sido utilizada uma rede quadrada de  $100 \times 100$ , existem efeitos de tamanho finito. Mais adiante, no capítulo 7, veremos como obter resultados mais precisos mediante o uso de simulações dependentes do tempo. A região I representa estados AP. À medida em que a probabilidade de sobrevivência de predadores cresce ( $c$  decresce) o sistema sofre uma transição de fase cinética para estados estacionários ativos. Estes estão representados pela região II.

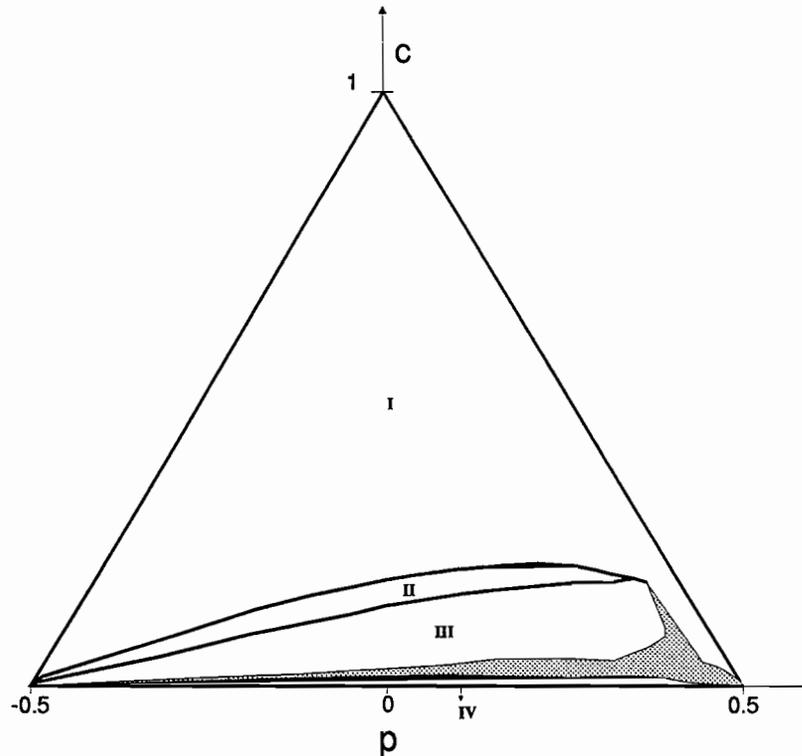


Figura 5.1: Diagrama de fases segundo simulações de Monte Carlo para uma rede de  $100 \times 100$  sítios.

A transição também pode ser apreciada na figura 5.2, análoga a figura 4.3

obtida na aproximação de pares. Estes estados estão caracterizados por curtos transientes de menos de 1000 MCS. Um estado foi considerado como ativo, na medida em que o sistema não caísse num estado absorvente durante 30000 MCS (tempo típico de amostragem de dados usado). Em II, as populações têm um valor médio constante no tempo, e não apresentam evidência nenhuma de caráter oscilatório.

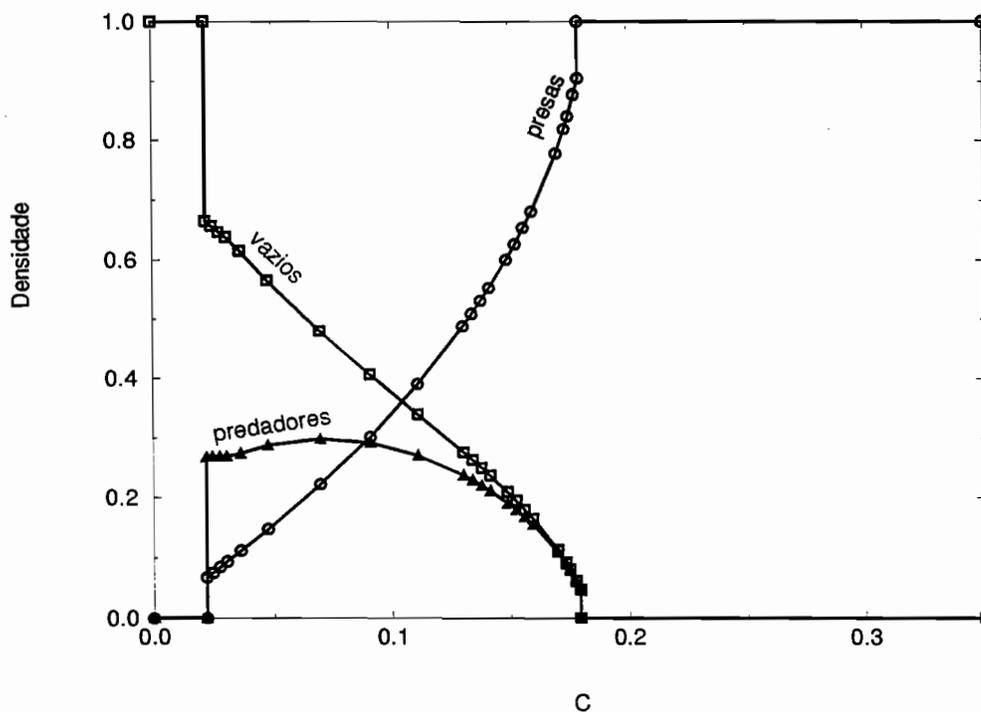


Figura 5.2: Densidade de presas, predadores e sítios vazios como função de  $c$ , para  $p = 0$ .

Este comportamento pode-se corroborar numa inspeção da figura 5.3. Nela, o gráfico superior representa um intervalo de uma amostra temporal típica. O gráfico inferior é a densidade espectral  $S(w)$  calculada em base na amostra temporal mencionada segundo a expressão [Van Kampen, 1981]

$$S(w_j) = \frac{1}{N} \left\langle \left| \sum_{n=1}^N f(n) \exp(iw_j n) \right|^2 \right\rangle, \quad (5.1)$$

$$w_j = \frac{\pi(j-1)}{N}, \quad j = 1, N,$$

onde  $f(n)$  denota a densidade estacionária de uma dada espécie no instante de tempo  $n$ . Para evitar uma divergência de  $S(w)$  em  $w = 0$ , a cada amostra temporal foi-lhe subtraído seu valor médio, obtendo assim um processo com valor médio nulo. Na figura 5.3.b. é mostrado o comportamento de  $S(w)$  versus  $w$  com  $S(w)$  calculada a partir de

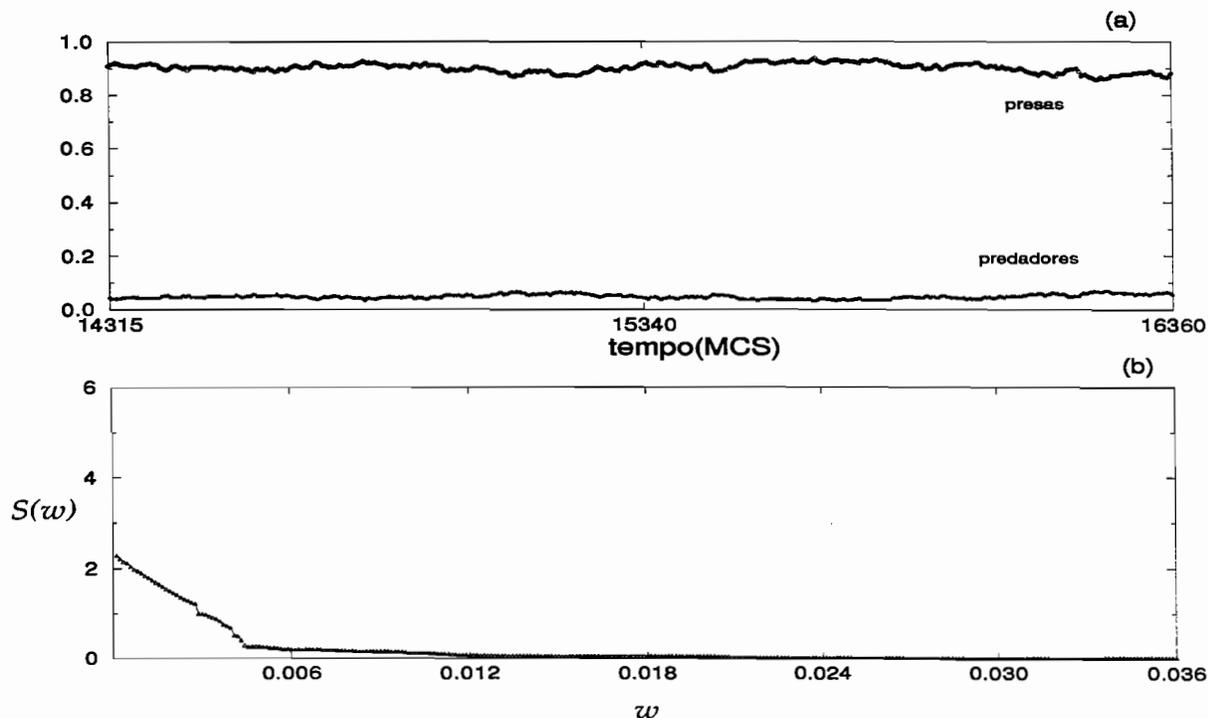


Figura 5.3: Região II do diagrama de fases. (a): Evolução temporal da densidade de presas e predadores. (b): Densidade espectral.

amostras temporais concernentes à densidade de presas. Resultados similares obtém-se para as densidades espectrais relativas a predadores e a sítios vazios.

A medida que  $c$  decresce para um valor fixo de  $p$ , acontece uma transição da região II para a III. Consiste no surgimento de oscilações temporais nas densidades das populações do sistema. Este comportamento oscilatório pode-se corroborar inspecionando a figura 5.4. Nela pode-se apreciar um nítido máximo em  $S(w)$ . Procurou-se uma forma de medir o grau de oscilação do sistema para um conjunto de parâmetros dado. Uma escolha natural é a altura do máximo valor atingido pela densidade espectral, que pode servir como parâmetro de ordem. A linha delimitando as regiões II e III foi definida de modo que os modos baixos da densidade espectral ( $\lim_{w \rightarrow 0} S(w)$ ) tivessem o mesmo valor que seu máximo  $S(w_{\max})$ . A predominância dos modos baixos (que pode apreciar-se claramente na figura 5.3) é inevitável à medida que  $c$  cresce, dado o fato de o sistema estar perto da transição de fase cinética (TFC) de segunda ordem entre as regiões I e II. Perto da transição, as flutuações de longo alcance ficam cada vez mais relevantes. É por isso que se deve tomar cuidado na confiabilidade dos pontos da mencionada linha no seu extremo direito, pois para altos valores de  $p$  esta chega muito perto da TFC de segunda

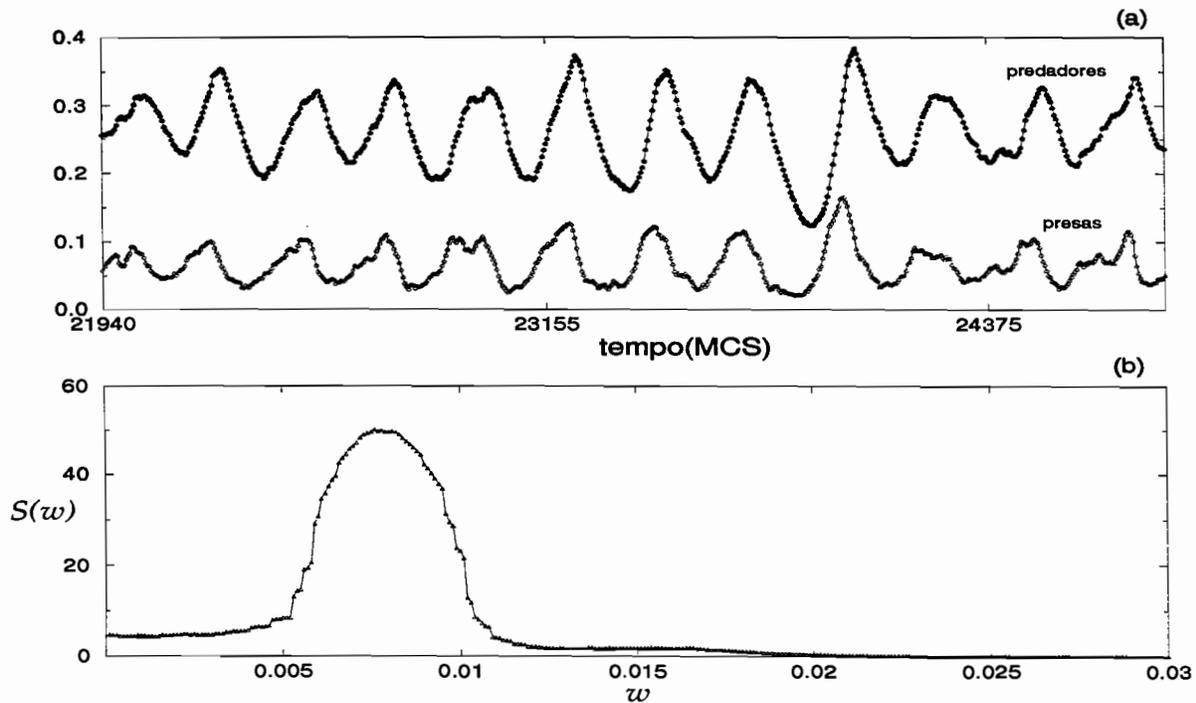


Figura 5.4: Região III do diagrama de fases. (a): Evolução temporal da densidade de presas e predadores. (b): Densidade espectral.

ordem, ocasionando-se um *overlap* entre os modos baixos e o máximo de  $S(w)$ . É notável o fato de que as flutuações de grande comprimento espacial se comportem, nas transições contínuas de sistemas fora do equilíbrio, de modo similar ao caso de sistemas em equilíbrio térmico.

As densidades espectrais calculadas diretamente a partir das séries temporais são extremamente irregulares. Para obter informações a partir delas foi preciso fazer a convolução da densidade espectral com gaussianas. Dessa forma é que se obteve o gráfico da densidade espectral na figura 5.4. Para não induzir resultados espúrios se tomou o cuidado de escolher gaussianas de dispersão sensivelmente menor do que a largura da densidade espectral. A escolha de gaussianas foi um pouco arbitrária pois confirmou-se que qualquer função com um nítido máximo em  $x = 0$  e decaimento suficientemente rápido também funciona. Outra possibilidade testada é fazer a convolução diretamente com a série temporal (neste caso a dispersão da gaussiana deve ser muito menor que o período típico de uma oscilação na série).

Os resultados das simulações indicam que as oscilações tornam-se mais notórias à medida que  $c$  decresce. Ou seja,  $S(w_{\max})$  cresce à medida que  $c$  decresce. Ademais,  $w_{\max}$  decresce com  $c$ . Neste limite, para  $p = 0$  e  $c \ll 1$ ,  $w_{\max} \sim c^\alpha$  com  $\alpha < 1$ . Este

comportamento está em acordo qualitativo com as previsões da aproximação de pares, que fornece o valor  $\alpha = 1/2$ . Incrementando  $c$ ,  $w_{\max}$  também cresce, atingindo um valor limite até a oscilação desaparecer. Para  $p = 0$  este valor corresponde a um período de  $\approx 250$  MCS. Por último, a região IV na figura 5.1 representa estados AV. Usando redes de até  $480 \times 480$  sítios observamos que a região se reduz com o tamanho da rede. Esse comportamento está de acordo com as previsões de campo médio, segundo as quais estes estados só podem existir em  $c = 0$ . Estudos mais detalhados do comportamento crítico do modelo e do estado AV, usando idéias de teoria de escala, serão feitos no capítulo 7.

A respeito da região cinza da figura 5.1, tal como antecipou-se no começo da seção, os valores das densidades iniciais das populações determinam se o sistema atingirá um estado oscilante (até no mínimo 30000 MCS), ou se será aprisionado num dos estados absorventes a poucos MCS do instante inicial. Decidimos deixá-la, até o capítulo 7, como uma região de resultados não conclusivos.

Antes de encerrar esta seção, devemos mencionar uma questão importante. A pergunta que surge após observar a existência das oscilações temporais é a de como elas se comportam no limite termodinâmico. Persistirão como oscilações sincronizadas ou serão um fenômeno de caráter local? Intuitivamente é quase óbvio que nosso sistema é suficientemente estocástico para não possuir estados *coerentes* (oscilações coletivas). Com esta idéia em mente, estudamos o desvio quadrático médio de amostras temporais da densidade de cada espécie,  $\rho$ , para redes de diferentes tamanhos,

$$\sigma = \sqrt{\langle (\rho - \langle \rho \rangle)^2 \rangle}. \quad (5.2)$$

Este estimador inclui as flutuações de todas as frequências e não só a dominante no espectro, de modo que serve como uma cota da rapidez com que o modo principal decai com o tamanho  $L$  da rede.

Verificamos, para valores específicos de  $p$  e  $c$  dentro da região III, que quando o tamanho  $L$  da rede é incrementado,  $\sigma$  decai na forma  $1/\sqrt{N}$ , onde  $N$  é o número total de sítios na rede ( $N = L^2$ ). Isto pode ser observado na figura 5.5. O fato de as flutuações decaírem *termodinamicamente* indica que as oscilações são um fenômeno de caráter local. No capítulo 8 descrevemos qualitativamente um mecanismo, observado nas simulações, capaz de produzir estas oscilações locais.

Vale lembrar que existem modelos, como o caso de um autômato celular probabilístico para descrever o transporte ativo em membranas biológicas [Vieira e Bisch, 1993], ou como um modelo de gás de rede para reações de catálise em Pd [Vlachos *et al.*, 1992], que também apresentam flutuações locais nas densidades das espécies envolvidas. Em [Vieira e Bisch, 1993], o modelo tem só um processo autocatalítico, mas as oscilações bem definidas são observadas com um mínimo de 5 espécies. Estas oscilações são explicadas

em termos de fenômenos de aglomeração de variáveis com o mesmo estado e propagação de frentes de onda. Como veremos no capítulo 8, as oscilações de nosso modelo, numa porção do diagrama de fases, são semelhantes no que diz respeito a propagação de frentes de onda.

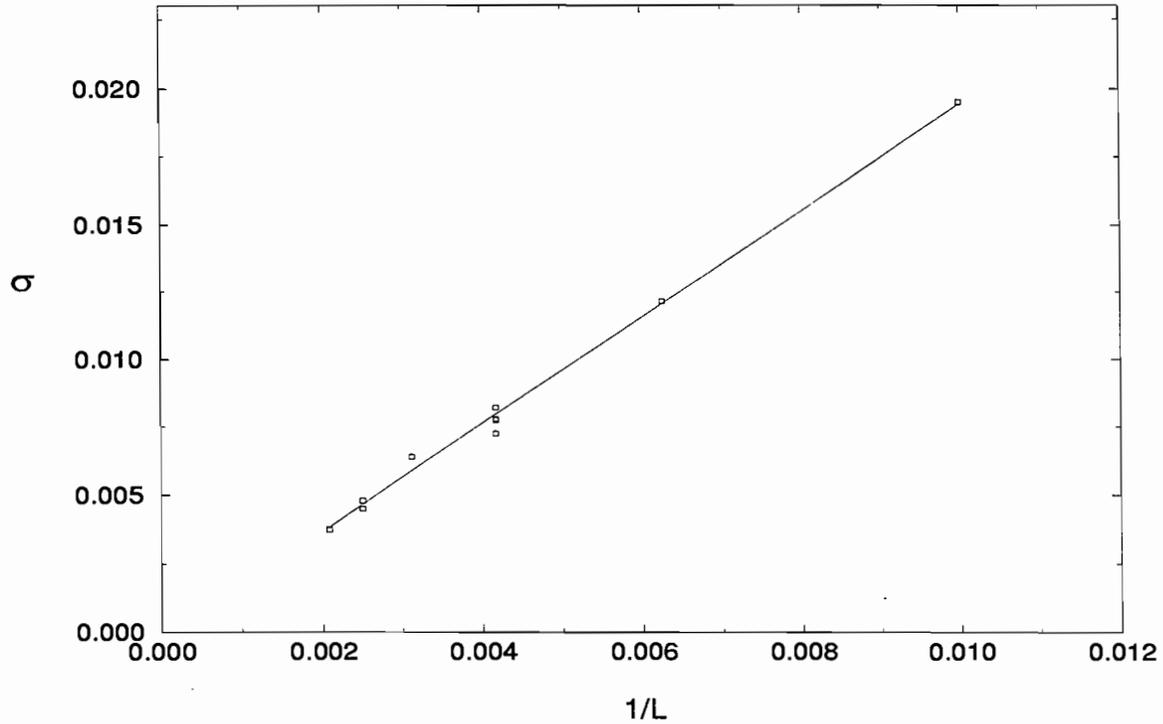


Figura 5.5: Decaimento de  $\sigma$  como função de  $1/L$ .

# Capítulo 6

## Instabilidades espaço-temporais

### A região das oscilações do ponto de vista de campo médio

Para uma melhor compreensão do mecanismo das oscilações do modelo, estudamos a evolução das perturbações não-homogêneas na equação mestra [Satulovsky e Tomé, 1995]. A análise foi feita na aproximação de campo médio simples e na aproximação de campo médio com pares.

Consideramos perturbações espaço-temporais ao longo de uma dada direção, a direção longitudinal, o que implica que as densidades e correlações (longitudinais e transversais) variam apenas ao longo da direção longitudinal e não da transversal. É importante notar que, dada a não linearidade das equações que governam a evolução temporal das correlações, o princípio da superposição não tem validade nesse caso e as conclusões obtidas a seguir não podem ser generalizadas para perturbações genéricas.

### 6.1 Equações de campo médio simples para correlações não-homogêneas

Primeiro analisamos as equações na aproximação de campo médio simples. As densidades das presas e dos predadores são definidos por

$$x_\ell = P_\ell(1), \quad \text{e} \quad y_\ell = P_\ell(2) \quad (6.1)$$

respectivamente, onde  $\ell$  é o rótulo que denota a direção longitudinal. Nesse caso temos as seguintes equações de evolução para  $x_\ell$  e  $y_\ell$

$$\frac{dx_\ell}{dt} = \frac{a}{4}(1 - x_\ell - y_\ell)(2x_\ell + x_{\ell-1} + x_{\ell+1}) - \frac{b}{4}x_\ell(2y_\ell + y_{\ell-1} + y_{\ell+1}), \quad (6.2)$$

$$\frac{dy_\ell}{dt} = \frac{b}{4}x_\ell(2y_\ell + y_{\ell-1} + y_{\ell+1}) - cy_\ell, \quad (6.3)$$

e consideramos perturbações em torno do estado estacionário não trivial escrevendo

$$x_\ell = x^* + X_\ell, \quad e \quad y_\ell = y^* + Y_\ell, \quad (6.4)$$

onde  $x^*$  e  $y^*$  são as soluções estacionárias de campo médio simples dadas em 4.4. Uma vez linearizada, nossas equações para a evolução das perturbações ficam

$$\begin{aligned} \frac{dX_\ell}{dt} = & \frac{a}{4}(1 - x^* - y^*)(2X_\ell + X_{\ell+1} + X_{\ell-1}) - ax^*(X_\ell + Y_\ell) \\ & - \frac{b}{4}x^*(2Y_\ell + Y_{\ell-1} + Y_{\ell+1}) - by^*X_\ell, \end{aligned} \quad (6.5)$$

$$\frac{dY_\ell}{dt} = \frac{b}{4}x^*(2Y_\ell + Y_{\ell-1} + Y_{\ell+1}) + by^*X_\ell - cY_\ell. \quad (6.6)$$

Para testar a possibilidade de instabilidades espaciais propomos perturbações na forma

$$X_\ell = C_1 e^{\lambda t + i k \ell}, \quad e \quad Y_\ell = C_2 e^{\lambda t + i k \ell}. \quad (6.7)$$

que substituídas nas equações lineares fornecem a seguinte equação característica

$$\lambda^2 - T(k)\lambda + D(k) = 0, \quad (6.8)$$

onde

$$T = -\frac{ac}{b} - \frac{b(a+c)}{2(a+b)}(1 - \cos k), \quad (6.9)$$

$$D = \frac{ac}{4b(a+b)}[b(b-c)\cos^2 k - 2c(a+b)\cos k + 4ab + 3b^2 - 2ac - bc]. \quad (6.10)$$

A equação da dependência de  $\lambda$  com  $k$  tem a forma

$$\lambda = \frac{1}{2} \left\{ T(k) \pm \sqrt{T^2(k) - 4D(k)} \right\} \quad (6.11)$$

Estudamos o comportamento do autovalor que possui a maior parte real como função de  $k$ . Assim, se existir  $k^*$  tal que

$$\text{Re}(\lambda(k^*)) \geq 0 \quad (6.12)$$

então poderemos concluir que o sistema é instável ante perturbações de comprimento característico  $2\pi/k^*$ .

Encontramos que  $k = 0$  domina o comportamento, dado que a parte real de  $\lambda$  é sempre negativa para  $k = 0$ , o que implica que, dentro dessa aproximação, o estado homogêneo é estável. Portanto, concluímos com essa análise que a aproximação de campo médio simples (e perturbações numa direção preferencial) não é capaz de revelar o comportamento não homogêneo. É necessário, então, considerar uma aproximação de ordem superior o que é feito a seguir.

## 6.2 Diagrama de fases do sistema não homogêneo na aproximação de pares

Da aproximação de pares para o caso homogêneo considerado anteriormente no capítulo 4 sabemos que no caso do modo zero ( $k = 0$ , perturbações homogêneas), para cada valor de  $p$  existe um valor crítico de  $c$  para o qual se produzem bifurcações de Hopf. Estudaremos agora como o sistema se comporta ante perturbações com  $k \neq 0$ . Novamente, nos restringimos ao caso em que a dependência espacial ocorre ao longo de uma direção, sendo homogênea nas outras.

Devido à falta de simetria das correlações no sentido longitudinal nosso sistema de equações diferenciais acopladas passa a ter nove elementos em vez de cinco elementos como se dava no caso homogêneo (capítulo 4). As variáveis independentes escolhidas para a análise foram: as duas densidades

$$x_\ell = P_\ell(1), \quad (6.13)$$

$$y_\ell = P_\ell(2), \quad (6.14)$$

e as sete correlações de dois sítios vizinhos

$$u_\ell = P_\ell^{\parallel}(01), \quad (6.15)$$

$$v_\ell = P_\ell^{\parallel}(12), \quad (6.16)$$

$$w_\ell = P_\ell^{\parallel}(02), \quad (6.17)$$

$$z_\ell = P_\ell^{\parallel}(21), \quad (6.18)$$

onde  $P_\ell^{\parallel}(\alpha\beta)$  é a correlação de pares de sítios vizinhos na direção longitudinal, sendo  $\ell$  o rótulo correspondente ao primeiro argumento  $\alpha$ , e

$$q_\ell = P_\ell^\perp(01), \quad (6.19)$$

$$r_\ell = P_\ell^\perp(12), \quad (6.20)$$

$$s_\ell = P_\ell^\perp(02), \quad (6.21)$$

onde  $P_\ell^\perp(\alpha\beta)$  é a correlação de pares de sítios vizinhos na direção transversal.

Lembremos que 0 representa um sítio vazio, 1 representa um sítio ocupado por uma presa e 2 representa um sítio ocupado por um predador. Todas as outras variáveis podem ser expressas como funções dessas nove variáveis.

As equações de evolução para as densidades e as correlações são dadas por

$$\frac{dx_\ell}{dt} = \frac{a}{4}(x_{\ell-1} - x_\ell + u_{\ell-1} - v_{\ell-1} + z_{\ell-1} + u_\ell + 2q_\ell) - \frac{b}{4}(v_\ell + z_{\ell-1} + 2r_\ell),$$

$$\frac{dy_\ell}{dt} = \frac{b}{4}(v_\ell + z_{\ell-1} + 2r_\ell) - cy_\ell, \quad (6.22)$$

$$\begin{aligned} \frac{du_\ell}{dt} = & \frac{a(1 - x_\ell - y_\ell - u_\ell - w_\ell)}{4(1 - x_{\ell+1} - y_{\ell+1})}(u_{\ell+1} + 2q_{\ell+1}) - \frac{bu_\ell}{4x_{\ell+1}}(v_{\ell+1} + 2r_{\ell+1}) + cz_\ell \\ & - \frac{au_\ell}{4(1 - x_\ell - y_\ell)}(x_{\ell-1} - x_\ell + u_{\ell-1} - v_{\ell-1} + z_{\ell-1} + 1 - x_\ell - y_\ell + 2q_\ell), \end{aligned} \quad (6.23)$$

$$\begin{aligned} \frac{dv_\ell}{dt} = & \frac{aw_\ell}{4(1 - x_\ell - y_\ell)}(x_{\ell-1} - x_\ell + u_{\ell-1} - v_{\ell-1} + z_{\ell-1} + 2q_\ell) - \frac{bv_\ell}{4x_\ell}(z_{\ell-1} + x_\ell + 2r_\ell) \\ & + \frac{b(x_{\ell+1} - u_\ell - z_\ell)}{4x_{\ell+1}}(v_{\ell+1} + 2r_{\ell+1}) - cv_\ell, \end{aligned} \quad (6.24)$$

$$\begin{aligned} \frac{dw_\ell}{dt} = & -\frac{aw_\ell}{4(1 - x_\ell - y_\ell)}(x_{\ell-1} - x_\ell + u_{\ell-1} - v_{\ell-1} + z_{\ell-1} + 2q_\ell) + \frac{bu_\ell}{4x_{\ell+1}}(v_{\ell+1} + 2r_{\ell+1}) \\ & + c(y_{\ell+1} - v_\ell - 2w_\ell), \end{aligned} \quad (6.25)$$

$$\begin{aligned} \frac{dz_\ell}{dt} = & \frac{b(x_{\ell+1} - u_\ell - z_\ell)}{4x_\ell}(z_{\ell-1} + 2r_{\ell+1}) - \frac{bz_\ell}{4x_{\ell+1}}(v_{\ell+1} + x_{\ell+1} + 2r_{\ell+1}) \\ & + \frac{a(y_\ell - y_{\ell+1} + v_\ell + w_\ell - z_\ell)}{4(1 - x_{\ell+1} - y_{\ell+1})}(u_{\ell+1} + 2q_{\ell+1}) - cz_\ell, \end{aligned} \quad (6.26)$$

$$\begin{aligned} \frac{dq_\ell}{dt} = & \frac{a(1 - x_\ell - y_\ell - 2q_\ell - s_\ell)}{4(1 - x_\ell - y_\ell)}(q_\ell + x_{\ell-1} - x_\ell + u_{\ell-1} - v_{\ell-1} + z_{\ell-1} + u_\ell) \\ & - \frac{bq_\ell}{4x_\ell}(z_{\ell-1} + v_\ell + r_\ell) - \frac{aq_\ell}{4} + cr_\ell, \end{aligned} \quad (6.27)$$

$$\begin{aligned} \frac{dr_\ell}{dt} = & \frac{as_\ell}{4(1 - x_\ell - y_\ell)}(x_{\ell-1} - x_\ell + u_{\ell-1} - v_{\ell-1} + z_{\ell-1} + u_\ell + q_\ell) - \frac{br_\ell}{4} - cr_\ell \\ & + \frac{b(x_\ell - q_\ell - 2r_\ell)}{4x_\ell}(z_{\ell-1} + v_\ell + r_\ell), \end{aligned} \quad (6.28)$$

$$\begin{aligned} \frac{ds_\ell}{dt} = & -\frac{as_\ell}{4(1 - x_\ell - y_\ell)}(x_{\ell-1} - x_\ell + u_{\ell-1} - v_{\ell-1} + z_{\ell-1} + u_\ell + q_\ell) \\ & + \frac{bq_\ell}{4x_\ell}(z_{\ell-1} + v_\ell + r_\ell) + c(y_\ell - r_\ell - 2s_\ell). \end{aligned} \quad (6.29)$$

De modo análogo ao caso da seção anterior estudamos pequenas perturbações ao redor

da solução estacionária homogênea não trivial dada no Apêndice B e linearizamos as equações acima. Propusemos soluções do mesmo tipo que em 6.7 para as perturbações obtendo assim um sistema altamente não linear em  $k$ . Estudamos numericamente o comportamento do autovalor dominante (maior parte real) como função de  $k$ . À medida que  $c$  decresce, com  $p$  fixo, as instabilidades espaço-temporais surgem a partir de um valor crítico  $c^*$  tornando o estado homogêneo instável. A linha crítica  $c^*(p)$  é definida, portanto, por  $\text{Re}(\lambda(k)) = 0$  e está mostrada na figura 6.1. Ao longo dessa linha crítica o vetor de onda  $k$  é não nulo e varia continuamente.

Na figura 6.1 mostramos também a linha de bifurcação de Hopf encontrada anteriormente a partir da análise de estabilidade linear homogênea (capítulo 4). A análise feita aqui mostra que as instabilidades espaço-temporais tornam o estado homogêneo instável antes da possível ocorrência da bifurcação de Hopf.

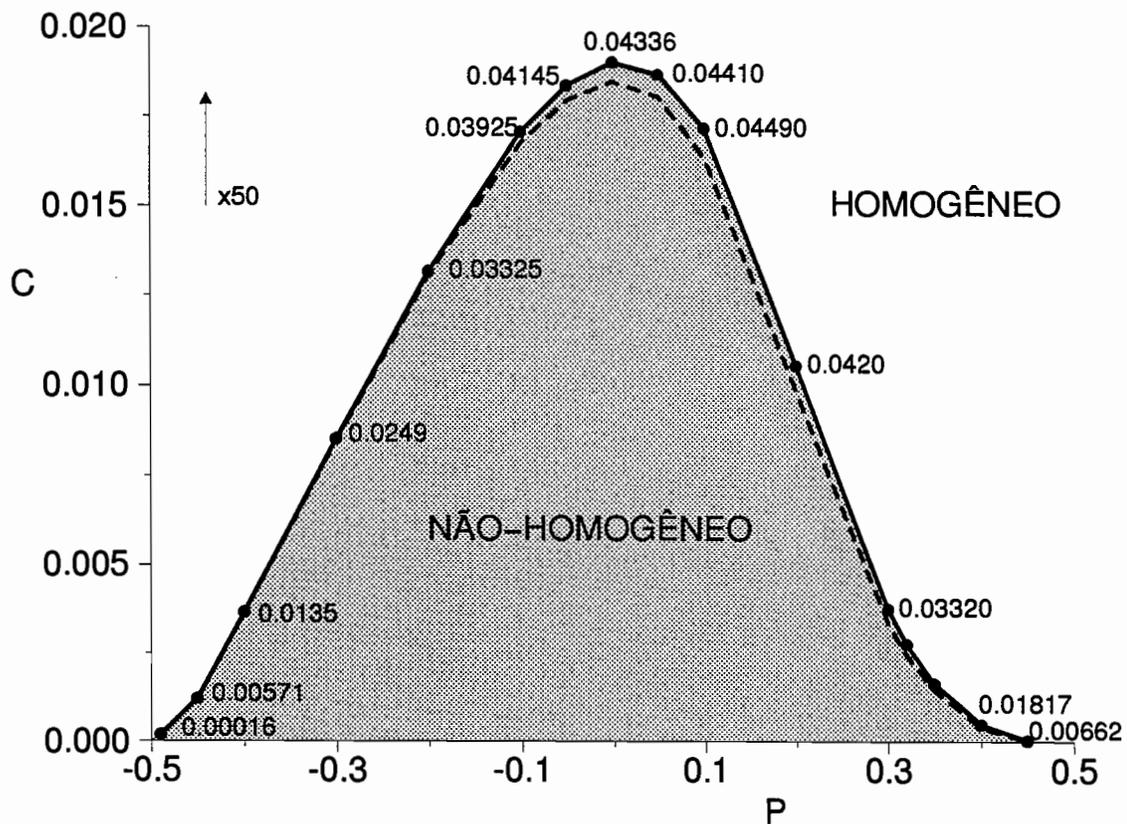


Figura 6.1: Amplificação da parte inferior do diagrama de fases na aproximação de pares. Na linha de bifurcação dos modos modulados se escreveram os valores de  $k$  associados as instabilidades. A linha tracejada indica a bifurcação do modo zero.

Para verificar esses resultados integramos numericamente as equações 6.22-6.29. A condição inicial utilizada está representada pela curva de círculos brancos na figura 6.2. Nesta figura, mostramos a dependência da densidade de predadores em função da coordenada na direção longitudinal. A amplitude da perturbação foi tomada como um milésimo do valor estacionário das densidades de cada espécie. O valor tão baixo foi tomado para evitar transitórios longos, pois os valores assintóticos das amplitudes são notoriamente pequenos. Somando o fato de que o sistema de nove equações a ser resolvido é altamente não linear, para obter resultados confiáveis foram necessárias mais de 14 casas representativas no valor das densidades. Além disso, também foi necessário discretizar o tempo em intervalos de tempo menores ou iguais do que  $2 \times 10^{-3}$  unidades. Para viabilizar o cálculo (em termos de tempo de CPU requerido) limitamos a faixa de variação de  $l$  a 100 sítios.

Na figura 6.2 mostra-se o resultado da simulação numérica para diferentes valores de  $c$ . Acima da linha de instabilidade as perturbações são assintoticamente amortecidas (figura 6.2(a)). Para valores de  $c$  suficientemente próximos da linha, a forma assintótica da perturbação está bem representada por uma função  $\sin(x)$  (figura 6.2(b)). Quando  $c$  está dentro da região de instabilidade começam a surgir não linearidades (figura 6.2(c) e (d)), assim como o valor assintótico da amplitude das perturbações cresce.

Como observação interessante podemos mencionar que a região de instabilidades das perturbações não homogêneas é a que mais se assemelha à região de estados estacionários oscilantes encontrada nas simulações de Monte Carlo descritas no capítulo 5. Ambos os tipos de oscilações são locais (com comprimento de onda finito). Porém, uma objeção a ser feita está relacionada com o caráter parabólico do sistema de equações. As integrações numéricas que deram lugar às figuras 6.2 evidenciaram que as perturbações não se propagam à medida que transcorre o tempo, mas as bordas da perturbação inicial se espalham de acordo com um movimento de tipo difusivo. Dessa forma, não fica claro como oscilações estacionárias das densidades se relacionam com o mecanismo de oscilação do tipo de uma onda química como observado nas simulações (ver capítulos 7 e 8). Outro aspecto que chama a atenção na figura 6.2 é quão pequenos são os valores assintóticos das amplitudes das instabilidades. Talvez a situação mude numa análise que leve em conta correlações de três sítios. De fato, na análise de campo médio simples vimos que a região de instabilidade não existe, enquanto que a aproximação de pares prediz o comportamento oscilante do sistema, ou seja, as flutuações introduzidas nas aproximações de campo médio são essenciais para revelar as características intrínsecas do modelo.

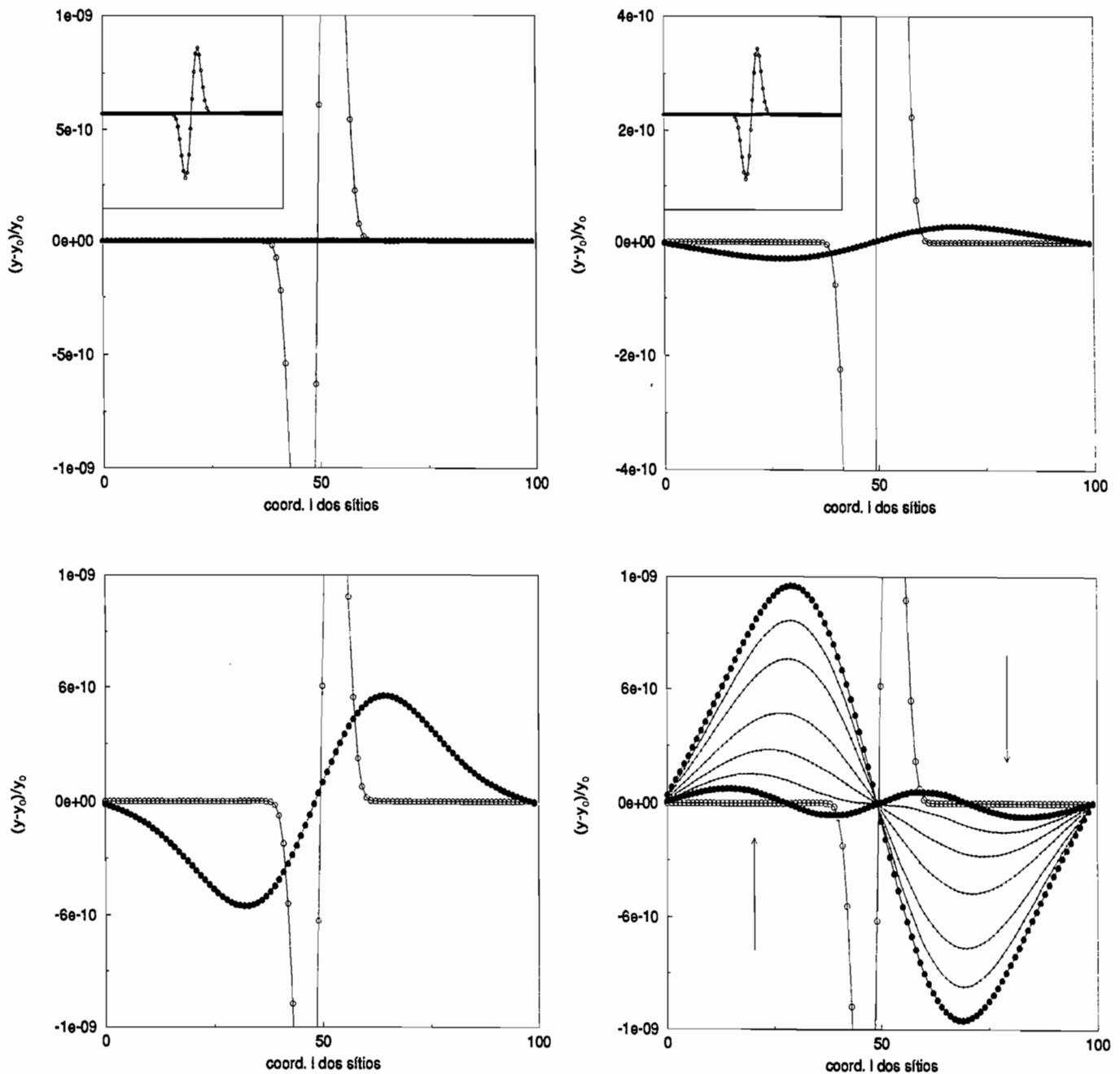


Figura 6.2: Densidade de presas (linha contínua) para  $p = 0.1$ . A linha de traços representa a perturbação a  $t=0$ . (a)  $c = 0.025, t = 1500$ , (b)  $c = 0.0168, t = 3161$ , (c)  $c = 0.010, t = 2506$ , e (d)  $c = 0.001$ , sequência de gráficos desde  $t = 3221$  até  $t = 3331$ , as flechas indicam a ordem da sequência.

# Capítulo 7

## Comportamento crítico

Classe de universalidade do modelo, a região do estado de vácuo e o diagrama de fases.

### 7.1 Introdução

Tal como se observara no capítulo I, um dos aspectos mais sobressalentes dos sistemas fora de equilíbrio é a existência de classes de universalidade bem definidas. Existe uma grande variedade de modelos estocásticos markovianos que apresentam transições de fase cinéticas (TFC) de segunda ordem. Exemplos em Física são a Percolação direcionada em  $d + 1$  dimensões (PD) [Blase, 1977b] e a evolução no plano de parâmetros de impacto da densidade de “n-wee parton” em processos de espalhamento de hadrons [Grassberger, 1978]. Na área das reações químicas, o Primeiro e o Segundo modelo de Schlögl [Schlögl, 1972, Gardiner e Walls, 1978] e mais recentemente o modelo ZGB [Ziff *et al.*, 1986], criado para descrever a oxidação do monóxido de carbono em superfícies de platina. Em ecologia, sistemas predador-presa [Matsuda *et al.*, 1992, Satulovsky e Tomé, 1994] e modelos de fogos em florestas [Drossel e Schwabl, 1993], e na modelagem epidemiológica o Processo de Contato (PC) [Harris, 1974]. É surpreendente que modelos tão diversos possuam os mesmos expoentes críticos. No caso do PC foram calculados por Grassberger e de la Torre [Grassberger e de la Torre, 1979] e para a PD por Blase e Grassberger entre outros [Blase, 1977a, Grassberger, 1989a]. Os expoentes do modelo ZGB aparecem em várias referências [Aukrust *et al.*, 1989, Jensen *et al.*, 1990, Albano e Pereyra, 1994]. Para o caso de um modelo de fogos em florestas com imunização ver [Albano, 1994].

Jannsen [Jannsen, 1981] e Grassberger [Grassberger, 1982a] conjecturaram, usando argumentos de teoria de campos, que o comportamento crítico de todo modelo de uma componente (como no caso do PC), que apresentar uma transição de fase contínua para um único estado absorvente, pertence à classe de universalidade da PD em  $d + 1$  dimensões, que é a mesma que a classe de universalidade da Teoria de Campos

de Regge. A suposição independe de detalhes nas regras locais que definem a dinâmica do modelo. Esta conjectura, conhecida como “conjectura PD”, foi estendida por Grinstein *et al.* [Grinstein *et al.*, 1989] para sistemas de várias componentes. Modelos que pareceram violar a conjectura PD [Albano, 1992, Yaldram *et al.*, 1993] revelaram mais tarde erros no cálculo dos expoentes críticos, pertencendo em verdade à esta classe [Zhuo e Redner, 1993, Jensen, 1994]. Também modelos com infinitos estados absorventes foram estudados e verificou-se que pertencem à classe de universalidade PD [Jensen e Dickman, 1993]. Mas se conhecem exemplos que não têm comportamento PD [Grassberger *et al.*, 1984, Grassberger, 1989b, Kim e Park, 1994]. As causas de um modelo particular estar ou não numa dada classe de universalidade não são ainda bem compreendidas dentro da mecânica estatística de não-equilíbrio.

Pensemos no nosso modelo para um sistema predador-presa no limite em que  $b, c \rightarrow 0$  ( $p \rightarrow -0.5$ ). Vamos nos manter arbitrariamente perto da linha de transição de segunda ordem para o estado AP (poucos predadores). Neste limite, o modelo se mapeia no PC. É fácil de se convencer disto, pois como  $b/a \rightarrow 0$  e  $c/a \rightarrow 0$ , o tempo de vida médio de um sítio vazio é muito pequeno com respeito ao de um predador ou ao tempo médio que uma presa demora para ser comida por um predador. Assim, podemos pensar num processo onde não existem sítios vazios, mas só predadores (ou sítios infectados) evoluindo sobre um substrato de presas (ou sítios não infectados). As regras dinâmicas dos predadores são as mesmas que no PC, de modo que a analogia é clara. Isto leva a pensar que no canto esquerdo de nosso diagrama de fases o comportamento crítico será do tipo PD.

Tomemos agora outro limite no nosso modelo, o limite em que  $a \rightarrow 0$  (e também nos mantemos perto da linha de transição para o estado AP). Quando as presas perdem a sua mobilidade, o que se dá para  $a = 0$ , o modelo pode ser mapeado num outro tipo de processo epidêmico. Este novo processo pertence à classe de universalidade da percolação ordinária [Grassberger, 1982b]. Cabe destacar que o tipo de transição a que nos estamos referindo é algo peculiar: a *transição* é entre duas fases com estados absorventes de caráter marcadamente diferente, e não entre um estado ativo e outro absorvente. Embora o valor crítico  $c_{cr}$  de nosso modelo não se possa inferir das simulações apresentadas em [Grassberger, 1982b], observamos que no nosso caso também existirá um valor  $c_c$  finito para  $a = 0$ .

Neste ponto cabe formular algumas perguntas. A primeira é sobre a linha de transições de segunda ordem para o estado absorvente de presas que se observa na figura 5.1 (relevada para uma rede finita). Numa rede infinita, continuará suavemente até encontrar o valor  $c_{cr}$  na borda  $a = 0$  do diagrama de fases? A questão da continuidade não é trivial, olhemos por exemplo para o modelo ZGB [Ziff *et al.*, 1986]. No limite em

que a probabilidade de adsorção de monóxido de carbono tende a zero,  $p_{co} \rightarrow 0$ , o valor assintótico da densidade de cada espécie na rede não coincide com os valores encontrados para  $p_{co} = 0$ .

A segunda pergunta tem a ver com a classe de universalidade da linha de transição de segunda ordem. Enquanto para um dos limites a classe de universalidade é a da percolação dirigida, o limite oposto pertence à classe da percolação ordinária. O que acontecerá para valores intermediários?

Para responder a estas questões calculamos os expoentes críticos em vários pontos da linha mediante a técnica de Simulações de Monte Carlo dependentes do tempo. Este procedimento possibilitou também a obtenção de estimativas muito precisas dos valores críticos dos parâmetros  $(p_{cr}, c_{cr})$  na transição.

## 7.2 Simulações dependentes do tempo.

A técnica que queremos apresentar neste capítulo consiste em fazer uma análise usando a teoria de escala. Tradicionalmente essa teoria é utilizada para estudar o comportamento dos valores do parâmetro de ordem obtidos a partir dos estados *estacionários* dos sistemas. A vantagem de nossa abordagem é que possibilita uma melhor compreensão do comportamento dinâmico do sistema. Esta metodologia, também conhecida como Teoria Epidêmica, foi usada pela primeira vez por Grassberger e de la Torre [Grassberger e de la Torre, 1979] e tem provado ser muito útil para classificar o comportamento crítico de novos modelos [Dickman, 1990, Jensen, 1991, Dickman e Tomé, 1991]. A base do método reside no fato de que a evolução assintótica do parâmetro de ordem de um modelo, no seu ponto crítico, está governada por leis de potência.

Assumamos em nosso modelo que o valor do parâmetro  $p$  é fixado momentaneamente. Assim, obtemos um modelo (um para cada valor de  $p$ ) com um único parâmetro:  $c$ . Acima de seu valor crítico,  $c_{crit}$ , o estado absorvente de presas é o único estado estacionário do sistema. Para valores de  $c$  menores que  $c_{crit}$ , existe um estado estacionário com uma densidade não nula nas populações. Chamamos a região de valores de  $c$  tais que  $c < c_{crit}$  de *supercrítica*, e a região de valores de  $c$  tais que  $c > c_{crit}$  de *subcrítica*. No caso supercrítico, esperamos que para valores de  $c$  próximos a  $c_{crit}$ , a densidade de predadores se comporte como:

$$\rho_{act} \sim \Delta^\beta, \quad (7.1)$$

onde  $\Delta = c_{crit} - c$ , e  $\rho_{act}$  denota a densidade de predadores na fase ativa, e  $\beta$  é um expoente crítico definido no regime estacionário.

Entre as grandezas úteis na caracterização do ponto crítico, destacamos o comprimento de correlação temporal  $\tau \sim \Delta^{-\nu}$  e o comprimento de correlação espacial

$\xi \sim \Delta^{-z\nu/2}$ , ambos definidos no regime assintótico ( $t \rightarrow \infty$ ).

Consideremos agora as distribuições assintóticas dos predadores para as quais no instante  $t = 0$  existe somente um pequeno grupo deles no centro da rede ( $\vec{x} = 0$ ) e o resto dos sítios estão ocupados por presas (estado absorvente). Além disso, tomemos  $\Delta \approx 0$ . Dessa forma poderemos usar as idéias da hipótese de escala, e expressar qualquer função de  $\vec{x}$ ,  $t$ , e  $\Delta$  como uma nova função de  $\vec{x}^2/t^z$  e  $\Delta t^{1/\nu}$ , multiplicada por alguma potencia de  $\vec{x}^2$ ,  $t$ , ou  $\Delta$ . Em particular, esperamos para a densidade de uma partícula, uma lei de escala do tipo

$$\rho(\vec{x}, t, \Delta) \sim t^{\eta - \frac{dz}{2}} F(\vec{x}^2/t^z, \Delta t^{1/\nu}), \quad (7.2)$$

e para a probabilidade de sobrevivência, ou seja para a probabilidade de que a distribuição de partículas não tenha colapsado (desaparecido) a tempo  $t$ ,

$$P(t, \Delta) \approx t^{-\delta} \varphi(\Delta t^{1/\nu}). \quad (7.3)$$

onde  $d$  é a dimensão espacial, enquanto que  $F$  e  $\varphi$  são funções universais de escala.

Em base à forma proposta para a densidade 7.2, podemos calcular o número médio de partículas e a distancia média percorrida pelas mesmas a tempo  $t$ ,

$$N(t) = \langle n(t) \rangle = \int d^d x \rho(\vec{x}, t) \approx t^\eta f(\Delta t^{1/\nu}), \quad (7.4)$$

e

$$R(t) = \langle \vec{x}^2 \rangle^{1/2} = \left[ \frac{1}{\langle n \rangle} \int d^d x \vec{x}^2 \rho(\vec{x}, t) \right]^{1/2} \approx t^{z/2} g(\Delta t^{1/\nu}). \quad (7.5)$$

Lembremos que as expressões 7.2 à 7.5, são válidas no limite em que  $t \rightarrow \infty$ . No contexto da teoria epidêmica definimos *disco epidêmico* como o estado ativo que se propaga radialmente no estado absorvente. É vital que o comprimento de correlação no interior do disco epidêmico (estado ativo que se propaga radialmente no estado absorvente), seja muito menor que o raio do disco epidêmico. Só quando o tempo transcorrido for suficiente (o disco terá um raio suficientemente grande) como para satisfazer esta condição, estaremos na região de *scaling*. Esta é a suposição básica do método. É a forma de *lavar* as particularidades de cada modelo, obtendo assim propriedades universais associadas à evolução do disco. Desta forma, à medida em que  $\Delta \rightarrow 0$  e as correlações espaciais crescerem, o raio mínimo do disco epidêmico necessário para atingir o *scaling* também crescerá arbitrariamente.

Não todos os expoentes críticos são independentes. Existem duas relações entre eles, de forma que só três precisam ser determinados. O apêndice C.1 mostra a origem das mesmas. Estas relações são

$$\beta = \nu\delta, \quad (7.6)$$

e

$$dz = 2\eta + 4\delta. \quad (7.7)$$

### 7.3 Resultados de simulações dependentes do tempo

Para encontrar a classe de universalidade do modelo, mediram-se os valores de  $\delta$  e  $\eta$  (nas simulações a serem descritas neste capítulo, não se calculou  $\nu$ , o terceiro expoente independente, pelo custo computacional adicional que isto implica). As simulações de Monte Carlo foram utilizadas para obter os valores médios de grandezas de interesse, fazendo a média aritmética de  $P(t)$  e  $N(t)$  medidas ao longo de várias rodadas independentes (tipicamente algumas centenas de milhares). Cada rodada foi feita de acordo a seguinte prescrição. Começamos a  $t = 0$  com a rede totalmente ocupada por presas, a exceção de uns poucos predadores (foco infeccioso) no centro da rede ( $\vec{x} = 0$ ). Os parâmetros  $p$  e  $c$  são escolhidos de modo a estarem próximos aos seus valores críticos. Se deixa o sistema evoluir com as regras dinâmicas tal como estabelecemos no capítulo 5. Vital para a viabilidade da implementação é a elaboração de uma lista de sítios *ativos*, ou seja locais da rede que têm probabilidade não nula de trocarem seus estados caso sejam escolhidos no processo de Monte Carlo. Assim, em vez de sortear sítios aleatoriamente na rede e incrementar o tempo em  $1/N$  após cada sorteio, se faz o sorteio somente entre os sítios disponíveis na lista, e se incrementa o tempo em  $1/L$ , sendo  $L$  o número de elementos da lista nesse momento. Esta modalidade, embora ocupe três vezes mais espaço de memória de computador que o método usual, é sempre mais eficiente respeito ao tempo de CPU usado, pois  $L \leq N$ . A intervalos regulares de tempo, medimos:

- $P(t)$ : a probabilidade de sobrevivência do disco epidêmico. Ou seja, a probabilidade de que no instante de tempo  $t$ , ainda exista pelo menos um predador na rede (armazenamos o número 1 num contador caso ainda existam predadores na rede e 0 em caso contrário).
- $N(t)$ : O número médio de predadores na rede no instante de tempo  $t$ .

A estatística pode ser levada a cabo para os predadores, os sítios vazios ou a soma de ambos. Os três grupos devem exibir o mesmo comportamento crítico. Cada rodada culmina no momento em que o disco epidêmico morrer, ou quando o tempo atingir um valor máximo  $T_{max}$  (nós usamos 2000 MCs na maioria dos casos). Ademais é importante assegurar que a rede seja suficientemente grande para evitar que os predadores atinjam a borda da matriz a tempos  $t \leq T_{max}$ . De modo que o valor de  $T_{max}$  vem acotado por baixo

pelo valor a partir do qual se satisfaz o *scaling* (relacionado ao comprimento de correlação espacial) e por cima pelo tamanho da matriz utilizada.

Uma vez estimados os valores médios destas grandezas, perto do ponto crítico (e para grandes valores de  $t$ ), esperamos que obedeçam leis de escala do tipo:

$$P(t) \sim t^{-\delta},$$

e

$$N(t) \sim t^{\eta}.$$

Assim, podemos graficar em escala logarítmica  $P$  e  $N$  contra  $t$  para vários conjuntos de valores  $(p,c)$  próximos ao valor crítico. A curva que assintoticamente for uma reta fornecerá, via sua derivada, o valor de  $\delta$  e  $\eta$  respectivamente. Fazendo isto obtemos os gráficos 7.1.a) para  $\delta$ , e 7.2.a) para  $\eta$ . Claramente resulta difícil discernir entre as linhas. Uma análise mais precisa dos dados é obtida se definirmos *pendentes locais* das curvas como

$$-\delta(t) = \frac{\ln[P(t)/P(t/m)]}{\ln(m)}, \quad (7.8)$$

onde  $m$  é um número pequeno (5 e 8 são tipicamente usados). Uma definição análoga vale para  $\eta(t)$ . Em geral, podemos supor correções de escala do tipo

$$P(t) = t^{-\delta} \left( 1 + \frac{a}{t} + \frac{b}{t^{\delta'}} + \dots \right), \quad (7.9)$$

o que implica, na nossa definição de *pendentes locais*,

$$\delta(t) = \delta + \frac{a}{t} + \frac{\delta' b}{t^{\delta'}} + \dots \quad (7.10)$$

(e expressão análoga para  $\eta(t)$ ). Os expoentes  $\delta'$  e  $\eta'$  são chamados expoentes de correção de escala e também têm caráter universal.

Fazendo o gráfico de  $-\delta(t)$  versus  $1/t$ , a curva correspondente a  $c_{crit}$  será aquela que colide com o eixo das ordenadas com comportamento linear, o valor da ordenada sendo o expoente desejado. Valores de  $c$  correspondentes à região supercrítica geram curvas que divergem para  $-\infty$  no limite em que  $t \rightarrow \infty$ . Enquanto que valores de  $c$  na região subcrítica geram curvas que divergem para  $+\infty$ . Nas figuras 7.1.b) e 7.2.b) mostramos as *pendentes locais* para  $\delta$  e  $\eta$  no caso em que  $p = 0$ .

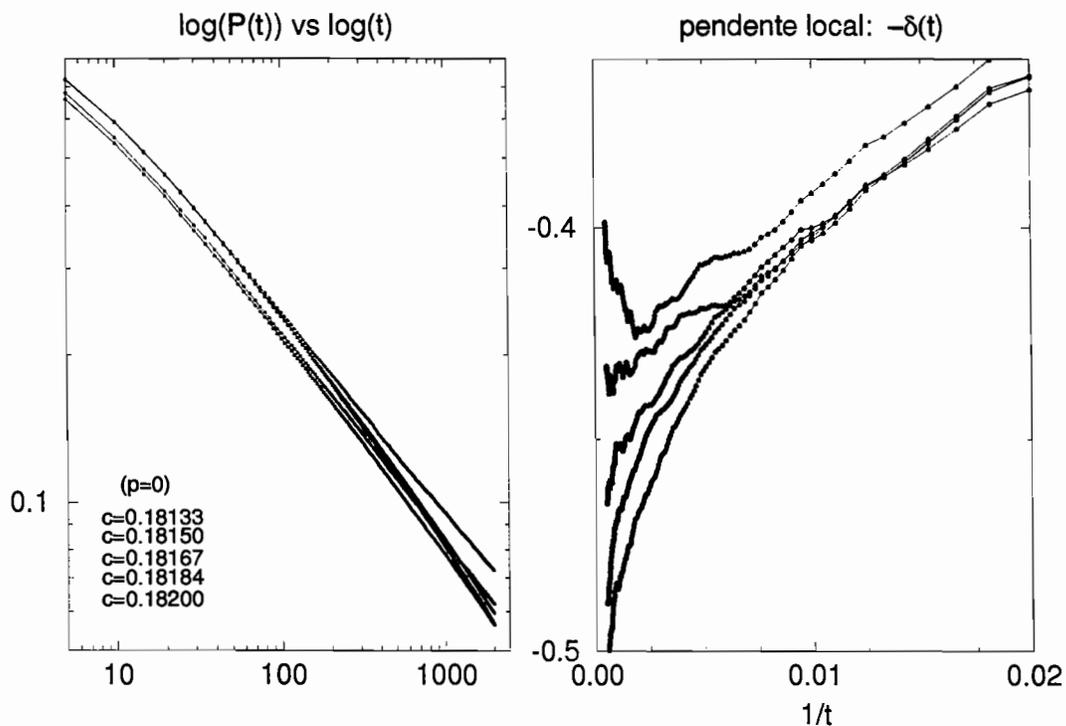


Figura 7.1: Probabilidade de sobrevivência do disco epidêmico. a) Mostra  $P(t)$  para diferentes valores de  $c$ . b) Gráfico de  $-\delta(t)$ . Ao lado de cada valor de  $c$  está o número de rodadas usadas na estatística.

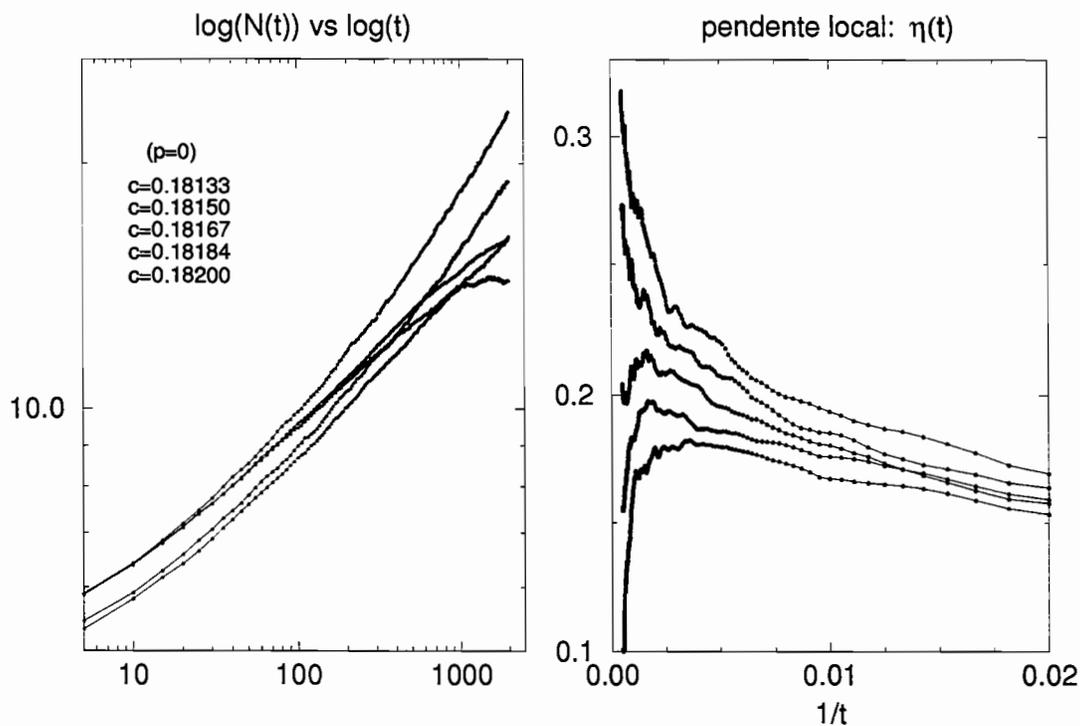


Figura 7.2: Análogo a figura 7.1, mas para o caso de  $N(t)$  e  $\eta(t)$ .

Destes gráficos inferem-se os valores

$$\begin{aligned} \delta &= 0.440 \pm 0.015 \\ \text{e} \quad \eta &= 0.225 \pm 0.015, \end{aligned} \tag{7.11}$$

o que se encontra em concordância com expoentes calculados para modelos que pertencem à classe de universalidade de percolação direcionada:

referência	$\delta$	$\eta$
R.Dickman [Jensen <i>et al.</i> , 1990]	$0.452 \pm 0.008$	$0.224 \pm 0.010$
P.Grassberger [Grassberger, 1989a]	$0.460 \pm 0.006$	$0.214 \pm 0.006$

Deve-se destacar o quão custosas estas simulações são computacionalmente devido a necessidade de uma alta amostragem, pois as flutuações crescem a medida que  $t \rightarrow \infty$  e  $\Delta \rightarrow 0$ . A geração dos dados para as figuras anteriores demandaram 2 076 500 rodadas, o que representa aproximadamente 866 hs (36 dias) de tempo de CPU numa work-station HewlettPackard Apollo 9000/735. Um aspecto interessante deste método é que ele fornece, simultaneamente, os expoentes críticos e valores muito precisos do  $c_{crit}$  no qual tem lugar a transição, como se aprecia na tabela da figura 7.3.

Repetimos o procedimento para calcular os expoentes e os valores críticos dos parâmetros em outros pontos da linha de transição e verificamos o seguinte:

- A linha de transições de segunda ordem avança em forma contínua até o ponto em que  $a = 0$ , como se aprecia na figura 7.3. O motivo de não ter feito simulações numéricas além do ponto  $(a, b, c) = (0.046083, 0.768049, 0.1859)$  deve-se ao excessivo custo computacional requerido (espaço de memória e tempo de CPU) pelo fato de as correlações espaço-temporais crescerem arbitrariamente à medida em que  $a \rightarrow 0$ . Neste limite os predadores são poucos, mas a *cauda* de sítios vazios que deixam no seu rastro é muito comprida (demora muito para ser preenchida pelas presas). Assim, os predadores têm uma *memória* cada vez mais comprida dos sítios que já visitaram.

Todos os restantes pontos da linha pertencem à classe de universalidade da percolação direcionada em  $d + 1 = 3$  dimensões. A única exceção é o ponto  $a = 0$ . Seus expoentes pertencem à classe de universalidade da percolação ordinária em duas dimensões [Grassberger, 1982b]:

$$\begin{aligned} \delta &= 0.093 \pm 0.001, \\ \text{e} \quad \eta &= 0.793 \pm 0.004, \end{aligned}$$

O gráfico 7.4 mostra-se coerente com esta idéia. A estatística que se apresenta foi levada a cabo sobre os predadores.

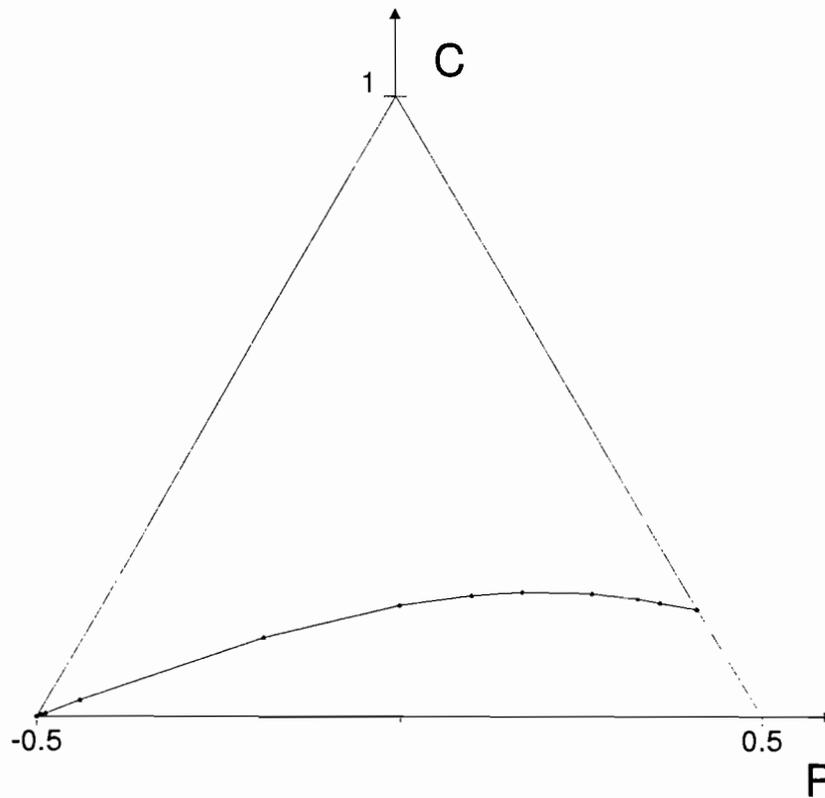


Figura 7.3: Diagrama do estado final da linha de transições de segunda ordem para o estado AP. Os pontos ressaltados como círculos cheios, são os pontos calculados via simulações dependentes do tempo, os valores críticos correspondentes se apresentam na tabela contigua.

$a$	$b$	$c$	$p$
0.99204(1)	0.00496(1)	0.0030(2)	-0.49354(1)
0.98423(1)	0.00984(1)	0.00592(2)	-0.48720(1)
0.9264(1)	0.0463(1)	0.0273(2)	-0.4400(1)
0.6225(1)	0.2490(1)	0.1285(5)	-0.1867(1)
0.4092(1)	0.4092(1)	0.1817(3)	0.0000(1)
0.300(1)	0.501(1)	0.198(4)	0.100(1)
0.2275(1)	0.5688(1)	0.2036(9)	0.1706(1)
0.133(1)	0.666(1)	0.201(1)	0.266(1)
0.0734(1)	0.7345(1)	0.1921(6)	0.3305(1)
0.046(1)	0.768(1)	0.186(3)	0.361(1)
0	0.8239(1)	0.1761(1)	0.41190(17)

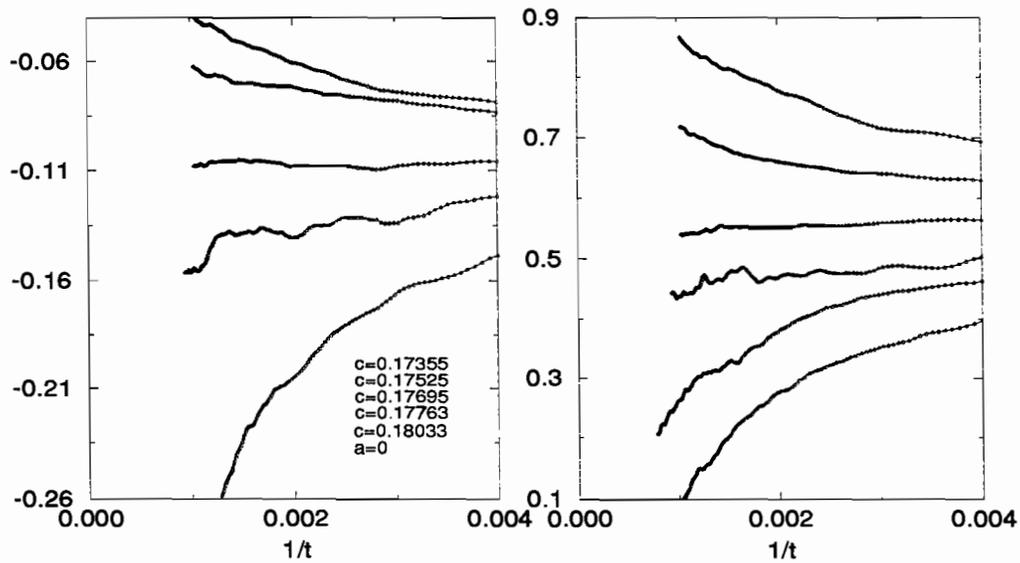


Figura 7.4:  $\delta(t)$  e  $\eta(t)$  para  $a=0$ .

- No canto inferior esquerdo do diagrama de fases o modelo se mapeia no PC. Isto pode-se verificar na figura 7.5, onde a linha tracejada representa pontos nos quais  $b/c=1.647 \pm 0.002$ , que é precisamente a taxa crítica para o PC na rede quadrada.

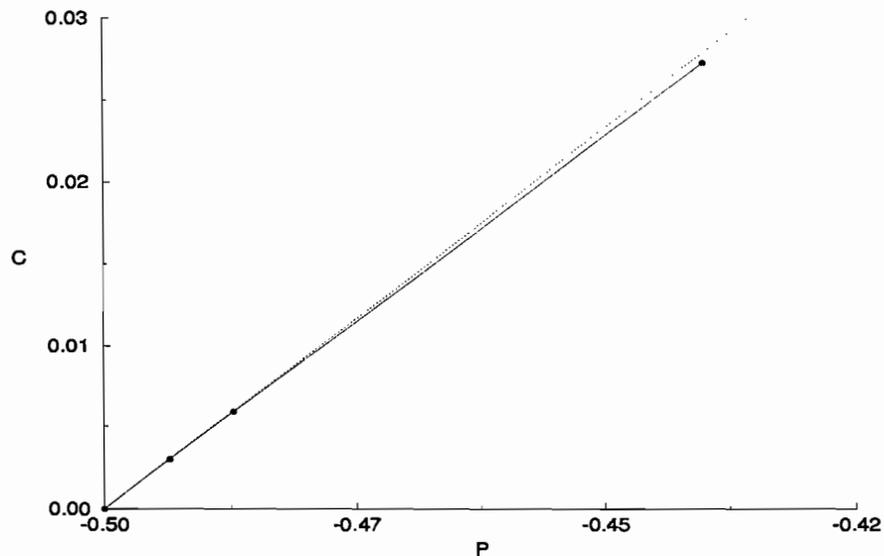


Figura 7.5: Comparação da linha crítica para o nosso modelo (ao redor de  $p = -0.5$ ) com a linha obtida a partir do processo de contato (linha tracejada).

## 7.4 A região do estado absorvente de vazio.

Como se mencionou no capítulo 5, o grande comprimento das correlações espaciais faz com que seja difícil a determinação da existência da região do estado AV em redes finitas. A dificuldade principal é que para valores baixos de  $c$ , se o sistema cair no AV devido a alguma flutuação, não sairá mais dele. Com a finalidade de estudar melhor a existência de uma transição de fase tentamos duas pequenas modificações do modelo. A primeira consistiu numa regra adicional não local. Se evitou que o último predador existente na rede morresse. Isto, em princípio, permitiria estudar a transição para valores de  $c$  arbitrariamente pertos ao valor crítico. Entretanto, foi confirmado pelas simulações que se bem é certo que a modificação não tem relevância (não altera muito o comportamento com respeito ao modelo original) quando as correlações são pequenas, este não é o caso perto da transição, onde as correlações se tornam grandes. Lá, a dinâmica do modelo se vê fortemente dominada pela nova regra. Na segunda modificação adicionamos uma pequena taxa (constante) de criação espontânea de pares presa-predador na rede. A finalidade foi tentar descobrir efeitos de histerese no modelo [Tomé e Dickman, 1993]. Os resultados foram negativos dentro de uma margem de erro muito pequena.

Isto nos leva a pensar na possibilidade de uma transição de segunda ordem e não de primeira. O aparente caráter de primeira ordem (ver figura 5.2 para o caso em que  $p = 0$ ) se originaria por causa de um forte efeito de tamanho finito. Para valores de  $c$  baixos, quando  $p$  é pequeno e positivo, a evolução do sistema vem governada por grandes estruturas do tipo de uma frente de onda interagindo entre si como as ondas químicas (ver figura 8.2 do capítulo 8.2). Não resulta muito intuitivo como um cenário deste tipo pode dar lugar a uma transição contínua para um outro estado com valores nulos nas densidades de cada espécie. O ponto importante é que, nessa região, para  $a$  fixo ( $b$  e  $c$  variáveis) o comprimento de correlação é grande, porém sempre finito. Deste modo, a transição de segunda ordem consistiria num afastamento progressivo, ou *diluição* das estruturas ou padrões previamente mencionados. Este efeito de diluição é coerente com a observação de que a frequência típica de oscilação na rede decresce à medida que  $c$  decresce. Isto seria análogo ao aumento do tempo médio de colisão entre as moléculas de um gás à medida que a densidade diminui.

É assim que surge a idéia de aplicar novamente a técnica das simulações dependentes do tempo. Nas simulações a implementar, as espécies sobre as quais devemos realizar a estatística são as presas e os predadores (ou o conjunto formado pela união de ambos).

Adiantando-nos um pouco ao conteúdo do resto deste capítulo, se olharmos para os resultados da figura 7.6 podemos concluir que:



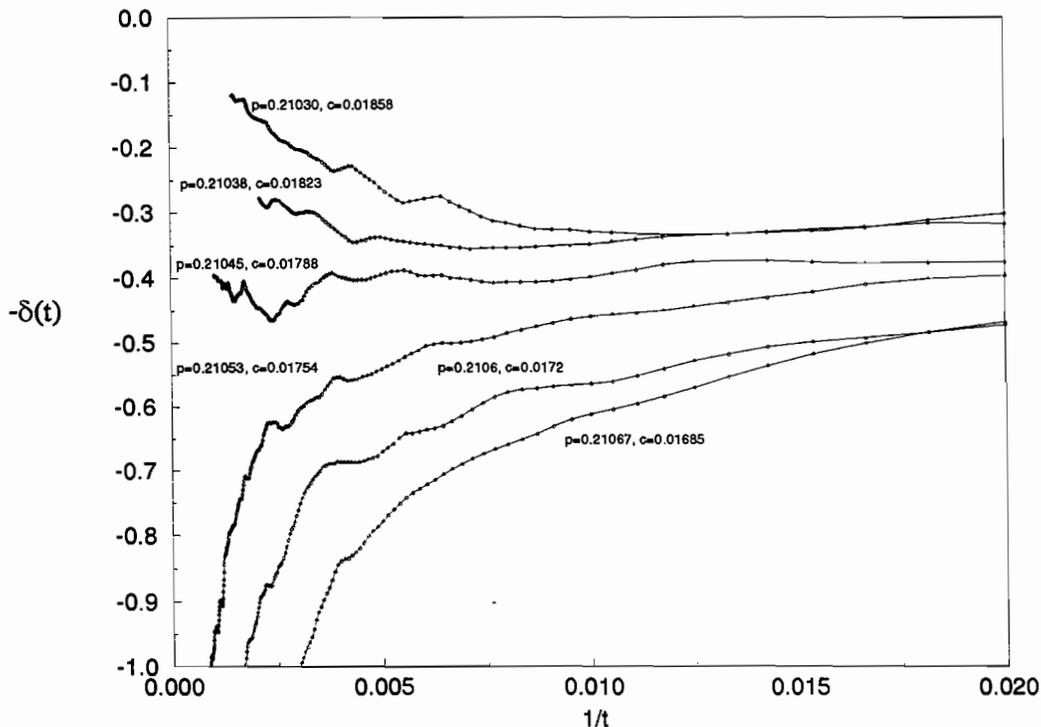


Figura 7.6:  $P(t)$  calculado com respeito à população de presas para diferentes valores de  $c$  quando  $p \approx 0.2105$ .

- O estado AV existe, não sendo um efeito de tamanho finito.
- A transição de fase cinética para este estado é de segunda ordem, e a classe de universalidade coincide com a linha de transição de fase para o estado AP.

Os procedimentos para a realização das simulações são os mesmos que no caso anterior. A idéia da diluição das frentes de onda se vê confirmada no *snapshot* da figura 7.7. Estas frentes se dividem eventualmente em duas ou mais partes, se aniquilam espontaneamente e interagem entre si como se foram partículas.

Existem duas novas questões a tratar. A primeira é sobre as correlações espaciais, elas são muito maiores que no caso da linha de transição para o estado AP. Isto requer a utilização de redes tão grandes que em principio inviabilizaria a implementação dos programas num computador do porte de uma estação de trabalho. A solução encontrada foi criar um código, no qual os sítios da rede vêm representados pelos bits dos números inteiros e não por números inteiros. Assim, com só dois bits podemos representar os três estados que caracterizam cada sítio de nossa rede. Apresenta-se então o problema de como manter uma lista dos sítios *ativos*. Se a metodologia anterior for seguida, cadastrando todos os sítios ativos, a lista seria tão comprida que não se obteriam ganhos de memória.

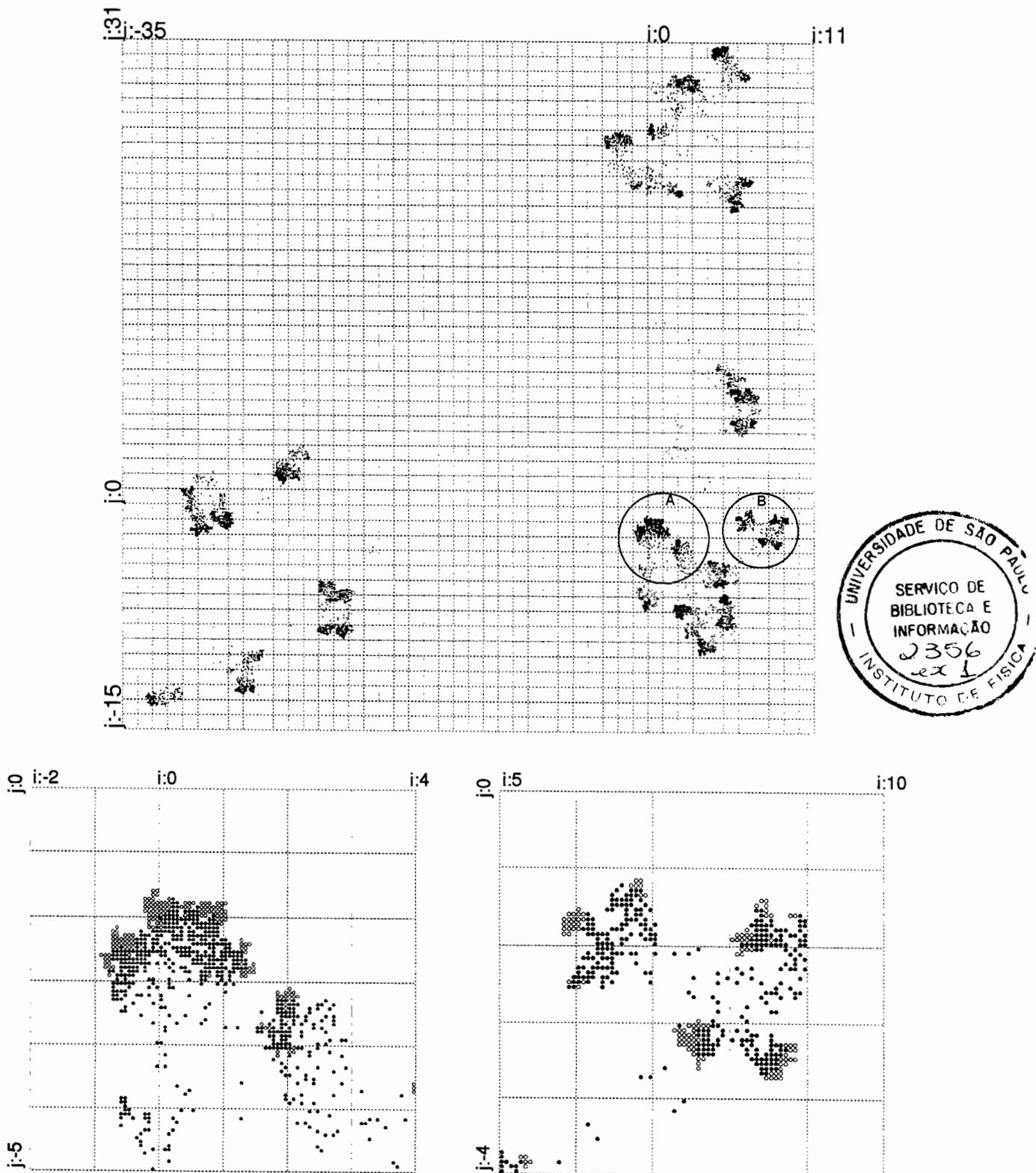


Figura 7.7: *Snapshot* da rede aos 15 000 MCs para  $p = 0.21053$  e  $c = 0.01754$ . As duas figuras na base são magnificações das partes da rede denotadas pelos círculos A e B.

A alternativa achada foi, as custas da perda de eficiência no uso de tempo de CPU utilizado, levar uma lista dos blocos da matriz nos quais se tem ao menos um sítio ativo. Escolhendo estes blocos de tamanho  $16 \times 16$  sítios da rede conseguimos representar redes de  $4096 \times 4096$  sítios com só 4.5Mb de memória, o que permite rodar o código em praticamente qualquer computador.

A segunda questão está relacionada com uma queda espúria no estado absorvente de vazio. A idéia é começar cada rodada com a rede vazia exceto por um pequeno grupo de presas e predadores no centro da mesma. Caso a última presa morrer durante a rodada, após um tempo o sistema cairá no estado AV. Mas se o último dos predadores morrer, o sistema cairá no estado AP. Isto não deveria acontecer nunca no tipo de transição que desejamos estudar. Se descartássemos estas rodadas poderíamos induzir erros severos no cálculo de  $P(t)$  e  $N(t)$ , dado que representam eventos com boas chances de sobreviver para tempos longos. Estudamos outras variantes para tratar estes casos. Uma delas consistiu em, mais uma vez, não deixar o último predador da rede morrer. Assim, as presas continuariam a se reproduzir até atingir esse predador. Outra variante testada consistiu em que, na hora do último predador morrer, outro nascer colado a algum grupo de presas. Claramente qual das variantes se usará é irrelevante a tempos longos, dado que o número de predadores deve crescer com o tempo quando os parâmetros estão próximos aos valores críticos. Ambas alternativas têm vantagens e desvantagens. A primeira das variantes induz transitórios oscilantes em  $P(t)$  e  $N(t)$ . E estes transitórios dificultam a extrapolação das curvas a grandes tempos. O motivo disto se mostra nas instantâneas da rede da figura 7.8. Nelas, as presas foram excepcionalmente coloridas de cinza por claridade, os predadores continuam coloridos de preto. Os valores dos parâmetros usados correspondem a valores de  $p$  próximos a 0.5. Até as presas atingirem o último predador, estas vão se fusionando num único *cluster*. O predador começa a infectar as presas por um extremo, de forma tal que após os predadores fazerem uma *varredura do cluster* (isto é feito rapidamente, dado que  $b$  é muito maior que  $a$ ), o mais provável é que o futuro predador sobrevivente fique do lado oposto ao anterior. Assim, uma vez que as presas voltarem a se fusionar e atingirem o novo predador, a situação se repetirá no sentido oposto ao anterior. As oscilações observadas em  $P(t)$  estariam associadas aos periodos que caracterizam estas varreduras. A segunda variante não carrega esta desvantagem mas, em compensação, deixa uma estatística muito reduzida para tempos longos, pois a grande maioria das rodadas culmina logo num extermínio de todas as presas. De modo que optamos pela primeira alternativa.

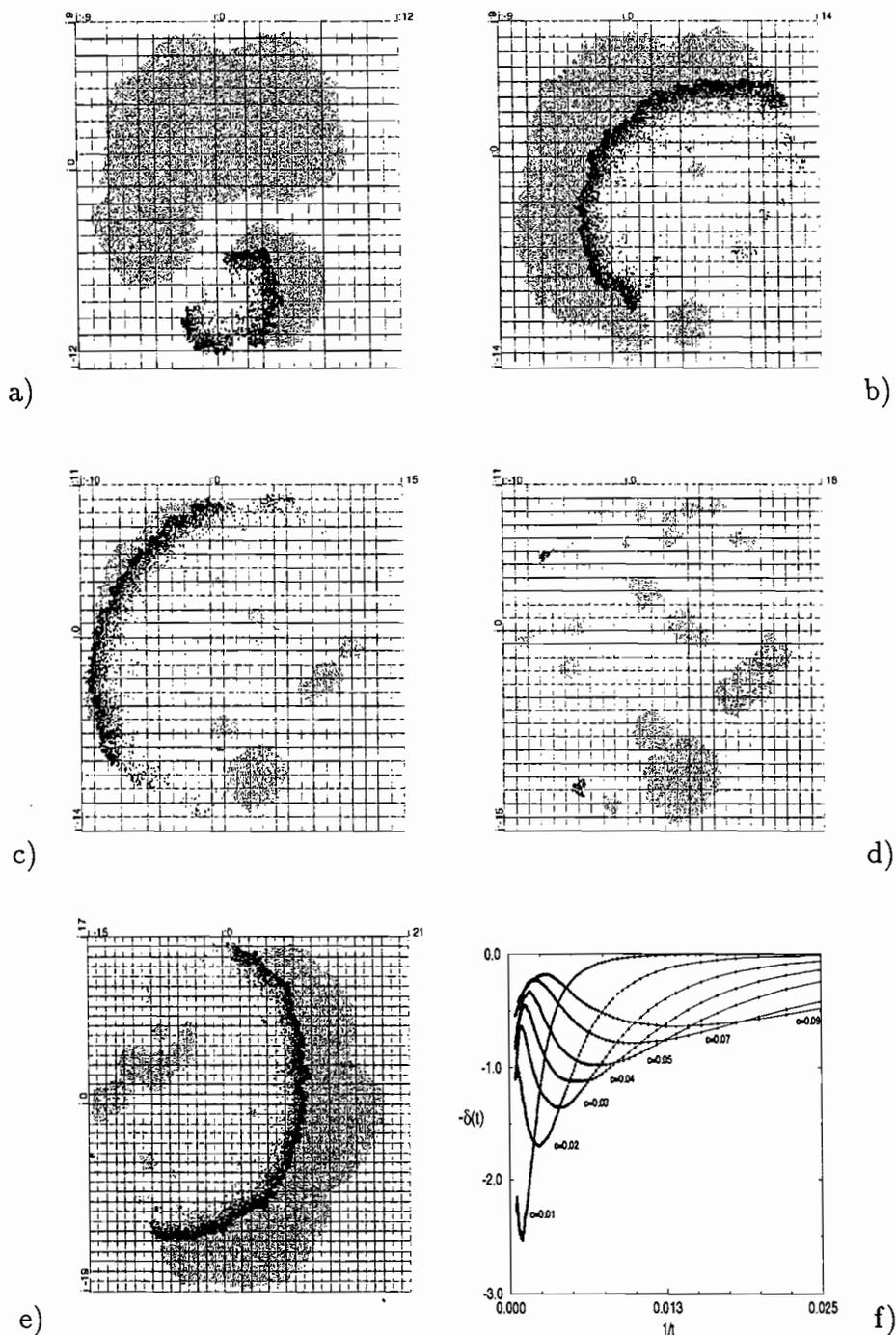


Figura 7.8: *Snapshots* da rede a diferentes tempos (lembramos que cada quadrado pontilhado representa 16x16 sítios). Os parâmetros usados são  $(a, b, c) = (0.045, 0.9, 0.045)$ . Os tempos são a) 2224 MCs, b) 2688 MCs, c) 2976 MCs, d) 3115 MCs, e) 3984 MCs. A figura f) mostra o gráfico de  $-\delta(t)$  com suas oscilações.

Quando  $p$  toma valores suficientemente grandes, o dramático crescimento das correlações e o demorado crescimento do disco epidêmico (a raiz do mecanismo descrito pela figura 7.8) torna as simulações não implementáveis. A alternativa adotada foi, assumindo que os expoentes críticos de todos os pontos da linha pertencem a classe PD, realizar simulações na região subcrítica com uma fonte do estado ativo no centro da rede. A idéia é medir momentos da distribuição espacial das espécies e, usando idéias de *scaling*, extrapolar o valor dos parâmetros críticos. Por motivos de espaço, preferimos reservar uma descrição mais detalhada deste procedimento para a segunda parte do apêndice C.2.

Mediante o esquema acima descrito realizamos simulações de Monte Carlo na região subcrítica e conseguimos reproduzir o valor de  $c_{crit}$  achado previamente para  $p = 0.2105$  (figura 7.6). Para valores de  $p$  tais que  $p < 0.17$ , conferimos que não existe nenhum valor de  $c$  no qual se possa atingir um estado estacionário com momentos finitos (calculados tomando a fonte como a origem). Interpretamos isto como não existindo região de estado AV para estes valores de  $p$ . Neste sentido, concluímos que a porção da região IV da figura 5.1 com valores de  $p < 0.17$  é um efeito de tamanho finito. Mas não acontece isto com a parte da porção direita na qual  $p > 0.17$ . Foi possível calcular três pontos, que se podem apreciar na figura 7.9. Representamos eles por bolas vazias para explicitar o erro estimado no cálculo dos valores de  $c_{crit}$ . Não foi possível determinar os valores críticos com tanta precisão como no caso das simulações dependentes do tempo (seção anterior) dado o enorme custo computacional requerido. Podemos apreciar a partir do gráfico que os valores não são coerentes com a idéia de uma linha de transição bem comportada. Mas ante a falta de hipóteses sobre a forma da região de vazio ou outro tipo de dados para comparação, eles representam a melhor informação que atualmente podemos obter. Claramente, as simulações de Monte Carlo para o cálculo dos momentos das distribuições espaciais será cada vez mais custosa a medida que  $a \rightarrow 0$ , dado que o tempo em que uma configuração difere da outra cresce arbitrariamente neste limite. Representa um desafio prever como se comportará a linha de transição de fase quando  $a \rightarrow 0$ , pois o modelo não recai num outro mais simples, como no extremo oposto do diagrama de fases (caso em que  $p \rightarrow -0.5$  e o modelo se mapeia no PC). Lembrando o significado da transição de segunda ordem para o estado AP quando  $a = 0$ , podemos pensar na seguinte possibilidade. Caso a linha de transição colida contra o eixo  $a = 0$ , poderia-se interpretar como uma transição na qual o grupo de predadores que se propaga a partir de tempo  $t = 0$ , deixa uma cauda com densidade nula ou finita de presas, dependendo do valor do parâmetro  $c$ . Consideramos que este limite ( $a \rightarrow 0$  e valores de  $c$  pequenos), assim como a determinação precisa da região do estado AV, são uns dos problemas mais difíceis que o modelo propõe para analisar, e esperamos que num futuro seja possível realizar progressos a esse respeito.

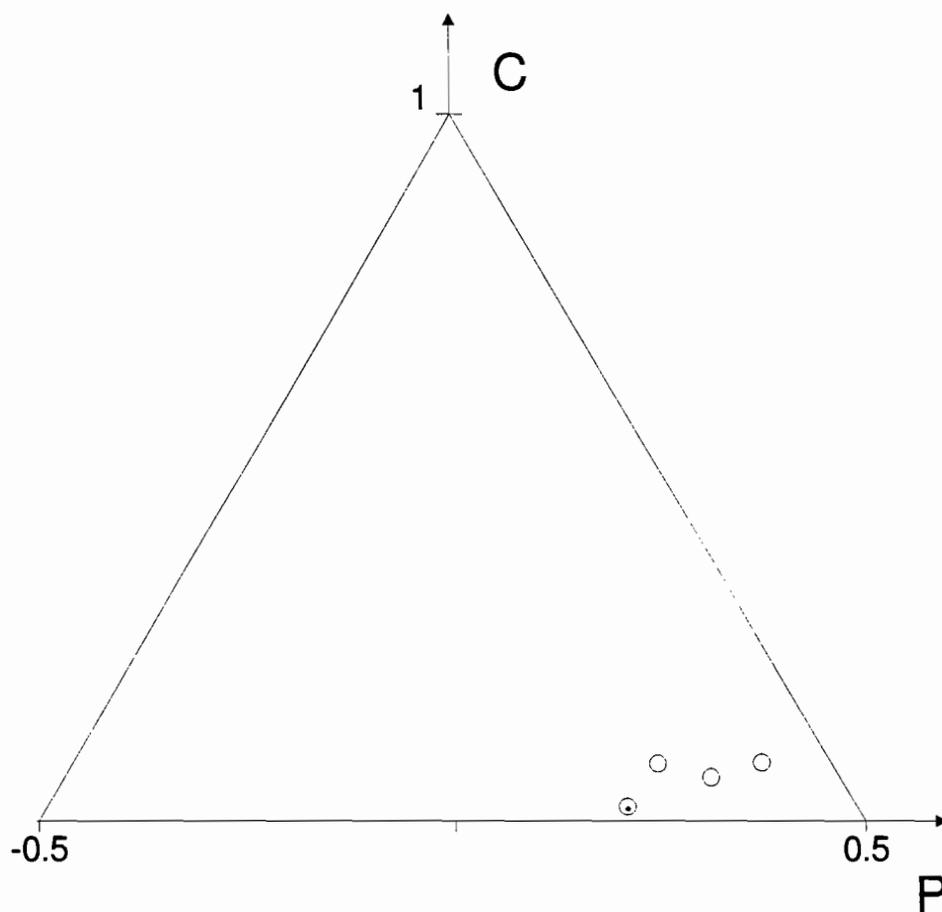


Figura 7.9: Os pontos representados como bolas vazias foram calculados em base a simulações na região subcrítica com uma fonte. O círculo cheio representa o ponto já calculado mediante simulações dependentes do tempo que se mostra na figura 7.6

# Capítulo 8

## Propagação de ondas e equações de reação-difusão

### Alguns aspectos de interesse biológico

#### 8.1 Introdução: oscilações espaço-temporais e ondas químicas

No capítulo 5 vimos que as oscilações observadas no nosso sistema têm caráter local, no sentido que as amplitudes das mesmas decaem *termodinamicamente*. Também acontece que as oscilações tornam-se reforçadas ao diminuir progressivamente o parâmetro  $c$ . Observemos um *snapshot* da rede no estado estacionário, como mostra a figura (8.1). Ela apresenta as presas agrupadas em *clusters* e rodeadas por predadores assimetricamente distribuídos. Estas estruturas, as quais chamaremos *frentes de onda*, são muito similares as ondas químicas (também denominadas *auto-ondas* na literatura). As características mais marcantes das ondas químicas são

- não conservam a energia,
- conservam a amplitude e a forma (localmente),
- não apresentam reflexão nem interferência, mas pelo contrário,
- podem-se aniquilar entre si, e também difratar (contornando objetos).

Por não apresentar interferência, quando duas frentes de onda colidem frontalmente, se aniquilam. Na maioria dos casos, pela irregularidade destas frentes e pela estocasticidade do processo, em vez de aniquilação total, observa-se uma forte diminuição das populações. Primeiro, decresce subitamente a população de presas (que não tem para onde *fugir*) e logo decresce a população de predadores (a consequência da morte das presas). Um *snapshot* da rede mostrando momentos prévios a uma destas colisões aprecia-se na figura (8.2).

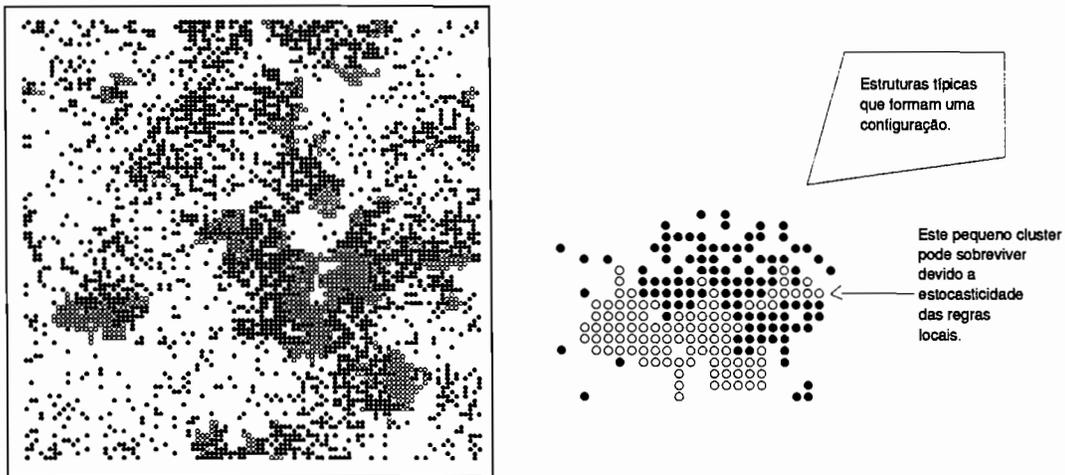


Figura 8.1: *Snapshot* da rede. A direita, uma ampliação de uma porção desta figura.

Nela, o valor do parâmetro  $c$  é muito baixo ( $c = 0.015$ ), a medida em que  $c$  decresce, o tamanho destas estruturas cresce sensivelmente, chegando a atingir o tamanho da rede usada na simulação.

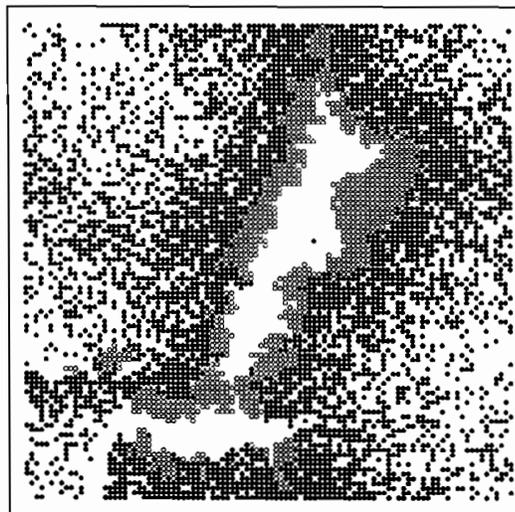


Figura 8.2: *Snapshot* da rede.

A aniquilação de frentes de onda explica satisfatoriamente o fato das oscilações serem um fenômeno local. As distâncias típicas nas quais dois sítios da rede estão correlacionados são da ordem do comprimento de uma frente de onda. Ou seja, existe uma relação estreita entre o incremento do caráter oscilatório e as dimensões destas frentes. O

extermínio (total ou parcial) de duas frentes de onda explica o decréscimo nas densidades de ambas espécies numa região da rede. Pelo fato da densidade de frentes de onda diminuir, os caminhos livres médios das frentes serão maiores nessa região, causando um crescimento posterior nas densidades. O crescimento se deve ao aumento da massa quando uma frente se propaga livremente na rede bidimensional (pode-se compreender isto em função da propagação radial da frente e a idéia de que conserva sua forma localmente). Uma conclusão imediata que se pode extrair de um mecanismo deste tipo é que as densidades de cada espécie (em particular a de presas) crescerá de forma gradual num semiperíodo da oscilação, enquanto que decrescerá bruscamente no seguinte. Para verificar isto, na figura (8.3) mostra-se uma porção ampliada de uma das figuras apresentadas no capítulo 5 (aqui mostram-se só as presas, mas para os predadores acontece algo similar). As amostras da densidade foram tomadas em intervalos de tempo regulares. Observamos que é maior o número de pontos nos aclives. Devemos aclarar, porém, que este mecanismo de oscilações acontece para valores de  $c$  baixos e  $p > 0$  mas não muito grande. A medida que  $c$  cresce, deixam de existir frentes de onda bem definidas se propagando e interagindo entre si, como mostram as figuras 7.8.

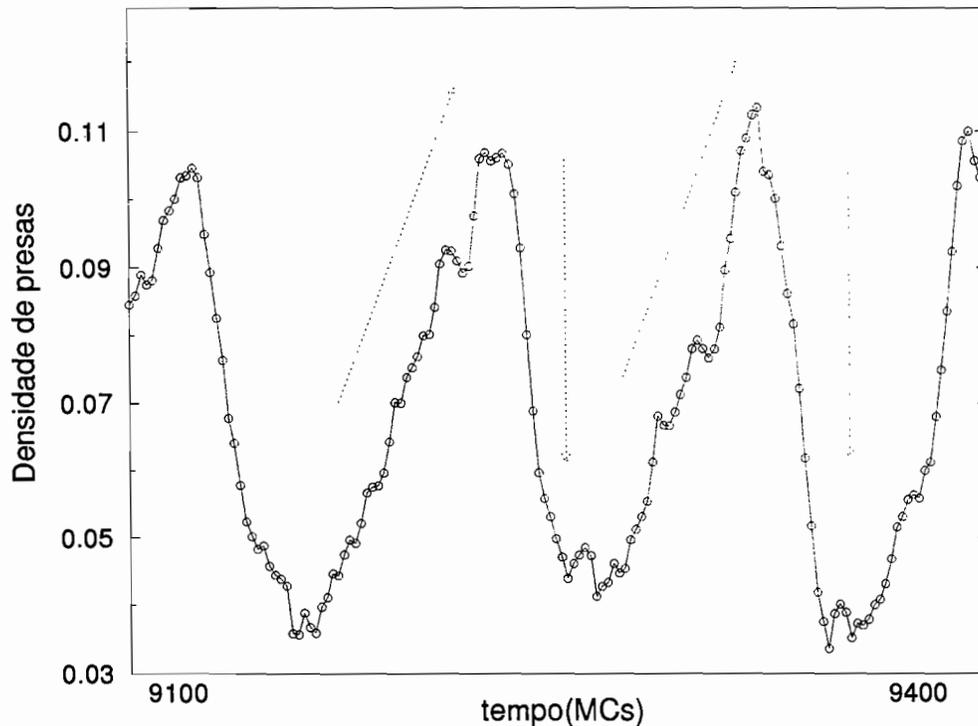


Figura 8.3: Amplificação de uma porção da figura 5.4.

## 8.2 Existem soluções de onda viajante no nosso modelo?

Soluções com comportamento espacialmente não homogêneo não são possíveis de obter no esquema de aproximação de sítios utilizado no capítulo 4 para truncar o sistema de equações 3.9. Neste esquema, as correlações são levadas em conta (até certa ordem), mas o fato de procurar soluções homogêneas e isotrópicas faz com que possamos tirar os índices das magnitudes estudadas. Ou seja,

$$P_i(\alpha) = P_j(\alpha) = \dots = P(\alpha), \quad (8.1)$$

e

$$P_{ij}(\alpha\beta) = P_{ji}(\alpha\beta) = P_{jk}(\alpha\beta) = P_{kj}(\alpha\beta) = \dots = P(\alpha\beta), \quad (8.2)$$

As equações obtidas, do tipo da cinética química, impossibilitam alguma dependência de  $P(\alpha)$  com o sítio em questão na rede. Surge assim o interesse de analisar o sistema de equações para as correlações uma vez que este foi truncado, mas antes de aplicar as condições acima citadas. Para o caso da aproximação de um sítio ( $n = 1$ ) obtém-se, em vez das equações

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}P(1) &= a(1 - P(1) - P(2))P(1) - bP(1)P(2), \\ \frac{d}{dt}P(2) &= bP(1)P(2) - cP(2). \end{aligned} \quad (8.3)$$

o sistema (infinito) de equações acopladas

$$\frac{d}{dt}U_i = \frac{a}{2}(1 - U_i - W_i)(U_{i+1} + U_{i-1}) - \frac{b}{2}U_i(W_{i+1} + W_{i-1}), \quad (8.4)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}W_i &= \frac{b}{2}U_i(W_{i+1} + W_{i-1}) - cW_i, \\ i &= -\infty, \dots, -1, 0, 1, \dots, \infty, \end{aligned} \quad (8.5)$$

onde  $U_i = P_i(1)$ , e  $W_i = P_i(2)$  e trabalhamos numa dimensão por simplicidade, mas é mais simples generalizar tudo isto para dimensão  $n$ . Se agora definimos os operadores derivação e o seu adjunto como

$$\begin{aligned} (\nabla U)_i &= U_i - U_{i-1}, \\ \text{e } (\nabla^* U)_i &= U_{i+1} - U_i, \end{aligned} \quad (8.6)$$

podemos escrever

$$\begin{aligned}
U_{i+1} + U_{i-1} &= (U_{i+1} - U_i) - (U_i - U_{i-1}) + 2U_i \\
&= (\nabla U)_{i+1} - (\nabla U)_i + 2U_i \\
&= (\nabla^* \nabla U)_i + 2U_i = (\Delta U)_i + 2U_i,
\end{aligned} \tag{8.7}$$

onde  $\Delta$  é precisamente o laplaciano de diferenças finitas definido na rede.

Assim, as equações 8.4 tomam a forma

$$\begin{aligned}
U_t &= a(1 - U - W)U - bUW + \frac{a}{2}(1 - U - W)\Delta U \\
&\quad - \frac{b}{2}U\Delta W, \\
W_t &= bUW - cW + \frac{b}{2}U\Delta W.
\end{aligned} \tag{8.8}$$

As equações em que os termos difusivos são incorporados fenomenologicamente, conhecidas como equações de reação-difusão, têm a forma geral

$$\begin{aligned}
U_t &= f(U, W) + D_1 \Delta U, \\
W_t &= g(U, W) + D_2 \Delta W,
\end{aligned} \tag{8.9}$$

( $D_1$  e  $D_2$  são constantes não negativas). Tanto  $f(U, W)$  como  $g(U, W)$  são termos reativos, enquanto que os laplacianos são incorporados para levar em conta a difusão. Estas equações são muito usadas na modelagem de interações entre espécies biológicas. As nossas, obtidas a partir das regras microscópicas do modelo, contém, além do termo difusivo conhecido (só na variável  $U$ ), termos de *difusão cruzada*, no sentido que o laplaciano que age na variável  $W$  está multiplicado por  $U$  e vice-versa. Este tipo de termo é usado especificamente em modelos *Convectivos de Evasão-Perseguição* entre predadores e presas [Murray, 1989] e surge na modelagem prática. Nestes casos, a presa trata de evadir-se do predador e o predador de alcançar a presa *somente* se eles interagem entre si (se existe um *overlap* entre as variáveis  $U$  e  $W$ ). O sistema 8.9, ainda quando o termo reativo seja um polinômio de segunda ordem (equações *semi-parabólicas*), apresentam uma grande variedade de comportamentos. Entre eles, estaremos interessados na propagação de ondas químicas, em particular pela relação que este fenômeno tem com o mecanismo das oscilações no nosso sistema.

É importante dizer que a propagação destas ondas não é incomum, mas um dos aspectos mais representativos destas equações, frequentes na descrição de sistemas bioquímicos. Dada uma equação *standard* difusiva (numa dimensão)

$$U_t = D\Delta U, \tag{8.10}$$

(onde  $U$  é uma dada concentração química), o tempo exigido para transmitir informação na forma de uma mudança de concentração a uma distância  $L$  é  $O(\frac{L^2}{D})$  (isto é obvio a partir de análise dimensional). Como muitas das distâncias em organismos biológicos são tipicamente da ordem de 1mm e  $D$  nas substâncias químicas de interesse biológico é em geral pequeno (de  $10^{-9}$  a  $10^{-11} \text{cm}^2 \text{seg}^{-1}$ ), os tempos exigidos são  $O(10^7 - 10^9 \text{seg})$ , muito grandes para a maioria dos processos de interesse. Em contraste, quando se acoplam termos reactivos, podem existir ondas propagando informação a velocidades muito maiores que no processo estritamente difusivo. A mais simples destas equações é a proposta por Fisher [Fisher, 1937]

$$U_t = kU(1 - U) + D\partial_x^2 U, \quad (8.11)$$

(onde  $k$  e  $D$  são parâmetros positivos). No apêndice D mostramos, mediante uma análise conceitualmente simples, como podemos acotar a faixa de valores de  $D/k$  para os quais podem-se propagar ondas para a equação 8.11.

Voltemos para nossa equação 8.8. Tem-se demonstrado [Dunbar, 1983] que equações do tipo

$$\begin{aligned} U_t &= A\left(1 - \frac{U}{k}\right) - BUW + D_1\Delta U, \\ W_t &= EUW - CW + D_2\Delta W, \end{aligned} \quad (8.12)$$

com  $D_1$  e  $D_2$  constantes positivas, admitem soluções de onda viajante. Demonstrar a existencia destas ondas não é trivial, equivale a provar que existe uma órbita heteroclínica no espaço de fases ( $R^4$  neste caso).

Sigamos um procedimento similar ao delineado no apêndice D e usemos, no sistema 8.8, o *ansatz*

$$\begin{aligned} u &= U(x + vt) = u(\xi), \\ w &= W(x + vt) = w(\xi), \end{aligned} \quad (8.13)$$

em termos de  $\xi$  obtemos

$$\begin{aligned} vu' &= a(1 - u - w)u - buw - \frac{b}{2}uw'' + \frac{a}{2}(1 - u - w)u'', \\ vw' &= buw - cw + \frac{b}{2}uw'', \end{aligned} \quad (8.14)$$

que equivale ao sistema

$$\begin{aligned} u' &= x \\ w' &= y \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} x' &= \frac{2(vx + vy + cw)}{a(1 - u - y)} - 2u \\ y' &= \frac{2(vy + cw)}{b} - 2w, \end{aligned} \quad (8.15)$$

Os análogos dos pontos fixos  $(0, 0)$  e  $(1, 0)$  no caso da equação de Fisher são agora os pontos:  $P_1 = (\frac{a}{b}(\frac{b-c}{b+a}), \frac{c}{b}, 0, 0)$ ,  $P_2 = (1, 0, 0, 0)$ , e  $P_3 = (0, 0, 0, 0)$ . No nosso diagrama de fase (de parâmetros  $p$  e  $c$ ), eles estão localizados esquematicamente como se mostra na figura 8.4.

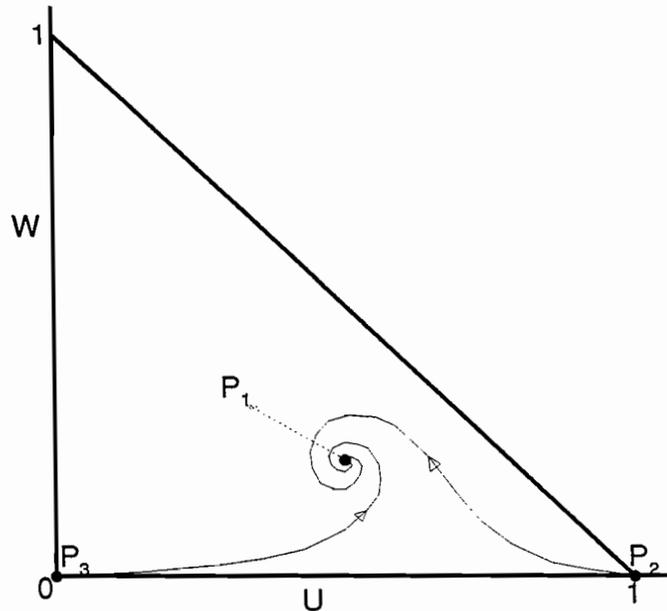


Figura 8.4: Projeção de uma órbita hipotética no espaço  $(u, w, x, y)$  sobre o subespaço  $(u, w)$ .

Em vez de dois autovalores, temos agora quatro, e existem dois tipos de frentes de onda possíveis: os que vão do estado AV,  $P_3$ , ao estado estável  $P_1$  (que Dunbar chama ondas de *Evasão-Perseguição* ou *tipo 2*) e as que vão do estado AP,  $P_2$ , ao estado estável  $P_1$  (que Dunbar chama ondas *Invasivas* ou de *tipo 1*). Ambas estão representadas esquematicamente no diagrama da figura 8.4. Este diagrama é a projeção de uma órbita de um espaço de 4 dimensões sobre o sub-espaço das variáveis  $u$  e  $w$  (na figura assume-se que a órbita existe). A principal dificuldade para fazer uma análise similar à do apêndice reside no fato do sistema 8.15 não estar definido em  $P_1$  e  $P_2$ , o que impossibilita linearizar o sistema em torno de esses pontos.

Calculamos a matriz jacobiana de 8.15 e estudamos numericamente como evoluem seus quatro autovalores à medida em que o ponto onde a matriz é avaliada converge a  $P_1$  ou  $P_2$  ao longo de diferentes direções. Se para um dado conjunto de valores de  $c$ , todos os autovalores com parte real positiva possuem parte complexa, pode-se dizer que

não serão possíveis ondas viajantes para esses valores. Isto porque a parte imaginária faria *sair* do espaço de fases a órbita do sistema (do mesmo modo que o ponto  $(0, 0)$  na equação de Fisher).

Nos caso dos dois tipos de ondas possíveis, para todos os valores de  $v$  (valor da velocidade) testados, sempre obteve-se que pelo menos um dos autovalores é real positivo, impossibilitando assim qualquer afirmação ao respeito da não existencia de algum dos dois tipos de ondas. É assim que optamos por simular numericamente nossas equações. O objetivo disto foi

- Verificar se as ondas viajantes tipo 1 e tipo 2 efetivamente existem. Não é obvio que para  $t \rightarrow \infty$ ,  $u(x, t) \rightarrow u(x - ct)$ .
- No caso de achar estas ondas, sua estabilidade está de certo modo garantida pela natureza da simulação numérica. Seria interessante conhecer
  - O perfil das frentes de onda.
  - A região do diagrama de fase do sistema (em termos dos parâmetros  $p$  e  $c$ ) onde cada tipo de onda é estável.
  - Como muda a velocidade assintótica das ondas ao longo do diagrama de fase.

Discretizando o tempo nas equações 8.8 e utilizando as mesmas condições iniciais que no trabalho de Dunbar, ou seja para ondas do tipo 1:

$$U_0(x) = \begin{cases} \frac{a}{b} \left( \frac{b-c}{b+a} \right) & \text{se } x \leq x_0 \\ 0 & \text{se } x > x_0 \end{cases}, \quad W_0(x) = \begin{cases} \frac{c}{b} & \text{se } x \leq x_0, \\ 0 & \text{se } x > x_0 \end{cases}$$

e para ondas do tipo 2:

$$U_0(x) = \begin{cases} \frac{a}{b} \left( \frac{b-c}{b+a} \right) & \text{se } x \leq x_0 \\ 1 & \text{se } x > x_0 \end{cases}, \quad W_0(x) = \begin{cases} \frac{c}{b} & \text{se } x \leq x_0, \\ 0 & \text{se } x > x_0 \end{cases}$$

implementamos as simulações em redes de 10000 sítios, com  $x_0 = 1000$ . Observamos o seguinte

- Existem tanto as ondas do tipo 1 como 2 (figura 8.5). As ondas do tipo 1 (ou *invasivas*) são estáveis em todo o dominio de variação dos parâmetros. As regiões, no diagrama de fases, para as quais se observam comportamentos oscilantes e não oscilante nas caudas concordam com a análise de estabilidade linear realizada no capítulo 4 (ver figura 8.6).

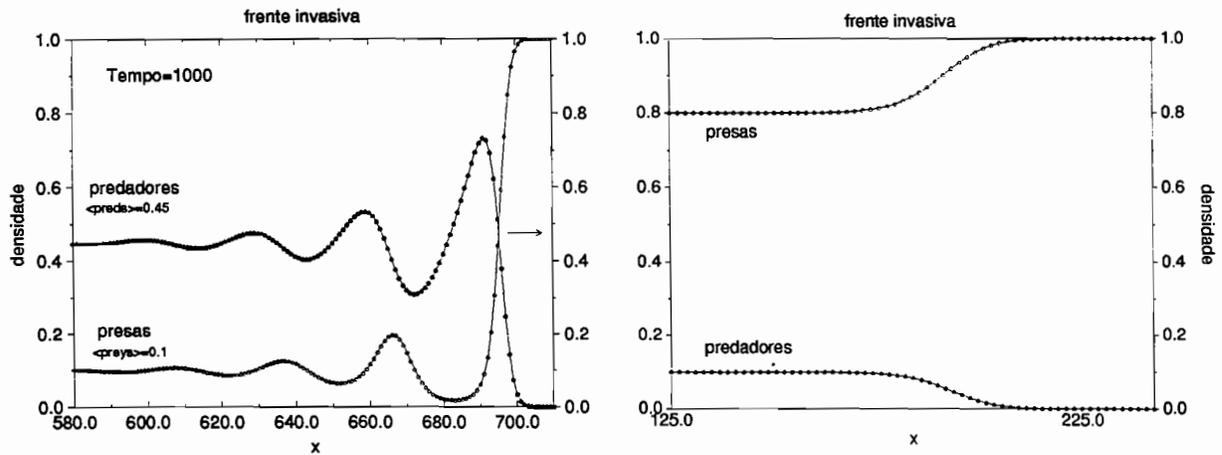


Figura 8.5: Comportamento oscilante e não oscilante nas caudas das frentes.

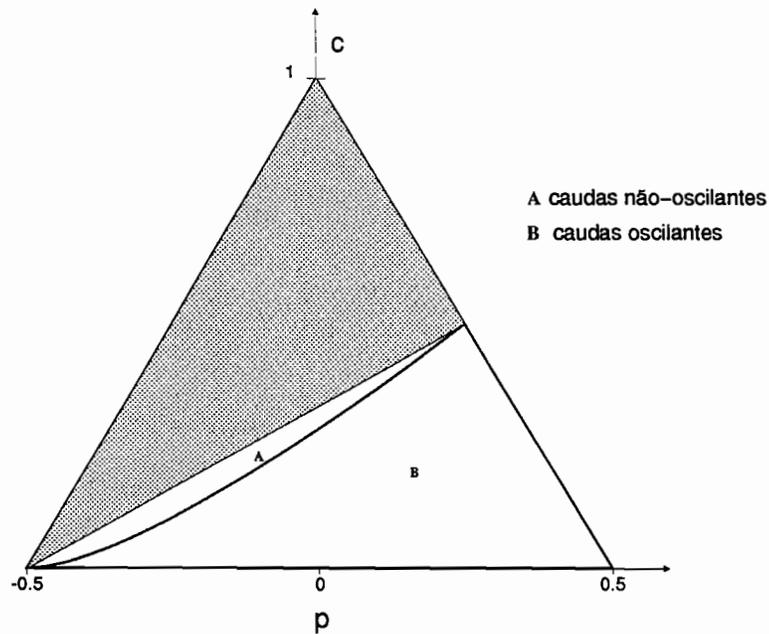


Figura 8.6: Na região branca as frentes de onda *invasivas* são estáveis. Em A, as caudas das frentes são não oscilantes. Em B, são oscilantes.

- As ondas de *evasão-perseguição* são estáveis só na região mostrada na figura 8.7. A linha de estabilidade foi determinada tomando como critério os valores dos parâmetros nos quais as velocidades assintóticas de propagação para as presas e predadores comecem a diferir (figura 8.8).

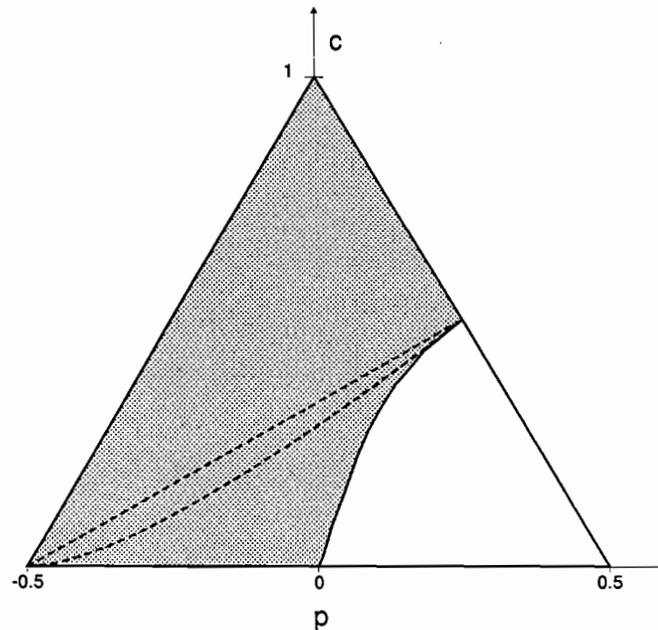


Figura 8.7: Na região branca as frentes de onda de *evasão perseguição* são estáveis.

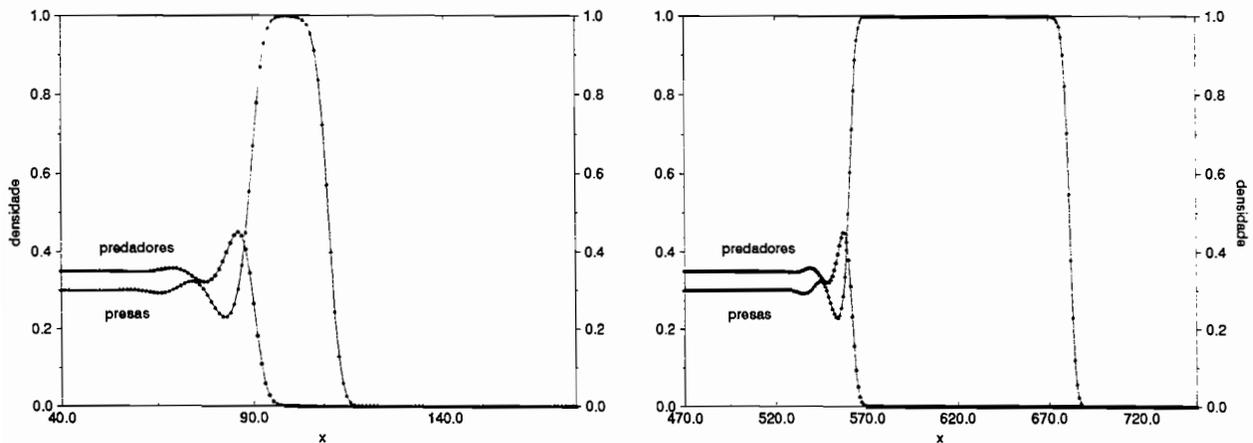


Figura 8.8: Uma onda que aparenta ser do tipo 2, quando observada a tempos suficientemente compridos se divide em dois tipos diferentes.

### 8.3 Velocidades assintóticas de propagação

Para calcular numericamente a velocidade das ondas e determinar quão perto do valor assintótico se encontram, utilizamos uma modificação da expressão usada em [LeVeque e Yee, 1990]. Assim,

$$Vel_{numérica} = \frac{1}{H\Delta t} \left( \sum_j u_j^{t-\Delta t} - \sum_j u_j^t \right),$$

onde:  $u_j^t$  é o valor da densidade de presas no sítio  $j$  no tempo  $t$ ,  $\Delta t$  o intervalo de tempo usado na discretização ( $O(10^{-3})$ ), e  $H = 1 - \min\{u_j\}$  para ondas invasivas, ou  $\max\{u_j\}$  caso contrário.

Os resultados podem ser resumidos na figura 8.3, que mostra o valor da velocidade calculada para o caso das ondas tipo 1 (para ondas tipo 2 a situação é muito similar). Em todos os casos, fixamos  $a$  e  $b$  variando  $c$ .

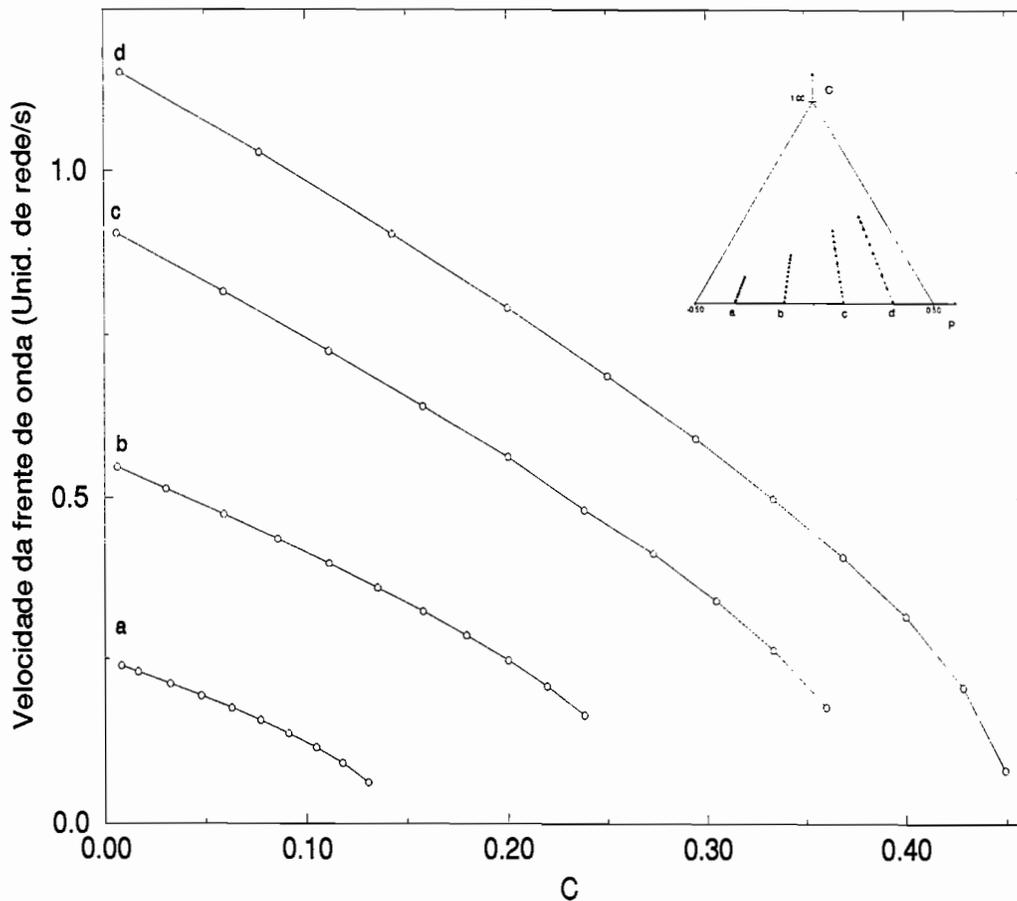


Figura 8.9: velocidade assintótica de propagação de frentes de ondas invasivas. A localização das linhas relevadas no diagrama de fases se encontra no canto superior direito da figura.

A forma em que a velocidade desce até zero, no caso das frentes invasivas, pode-se entender qualitativamente com argumentos de campo médio. Se linearizamos a segunda das equações 8.14 em torno de seu valor assintótico:  $(u, w) = (u(\infty), w(\infty)) = (1, 0)$ , obtemos,

$$0 = \left( v \frac{d}{dz} + (b - c) + \frac{b}{2} \frac{d^2}{dz^2} \right) w, \quad (8.16)$$

Sustituindo  $w(z) = e^{-kz}$ , chegamos à relação de dispersão

$$v = \frac{(b - c)}{k} \left( 1 + \frac{k^2 b}{2(b - c)} \right). \quad (8.17)$$

Como o valor da velocidade de propagação vem dada tomando o extremo da relação de dispersão [Shigesada *et al.*, 1986], se tem

$$v_{min} = \sqrt{2(b - c)b}. \quad (8.18)$$

Observemos que  $b = c$  ( $v_{min} = 0$ ) marca precisamente o começo do estado AP.

# Capítulo 9

## Conclusões

Nesta tese propomos um modelo estocástico de gás de rede para descrever a evolução de duas espécies: presas e predadores. O modelo tem regras locais e irreversíveis. Ambas espécies se reproduzem autocataliticamente: as presas as expensas de sítios vazios, e os predadores as expensas das presas. Os predadores também morrem espontaneamente.

Estudamos o modelo mediante aproximações de campo médio dinâmicas e simulações de Monte Carlo. O primeiro tipo de análise prediz a existência de três regiões no diagrama de fases do modelo. Na primeira só é estável o estado AP: após a morte de todos os predadores, as presas se reproduzem até preencher toda a rede. Na segunda fase, as densidades de cada espécie assumem valores finitos e constantes. A terceira fase está caracterizada pela existência de instabilidades espaciais: num ponto do espaço, a densidade de cada espécie oscila periodicamente no tempo em torno de seu valor médio.

As simulações de Monte Carlo em redes quadradas mostram a existência de uma região para estado AP. Uma linha de transições de fase cinéticas contínuas da lugar a uma outra fase, com valores médios finitos nas densidades de ambas espécies. Esta nova fase tem dois comportamentos: um com oscilações locais nas populações e outro sem oscilações. Atraves de uma outra linha de transições de fase contínuas surge uma região do diagrama de fases não prevista pelo campo médio com pares: a fase do estado AV. Determinamos a classe de universalidade da primeira das transições usando simulações dependentes do tempo em vários pontos do diagrama de fases: ela coincide com a classe de universalidade da percolação dirigida em  $d + 1$  dimensões, em acordo com a conjectura PD (capítulo 7). A exceção é o ponto final da linha de transições, pertencente à classe de universalidade da percolação ordinária. A segunda linha de transições é mais difícil de estudar que a primeira. Os pontos relevados também pertencem à classe de universalidade da percolação dirigida em  $d + 1$  dimensões.

O modelo analisado nesta tese, com só dois parâmetros, apresenta um rico comportamento: duas transições de fase contínuas associadas à existência de dois estados absorventes diferentes, a existência de dois tipos de comportamento crítico, e a aparição de oscilações locais à medida que se variam seus parâmetros. Sobre este último aspecto,

o parâmetro de ordem usado para medir o grau de oscilação, a altura do máximo na densidade espectral, tenderá para zero no limite termodinâmico. Por este motivo, decidimos não tentar descrever a emergência de oscilações locais como uma transição contínua. Seria interessante, no futuro, estudar esta mudança de comportamento em termo de parâmetros de ordem locais, que não se anulem no limite termodinâmico, como o valor do tempo de autocorrelação de um sítio (ou grupo de sítios) da rede. Outra atividade para o futuro é poder definir com maior precisão a região de estabilidade do estado AV, em particular no limite em que  $a \rightarrow 0$ .

A contribuição que esta tese pretende fazer é propor um modelo simples de partículas interagentes que exhibe comportamentos variados e coloca questões não triviais ainda em aberto. Esperamos que ele seja usado no estudo dos sistemas fora de equilíbrio, para propor novas idéias e testar futuras conjecturas.

# Apêndice A

## O modelo de Lotka-Volterra

Não é necessário aclarar a importância das oscilações nos sistemas biológicos. O paradigma dos modelos ecológicos que apresentam oscilações nas populações é o modelo de Lotka-Volterra. Ele foi proposto em forma independente por Lotka [Lotka, 1920] (no contexto da área da cinética química) e Volterra [Volterra, 1931] (no contexto da ecologia). Neste apêndice pretendemos dar uma breve resenha do modelo. Para uma descrição mais detalhada sugerimos a leitura do livro de Goel *et al.* [Goel *et al.*, 1971].

Volterra estava motivado em estudar certos aspectos das séries temporais obtidas em base à estatística sobre a pesca no mar Adriático: a população de duas espécies de peixes variava com o mesmo período mas fora de fase. Volterra descreveu um sistema composto por dois tipos de espécies,  $S_1, S_2$ , de massas  $x_1, x_2$ :

- A espécie  $S_1$ , ou peixes pequenos, que cresce a expensas de uma fonte *constante* (reservatório de alimento).
- A espécie  $S_2$ , ou peixes grandes, crescendo a expensas de  $S_1$ .

Este mecanismo qualitativo foi descrito por Volterra mediante o sistema de equações

$$\begin{aligned}\frac{dx_1}{dt} &= A_1x_1 - B_1x_1x_2 \\ \frac{dx_2}{dt} &= A_2x_1x_2 - B_2x_2\end{aligned}\tag{A.1}$$

onde  $A_1, A_2, B_1$ , e  $B_2$  são constantes positivas.

O termo  $B_1x_1x_2$  representa a perda de peixes pequenos devido a *colisões* com os grandes. A taxa com que os peixes grandes se multiplicam como consequência destas colisões é  $A_2x_1x_2$ . Neste modelo a espécie  $S_1$  cresce exponencialmente na ausência da espécie  $S_2$ , enquanto que a espécie  $S_2$  morre exponencialmente na ausência de  $S_2$ .

Adimensionalizando o sistema com as novas variáveis

$$\alpha = \frac{B_2}{A_1}, \quad \tau = \alpha t, \quad x(\tau) = \frac{A_2}{B_2} x_1, \quad y(\tau) = \frac{B_1}{A_1} x_2, \quad (\text{A.2})$$

as equações ficam como

$$\begin{aligned} \frac{dx}{d\tau} &= x(1 - y), \\ \frac{dy}{d\tau} &= \alpha y(x - 1). \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Este sistema tem duas soluções estacionárias,  $(0, 0)$  e  $(1, 1)$ . Linearizando as equações em torno dos valores estacionários  $(x = x_0, y = y_0)$  obtemos a equação para a evolução das perturbações  $\eta = (x - x_0)$  e  $\zeta = (y - y_0)$  dada abaixo

$$\begin{pmatrix} \eta' \\ \zeta' \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} \eta \\ \zeta \end{pmatrix}, \quad (\text{A.4})$$

onde  $A$  é a matriz jacobiana.

Após propor soluções do tipo

$$\begin{aligned} \eta &= c_1 \exp(\lambda\tau), \\ \zeta &= c_2 \exp(\lambda\tau), \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

obtemos a seguinte equação de autovalores,

$$A \begin{pmatrix} \eta \\ \zeta \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \eta \\ \zeta \end{pmatrix}. \quad (\text{A.6})$$

Podemos verificar os seguintes casos

- $(x_0, y_0) = (0, 0)$ :

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -\alpha \end{pmatrix} \quad (\text{A.7})$$

Assim obtemos os autovalores  $\lambda_1 = 1$  e  $\lambda_2 = -\alpha$ . Isto quer dizer que o ponto  $(0, 0)$  é um ponto de sela [Nicolis e Prigogine, 1977].

- $(x_0, y_0) = (1, 1)$ : neste caso, a matriz jacobiana assume a forma

$$A = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ \alpha & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.8})$$

o que leva a soluções do tipo  $\eta = A_1 \exp^{i\sqrt{\alpha}\tau} + B_1 \exp^{-i\sqrt{\alpha}\tau}$  (e expressões análogas para  $\zeta$ ), pois os autovalores são imaginários. Ou seja, a solução estacionária é um centro [Nicolis e Prigogine, 1977]. Pequenas perturbações em torno do valor estacionário  $(1, 1)$  têm elipses como órbitas no espaço de fases.

O sistema de equações A.3 pode ser integrado em forma exata, a solução [Goel *et al.*, 1971] sendo

$$\alpha x + y - \ln(x^\alpha y) = \mathcal{H} = cte, \quad (\text{A.9})$$

onde  $\mathcal{H}$  é a *constante de movimento* do sistema, determinada pelos valores iniciais das variáveis  $x$  e  $y$ . Pode-se demonstrar, por meio de construções geométricas, que existe um valor máximo possível de  $\mathcal{H}$  para que o sistema A.3 admita soluções na forma de órbitas fechadas [Davis, 1962], e que, quando as órbitas são fechadas, a sua frequência depende de forma contínua nas condições iniciais [Frame, 1974]. O fato do espectro de frequências ser contínuo implica a falta de estabilidade assintótica orbital do modelo. Esta característica por sua vez está relacionada com o fato do modelo ser integrável.

As órbitas correspondentes às soluções de A.9 se mostram na figura A.1 para alguns valores de  $\mathcal{H}$ . A falta de estabilidade assintótica orbital faz com que o modelo não seja útil para uma descrição realista de oscilações em sistemas biológicos. O motivo é que se uma perturbação *afastar* o sistema de sua órbita, ele não lembrará de onde partiu, mas continuará na sua nova trajetória. Assim, o sistema irá à *deriva* até cair no estado  $(0, 0)$ . As oscilações em sistemas reais são entendidas em termos de ciclos limites.

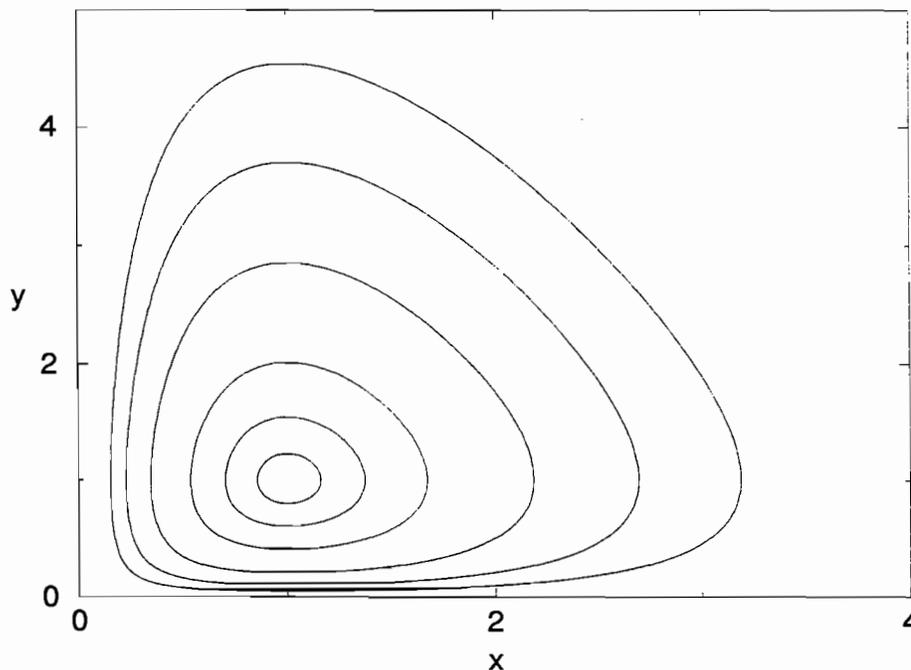


Figura A.1: soluções das equações de Lotka-Volterra para diferentes condições iniciais,  $\alpha = 2$  e valores de  $\mathcal{H}$  crescentes à medida que as órbitas aumentam de tamanho: 3.02, 3.11, 3.32, 3.81, 4.40, e 5.05.

## Apêndice B

### Soluções da equação mestra na aproximação de pares

Neste apêndice escreveremos explicitamente a dependência funcional das soluções estacionárias da equação 4.6 à 4.10 com os parâmetros  $a$ ,  $b$ , e  $c$ .

Denotemos por  $f(a, b, c)$  a menor das soluções da equação de segundo grau

$$0 = \frac{a}{b} \left(1 + \frac{a}{b}\right) (3f)^2 - (3f) \left[3 + \frac{5a}{b} + \frac{4c}{b} \left(1 + \frac{b}{a} - \frac{a}{b}\right)\right] + 8c \left(\frac{1}{a} - \frac{1}{b} - \frac{2c}{ab}\right) + 6, \quad (\text{B.1})$$

ou seja

$$f(a, b, c) = \frac{3 + \frac{5a}{b} + \frac{4c}{b} \left(1 + \frac{b}{a} - \frac{a}{b}\right)}{\frac{6a}{b} \left(1 + \frac{a}{b}\right)} - \frac{\sqrt{\left[3 + \frac{5a}{b} + \frac{4c}{b} \left(1 + \frac{b}{a} - \frac{a}{b}\right)\right]^2 - \frac{8a}{b} \left(1 + \frac{a}{b}\right)}}{\frac{6a}{b} \left(1 + \frac{a}{b}\right)}. \quad (\text{B.2})$$

Desta forma, em termos de  $f(a, b, c)$ , as soluções procuradas são

$$x_0 = \left\{1 + f(a, b, c) \frac{a}{b} \left[1 + \left(\frac{2a}{3c} - (1 - a/b)f(a, b, c) \frac{a}{c}\right)\right]\right\}^{-1} \quad (\text{B.3})$$

$$w_0 = \left[\frac{2}{3} - \left(1 + \frac{a}{b}\right) f(a, b, c)\right]^{-1} \left[\left(1 + \frac{2a}{b}\right) f(a, b, c) - \frac{4}{3} \left(\frac{1}{2} - \frac{c}{b}\right)\right] f(a, b, c) x_0 \quad (\text{B.4})$$

$$y_0 = \frac{a}{c} f(a, b, c) x_0 \quad (\text{B.5})$$

$$u_0 = f(a, b, c) x_0 \quad (\text{B.6})$$

$$v_0 = \frac{a}{b} f(a, b, c) x_0 \quad (\text{B.7})$$

# Apêndice C

## Duas relações entre expoentes e simulações na região subcrítica

Na parte C.1 deste apêndice tentaremos mostrar a origem das relações 7.6 e 7.7 que obedecem os expoentes críticos mencionados no capítulo 7. Na parte C.2, descrebiremos como, fazendo simulações de Monte Carlo na região subcrítica do modelo e assumindo conhecidos os expoentes críticos, podemos calcular o valor dos parâmetros críticos nos quais acontece a transição.

### C.1 Duas relações entre expoentes críticos

Olhemos para a região supercrítica ( $\Delta > 0$ ) do modelo. Reescrevamos 7.3 como

$$P_t \approx \Delta^{\nu\delta} \psi(\Delta t^{1/\nu}), \quad (\text{C.1})$$

onde

$$\psi(\xi) = \xi^{-\nu\delta} \varphi(\xi). \quad (\text{C.2})$$

Dado que  $P_\infty = \lim_{t \rightarrow \infty} P_t$  é finito,  $\lim_{\xi \rightarrow \infty} \psi(\xi)$  também o será, de modo que

$$P_\infty \sim \Delta^{\nu\delta}. \quad (\text{C.3})$$

Um resultado relevante e não trivial é o fato de que  $P_\infty$  e  $\rho_{act}$  têm os mesmos expoentes críticos (ver Apêndice A em [Grassberger e de la Torre, 1979]). A partir desse resultado se depreende a primeira das relações entre os expoentes

$$\beta = \nu\delta. \quad (\text{C.4})$$

A continuação assumimos, por estar na região supercrítica onde o comprimento de correlação é finito, que os discos que sobrevivem a tempo grandes têm densidade constante e se expandem com velocidade finita  $\vec{v}$ ,

$$\langle |\vec{x}|^2 \rangle^{1/2} \sim vt. \quad (\text{C.5})$$

Comparando isto com 7.5 vemos que

$$v \sim \Delta^{(1-z/2)\nu}. \quad (\text{C.6})$$

E por último consideremos o número medio de partículas na rede. Avaliando as expresões 7.2, C.5, e C.6 quando  $t \rightarrow \infty$  temos

$$\langle n \rangle \approx \text{const } \rho_{act} P_\infty \langle |\vec{x}|^2 \rangle^{d/2} \quad (\text{C.7})$$

$$\sim \Delta^{2\beta+(1-z/2)\nu d} t^d, \quad (\text{C.8})$$

O termo  $\langle |\vec{x}|^2 \rangle^{d/2}$  representa o volume (em  $d$  dimensões) ocupado pela epidemia, e o fato não intuitivo de aparecer  $P_\infty$  em C.7 deve-se ao cálculo do valor médio  $\langle n \rangle$  ser feito sobre o conjunto de todos os discos epidêmicos que ainda não morreram a tempo  $t$ .

Uma comparação direta com a expressão 7.4 fornece a segunda relação procurada

$$dz = 2\eta + 4\delta. \quad (\text{C.9})$$

## C.2 Simulações de Monte Carlo na região subcrítica com uma fonte

Das relações 7.2 e C.3 podemos escrever a densidade de uma partícula como

$$\rho(\vec{x}, t) \sim \Delta^{2\delta\nu} H(|\vec{x}|^2/t^z, \Delta t^{1/\nu}). \quad (\text{C.10})$$

Imaginemos que temos uma fonte do estado ativo em  $\vec{x} = 0$ . Estamos interessados em conhecer a distribuição estacionaria da densidade de uma partícula longe da fonte. Devido ao fato do disco epidêmico não desaparecer nunca, devemos corrigir  $\rho(\vec{x}, t)$  por um fator proporcional à probabilidade de sobrevivida do disco. Assim

$$\rho(\vec{x}) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\rho(\vec{x}, t)}{P(t)}, \quad (\text{C.11})$$

Tomando  $\lim_{t \rightarrow \infty}$  e  $\lim_{\Delta \rightarrow 0}$  de modo que

$$\Delta t^{1/\nu} = 1, \quad (\text{C.12})$$

verificamos, usando C.3, que

$$\begin{aligned} \rho(\vec{x}) &\approx \Delta^{\delta\nu} \bar{H}(|\vec{x}|^2 \Delta^{z\nu}, 1), \\ &= |\vec{x}|^{\frac{2\delta}{z}} G(|\vec{x}|^2 \Delta^{z\nu}). \end{aligned} \quad (\text{C.13})$$

Calculamos agora o que chamaremos *momentos de ordem n* da distribuição

$$x_n = \int d^d x \rho(\vec{x}) |\vec{x}|^{n + \frac{2\delta}{z}}, \quad (\text{C.14})$$

verificamos facilmente que

$$x_n \sim \Delta^{-\frac{(n+d)}{2}\nu z}, \quad (\text{C.15})$$

Assim, assumindo como conhecidos os valores de  $z = 1.134$  e  $\nu = 1.1286$  [Grassberger, 1989a], é possível, calculando  $x_n$  para vários valores de  $c$ , fazer gráficos logarítmicos da relação C.15 e inferir o valor de  $c_{crit}$  impondo que os pontos formem uma reta de inclinação  $(n+d)\nu z/2$ .

Para relevar a linha de transição para o estado AV a medida que  $p$  fica próximo de 0.5, esta alternativa resultou ser o único tipo de simulação viável. Como fonte do estado ativo utilizamos as bordas dos quatro blocos (de  $16 \times 16$  sítios) centrais da rede. Cada borda alterna grupos de presas e predadores. Um *snapshot* de uma configuração estacionária se mostra na figura C.1.

Os valores de  $x_n$  foram calculados para  $n = 0, 1$ , e  $2$  como médias de uma amostragem sobre diferentes configurações. A amostragem foi feita em intervalos de tempo superiores ao comprimento de autocorrelação das amostras temporais.

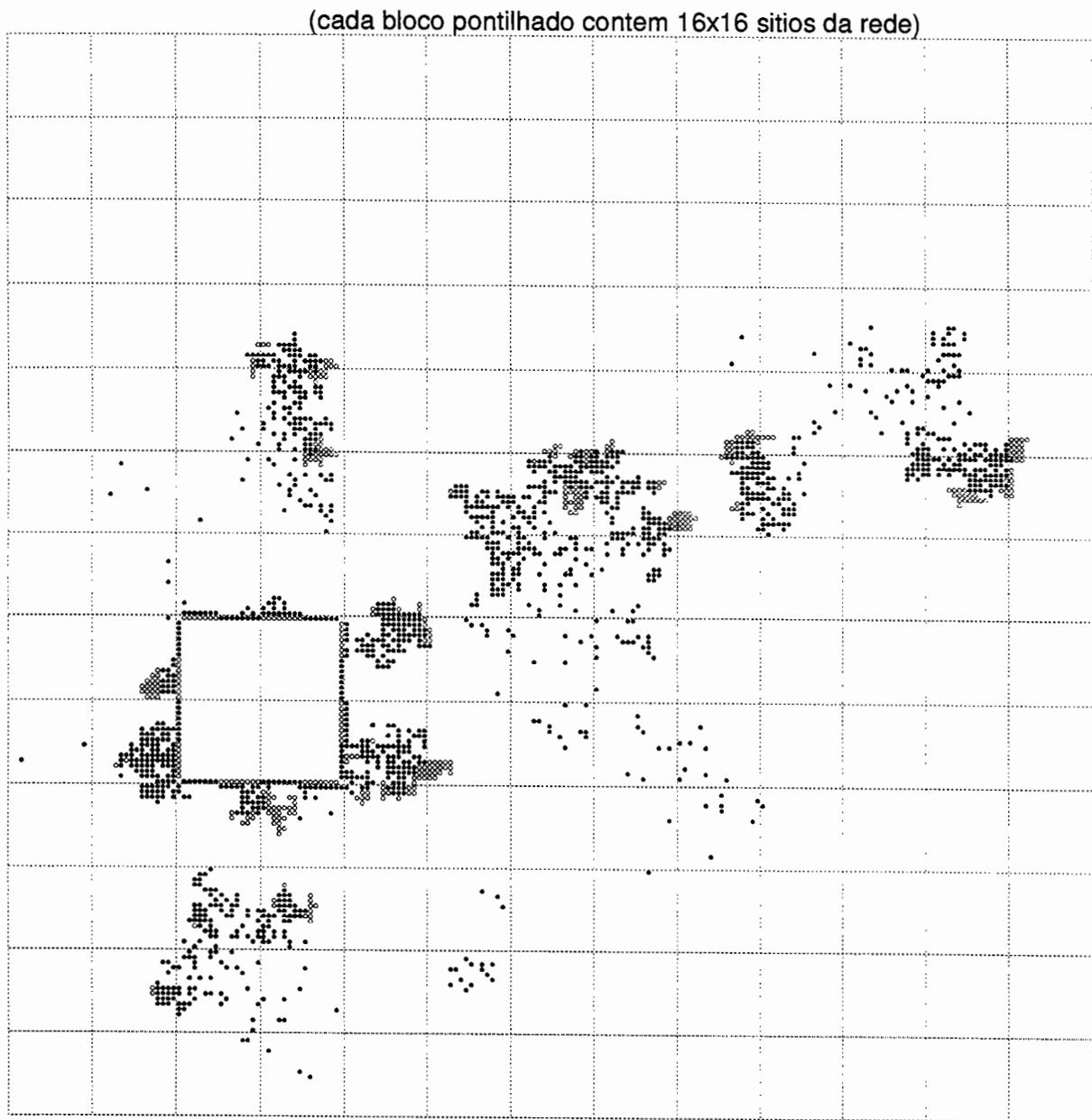


Figura C.1: *Snapshot* da rede aos 55000 para  $p = 0.2105$  e  $c = 0.0175$ .

## Apêndice D

# Soluções de onda viajante na equação de Fisher

Neste apêndice mostraremos, via uma análise canônica no tratamento de equações de reação-difusão, como se pode determinar (o pelo menos acotar) os intervalos de valores de parâmetros nos quais uma equação deste tipo admite soluções de onda viajante. O caso específico que trataremos, a equação de Fisher [Fisher, 1937], é muito simples: unidimensional e com um único parâmetro, pelo que é um paradigma da classe de equações que admitem soluções de onda viajante. A equação foi proposta como uma versão determinística de um modelo estocástico para a propagação espacial de um gene favorito numa população. Ela tem a forma

$$U_t = kU(1 - U) + D\partial_x^2 U, \quad (\text{D.1})$$

onde  $k$  e  $D$  são parâmetros positivos. Reescalando o tempo em  $k$  e a coordenada espacial em  $(k/D)^{\frac{1}{2}}$ , tem-se

$$U_t = U(1 - U) + \partial_x^2 U \quad 0 \leq u \leq 1. \quad (\text{D.2})$$

No caso espacialmente homogêneo, os estados estacionários são  $u = 0$  e  $u = 1$ . O primeiro é instável, e o segundo estável. A estabilidade do segundo estado é *global*, ou seja, qualquer que seja o valor inicial de  $u$ , o sistema sempre evoluirá para  $u = 1$ . Isto dá uma idéia de como se pode propagar uma onda viajante. Pensemos no entorno de cada ponto no espaço como sistemas homogêneos e suponhamos que estão todos no estado  $u = 0$ . Se um deles for perturbado, começar a ir para o estado  $u = 1$ , mas pelo acoplamento difusivo, induzirá os sistemas vizinhos a fazer isto um instante depois. E assim por diante. O resultado é que se forma espacialmente uma frente de onda avançando com velocidade finita.

De existir uma onda viajante, deve-se poder escrever como

$$U(x, t) = U(z), \quad z = x - ct, \quad (\text{D.3})$$

então substituindo D.3 em D.2 obtém-se a equação diferencial em  $z$

$$U'' + cU' + U(1 - U) = 0, \quad 0 \leq U \leq 1. \quad (\text{D.4})$$

Isto não é outra coisa que D.2 expressada num marco de referência que se move com velocidade  $c$ . Uma solução típica será aquela na qual, assintoticamente, um extremo se encontra num estado estacionário, e o antagônico no outro estado estacionário. Assim, as condições de contorno para D.4 podem ser expressas como

$$\lim_{z \rightarrow \infty} U(z) = 0, \quad \lim_{z \rightarrow -\infty} U(z) = 1. \quad (\text{D.5})$$

A equação D.2 é equivalente ao sistema

$$\begin{aligned} U' &= V, \\ V' &= -cV - U(1 - U), \end{aligned} \quad 0 \leq U \leq 1. \quad (\text{D.6})$$

A idéia é agora estudar a estabilidade dos pontos estacionários deste último sistema, a saber o  $(0, 0)$  e o  $(1, 1)$ . Em particular queremos saber como a estabilidade depende de  $c$  (até agora indeterminado).

O ponto  $(0, 0)$ :

Os autovalores da matriz de estabilidade são:

$$\lambda_{\pm} = \frac{1}{2}(-c \pm (c^2 - 4)^{\frac{1}{2}}), \quad (\text{D.7})$$

assim,

- se  $c^2 \geq 4$ , o ponto é um nodo estável,
- se  $c^2 > 4$ , o ponto é uma espiral estável.

O ponto  $(1, 0)$ :

Os autovalores da matriz de estabilidade são:

$$\lambda_{\pm} = \frac{1}{2}(-c \pm (c^2 + 4)^{\frac{1}{2}}), \quad (\text{D.8})$$

assim, para todos os valores de  $c$  é um ponto de sela.

Se  $c \geq c_{min} = 2$ , por argumentos de continuidade, pode-se ver que existe uma trajetória desde  $(1, 0)$  até  $(0, 0)$  contida no quadrante

$$0 \leq U \leq 1 \text{ e } u' \leq 0.$$

Isto se vê na figura D.1.

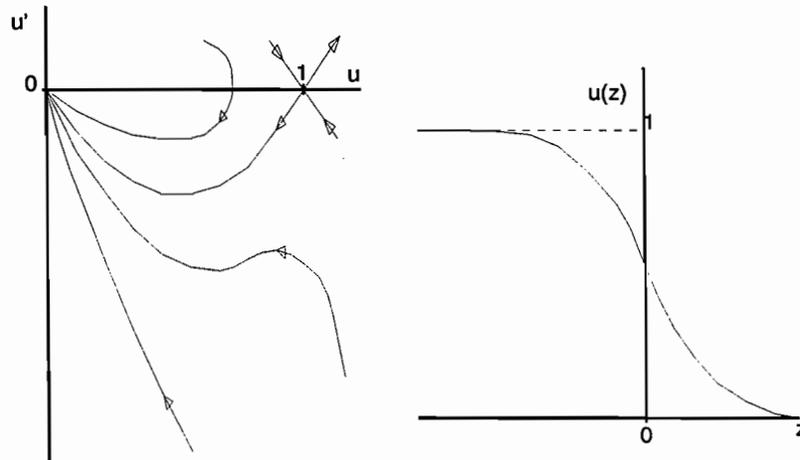


Figura D.1: Trajetória de  $(1, 0)$  até  $(0, 0)$  e a forma de  $u(z)$  respectivamente.

Contrariamente, para  $c \leq 2$ , existem soluções de onda viajante, mas elas não têm sentido físico desde que o  $(0, 0)$  é um ponto estacionário de tipo espiral e  $U$  nunca pode ser negativo. Desta forma, analisando os tipos de autovalores, se podem acotar os valores possíveis de  $c$ :

$$c \geq c_{min} = 2(kD)^{\frac{1}{2}}.$$

Ficam importantes questões ainda abertas que são hoje motivo de atividade na área:

- que tipo de condições iniciais evoluem para uma onda viajante?
- porque, de todas as possíveis velocidades, as ondas se sintonizam assintoticamente numa em particular? Qual é o mecanismo de seleção?

Lembremos que nada falamos sobre a estabilidade de estas frentes de onda.

Kolmogorov e colaboradores provaram que se  $U(x, 0)$  tem suporte compacto,

$$U(x, 0) = U_0(x), \text{ com } U_0(x) = \begin{cases} 1 & \text{se } x \leq x_1, (x_1 \leq x_2) \\ 0 & \text{se } x > x_2 \end{cases}$$

e  $U_0$  é contínua, então a solução de D.1 converge para uma onda viajante com velocidade  $c_{min}$  a medida que  $t \rightarrow \infty$  (a convergencia é num sentido algo fraco). Para outros tipos de condições iniciais, as soluções dependem dramaticamente do comportamento assintótico de  $U_0(x)$ .

# Bibliografia

- [Albano, 1992] Albano, E. V. (1992), *Critical exponents for the irreversible surface reaction model  $A + B \rightarrow AB$  with  $B$  desorption on homogeneous and fractal media*, Phys. Rev. Lett. **69**, 656.
- [Albano, 1994] Albano, E. V. (1994), *Critical behaviour of forest fire model with immune trees*, J. Phys. A **27**, L881.
- [Albano e Pereyra, 1994] Albano, E. V. e Pereyra, V. D. (1994), *On the the hot dimmer adsorption mechanism in the critical behaviour of the ZGB model*, J. Phys. A **27**, 7763.
- [Andjel e Schinazi, 1994] Andjel, E. e Schinazi, R. (1994), *A complete convergence theorem for an epidemic*, aceito para publicação no J. Math. Prob.
- [Aukrust *et al.*, 1989] Aukrust, T., Browne, D. A., e Webman, I. (1989), *Critical behavior of an autocatalytic reaction model*, Phys. Rev. A **41**, 5294.
- [Blase, 1977a] Blase, J. (1977a), *Directed bond percolation on hypercubic lattices*, J. Phys. C **10**, 917.
- [Blase, 1977b] Blase, J. (1977b), *Series expansions for the directed percolation problem*, J. Phys. C **10**, 917.
- [Brower *et al.*, 1978] Brower, C. R., Furman, M, A., e Moshe, M. (1978), *Critical Exponents for the Reggeon quantum spin model*, Phys. Lett. **76B**, 213.
- [Davis, 1962] Davis, H. T. (1962), *Introduction to nonlinear differential and integral equations*, Dover, New York.
- [Dickman, 1990] Dickman, R. (1990), *Nonequilibrium critical behavior of a triplet annihilation model*, Phys. Rev. A **42**, 6985.

- [Dickman e Tomé, 1991] Dickman, R. e Tomé, T. (1991), *First-order phase transition in a one-dimensional nonequilibrium model*, Phys. Rev. A **44**, 4833.
- [Drossel e Schwabl, 1993] Drossel, B. e Schwabl, F. (1993), *Forest-fire model with immune trees*, Physica A **199**, 183.
- [Dunbar, 1983] Dunbar, S. R. (1983), *Travelling wave solutions of diffusive Lotka-Volterra equations*, J. Math. Biology **17**, 11.
- [Fisher, 1937] Fisher, R. A. (1937), *The wave of advance of advantageous genes*, Ann. Eugenics **7**, 353.
- [Frame, 1974] Frame, J. S. (1974), *Explicit solutions in two species Volterra systems*, J. theor. Biol. **43**, 73.
- [Gardiner, 1985] Gardiner, C. W. (1985), *Handbook of Stochastic Methods*, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg.
- [Gardiner e Walls, 1978] Gardiner, C. W. e Walls, D. W. (1978), *A generalized Landau theory for chemical instabilities*, J. Phys. A **11**, 161.
- [Glauber, 1963] Glauber, R. J. (1963), *Time-dependent statistics of the Ising model*, J. Math. Phys. **4**, 294.
- [Goel et al., 1971] Goel, N. S., Maitra, S. C., e Montroll E. W. (1971), *On the Volterra and other nonlinear models of interacting populations*, Rev. Modern Phys. **43**, 231.
- [Grassberger, 1978] Grassberger, P. e Sundermeyer, K. (1978), *Reggeon field theory and Markov processes*, Phys. Lett. B **77**, 220.
- [Grassberger e de la Torre, 1979] Grassberger, P. e de la Torre, A. (1979), *Reggeon field theory (Schlögl's first model) on a lattice: Monte Carlo simulations of critical behaviour*, Ann. Phys. **122**, 373.
- [Grassberger, 1982a] Grassberger, P. (1982), *On phase transitions in Schlögl's Second Model*, Z. Phys. B **47**, 365.
- [Grassberger, 1982b] Grassberger, P. (1982), *On the Critical Behavior of the General Epidemic Process and Dynamical Percolation*, Math. Biosci. **62**, 157.
- [Grassberger et al., 1984] Grassberger, P., Krause, F., e von der Twer, T. (1984), *A new type of kinetic critical phenomenon*, J. Phys. A **17**, L105.

- [Grassberger, 1989a] Grassberger, P. (1989a), *Directed percolation in 2+1 dimensions*, J. Phys. A **22**, 3673.
- [Grassberger, 1989b] Grassberger, P. (1989b), *Some further results on kinetic critical phenomenon*, J. Phys. A **22**, L1103.
- [Grinstein *et al.*, 1989] Grinstein, G., Lai, Z. W., e Browne, D. A. (1989), *Critical phenomena in a nonequilibrium model of heterogeneous catalysis*, Phys. Rev. A **40**, 4820.
- [Haken, 1978] Haken, H. (1978), *Synergetics, An introduction*, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg.
- [Harris, 1974] Harris, T. E. (1974), *Contact interactions on a lattice*, Ann. Probab. **2**, 969.
- [Jannsen, 1981] Jannsen, H. K. (1981), *On the nonequilibrium phase transition in reaction-diffusion systems with an absorbing stationary state*, Z. Phys. B **42**, 151.
- [Jensen *et al.*, 1990] Jensen, I., Fogedby, H. C., e Dickman, R. (1990), *Critical exponents for an irreversible surface reaction model*, Phys. Rev. A **41**, 3411.
- [Jensen, 1991] Jensen, I. (1991), *Universality class of a one-dimensional cellular automaton*, Phys. Rev. A **43**, 3187.
- [Jensen, 1994] Jensen, I. (1994), *Critical behaviour of a surface reaction model with infinitely many absorbing states*, J. Phys. A **27**, L61.
- [Jensen e Dickman, 1993] Jensen, I. e Dickman, R. (1993), *Nonequilibrium phase transitions in systems with infinitely many absorbing states*, Phys. Rev. E **48**, 1710.
- [Kikuchi, 1951] Kikuchi, R. (1951), *A theory of cooperative phenomena* Phys. Rev. **81**, 988.
- [Kim e Park, 1994] *Critical behavior of an interacting monomer-dimer model*, Kim, M. H. e Park, H. (1994), preprint.
- [LeVeque e Yee, 1990] LeVeque, R. e Yee, H. C. (1990), *A study of numerical methods for hyperbolic conservation laws with source terms*, J. Comp. Phys. **86**, 187.

- [Liggett, 1985] Liggett, T. M. (1985), *Interacting particle systems*, Springer-Verlag, New York.
- [Lotka, 1920] Lotka, A. J. (1920), *Analytical note on certain rhythmic relations in organic systems*, Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A. **6**, 410.
- [Mamada e Takano, 1968] Mamada, H. e Takano, F. (1968), *New approximate method for Ising system*, J. Phys. Soc. Jpn. **25**, 675.
- [Matsuda *et al.*, 1992] Matsuda, H., Ogita, N., Sasaki, A., e Sato, K. (1992), *Statistical mechanics of a population*, Prog. Theor. Phys. **88**, 1035.
- [Murray, 1989] Murray, J. D. (1989), *Mathematical Biology, Biomathematics Texts*, Vol. 19. Springer-Verlag, Heidelberg.
- [Nicolis e Prigogine, 1977] Nicolis, G. e Prigogine, I. (1977). *Self-organization in nonequilibrium systems*, Wiley Interscience, New York.
- [Volterra, 1931] Volterra, V. (1931), *Leçon sur la theorie mathematique de la lutte pour le vie*. Gauthier-Villars, Paris.
- [Satulovsky e Tomé, 1994] Satulovsky, J. e Tomé, T. (1994), *Stochastic lattice gas model for a prey-predator system*, Phys. Rev. E **49**, 5073.
- [Satulovsky e Tomé, 1995] Satulovsky, J. e Tomé, T. (1995), *Spatial instabilities and local oscillations in a lattice gas Lotka-Volterra model*, submetido a J. Math. Biology.
- [Schlögl, 1972] Schlögl, F. (1972), *Chemical reaction models for non-equilibrium phase transitions*, Z. Phys. **253**, 147.
- [Shigesada *et al.*, 1986] Shigesada, N., Kawasaki, K., e Teramoto, E. (1986), *Traveling periodic waves in heterogeneous environments*, Theor. Pop. Biol. **30**, 143.
- [Solé *et al.*, 1992] Solé, R. V., Bascompte, J., e Valls, J. (1992). *Stability and complexity of spatially extended two-species competition*, J. theor. Biol. **159**, 469.
- [Tomé e Dickman, 1993] Tomé, T. e Dickman, R. (1993), *The Ziff-Gulari-Barshad model with CO desorption: An Ising-like nonequilibrium critical point*, Phys. Rev. E **47**, 948.

- [Van Kampen, 1981] N. G. Van Kampen, *Stochastic processes in Physics and Chemistry*. North-Holland, Amsterdam, 1981.
- [Vieira e Bisch, 1993] Vieira, F. M. C. e Bisch, P. M. (1993), *Oscillatory patterns in an autocatalytic reaction ring network simulated by a probabilistic cellular automaton*, *Physica A* **199**, 40.
- [Vlachos *et al.*, 1992] Vlachos, D. G., Schüth, F., Aris, R. e Schmidt, L. D.. (1992), *Spatial and temporal patterns in catalytic oscillations*, *Physica A* **188**, 302.
- [Yaldram *et al.*, 1993] Yaldram, K., Khan, K. M., Ahmed, N., Kkan, M. A. (1993), *A new class of critical exponents in a dimer-monomer catalytic surface reaction*, *J. Phys. A* **26**, L801.
- [Zhuo e Redner, 1993] Zhuo, J. e Redner, S. (1993), *Comment on 'Critical exponents for the irreversible surface reaction  $A+B \rightarrow AB$  with  $B$  desorption on homogeneous e fractal media*, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 2822.
- [Ziff *et al.*, 1986] Ziff, R. M., Gulari, E., e Barshad, Y. (1986), *Kinetic phase transitions in an irreversible surface reaction model*, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 2553.