

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
FFCLRP - Departamento de Física e Matemática
Programa de Pós-Graduação em FÍSICA APLICADA
A MEDICINA E BIOLOGIA

SIMULAÇÃO MONTE CARLO PARA SISTEMAS DINÂMICOS

OSVALDO EDUARDO AIÉLO

Tese apresentada à Faculdade de Filosofia,
Ciências e Letras de Ribeirão Preto - USP, como
parte das exigências para obtenção do título de
DOUTOR EM CIÊNCIAS - Área: FÍSICA
APLICADA À MEDICINA E BIOLOGIA.

RIBEIRÃO PRETO - SP
Julho - 2000

Abstract

In this work we present results obtained by Dinamical Monte Carlo simulation for Poisson processes. We Developed a new technique to simulate markovian processes and we applied it to several systems as: lattice-gas, epidemics and newtonian. The technique is based in an approach to the solution of the Master Equation. In some cases the results are compared with others numerical methods and analitical results, if they exist.

The comparisons are excelent in the regions that are expected to be, but in other ones only our method works. We developed, also a new way to see phase transition even far from equilibrium.

RESUMO

Neste trabalho apresentamos resultados obtidos por simulação Monte Carlo para processos de Poisson. Desenvolvemos uma nova técnica para simular processos markovianos e aplicamo-la a vários sistemas como, por exemplo, gás-rede, epidêmicos e newtonianos. A técnica é baseada na solução da Equação Mestra e os resultados são comparados a outros obtidos por métodos numéricos ou analíticos mostrando excelente concordância. Em alguns casos somente o nosso método funciona. Desenvolvemos também uma nova maneira de localizar transições de fase.

AGRADECIMENTOS

Desejo manifestar sincera gratidão às seguintes pessoas que foram de importância fundamental para a execução deste trabalho:

- Marco pela orientação, amizade, companheirismo que foram uma constante durante todos estes anos,
- Caliri pela co-orientação, estímulo e pelas boas conversas informais,
- Aos alunos do departamento, especialmente para o Vanderlei e a Eulália
- Oswaldo Baffa pela recepção no departamento de física.
- Aos funcionários, principalmente a Rosângela, Sônia, Gisele, Denise e Inês.
- Aos professores Zimmermann e a Adelaide pelo carinho e atenção.

Conteúdo

1	Introdução	1
2	Monte Carlo Canônico	5
2.1	O Método Monte Carlo na Mecânica Estatística	5
2.2	Números aleatórios	8
2.3	Condições de contorno	9
2.4	Finitude espacial e temporal em simulações	10
2.5	Estratificação	10
2.6	Transição de fase do modelo gás-rede	11
2.7	Limitações do método	13
3	Simulação de processos de Poisson	15
3.1	Tempos de espera	16
3.2	Adsorção-dessorção de Langmuir	18
4	modelo Epidêmico <i>SIRS</i>	29
4.1	modelo <i>SIRS</i>	30
4.2	Soluções estacionárias	30
4.3	Soluções numéricas	31
4.4	modelo <i>SIRS</i> com interações locais	34
5	Simulação de processos markovianos	41
5.1	O Método	41
5.2	A Simulação MCD	45
5.3	Adsorção-dessorção de Langmuir	47
6	Outros resultados e perspectivas	53
6.1	modelo epidêmico	53

6.2	Transições entre fases epidêmicas e não-epidêmicas	57
6.3	modelo gás-rede	57
6.4	Perspectivas	65
6.5	Pêndulo	66
6.6	Considerações finais	67
7	Apêndice A	69
8	Apêndice B	73
9	Apêndice C	75
10	Apêndice D	77

Capítulo 1

Introdução

O tempo sempre suscitou reflexões entre os pensadores ¹. Na física o tempo contrapõe a reversibilidade, arraigada às leis da Mecânica (tanto clássica como quântica), e os processos irreversíveis. Prigogine [1] defende uma extensão da dinâmica clássica e da Física Quântica que leve em consideração a assimetria temporal dos processos irreversíveis. Por outro lado, Lebowitz [2] afirma que o comportamento assimétrico em relação ao tempo para sistemas macroscópicos surge naturalmente das leis microscópicas considerando a grande disparidade entre as duas escalas.

A despeito deste impasse, em situações de equilíbrio termodinâmico há o consenso de que a mecânica estatística [3] - [8], teoria que relaciona os estados macroscópicos da matéria com as propriedades e movimento dos constituintes microscópicos, pode ser considerada bem estabelecida. Quando a distribuição de equilíbrio é conhecida podemos calcular todas as propriedades termodinâmicas: pressão, calor específico, etc. Todavia, o mesmo não podemos dizer da mecânica estatística de não-equilíbrio. Então, como descrever a aproximação do equilíbrio nos sistemas dinâmicos?

Esta área continua sendo o campo de confrontos entre a Mecânica Clássica ou a Mecânica Quântica, ambas ignorando a irreversibilidade, e a Termodinâmica com seu segundo princípio associado ao aumento de entropia.

Huang [3] sugere que a derivação da Mecânica Estatística fora de equilíbrio deve ser fundamentada na Equação Mestra (Apêndice A).

De forma mais pragmática, as simulações computacionais buscam obter

¹Pré-socráticos, como Epicuro, já se preocupavam com o papel do tempo nos processos naturais. *Que podia significar a liberdade humana no mundo determinista dos átomos?* Apud. PRIGOGINE, I. *O fim das certezas...*, p. 18.

informações de um determinado sistema não se preocupando em resolvê-lo analiticamente.

Os métodos de simulação computacional podem ser divididos em duas classes, os deterministas e os estocásticos. O método Dinâmica Molecular [9] consiste na integração das equações clássicas de movimento (ou mesmo quânticas) para um sistema de partículas. Este método é de natureza determinista e reversível no tempo, ou seja, dadas as posições e momentos iniciais determinamos a trajetória no espaço de fases do sistema podendo, assim, obter qualquer grandeza que se relacione com as posições e com as velocidades dos constituintes. A qualquer instante podemos reverter as equações (trocar t por $-t$) e obter a mesma trajetória no sentido contrário voltando às condições iniciais. A outra classe de métodos de simulação é de natureza estocástica e é chamada de Monte Carlo (MC), em alusão à cidade de mesmo nome e famosa pelos cassinos. A essência deste método consiste em analisar o problema a partir de um conjunto estatístico finito (uma amostra) do total, impossível de ser tratado diretamente. A versão mais disseminada do método Monte Carlo é devida a Metropolis *et al* [10] e consiste em realizar um passeio aleatório visitando somente as configurações mais importantes do sistema. As transições entre as configurações nos métodos estocásticos são construídas de maneira probabilista. Este método tem a vantagem de não necessitar de modelos que tenham uma dinâmica intrínseca [9]. No entanto, podemos resolver sistemas deterministas pelo método Monte Carlo, para isto é necessário a transformação do problema em outro de natureza estocástica, o original não necessita ter caracterizar-se como um processo randômico.

Tradicionalmente as simulações Monte Carlo são aplicadas a sistemas em equilíbrio [11]. Entretanto, nos últimos anos intensificou-se o interesse por técnicas aplicáveis a sistemas fora do equilíbrio. Algum sucesso tem sido alcançado dentro do escopo de processos poissonianos [12, 13]. Estes aparecem com frequência em sistemas epidêmicos [14].

Neste trabalho buscamos soluções de problemas dinâmicos no nível estatístico, apresentamos uma nova proposta para simular processos fora do equilíbrio. Partindo de uma Equação Mestra genérica mostramos que o processo markoviano [15, 16, 17], simulado pelo método Monte Carlo, fornece a dinâmica correta, quando o tempo entre os eventos for estipulado adequadamente.

No capítulo 2 exibimos o método Monte Carlo tradicional, utilizado para obter grandezas em equilíbrio termodinâmico. Em seguida, no capítulo 3, mostramos a simulação dinâmica para processos poissonianos, formulada por

Fichthorn *et al* [13]. Esta técnica é aplicada ao modelo epidêmico *SIRS* [14] no capítulo 4 , apontando a transformação do problema determinista em um estocástico. Os resultados são comparados com as soluções obtidas por Runge-Kutta [18] (Apêndice B). Introduzimos interação local no modelo *SIRS*, o que impossibilita a resolução por Runge-Kutta. Uma nova técnica que simula qualquer processo markoviano é exposta (capítulo 5). Finalmente, no capítulo 6, fazemos algumas aplicações teóricas desta técnica em sistemas epidêmicos e no modelo gás-rede, além de estimarmos o ponto crítico de alguns sistemas, sem a necessidade de termalização como ocorre no método tradicional. Sugerimos, ainda, a aplicação deste método em sistemas deterministas, por exemplo, a resolução do problema clássico de um pêndulo acoplado a um mola (pêndulo elástico).

Capítulo 2

Monte Carlo Canônico

A simulação Monte Carlo é uma técnica computacional de grande generalidade para o cálculo em sistemas com muitos graus de liberdade e por isso mesmo tem muitas aplicações na ciência. Ela pode fornecer informações sobre o modelo, checar o quanto este se aproxima do real, e comparando os resultados com teorias analíticas a partir do mesmo modelo, checar a validade de aproximações feitas no tratamento analítico. Neste capítulo apresentaremos os fundamentos da simulação Monte Carlo na Mecânica Estatística.

2.1 O Método Monte Carlo na Mecânica Estatística

A Mecânica Estatística relaciona as variáveis microscópicas de um sistema com as grandezas macroscópicas. O problema típico que desejamos resolver é o seguinte: dado um modelo governado pela hamiltoniana $H(\Omega_i)$, no qual Ω_i representa pontos no espaço de fases $\{\Omega\}$, queremos calcular o valor de uma observável A do sistema. Sendo $f(\Omega_i)$ a função distribuição apropriada, o valor médio da grandeza A é determinado por :

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_i A(\Omega_i) f(\Omega_i)}{\sum_i f(\Omega_i)}, \quad (2.1)$$

em equilíbrio termodinâmico os sistemas clássicos satisfazem a estatística de Boltzmann, cuja função distribuição é dada por:

$$f_{(\Omega_i)} = Z^{-1} e^{-H(\Omega_i)/k_B T}, \quad (2.2)$$

em que $Z = \sum_{\Omega} f_{(\Omega)}$ é a função partição, k_B é a constante de Boltzmann e T é a temperatura absoluta. Notamos que todos os estados, correspondendo a altas energias, contribuirão com uma pequena parcela para a soma, sendo que a escolha aleatória direta dos estados se torna dispendiosa. Por este motivo, os estados são escolhidos de acordo com sua importância. Com tal conjunto específico de estados do espaço de fase, o valor médio de A se reduz a simples média aritmética:

$$\langle A \rangle \simeq \frac{\sum_{i=1}^M A_{(\Omega_i)}}{M}. \quad (2.3)$$

Prosseguindo, incorporamos um algoritmo para gerar os estados distribuídos de acordo com $P_{(\Omega_i)} = Z^{-1} f_{(\Omega_i)}$. Metropolis *et al* [10], introduziram a idéia de usar uma cadeia de Markov (Apêndice A). Esta começando de um estado inicial propicia que os outros estados gerados sejam distribuídos de acordo com $P_{(\Omega_i)}$. Na cadeia de Markov há uma correlação bem definida entre os estados subsequentes. Esta cadeia é o análogo probabilista para a trajetória gerada pelas equações de movimento em dinâmica molecular. O que precisamos especificar são as probabilidades de transição T_{ij} do estado i para o estado j . Para assegurar que, em equilíbrio, os estados sejam distribuídos de acordo com $P_{(\Omega_i)}$, devemos impor algumas restrições às probabilidades de transição T_{ij} [9]:

- 1^a) para qualquer par i, j $T_{ij} \neq 0$;
- 2^a) para todo i, j $T_{ij} \geq 0$;
- 3^a) para todo i , $\sum_j T_{ij} = 1$;
- 4^a) para todo i , $\sum_j T_{ij} P_j = P_i$.

A primeira é a declaração da conectividade ou ergodicidade e a segunda da positividade. A terceira restrição é a conservação, isto é, a probabilidade total de que o sistema vai para algum estado j é 1. A quarta afirma que a distribuição limite é a de equilíbrio.

Supondo que as probabilidades de transição estejam especificadas e os estados $\Omega_0, \Omega_1 \dots$ gerados, a evolução das probabilidades $P_{(\Omega_i)}$, com as quais os estados estão distribuídos, pode ser descrita pela Equação Mestra (Apêndice A)

$$\frac{dP_i(t)}{dt} = \sum_j w_{j \rightarrow i} P_j - \sum_j w_{i \rightarrow j} P_i, \quad (2.4)$$

em que o primeiro termo descreve a taxa de todas as transições saindo do estado considerado (diminuindo a sua probabilidade), enquanto que o segundo termo descreve a taxa de todas transições chegando no estado considerado (aumentando a sua probabilidade). As taxas de transição estão relacionadas às probabilidades de transição T_{ij} pela expressão: $w_{i \rightarrow j} = \frac{T_{ij}}{\tau_i}$, sendo τ_i o tempo característico de permanência no estado i .

A solução estacionária para a Equação Mestra fornece:

$$\sum_j w_{j \rightarrow i} P_j = \sum_j w_{i \rightarrow j} P_i \quad (2.5)$$

Outra restrição mais forte do que esta pode ser imposta, exigindo que o balanço detalhado seja obedecido:

$$w_{j \rightarrow i} P_j = w_{i \rightarrow j} P_i \quad (2.6)$$

A condição do balanço detalhado é suficiente mas não necessária para que a cadeia de Markov convirja para a distribuição desejada [19]. Deste modo, há uma considerável liberdade para a escolha das probabilidades de transição já que:

$$\frac{T_{ij}}{T_{ji}} = \frac{w_{j \rightarrow i}}{w_{i \rightarrow j}} = \frac{P_j}{P_i}, \quad (2.7)$$

pois podemos considerar $\tau_i = \tau_j$. No algoritmo de Metropolis, $T_{ij} = \min(1, e^{-\Delta E_{ij}/k_B T})$, na qual $\Delta E_{ij} = E_{(\Omega_j)} - E_{(\Omega_i)}$, $E_{(\Omega)}$, é a parte configuracional da hamiltoniana, uma vez que a parte cinética pode ser fatorada na função partição e tratada analiticamente.

A forma geral do algoritmo de Metropolis para a simulação Monte Carlo é a seguinte:

- 1) partindo de uma configuração inicial,
- 2) escolhemos randomicamente (ou sequencialmente) uma partícula

do sistema e mudamos seu estado aleatoriamente,

3) calculamos a diferença de energia $\Delta E_{ij} = E_{(\Omega_j)} - E_{(\Omega_i)}$,

4) o novo estado é aceito com a probabilidade de transição

$T_{ij} = \min(1, e^{-\beta\Delta E})$, efetuando o seguinte procedimento: se

$\Delta E \leq 0$ a transição é aceita, caso contrário, sorteamos um

número aleatório ξ , $0 \leq \xi \leq 1$. Se $\xi < T_{ij}$ mantemos a anterior ,

5) voltamos novamente ao estágio *b*.

Dada a fórmula para T_{ij} , observa-se que o algoritmo de Metropolis gera uma trajetória de acordo com a distribuição canônica de Boltzmann.

A amostragem de Metropolis gera uma sequência convergente para a região de pontos mais relevantes àquela temperatura, escapando, por exemplo, das regiões de energia muito alta.

Outros ingredientes importantes para a simulação Monte Carlo são: números aleatórios, condições de contorno e o tratamento estatístico dos dados. Nas próximas seções daremos ênfase a estes tópicos e no final do capítulo, exemplificaremos como a simulação Monte Carlo aplica-se à Mecânica Estatística.

2.2 Números aleatórios

A qualidade da simulação Monte Carlo liga-se à utilização de um adequado gerador de números aleatórios. Na verdade, computacionalmente, só podemos gerar sequências deterministas pseudo-aleatórias.

Existem diversas técnicas para gerar números pseudo-aleatórios. A que utilizamos neste trabalho é a de truncamento de “bits” [11]. Esta se beneficia do fato das máquinas só poderem conter um número finito de números inteiros. O número máximo para inteiros é $I_{max} = 2^m - 1$, em que m é o número de “bits”. Multiplicando dois inteiros I_ν, J , o resultado $I_{\nu+1} = J \times I_\nu$ será truncado se $I_{\nu+1}$ exceder I_{max} , conservando os últimos $m - 1$ “bits” do produto, os primeiros dígitos do número $\{I_\nu\}$ produzidos pela aplicação subsequente desta fórmula de recursão serão aproximadamente aleatórios se J for escolhido adequadamente. Estes números tem período de 2^m . Para restringir os números gerados entre I e $I_{max} - 1$, temos que trocar $I_{\nu+1}$ por $I_{\nu+1} + I_{max} - 1$ senão $I_{\nu+1}$ seria negativo. Números pseudoaleatórios ξ podem, então, serem obtidos no intervalo $0 < \xi < 1$ fazendo $\xi_\nu = I_\nu / I_{max}$. A qualidade de tais geradores depende do número m de “bits” conservados depois da multiplicação. Enquanto a periodicidade for grande o bastante em comparação com o comprimento da cadeia simulada, este gerador não oferece

limitações. Correlações de curto alcance devem ser consideradas seriamente, por exemplo: se usarmos ξ_ν subsequentes para escolher aleatoriamente as coordenadas (h, k, l) de uma rede $L \times L \times L$ é frequente acontecer que alguns sítios nunca sejam escolhidos, enquanto outros são escolhidos com probabilidade muito alta. Isto pode ser evitado misturando os números da mesma cadeia $\{I_\nu\}$. De qualquer forma é necessário checar se o procedimento, supostamente aleatório (como a escolha aleatória de partículas), está realmente próximo de uma distribuição aleatória realizando testes estatísticos. Podemos checar a influência da não-aleatoriedade comparando os resultados finais para sistemas nos quais temos a solução exata.

2.3 Condições de contorno

Nas simulações utilizamos sistemas finitos. Mas, frequentemente, estamos interessados nas propriedades de um sistema infinito (limite termodinâmico). A condição de contorno convencional para simular um sistema infinito é a periódica (ou toroidal) [11]. Tal condição minimiza os efeitos de superfície.

Seja uma caixa hipercúbica de dimensões lineares L_1, L_2, \dots, L_d e seja G uma grandeza a ser medida e x uma posição no sistema. Podemos definir os vetores $\vec{L}_1 = (L_1, 0, 0, \dots, 0)$, $\vec{L}_2 = (0, L_2, 0, \dots, 0)$, ..., $\vec{L}_d = (0, 0, 0, \dots, L_d)$. Considerando esta condição de contorno, a grandeza física G é expressa por:

$$G(\vec{x}) = G(\vec{x} \pm \vec{L}), i = 1, 2, \dots, d. \quad (2.8)$$

Se o sistema de N partículas é tal que a energia de interação entre as partículas é

$$u_{ij} = u(|\vec{x}_i - \vec{x}_j|), \quad (2.9)$$

a condição de contorno, equação (2.8), é pior quanto maior o alcance de u_{ij} . A energia interna do sistema é dada por

$$U(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sum_{i \neq j} u(|\vec{x}_i - \vec{x}_j|) + \sum_{i \neq j} \sum_{\vec{m}} 'u(|\vec{x}_i - \vec{x}_j + \vec{L}_m|), \quad (2.10)$$

na qual $\vec{L}_m = m_1 L_1 + m_2 L_2 + \dots + m_d L_d$, $\vec{m} = (m_1, m_2, \dots, m_d)$, $\{m_i\}$ inteiros, e a "linha" na somatória em \vec{m} significa $\vec{L}_m \neq 0$. O procedimento usual, para evitar uma soma infinita no segundo termo, é truncar o potencial para distâncias $|\vec{x} - \vec{x}'| > L/2$, em que L é um comprimento da caixa [20]

2.4 Finitude espacial e temporal em simulações

Um sistema finito só fornecerá a descrição precisa de um sistema infinito se o comprimento de correlação, ζ , não exceder sua extensão linear L . Quando $\zeta \gtrsim L$ (o que ocorre próximo ao ponto crítico) as propriedades do sistema finito refletirão a natureza das condições de contorno [21].

Perto da temperatura crítica T_c a relaxação para o equilíbrio torna-se muito lenta e o tempo de relaxação diverge no ponto crítico, (“critical slowing down”). Então, muito próximo de T_c e para tempos de observação pequenos, um sistema com uma transição contínua pode comportar-se como se estivesse em um estado metaestável.

2.5 Estratificação

Ao invés de usarmos 2.3 diretamente podemos dividir a cadeia de comprimento M em l cadeias de comprimento N_c , ou seja $M = l \times N_c$. O valor médio da grandeza física A para uma dessas cadeias de comprimento N_c é:

$$\langle A^{(m)} \rangle = \sum_{i=(m-1)N_c+1}^{mN_c} \frac{A_i}{N_c}, \quad (2.11)$$

com $m = 1, 2, 3, \dots, l$. O valor médio final de A fica:

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_{m=1}^l \langle A^{(m)} \rangle}{l}. \quad (2.12)$$

Se l for suficientemente grande, podemos interpretar $\langle A^{(m)} \rangle$, como sendo valores correspondentes a configurações descorrelacionadas ou pouco correlacionadas. Assim o erro para estas configurações é dado por:

$$\Upsilon = \left(\frac{\langle A^2 \rangle_m - \langle A \rangle_m^2}{l} \right)^{1/2}, \quad (2.13)$$

na qual as médias $\langle A^2 \rangle$ e $\langle A \rangle$ são calculadas usando $\langle A^{(m)} \rangle$. Nos casos em que a correlação ζ_0 não pode ser desprezada, o erro deve ser calculado por :

$$\Upsilon = \left(\frac{(1 + 2\zeta_0)(\langle A^2 \rangle_m - \langle A \rangle_m^2)}{l} \right)^{1/2} \quad (2.14)$$

no qual ζ_0 geralmente é estimado empiricamente.

2.6 Transição de fase do modelo gás-rede

Em uma rede subdividida em células caracterizada pelo número de ocupação n da célula i , cada célula pode estar ocupada por uma partícula $n_i = 1$ ou desocupada $n_i = 0$. Quando as partículas estão nas células primeiras vizinhas a energia associada a cada par é $-\alpha$. A hamiltoniana para um dado conjunto de números de ocupação é então :

$$H = -\alpha \left(\sum_{i,j} n_i n_j - \sum_i n_i \right). \quad (2.15)$$

Este modelo com esta hamiltoniana é chamado gás-rede. Ele é isomórfico ao modelo de Ising magnético, em que uma célula ocupada corresponde a um “spin up” e uma desocupada a um “spin down” [7].

O modelo gás-rede exhibe transição de fase de segunda ordem em $\alpha/k_B T \simeq 1,76$, sendo k_B a constante de Boltzmann e T a temperatura absoluta.

A simulação Monte Carlo é executada sobre uma rede quadrada $N = L \times L$ com $L = 100$. O sistema é colocado em uma configuração inicial com 70% dos sítios preenchidos aleatoriamente. Em seguida cada sítio da rede é visitado sequencialmente, um a um, e o seu estado é alterado, isto é, se o sítio está preenchido ele é desocupado e vice-versa. A variação de energia entre as configurações i e j é calculada:

$$\Delta E_{ij} = -\alpha(N_s + 2), \quad (2.16)$$

sendo N_s o número de pares de partículas primeiras vizinhas. Caso ocorra um decréscimo de energia a nova configuração é aceita. Se houver um aumento de energia a nova configuração é aceita com probabilidade $T_{ij} = e^{-\beta\Delta E}$. Foram descartados 20^1 para que o sistema se estabelecesse no equilíbrio.

¹Geralmente é considerado 1 *MCS* quando o sistema executa uma travessia completa pela rede. Entretanto, nos casos em que a dinâmica é analisada (capítulos seguintes), consideraremos 1 passo Monte Carlo (1 *MCS*) a cada sorteio simples.

Calculamos, então, as médias usando o processo de estratificação com $N_c = 5$ MCS. Foram geradas $M = 10^8$ configurações. O erro é da ordem de 0.1% para abaixo da transição e 1% acima da transição.

Foram usadas condições periódicas de contorno. O calor específico:

$$C_V = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{(k_B T)^2} \quad (2.17)$$

no qual E é a energia de uma dada configuração e revela a transição de segunda ordem em $\alpha/k_B T \simeq 1,76$ conforme pode ser visto na figura [2.1]

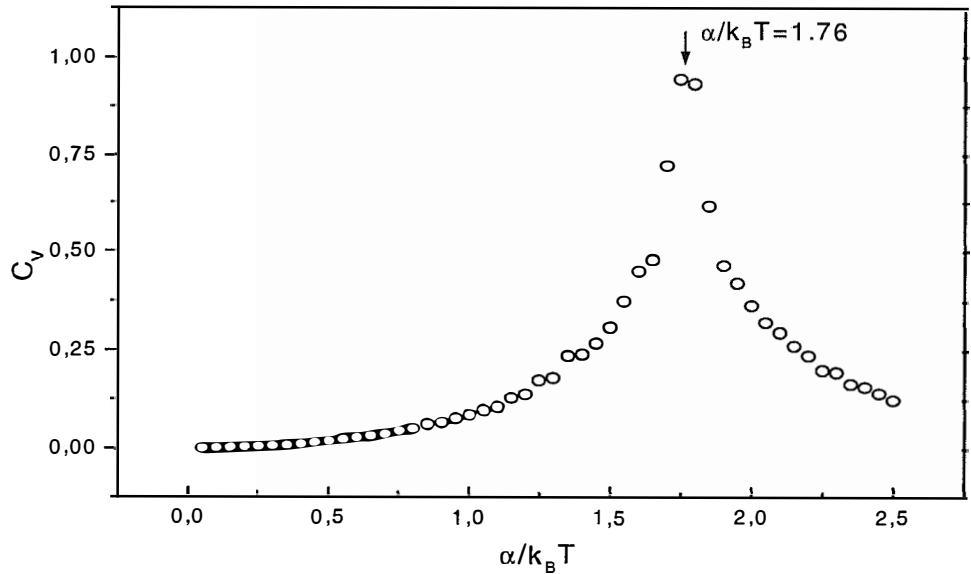


Figura 2.1: Calor específico para o modelo gás-rede mostrando a transição de fase de segunda ordem (transição λ).

Veremos no capítulo 6 que utilizando o método Monte Carlo Dinâmico (MCD) podemos estimar o local da transição de fase mesmo antes que o sistema atinja o equilíbrio. As correlações entre os estados gerados deixam de ser obstáculo para o cálculo da grandeza desejada.

2.7 Limitações do método

Uma limitação natural do método Monte Carlo canônico refere-se à impossibilidade de atingir a evolução temporal real. Outro problema apresentado na simulação Monte Carlo é com relação a termalização, não existindo um critério bem estabelecido que especifique o número correto de configurações a serem descartadas para que o sistema atinja o equilíbrio.

A obtenção da distribuição de Boltzmann pressupõe a condição de balanço detalhado, não costumando se verdadeira para os primeiros termos da sequência quando o sistema é inicializado em um estado muito distante do equilíbrio, isto é, em uma configuração com probabilidade extremamente baixa de ocorrer. Desta forma, a parte inicial da sequência de configurações é desprezada, até que um subconjunto local desta sequência possa ser considerado “termalizado”.

A função partição não é diretamente acessível na simulação, implicando que a energia livre $F = -k_B T \ln Z$ ou a entropia $S = (U - F)/T$ também não possam ser calculadas diretamente.

Capítulo 3

Simulação de processos de Poisson

Embora a técnica MC, conhecida genericamente pelo algoritmo de Metropolis, seja empregada principalmente em simulações de propriedades estáticas ou de equilíbrio, ela também pode ser utilizada para estudar fenômenos dinâmicos [12, 13, 22, 23] de sistemas em contato com reservatórios externos. Tal acoplamento induz perturbações randômicas nas variáveis do sistema tal que uma interpretação em termos de “tempos de espera” [23] entre a sequência hierárquica ¹ de estados pode ser contemplada.

Durante a evolução temporal de um sistema de variáveis estocásticas, há transições entre os valores destas variáveis. Através destas transições, a probabilidade de encontrar o sistema em um dado estado muda até que o sistema atinja o estado de equilíbrio estacionário no qual as transições não podem mais causar mudanças na distribuição de probabilidades.

A equação que governa a evolução da distribuição de probabilidades para processos Markovianos é a equação Mestra (2.4), que pode ser escrita na forma:

¹Podemos definir hierarquia como o conjunto de regras que fornecem a sequência de eventos em um processo. Um *processo hierárquico* é aquele cuja sequência de eventos é ordenada no tempo. A hierarquia é então *determinada pelo conjunto de probabilidades de transição* juntamente com as regras para o tipo de evento que poderá ocorrer em uma transição entre dois estados do sistema.

$$\frac{dP_{(i,t)}}{dt} = \sum_j w_{j \rightarrow i} P_j(t) - \Omega_i(t) P_i(t) \quad (3.1)$$

em que $\Omega_i(t) = \sum_j w_{i \rightarrow j}$.

Agora, vamos considerar que em um tempo particular t o sistema está em um estado microscópico específico i . Do ponto de vista estocástico, há duas questões que gostaríamos de responder, para o processo dinâmico governado pela equação (3.1): primeiro, qual é a probabilidade do sistema permanecer no mesmo estado i até o tempo $t + \tau$, antes que sofra uma transição para outro estado, digamos o estado k ? E segundo, como escolher o próximo estado permitido k ? Para responder estas duas questões, há dois caminhos possíveis a seguir; começaremos pelo mais geral, usando diretamente a equação Mestre [23], e em seguida consideraremos um procedimento alternativo que tem grande potencial para aplicações devido a sua simplicidade [13].

3.1 Tempos de espera

Suponha que no tempo t o sistema está no estado i . A probabilidade condicional $q_i(t + \tau|t)$ que o sistema permanecerá no estado i até o tempo $t + \tau$, dado que ele estava no mesmo estado no tempo t é, da equação (3.1)

$$\frac{\partial q_i(t + \tau|t)}{\partial t} = -\Omega_i(t) q_i(t + \tau|t), \quad (3.2)$$

e com a condição inicial $q_i(t|t) = 1$, formalmente, a solução para $q_i(t + \tau|t)$ pode ser escrita como

$$q_i(t + \tau|t) = \exp \left[- \int_t^{t+\tau} dt' \Omega_i(t') \right]. \quad (3.3)$$

Então, combinando as equações (3.2) e (3.3), encontramos que a distribuição de “tempos de espera”, $\rho_i(t + \tau|t) = -\partial q_i(t + \tau|t) / \partial t$, é

$$\rho_i(t + \tau|t) = \Omega_i(t + \tau) \exp \left[- \int_t^{t+\tau} dt' \Omega_i(t') \right]. \quad (3.4)$$

Particularmente, para Ω_i independente do tempo, a distribuição $\rho_i(t+\tau|t)$ torna-se a distribuição exponencial

$$\rho_i(t + \tau|t) = \Omega_i \exp(-\Omega_i \tau). \quad (3.5)$$

Este método é geral e interessante para investigações teóricas. Para uma aplicação direta, porém, ele demanda uma descrição detalhada de todas as taxas de transição $\{w_{ji}(t)\}$ envolvendo todos estados microscópicos $\{i\}$ para obter $\Omega_i(t)$, e construir um arranjo hierárquico de estados para escolher apropriadamente a sequência temporal de eventos. Esta exigência sugere sua aplicação principalmente a sistemas simples como o modelo de Ising [22, 23] no qual uma descrição detalhada pode ser realizada.

Alternativamente, podemos considerar o problema no nível mesoscópico. Como uma premissa para este procedimento, consideramos que a soma das “influências microscópicas” comanda a sequência de eventos representativos em uma escala de tempo mesoscópica. Então, eventos microscópicos independentes e simultâneos criam uma taxa de transição média w_0 . Com esta perspectiva é possível simular propriedades dinâmicas pelo método MC através de um processo Poisson, se os seguintes três critérios são satisfeitos [13]: (i) as probabilidades de transição entre eventos sucessivos, projetadas para o problema específico, refletem uma hierarquia dinâmica; (ii) o incremento de tempo entre eventos sucessivos seja estabelecido apropriadamente; e (iii) a independência efetiva entre os eventos seja garantida. O primeiro e o terceiro critérios serão considerados na próxima seção, depois que o algoritmo MC seja introduzido; agora nos concentramos no segundo critério.

Ao nível mesoscópico, é possível conceber um processo Markoviano de “sucesso” e “fracasso”, no qual um evento que ocorre no tempo $t_0 + \Delta t$ é efetivamente independente de eventos que ocorreram antes do tempo t_0 . Para este propósito focalizamos o sistema ao nível microscópico; seja o tempo t dividido em n intervalos Δt suficientemente pequenos tal que a probabilidade de ocorrência de mais de um evento microscópico do tipo “sucesso” durante o tempo Δt seja desprezível. Agora, se n_α eventos ocorrem no tempo $t = n\Delta t$, no limite de Δt pequeno e n grande, uma taxa média w de eventos pode ser definida como a razão do número n_α para o número total n de intervalos por unidade de tempo Δt , isto é, $w = n_\alpha/t$. Se no tempo t é suposto que qualquer intervalo de tempo Δt tem a mesma probabilidade $w\Delta t$ de conter um evento, há $C_{n,n_\alpha} = n!/(n - n_\alpha)!n_\alpha!$ maneiras para arranjar n_α eventos no

número total de n intervalos. Então, a probabilidade $p(n_\alpha)$ que n_α eventos possam ocorrer no tempo t é

$$p(n_\alpha, t) = C_{n, n_\alpha} (w\Delta t)^{n_\alpha} (1 - w\Delta t)^{n - n_\alpha}. \quad (3.6)$$

Esta expressão indica que a probabilidade de zero "sucessos" durante o tempo t é $P(n_\alpha = 0) = (1 - w\Delta t)^n$, e para $w\Delta t \rightarrow 0$, ela torna-se $P(0) = \exp(-wt)$. Então, a probabilidade de ocorrer o primeiro sucesso antes do tempo t é $Q = 1 - \exp(-wt)$, e a densidade de probabilidade $f_w = dQ/dt$ de "tempos de espera" entre dois eventos sucessivos será

$$f_w = w \exp(-wt). \quad (3.7)$$

No limite $\Delta t \rightarrow 0$ e $n \rightarrow \infty$, a equação (3.6) torna-se a distribuição de Poisson $p(n_\alpha, t) = (wt)^{n_\alpha} \exp(-wt)/n_\alpha!$. Agora, para uma coleção de η processos independentes temos [[24]]

$$p(n_e, t) = \frac{(w_0 t)^{n_e}}{n_e!} \exp(-w_0 t) \quad (3.8)$$

na qual, $n_e = \sum_{\alpha=1}^{\eta} n_\alpha$ é a soma de todos eventos que ocorreram em cada processo e $w_0 = \sum_{\alpha=1}^{\eta} w_\alpha$ é a taxa total de "sucessos", com w_α sendo a taxa para cada um dos eventos η . Cada evento rotulado agora por n_e ($n_e = 0, 1, 2, \dots$) pode ser considerado governado por uma taxa média w_0 .

No procedimento anterior, o tempo de espera τ_i no estado microscópico i é determinado primeiro, e então o próximo estado é escolhido de acordo com as probabilidades de transição normalizadas $\{T_{ji}(\tau)\} = w_{ji}/\Omega_i$. Para obter isto, os estados $\{i\}$ e as probabilidades de transição $\{T_{ij}(\tau)\}$ tem que ser ordenadas previamente seguindo alguma prescrição hierárquica. Por outro lado, no último procedimento (mesoscópico), primeiro as transições para os novos estados são consideradas através de um critério hierárquico apropriado baseado nas taxa médias, e então um tempo efetivo de espera é determinado. Este método pode ser aplicado a uma grande diversidade de sistemas (não somente a modelos Hamiltonianos), se a expressão cinética apropriada baseada nas taxas médias for fornecida.

3.2 Adsorção-dessorção de Langmuir

A adsorção-dessorção de Langmuir [25] classifica-se como um processo de "chegada" [15], em que as adsorções ocorrem randomicamente, em tempos

não correlacionados e podem ser caracterizadas por uma taxa média w_A . Dessorções que são induzidas por uma série de eventos microscópicos ocorrem a uma taxa média w_D . Não há interação entre os adsorbatos que serão distribuídos em uma rede bidimensional de sítios. De fato este é um problema unidimensional, mas utilizaremos a rede com o intuito de futura generalização. A interação com o substrato é considerada a mesma para todas as partículas do sistema, que estão em contato com o vapor a pressão constante. A expressão cinética mesoscópica apropriada para a concentração θ sobre a superfície é

$$\frac{d\theta}{dt} = w_A(1 - \theta) - w_D\theta. \quad (3.9)$$

A ausência de interações entre moléculas adsorvidas permite que a equação (3.9) seja resolvida facilmente tanto fora como no equilíbrio. Começando com a superfície vazia $\theta(t = 0) = 0$, a solução é

$$\theta(t) = \frac{w_A}{w_A + w_D} (1 - \exp e^{-(w_A + w_D)t}), \quad (3.10)$$

que no limite $t \rightarrow \infty$, fornece

$$\theta_{eq} = \frac{w_A}{w_A + w_D}, \quad (3.11)$$

na qual θ_{eq} é o valor de equilíbrio da concentração. A equação (3.11) reflete o balanço detalhado deste modelo.

A figura [3.1] mostra o algoritmo proposto por Fichthorn *et al* [13] para simular o processo de Poisson de adsorção-dessorção em uma rede bidimensional contendo N sítios. Um teste neste algoritmo começa quando um dos N -sítios é selecionado randomicamente. Se o sítio está vago, a adsorção ocorre com probabilidade T_A ; e a dessorção ocorre com probabilidade T_D se o sítio está ocupado. O tempo é atualizado por um incremento Δt_i para cada sucesso na tentativa i e também contaremos o número total de tentativas T_e . Através de uma definição apropriada de T_A e T_D , da escolha correta dos incrementos de tempo Δt_i , e da seleção randômica do processo, o algoritmo Monte Carlo da figura [3.1] simula um processo de Poisson e dá a solução correta para a equação (3.9) para um conjunto de N -sítios. O primeiro critério que deve ser satisfeito para simularmos efetivamente o processo de Poisson é que as probabilidades de transição T_A , T_D devem ser

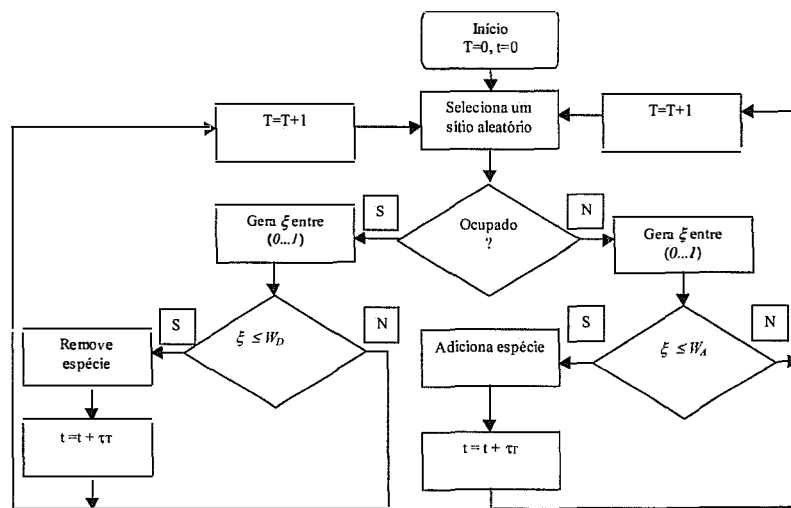


Figura 3.1: Fluxograma para a simulação o processo de Poisson de adsorção-dessorção. T é o número de tentativas, t representa o tempo real ξ é um número aleatório entre 0 e 1 w_i é a probabilidade de transição para o evento i e τ_T é o incremento de tempo real.

escolhidas tal que a simulação Monte Carlo obedeça o balanço detalhado, como especificado pela eq. (3.11). Quando o estado estacionário é atingido na simulação, a taxa média de adsorção é igual a taxa média de dessorção e o balanço detalhado é satisfeito. Na tradicional aplicação do Monte Carlo em equilíbrio, as probabilidades de transição são frequentemente formuladas sem considerar o comportamento do sistema fora do equilíbrio. Para simular fenômenos dinâmicos, um critério adicional é necessário tal que as probabilidades de transição reflitam taxas de transições únicas (e então simule dinâmica). Genericamente uma hierarquia de probabilidades de transição é criada quando estas probabilidades são definidas, para uma transição i , como [13]

$$T_i = w_i / \varsigma_{max} \quad (3.12)$$

na qual w_i é a taxa na qual o evento i ocorre e $\varsigma_{max} \geq \sup\{w_i\}$. Uma hierarquia dinâmica não é encontrada, por exemplo no algoritmo de Metrópolis tradicional, porque todas transições do sistema para estados de energia menor ou igual tem probabilidade 1. No algoritmo da figura [3.1], as probabilidades de transição devem ser construídas através da normalização das taxas de adsorção e dessorção pela maior das duas. Se, digamos, $w_A > w_D$, então a probabilidade de transição será definida por

$$T_A = 1 \text{ e } T_D = \frac{w_D}{w_A}. \quad (3.13)$$

Com estas definições, a frequência relativa de eventos de adsorção e dessorção na simulação Monte Carlo, satisfará o critério do balanço detalhado. É imposto que a frequência relativa com que vários eventos são realizados obedeça o critério do balanço detalhado também para a situação fora de equilíbrio.

Um segundo critério que deve ser satisfeito para simular dinâmica é a correspondência do tempo Monte Carlo e o tempo real. Para este fim, notemos que o processo de Poisson é, na realidade uma versão contínua (no tempo) do processo que é simulado pelo algoritmo Monte Carlo quando o tempo é medido em termos de tentativas. Representando os intervalos de tempo discretos com valores “contínuos” apropriados, o algoritmo Monte Carlo produz uma cadeia de eventos que constitui um processo de Poisson. Os intervalos de tempo contínuos são construídos através da equação (3.7). A cada tentativa i em que um evento de adsorção ou dessorção é realizado, o tempo será incrementado de Δt_i selecionado de uma distribuição de Poisson com parâmetro

$w_i = (N - M_i)w_A + M_iw_D$ em que, M_i é o número de sítios ocupados no tentativa i ($\theta_i = M_i/N$). Para gerar a distribuição de Poisson é utilizado o mapeamento:

$$\Delta t_i = -\frac{\ln \xi}{w_i}, \quad (3.14)$$

na qual ξ são números randômicos uniformemente distribuídos. Em geral a independência das tentativas sucessivas é garantida pela utilização de um sistema que seja suficientemente grande para que as correlações de um único sítio e entre sítios sejam insignificantes, e pela seleção randômica dos sítios sobre os quais os eventos possam ocorrer. Contudo, esta independência não é sempre possível de se obter, particularmente se o sistema é denso. Em tais sistemas nem sempre é possível definir computacionalmente uma rede suficientemente grande para representar o sistema e simular eventos independentes. As vezes conseguimos simular sistemas com certa correlação entre eventos, considerando o processo de Poisson de apenas um dos eventos. Por exemplo, no processo de adsorção-dessorção em único sítio, adsorções e dessorções sucessivas são correlacionadas. Entretanto um processo de Poisson pode ser construído consistindo de um dos eventos, por exemplo, adsorção ocorrendo com taxa $w_A(1 - \theta)$. O critério de seleção randômica de sítios da rede para realização dos eventos, evita correlações entre sítios específicos, e é realizada pela utilização de um gerador de números randômicos adequado.

Com isto , através do exemplo de Langmuir, delineamos os elementos básicos para o método Monte Carlo simular fenômenos de dinâmica. Utilizamos esta metodologia para simular a adsorção-dessorção com o algoritmo dado na figura [3.1].

A simulação foi executada sobre uma rede quadrada de 200×200 com $w_A = 1.0(\text{sítios})^{-1}$ e $w_D = 2.0(\text{sítios})^{-1}$. A probabilidade de transição definida pela normalização das taxas pela taxa de dessorção ($T_A = 1/2, T_D = 1.0$). A figura [3.2] mostra uma solução da concentração θ como função do tempo t para uma superfície inicialmente vazia. A linha contínua representa a solução exata (analítica), enquanto que a simulação Monte Carlo é simbolizada por círculos. Há boa concordância entre as duas soluções, tanto no equilíbrio como fora deste, o erro é da ordem de 1%.

Cada realização do experimento fornece uma curva. A figura [3.3] mostra quatro realizações do experimento, fornecendo a resolução da equação (3.9) paradiferentes “sementes” do número aleatório.

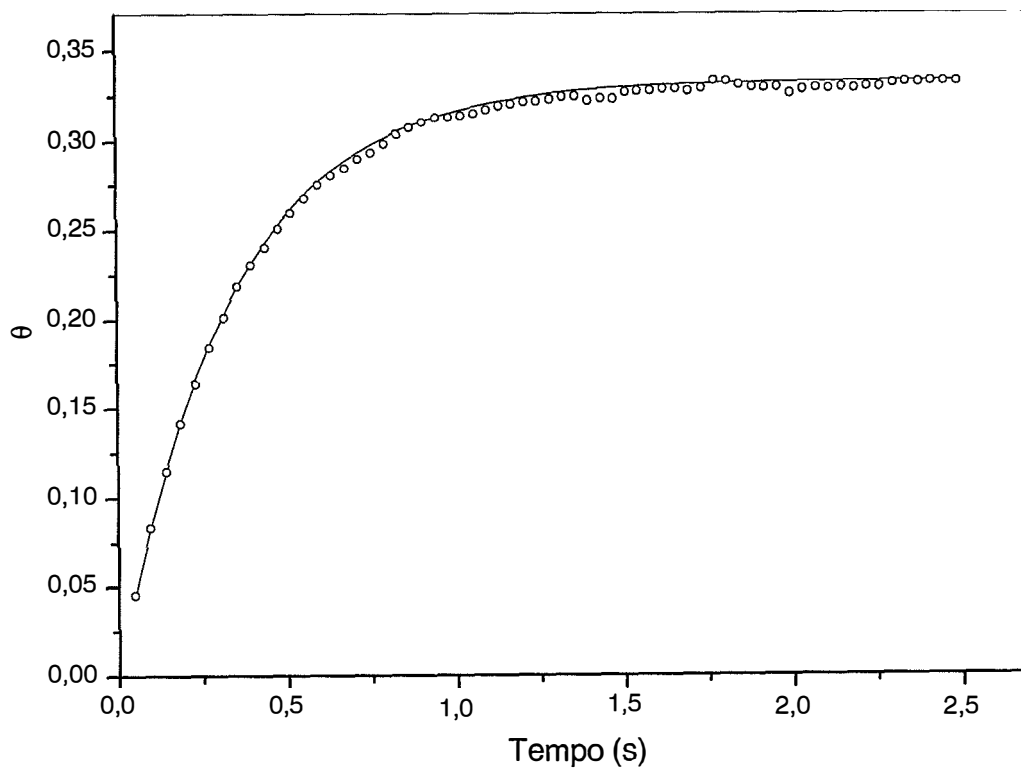


Figura 3.2: Solução da equação (3.9) para as condições iniciais de superfície vazia, $\theta(t = 0) = 0$, obtida pela forma analítica (linha) e pela simulação Monte Carlo (círculos) com os parâmetros $w_A = 1.0/\text{sítio}/\text{segundo}$ e $w_D = 2.0/\text{sítio}/\text{segundo}$.

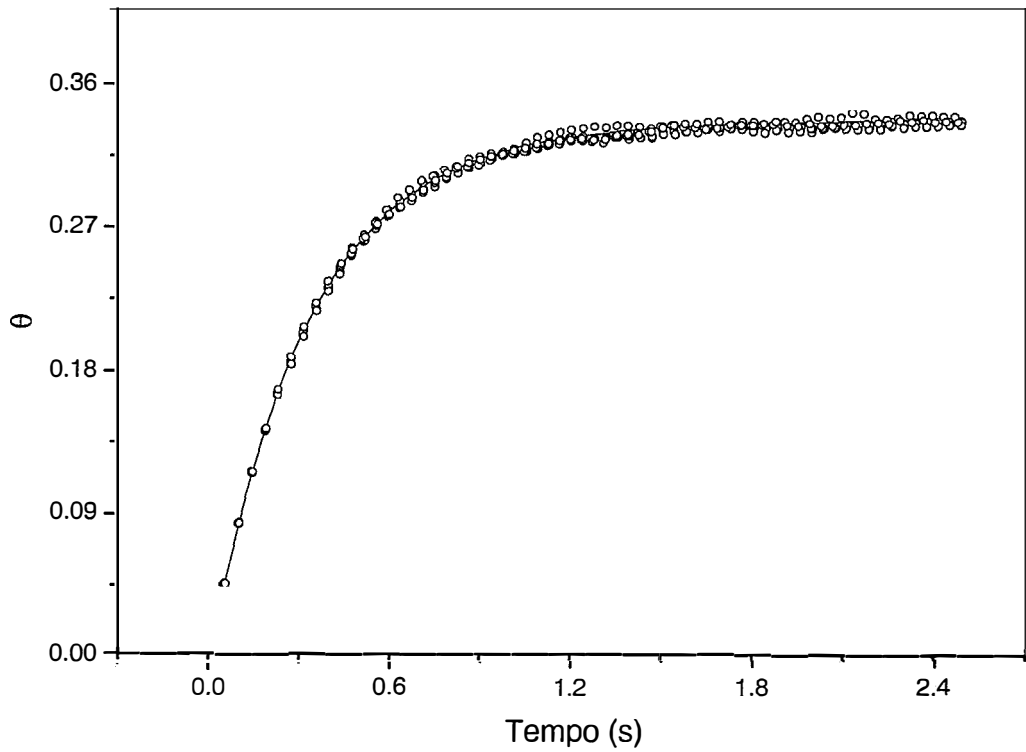


Figura 3.3: Quatro soluções (círculos) da equação 3.9 para sementes diferentes. A linha representa a solução exata.

Devido a linearidade entre passo Monte Carlo e tempo, figura [3.4], podemos executar um processo de médias [26] para o qual tomamos valores de θ em passos pré-determinados para as realizações independentes. Depois de um número M de experimentos calculamos a média aritmética dos valores de θ naqueles passos escolhidos.

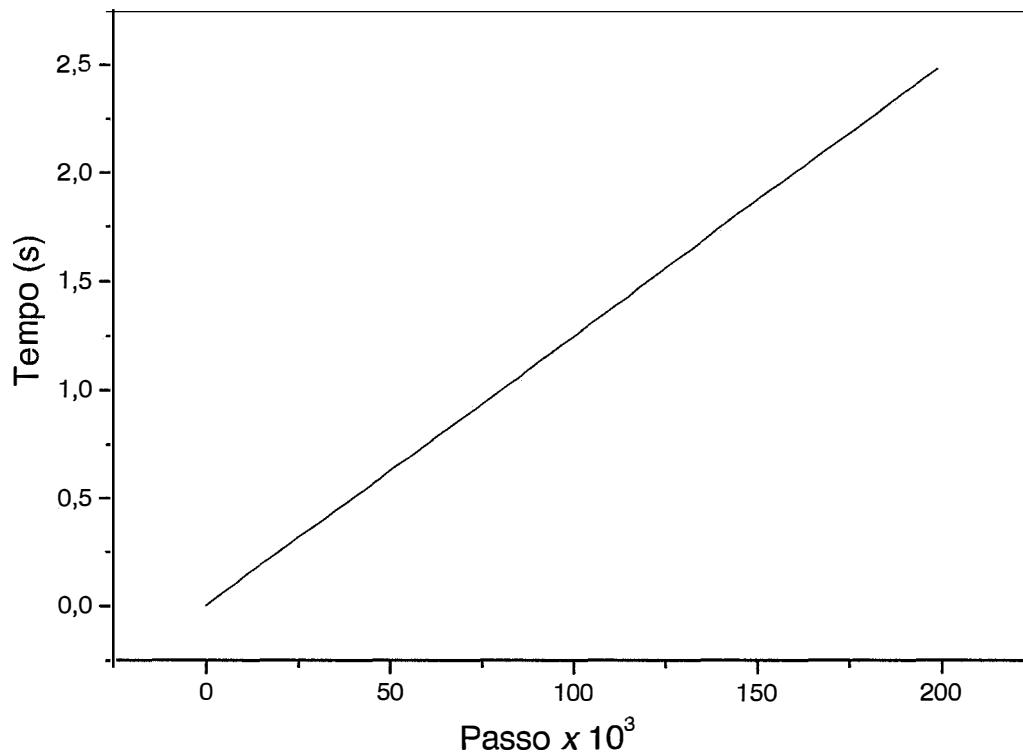


Figura 3.4: Linearidade entre tempo real (obtido de uma distribuição de Poisson) e passo Monte Carlo. Cada passo Monte Carlo é caracterizado por um único sorteio.

A figura [3.5] mostra a solução Monte Carlo (círculos), obtida pela média de 20 realizações independentes, comparada a solução analítica, indicada pela linha, os parâmetros foram os mesmos da figura [3.2]. Pode-se notar a

suavização da curva obtida pela média. O erro em relação a solução analítica é da ordem de 0.1% em todas as etapas da simulação.

Na figura [3.6], mostramos a distribuição de Poisson dos intervalos de tempo utilizados na simulação Monte Carlo.

A técnica formulada por Fichthorn é limitada, naturalmente, a processos Poissonianos. Sistemas cuja interação entre os elementos induzam dependência entre os eventos ficam fora deste tipo de processo. É interessante notar que o método Monte Carlo, gera um processo markoviano no qual os processos poissonianos são um caso particular. Portanto, podemos dar uma interpretação dinâmica para o método MC, bastando para isto, desenvolvermos um maneira consistente de calcular os intervalos de tempo entre os eventos. Propomos, dentro de certos limites, uma solução para este problema no capítulo 5.

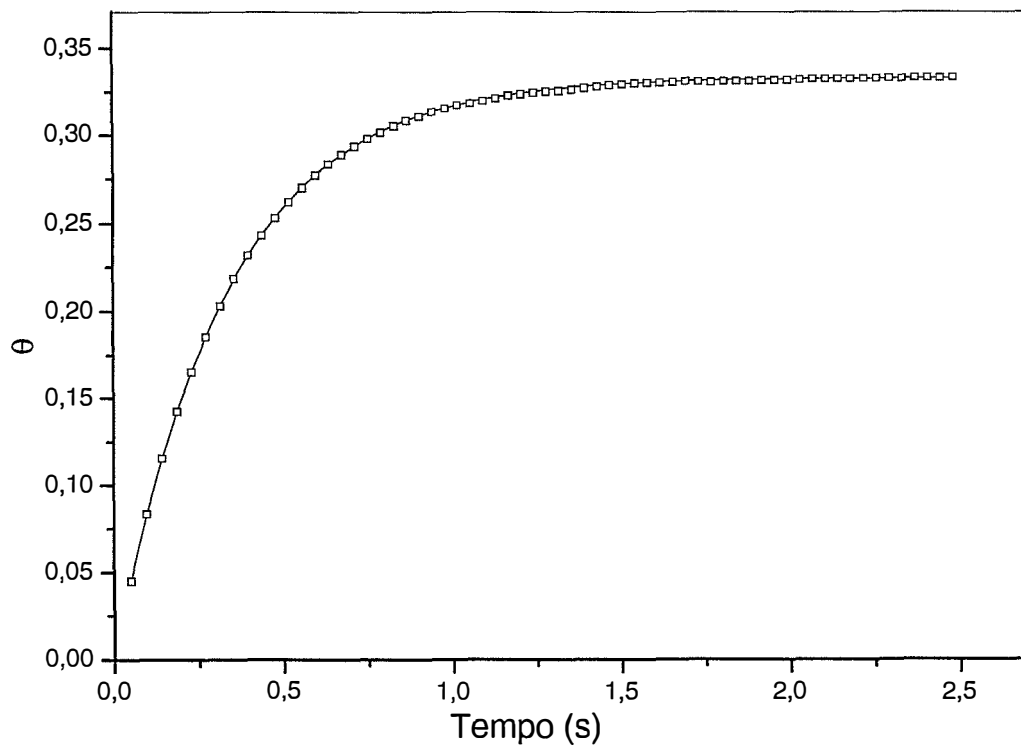


Figura 3.5: A linha representa a solução analítica da equação (3.9). Os círculos representam a solução média para 20 trajetórias independentes obtidas por simulação Monte Carlo. Os parâmetros são os mesmos da figura (3.2).

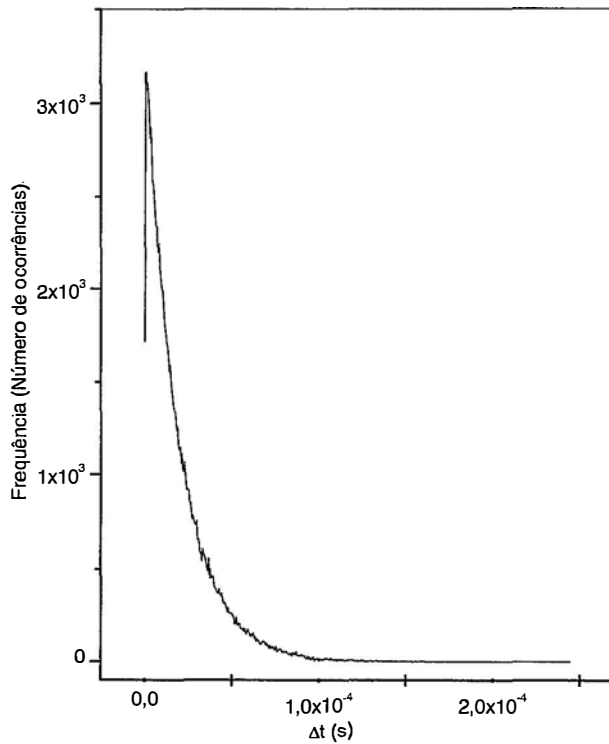


Figura 3.6: Distribuição dos intervalos de tempo, utilizados nas simulações Monte Carlo, mostrando a forma Poissoniana esperada.

Capítulo 4

modelo Epidêmico *SIRS*

A analogia entre fenômenos ecológicos e alguns problemas bem conhecidos, tal como a cinética química [27], crescimento fractal [28], e percolação [29] tem despertado a atenção de muitos químicos e físicos. O interesse e o fácil acesso a computadores e métodos numéricos de grande generalidade tem propiciado, através de modelos matemáticos, um intercâmbio efetivo entre áreas científicas tão diferentes.

Do ponto de vista específico da epidemiologia, os modelos são úteis na prevenção e controle [30]. Os sistemas epidêmicos tem sido formulados matematicamente através de modelos contínuos e deterministas, levando a vantagem imediata das muitas técnicas e métodos numéricos já desenvolvidos para sistemas de equações diferenciais. A estrutura estocástica, embora mais realista em princípio, é mais complexa para análise por causa do nível de detalhe exigido [31]. Também o método de simulação Monte Carlo [21, 32] tem sido empregado extensivamente para resolver uma expressiva diversidade de modelos epidêmicos e sistemas relacionados.

Neste capítulo o método Monte Carlo Dinâmico para processos poissonianos (técnica de Fichthorn) é aplicado ao modelo *SIRS* (Suscetíveis-Infetados-Removidos-Suscetíveis). Este modelo é uma generalização do modelo *SIR* clássico [33] que por sua vez é um modelo determinista com interação de campo médio baseado no princípio químico de “ação das massas” [34, 35, 36]. O modelo *SIRS* primeiramente é descrito em um formalismo contínuo-determinista através de um conjunto de equações diferenciais e de taxas de transição entre as classes. Então, sua versão estocástica é resolvida por simulação MCD, usando para este propósito uma rede quadrada de 200×200 sítios; os resultados são comparados a soluções obtidas pelo método

Runge-Kutta. Finalmente, uma generalização extra incluindo coordenadas espaciais é adicionada ao modelo e a evolução temporal do sistema também é determinada por simulação MCD.

Na próxima seção introduzimos o modelo usado neste capítulo e suas soluções estacionárias são também apresentadas.

4.1 modelo *SIRS*

O modelo contínuo-determinista é considerado aqui, através do seguinte conjunto de equações diferenciais:

$$\frac{dS}{dt} = \frac{-b}{N^\mu} S^\mu I + mR, \quad (4.1)$$

$$\frac{dI}{dt} = +\frac{b}{N^\mu} S^\mu I - aI, \quad (4.2)$$

$$\frac{dR}{dt} = +aI - mR, \quad (4.3)$$

em que S , I , e R são, respectivamente, o número de indivíduos nas classes Suscetíveis, Infectados e Removidos; b , a , μ e m são parâmetros positivos $\mathcal{O}(1)$, e $S(t) + I(t) + R(t) = N$, com $dN/dt = 0$. Este modelo é uma generalização do modelo clássico Suscetíveis-Infectados-Removidos SIR [33, 34], que pode ser facilmente recomposto das equações (4.1) - (4.3) fazendo $\mu = 1$ e $m = 0$. O parâmetro μ é chamado potência μ , o que significa que grandes valores de μ implicam em uma grande segurança em ter mais do que alguns suscetíveis [37]. No caso que o parâmetro de renovação $m \neq 0$ há um influxo contínuo de suscetíveis no sistema que pode produzir oscilações no número de elementos da classe populacional $\mathcal{C} = \{S, I, R\}$. Então epidemias recorrentes que desvanecem podem ocorrer antes que o estado estacionário (endêmico) seja atingido [38].

4.2 Soluções estacionárias

As soluções estacionárias são determinadas pelas condições $dS/dt = 0$, $dI/dt = 0$, $dR/dt = 0$; as soluções não triviais ocorrem os valores finitos de S_σ , I_σ e R_σ ,

$$S_\sigma = (a/b)^{1/\mu} N, \quad (4.4)$$

$$I_\sigma = \frac{1 - (a/b)^{1/\mu}}{1 + a/m} N, \quad (4.5)$$

$$R_\sigma = \frac{1 - (a/b)^{1/\mu}}{1 + m/a} N. \quad (4.6)$$

Dependendo da taxa de remoção a , do parâmetros de infecção b e de renovação m , e da potencia μ , a solução em torno do estado estacionário pode ser estável ou não (note que S_σ não depende de m). Os valores numéricos dos parâmetros do modelo foram escolhidos de tal maneira que obtemos soluções estáveis em torno do estado estacionário, e para representar uma epidemia que desvanece.

4.3 Soluções numéricas

Agora aplicaremos a simulação MC dinâmica baseada no processo Poisson ao modelo $SIRS$. Para este fim, vamos considerar uma rede quadrada de $N = M \times M$ sítios, $M = 200$. Inicialmente, são distribuídos aleatoriamente I_0 infectados sobre a rede, e os sítios restantes são ocupados então por $S_0 = N - I_0$ suscetíveis; portanto $R_0 = 0$. A simulação se desenvolve sistematicamente escolhendo-se aleatoriamente sítios da rede em um tempo, e dependendo do seu “status” (susceptível, infectado ou removido), são feitas tentativas de transição para outros “status” por meio de um conjunto de probabilidades de transição, obedecendo a rota cíclica $S \rightarrow I \rightarrow R \rightarrow S$, e a população da classe $\mathcal{C} = \{S, I, R\}$ é atualizada. Se a transição tem sucesso, o sistema é considerado estar em um novo estado e é atribuído um atraso de tempo para esta transição particular. Este processo é repetido até que o estado estacionário seja estabelecido.

Antes de entrarmos em mais detalhes a respeito do procedimento Monte Carlo para este problema, discutiremos sobre a versão estocástica para o modelo representado pelas equações (4.1) - (4.3). Destas equações podemos

identificar três tipos de probabilidades de transição: $w_S = w(S \rightarrow I)$, $w_I = w(I \rightarrow R)$, e $w_R = w(R \rightarrow S)$, respectivamente, a probabilidade de transição por unidade de tempo para um suscetível se tornar infectado, um infectado se tornar removido, e um removido retornar ao sistema como suscetível. Podemos identificar as probabilidades, que fornecem as taxas, por inspeção das equações (4.1) - (4.3). Elas são

$$w_S = \frac{b}{N^\mu} S^{\mu-1} I, \quad (4.7)$$

$$w_I = a, \quad (4.8)$$

$$w_R = m. \quad (4.9)$$

A consistência destas probabilidades pode ser testada quando o sistema atinge o equilíbrio pois conhecemos os resultados exatos para o estado estacionário. Durante a simulação, para um teste particular, a probabilidade por unidade de tempo de, digamos, uma infecção ($S \rightarrow I$) é w_S vezes a probabilidade Q_S de encontrar um sítio no "status" suscetível, isto é: $w_S \times Q_S$, na qual $Q_S = S/N$. No intervalo de tempo Δt que segue, correspondendo a N testes, o número médio de suscetíveis é $\Delta S_- = w_S \times Q_S \times N \times \Delta t$. Então, o decréscimo no número de suscetíveis ocorre com taxa $\Delta S_- / \Delta t = -bS^\mu I / N^\mu$, em concordância com a equação (4.1). O mesmo raciocínio pode ser aplicado as outras taxas fornecendo resultados equivalentes com respeito as equações (4.1) - (4.3). Note que a probabilidade total para que um único teste tenha sucesso, é

$$P = w_S \times Q_S + w_I \times Q_I + w_R \times Q_R, \quad (4.10)$$

em que $Q_I = I/N$ e $Q_R = R/N$.

Quando o sistema atinge o estado estacionário, as taxas médias de transições de $S_\sigma \rightarrow I_\sigma$, $I_\sigma \rightarrow R_\sigma$ e $R_\sigma \rightarrow S_\sigma$ são iguais, isto é, $w_{S_\sigma} \times Q_{S_\sigma} = w_{I_\sigma} \times Q_{I_\sigma} = w_{R_\sigma} \times Q_{R_\sigma}$, pois os compartimentos das classes são arranjados em séries formando um único ciclo $S - I - R - S$. Estas igualdades dão as seguintes duas relações independentes

$$bS_\sigma^\mu I_\sigma / N_\sigma^{\mu+1} = aI_\sigma / N_\sigma, \quad (4.11)$$

$$S_\sigma = (a/b)^{1/\mu} N, \quad (4.4)$$

$$I_\sigma = \frac{1 - (a/b)^{1/\mu}}{1 + a/m} N, \quad (4.5)$$

$$R_\sigma = \frac{1 - (a/b)^{1/\mu}}{1 + m/a} N. \quad (4.6)$$

Dependendo da taxa de remoção a , do parâmetros de infecção b e de renovação m , e da potencia μ , a solução em torno do estado estacionário pode ser estável ou não (note que S_σ não depende de m). Os valores numéricos dos parâmetros do modelo foram escolhidos de tal maneira que obtemos soluções estáveis em torno do estado estacionário, e para representar uma epidemia que desvanece.

4.3 Soluções numéricas

Agora aplicaremos a simulação MC dinâmica baseada no processo Poisson ao modelo *SIRS*. Para este fim, vamos considerar uma rede quadrada de $N = M \times M$ sítios, $M = 200$. Inicialmente, são distribuídos aleatoriamente I_0 infectados sobre a rede, e os sítios restantes são ocupados então por $S_0 = N - I_0$ suscetíveis; portanto $R_0 = 0$. A simulação se desenvolve sistematicamente escolhendo-se aleatoriamente sítios da rede em um tempo, e dependendo do seu “status” (suscetível, infectado ou removido), são feitas tentativas de transição para outros “status” por meio de um conjunto de probabilidades de transição, obedecendo a rota cíclica $S \rightarrow I \rightarrow R \rightarrow S$, e a população da classe $\mathcal{C} = \{S, I, R\}$ é atualizada. Se a transição tem sucesso, o sistema é considerado estar em um novo estado e é atribuído um atraso de tempo para esta transição particular. Este processo é repetido até que o estado estacionário seja estabelecido.

Antes de entrarmos em mais detalhes a respeito do procedimento Monte Carlo para este problema, discutiremos sobre a versão estocástica para o modelo representado pelas equações (4.1) - (4.3). Destas equações podemos

identificar três tipos de probabilidades de transição: $w_S = w(S \rightarrow I)$, $w_I = w(I \rightarrow R)$, e $w_R = w(R \rightarrow S)$, respectivamente, a probabilidade de transição por unidade de tempo para um suscetível se tornar infectado, um infectado se tornar removido, e um removido retornar ao sistema como suscetível. Podemos identificar as probabilidades, que fornecem as taxas, por inspeção das equações (4.1) - (4.3). Elas são

$$w_S = \frac{b}{N^\mu} S^{\mu-1} I, \quad (4.7)$$

$$w_I = a, \quad (4.8)$$

$$w_R = m. \quad (4.9)$$

A consistência destas probabilidades pode ser testada quando o sistema atinge o equilíbrio pois conhecemos os resultados exatos para o estado estacionário. Durante a simulação, para um teste particular, a probabilidade por unidade de tempo de, digamos, uma infecção ($S \rightarrow I$) é w_S vezes a probabilidade Q_S de encontrar um sítio no “status” suscetível, isto é: $w_S \times Q_S$, na qual $Q_S = S/N$. No intervalo de tempo Δt que segue, correspondendo a N testes, o número médio de suscetíveis é $\Delta S_- = w_S \times Q_S \times N \times \Delta t$. Então, o decréscimo no número de suscetíveis ocorre com taxa $\Delta S_- / \Delta t = -b S^\mu I / N^\mu$, em concordância com a equação (4.1). O mesmo raciocínio pode ser aplicado as outras taxas fornecendo resultados equivalentes com respeito as equações (4.1) - (4.3). Note que a probabilidade total para que um único teste tenha sucesso, é

$$P = w_S \times Q_S + w_I \times Q_I + w_R \times Q_R, \quad (4.10)$$

em que $Q_I = I/N$ e $Q_R = R/N$.

Quando o sistema atinge o estado estacionário, as taxas médias de transições de $S_\sigma \rightarrow I_\sigma$, $I_\sigma \rightarrow R_\sigma$ e $R_\sigma \rightarrow S_\sigma$ são iguais, isto é, $w_{S_\sigma} \times Q_{S_\sigma} = w_{I_\sigma} \times Q_{I_\sigma} = w_{R_\sigma} \times Q_{R_\sigma}$, pois os compartimentos das classes são arranjados em séries formando um único ciclo $S - I - R - S$. Estas igualdades dão as seguintes duas relações independentes

$$b S_\sigma^\mu I_\sigma / N_\sigma^{\mu+1} = a I_\sigma / N_\sigma, \quad (4.11)$$

$$aI_\sigma/N_\sigma = mR_\sigma/N_\sigma \quad (4.12)$$

que, com as condições $S_\sigma + I_\sigma + R_\sigma = N$, reproduz a solução do estado estacionário como descrita pelas equações (4.4) - (4.6). Este resultado indica uma transformação consistente do sistema contínuo-determinista, descrito pelas equações (4.1) - (4.3), para o modelo estocástico representado pelas equações (4.7) - (4.9).

Retornamos agora ao critério de independência dos eventos, como discutido no capítulo anterior. Para modelos formulados originalmente no procedimento contínuo-determinista, como o que estamos tratando aqui, a cinética é governada por taxas médias. Então cada evento, consistindo de uma transição entre dois "status" ($S \rightarrow I$, ou $I \rightarrow R$ ou $R \rightarrow S$) em um sítio particular da rede escolhido randomicamente, é substancialmente independente do próximo evento no curso da simulação. A taxa rotulada por w_0 representa uma média de muitos eventos microscópicos em um determinado instante. Então a independência de eventos consecutivos é assegurada, preenchendo o terceiro critério como requerido no capítulo precedente.

Embora as probabilidades de transição satisfazendo a solução do estado estacionário não sejam únicas [11], quando somente propriedades de equilíbrio são requeridas, a prescrição dada acima é o bastante para realizar a simulação Monte Carlo do problema em mãos. Porém, para refletir apropriadamente a sequência hierárquica de estados da evolução longe do equilíbrio, como requerido pelo segundo critério no capítulo anterior, as probabilidades de transição usadas para cada evento devem levar em conta os valores relativos para as taxas de transição. Isto pode ser obtido colocando para um evento particular α ($S \rightarrow I$, $I \rightarrow R$, ou $R \rightarrow S$, em nosso caso) a probabilidade de transição T_α como segue [13]:

$$T_\alpha = w_\alpha / \zeta_{\max}, \quad (4.13)$$

na qual $w_\alpha \in \mathcal{P} = \{w_S, w_I, w_R\}$ é a probabilidade de transição para o evento α e $\zeta_{\max} = \sup\{\mathcal{P}\}$, isto é, a maior probabilidade em \mathcal{P} . Assim, cada teste particular será pesado de acordo com o balanço das taxas, produzindo uma sequência hierárquica de eventos. Operacionalmente, T_α é comparado com um número randomico $0 \leq \xi_1 \leq 1$, tomado de uma distribuição uniforme. Se $\xi_1 > p_\alpha$ o novo estado é rejeitado; de outra forma o novo estado é aceito

e um incremento de tempo randomico τ_α é selecionado da densidade de probabilidade exponencial

$$f_w = w_0 \exp(-w_0 t), \quad (4.14)$$

na qual $w_0 = W_S \times S + W_I \times I + W_R \times R$ é a taxa total de sucessos. O incremento de tempo τ_α pode ser facilmente calculado da relação $\tau_\alpha = -\frac{1}{w_0} \ln(\xi_2)$, em que ξ_2 é também um número aleatório entre 0 e 1, tomado de um distribuição randomica uniforme.

Na figura [4.1], as partes *a*, *b*, e *c* mostram a evolução temporal de $S(t)$, $I(t)$, e $R(t)$. As linhas contínuas representam resultados numéricos (Runge-Kutta de 4ª ordem) para o conjunto de equações diferenciais (4.1) - (4.3) que serão usados para a checagem dos cálculos MC, e os círculos abertos são as correspondentes simulações MC dinâmico. As condições iniciais são $I_0 = 10$, e $S_0 = N - I_0$; os parâmetros do modelo usados foram $a = 0.8$, $b = 0.2$, $m = 0.01$ e $\mu = 2$. A solução determinista (Runge-Kutta) foi checada usando a solução exata do estado estacionário, no tempo final ($t \sim 700$ dias); o erro foi estimado como sendo menos do que 0.1%. A parte *d* da figura [4.1] mostra a relação paramétrica entre $I(t)$ e $S(t)$. Os resultados mostrados nesta figura correspondem a um total de 20 trajetórias independentes, que foram o bastante para produzir curvas suaves e ilustrar a concordância das soluções.

Na figura [4.2] é ilustrada outra aplicação do MC dinâmico. É mostrada a solução paramétrica $I \times S$ para $\mu = 1.1$ e $\mu = 2.5$, descrevendo os efeitos da potência μ ; os valores para a , b , e m , são os mesmos que os usados na figura [4.1].

4.4 modelo SIRS com interações locais

Seguindo, apresentamos os resultados obtidos para um modelo que inclui elementos espaciais; neste caso o método Runge-Kutta não pode ser aplicado mais. Este representa uma generalização adicional do modelo que estamos considerando aqui, obtido, reescrevendo a equação (4.7) de forma que ela tenha um termo global e um local [39]; o elemento global é justamente o prévio w_S . Então ela torna-se

$$w_S = \Gamma \frac{b}{N^\mu} S^{\mu-1} I + \Lambda [1 - (1 - p_0)^n], \quad (4.15)$$

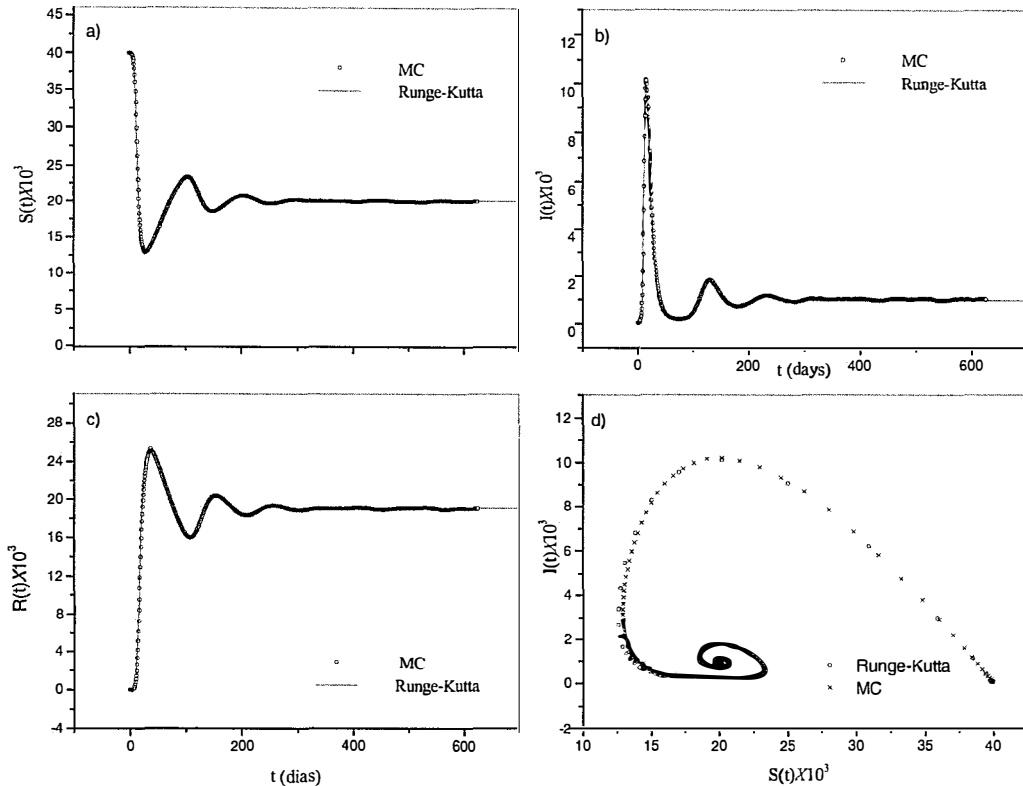


Figura 4.1: modelo SIRS; curvas epidêmicas. As partes *a*, *b* e *c* mostram, respectivamente, como o número de suscetíveis S , infectados I e recuperados R evoluem com o tempo t . Os valores numéricos para os parâmetros são $a = 0.2$, $b = 0.8$, $m = 0.01$ e $\mu = 2$. Há uma boa concordância entre os resultados obtidos por Monte Carlo (círculos) e as soluções fornecidas pelo método numérico Runge-Kutta. A parte *d* mostra a rota de oscilação para o estado estacionário (endêmico).

na qual Γ e Λ são respectivamente, o termo global (campo médio) e o local (primeiros vizinhos); a relação $\Gamma + \Lambda = 1$ é satisfeita. O parâmetro p_0 é a probabilidade por unidade de tempo para que um suscetível se torne infectado devido a um infectado vizinho e $\Gamma = 0$. Uma vez que $(1 - p_0)$ é a probabilidade por unidade de tempo para um suscetível *não* ser infectado se ele tem n vizinhos infectados, então $1 - (1 - p_0)^n$ é a probabilidade por unidade de tempo para um suscetível ser infectado se ele tem n vizinhos infectados. A variável n é um inteiro de $n = 0$ até 8, já que os primeiros e segundos vizinhos são considerados indistintamente para cada suscetível. Para valores de p_0 pequenos o bastante e $\Lambda < 1$ podemos considerar os efeitos topológicos como uma pequena perturbação sobre w_S , e também os tres critérios enunciados na capítulo prévio são supostos como satisfeitos. É mostrado, figura [4.3], a evolução temporal para os infectados; $\Lambda = 0.1, 0.5$ e 0.9 , e $p_0 = 0.05$. Conforme Λ aumenta, a severidade da epidemia é reduzida (redução do máximo de $I(t)$). Isto indica que epidemias que se propagam somente por mecanismos de contato local tem menos eficiência do que aquelas cuja propagação é devida a mecanismos de longo alcance, como quando vizinhos distantes são significativos [29], ou pela existência de vetores epidêmicos [37], aqui representados pelo efeito de campo médio. Também observamos, para valores grandes de Λ , que o pico da curva se desloca para a direita. Este efeito, que aparece claramente no segundo pico de infectados, é devido a uma proteção topologica (efeito de imunidade de massa) [29]: o alargamento do número de removidos, não afeta diretamente a taxa de infecção através do componente global de $w_S(\Delta I_+ \propto S^\mu I)$ mas, por outro lado, interfere essencialmente no mecanismo por contato local ($\Delta I_+ \propto 1 - (1 - p_0)^n$) porque o caráter infectivo dos vizinhos, determinado pelo número n , é alterado pela presença dos removidos. Note que o estado estacionário também é afetado: para grandes Λ o sistema encontra o equilíbrio em $I_{eq} < I_\sigma$, devido também a reduzida eficiência do mecanismo de contatos locais (primeiros vizinhos) com respeito ao mecanismo global (campo médio). A figura [4.4] ilustra graficamente o efeito topológico. Ela representa um instantâneo da evolução do sistema em $t \simeq 39$ ($\Lambda = 0.9$), quando $S = 19.428$ (amarelo), $R = 19.245$ (preto) and $I = 1.327$ (vermelho). Os indivíduos removidos em torno dos infectados diminuem significativamente seu contato com os suscetíveis, reduzindo significativamente a progressão da epidemia por influência local.

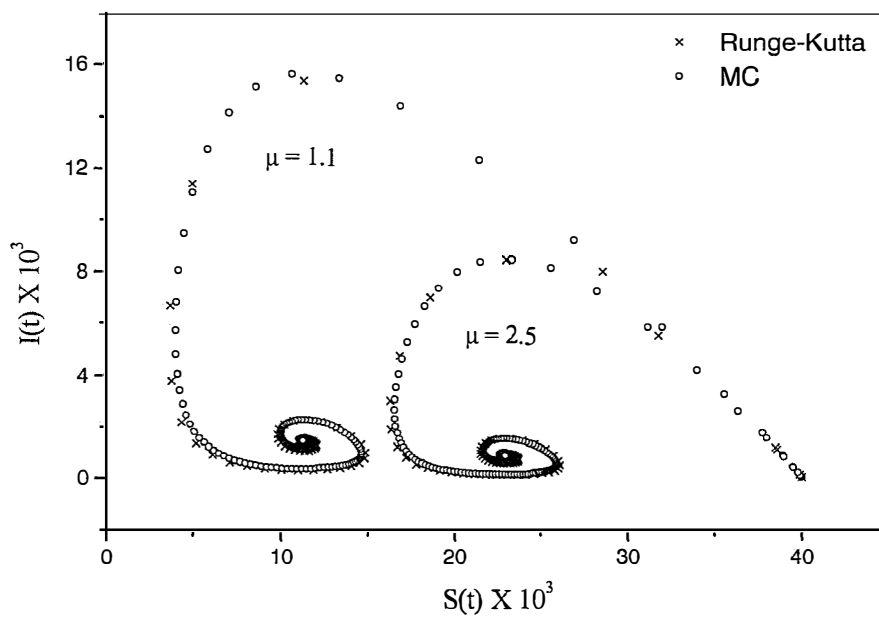


Figura 4.2: Efeito do parâmetro μ , os valores $\mu = 1.1$ e $\mu = 1.5$ foram escolhidos para ilustrar a equivalência entre os métodos Monte Carlo e Runge-Kutta.

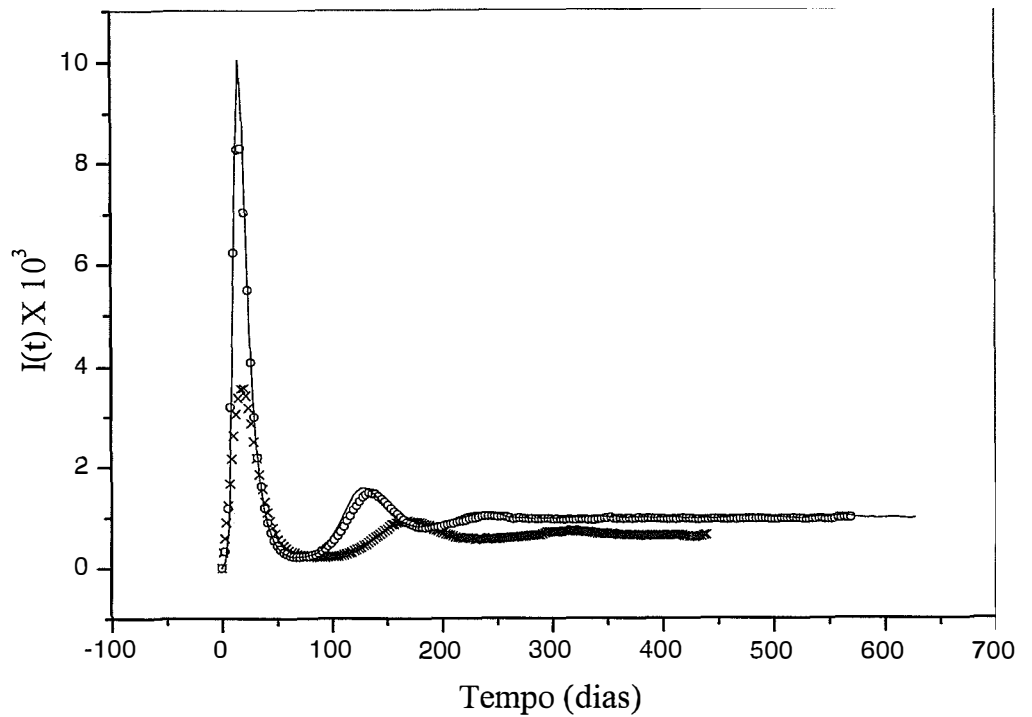


Figura 4.3: Efeito das variáveis espaciais: o parâmetro Λ regula as variáveis locais e globais ($\Lambda + \Gamma = 1$). O alargamento do número de infectados (efeito de imunidade de massa aumenta com Λ) é responsável pelo deslocamento do segundo pico para a direita. O estado estacionário também é afetado.

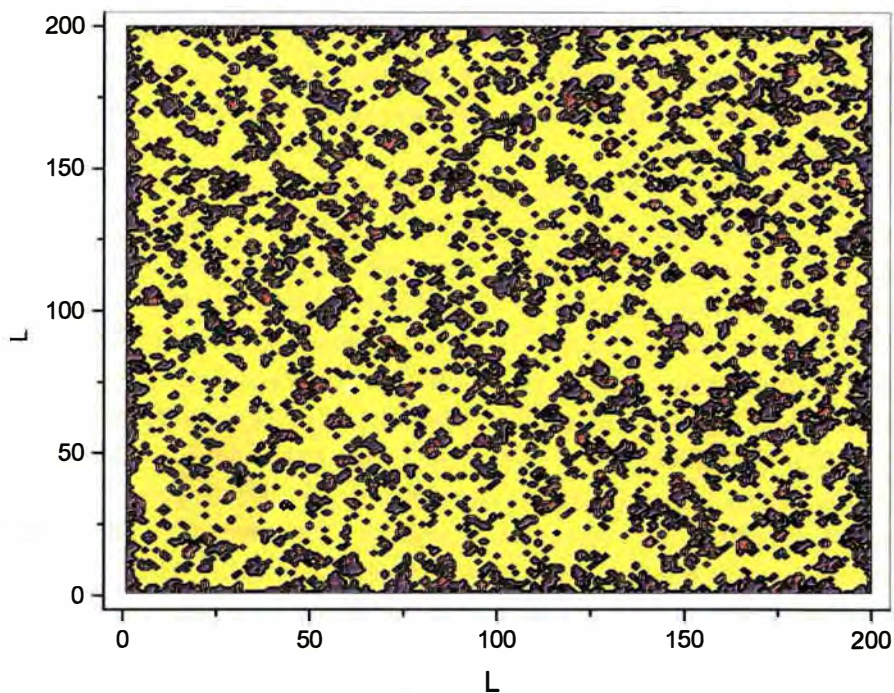


Figura 4.4: Efeito topológico: um instantâneo do sistema ($N = 200$, $\Lambda = 0,9$) em $t \simeq 39$, quando $S = 19,428$ (superfície amarela), $R = 19,245$ (em preto), e $I = 1,327$ (pontos vermelhos). Os indivíduos removidos em torno dos infectados reduzem significativamente o contato com os suscetíveis, reduzindo a progressão da epidemia por influência local.

Neste capítulo aplicamos o método Monte Carlo dinâmico no modelo epidêmico *SIRS*. A cinética do modelo é governada pelas taxas médias de transição entre as classes, que são interpretadas como soma média dos eventos microscópicos internos e de fatores externos que induzem mudanças randômicas nas variáveis do sistema. Então, aspectos dinâmicos do sistema, incluindo suas propriedades longe do equilíbrio, são simuladas pelo método Monte Carlo através de um processo Poisson. Basicamente, este procedimento é obtido por um processo Markoviano de “sucesso” e “fracasso” no qual a hierarquia de eventos é levada em consideração, os incrementos de tempo entre dois eventos consecutivos é estimado por uma variável randômica distribuída exponencialmente, e a efetiva independência entre eventos consecutivos é garantida.

O sistema *SIRS* é suficientemente geral par ilustrar vários aspectos da transformação de um modelo continuo-determinista em um estocástico equivalente. A evolução temporal real, determinada por simulação MC, é comparada com outras soluções numéricas (Runge-Kutta) mostrando boa concordância; a solução exata do estado estacionário do problema original também é usada para checar os resultados numéricos. Finalmente, fatores topológicos são incluídos no modelo e assim o método Runge-Kutta não pode ser aplicado. Os efeitos desta perturbação são explicados em termos da imunidade de massa. Esta proteção topológica não existe para epidemias que podem ser descritas por mecanismos globais (representados aqui pela aproximação de campo médio), mas o alargamento do número de removidos interfere essencialmente no mecanismo por contato local porque o caráter infectivo da vizinhança é alterado severamente pela presença dos removidos. A barreira criada pelos removidos $R(t)$ não afeta diretamente a evolução da epidemia que pode ser descrita por mecanismos globais (representados aqui pela aproximação de campo médio). Contudo, o número $R(t)$ e sua distribuição interfere essencialmente no mecanismo de contato local do sistema, reduzindo sua severidade e endemicidade.

Capítulo 5

Simulação de processos markovianos

As simulações realizadas nos capítulos anteriores se referem a processos poissonianos que são casos particulares de processos markovianos. Esta limitação pode ser abolida pois o método Monte Carlo gera uma cadeia Markov, podendo pois simular qualquer processo Markoviano. A maior dificuldade é estimar os intervalos de tempo entre os eventos. Neste capítulo buscamos simular estes processos com uma maneira alternativa de estimar os intervalos de tempo [40]

5.1 O Método

Retomemos a equação Mestra (2.4) :

$$\frac{dP_i(t)}{dt} = \sum_j w_{j \rightarrow i} P_j - \sum_j w_{i \rightarrow j} P_i, \quad (5.1)$$

como vimos no capítulo 2, se T_{ij} é a probabilidade de transição do estado i para o estado j , podemos escrever $w_{i \rightarrow j} = \frac{T_{ij}}{\tau_i}$, em que τ_i é a constante de tempo característica do estado i . De acordo com esta suposição, $w_{i \rightarrow j}$ pode ser diferente dependendo do evento que causa a transição. Então, a trajetória da evolução do sistema depende da sequência de eventos; quando um dado estado i é tomado, o próximo estado j será alcançado somente através da

ocorrência de um evento cuja probabilidade esta implícita em T_{ij} . As probabilidades $P_i(t)$ e T_{ij} obedecem às condições de normalização: $\sum_i P_i(t) = 1$; $\sum_j T_{ij} = 1$, em que T_{ii} é a probabilidade do sistema ficar no estado i . Na equação (5.1) incluímos o termo $j = i$ que não afeta a equação Mestra, e este termo pode ser interpretado da seguinte forma: quando o sistema fica no microestado i não há evolução temporal. É interessante notar que somente é possível encontrar todos estados igualmente prováveis no equilíbrio pois neste caso $\sum_{j \neq i} w_{j \rightarrow i} = \sum_{j \neq i} w_{i \rightarrow j}$ para todo i e t . De fato, se supomos que $P = P_i(t)$, independente de i , a equação (5.1) pode ser reescrita: $\frac{d \ln p}{dt} = \sum_j w_{j \rightarrow i} - \sum_j w_{i \rightarrow j}$, então $P = \text{constante}$. Supondo agora que um estado i é acessado através da ocorrência de um evento e com probabilidade “a priori” governada pela equação (5.1); para garantir as propriedades de equilíbrio, também supomos que estas probabilidades são todas iguais, independentes do tipo de evento. Desta maneira, quando temos mais do que um evento possível, a escolha é feita com probabilidades iguais, estabelecendo então parte da hierarquia relacionada a escolha da sequência de eventos. Podemos escolher convenientemente uma quantidade física microscópica extensiva A_i que é independente do tempo para cada estado i . O valor médio para esta quantidade no tempo t é dado por:

$$A(t) = \langle A \rangle = \sum_i P_i(t) A_i. \quad (5.2)$$

Esta equação representa uma quantidade física macroscópica $A(t)$ contínua. Diferenciando com respeito ao tempo os dois lados da equação acima obtemos:

$$\frac{dA(t)}{dt} = \sum_i \frac{dP_i(t)}{dt} A_i, \quad (5.3)$$

Substituindo (5.1) em (5.3) segue:

$$\frac{dA(t)}{dt} = \sum_i \sum_j w_{j \rightarrow i} P_j A_i - \sum_i \sum_j w_{i \rightarrow j} P_i A_i \quad (5.4)$$

Definindo $\Delta A_{ij} = A_i - A_j$, podemos escrever (5.4) na forma:

$$\frac{dA(t)}{dt} = \sum_i \sum_j w_{j \rightarrow i} P_j \Delta A_{ij}. \quad (5.5)$$

Supondo que enumeramos os estados de tal maneira que os valores de A_i estejam em ordem crescente tal que para $i > j$ temos $A_i > A_j$. Então podemos reescrever a equação (5.5) com as taxas ($w_{j \rightarrow i}$) de acréscimo e decréscimo separadas para $i > j$ e $i < j$ respectivamente:

$$\frac{dA(t)}{dt} = \sum_{i>j} w_{j \rightarrow i} P_j \Delta A_{ij} - \sum_{i<j} w_{j \rightarrow i} P_i \Delta A_{ji}, \quad (5.6)$$

na qual a soma $\sum_{i>j}$ indica a soma dupla com a restrição $i > j$. Agora nós consideramos que A e outra quantidade física A^\dagger , obedecem a lei de conservação $A_i + A_i^\dagger = \phi$, para todo estado i , em que ϕ é constante pelo menos em um pequeno intervalo de tempo, em torno do tempo onde estamos medindo a quantidade física. Isto implica que $A + A^\dagger = \phi$. Observamos que o evento que aumenta A , decresce A^\dagger e vice versa. Então podemos escrever (5.6)

$$\frac{dA(t)}{dt} = \sum_{i>j} w_{j \rightarrow i} P_j \Delta A_{ji}^\dagger - \sum_{i<j} w_{j \rightarrow i} P_j \Delta A_{ji}, \quad (5.7)$$

tal que podemos escrever a equação Mestra semi-empírica para os valores médios de uma grandeza física A :

$$\frac{dA}{dt} = \bar{w}_+ A^\dagger - \bar{w}_- A \quad (5.8)$$

na qual \bar{w}_+ e \bar{w}_- são as respectivas taxas, de acréscimo e decréscimo, no nível macroscópico ou mesoscópico. Note que em geral w_+ e w_- são funções não-triviais de A e t que dependem da dinâmica do sistema. Nós também generalizamos: $A^\dagger + A = \phi(t)$, ϕ como função de t . Quando $t \rightarrow \infty$, é necessário que $\phi(t) = cte$, para que o sistema vá para o equilíbrio (estático

ou dinâmico): $\frac{dA}{dt} = -\frac{dA^\dagger}{dt} = cte$. Para obter o equilíbrio estático temos a condição $\frac{dA}{dt} = 0$, que pode ser obtida impondo o balanço $\bar{w}_+ A^\dagger = \bar{w}_- A$. Uma consideração importante é que podemos usar escala de taxas acima para calcular intervalos de tempo. Isto implicará uma distribuição de tempos que pode ser diferente da microscópica. É necessário enfatizar que A^\dagger representa uma fonte para A em cada instante t . O valor médio da taxa de transição global é:

$$\bar{w} = \sum_i \sum_j P_i \frac{T_{ij}}{\tau_i} = \frac{1}{\tau}. \quad (5.9)$$

Podemos interpretar a equação (5.8) como um balanço entre as quantidades A_+ resultante de eventos entrando e A_- dos eventos “saindo”, tal que podemos escrever

$$\frac{dA_+}{dt} = \bar{w}_+ A^\dagger \quad (5.10)$$

e

$$\frac{dA_-}{dt} = \bar{w}_- A. \quad (5.11)$$

Então em nível “coarse-grained” podemos tomar intervalos de tempo

$$\Delta t = \frac{\Delta A_+}{\bar{w}_+ A^\dagger}, \quad (5.12)$$

quando ocorre um evento que incrementa A ou

$$\Delta t = \frac{\Delta A_-}{\bar{w}_- A}, \quad (5.13)$$

quando ocorre um evento que decresce A . Contudo estes intervalos de tempo pode ser interpretado como $\Delta t = \sum_i \langle \Delta t_i \rangle$, em que $\langle \Delta t_i \rangle$ são intervalos de tempo médios entre a ocorrência de eventos no nível microscópico. Para ser consistente, podemos expressar $\Delta t_i = \frac{\Delta A_{+,i}}{w_{+,i}^\dagger}$ ou $\Delta t_i = \frac{\Delta A_{-,i}}{w_{-,i}^\dagger}$, na qual o índice

i indica eventos em escala microscópica. As quantidades $\Delta A_{+,i}$ e $\Delta A_{-,i}$, podem ser relacionadas a ΔA por

$$\Delta A_{+,i} = \frac{f_{in}}{\sum_e f_e} \Delta A_+ \quad (5.14)$$

ou

$$\Delta A_{-,i} = -\frac{f_d}{\sum_e f_e} \Delta A_- \quad (5.15)$$

na qual f_{in} , f_d são as frequências¹ de eventos em certo tempo t que provocam aumento e decréscimo da quantidade A , e \sum_e é a soma de todas as espécies de eventos. A razão das frequências implica que estamos considerando um espécie de média em uma escala maior para estimar os intervalos de tempo microscópicos Δt_i (Apêndice C). Uma vez que temos as taxas que definem os intervalos de tempo em alguma escala, podemos construir um algoritmo MC para resolver a equação Mestra, e obter a evolução de quantidades físicas do sistema.

5.2 A Simulação MCD

Em uma interpretação dinâmica, o Método Monte Carlo fornece uma solução numérica para a equação Mestra. A simulação gera uma sequência de eventos que são separados por intervalos de tempo que são impostos pelas probabilidades de transição. Estes tempos são acoplados a escala na qual nunca dois eventos ocorrem simultaneamente.

A tarefa do algoritmo Monte Carlo é criar uma sequência cronológica de eventos distintos separados por intervalos de tempo [13]. Quando o equilíbrio é atingido, as quantidades físicas do sistema não evoluem mais, e podemos interpretar isto como uma “parada no tempo”. Vamos partir do princípio que não conhecemos a distribuição de tempos e que a hierarquia é conhecida. Podemos então escolher (5.10) e (5.11) ou a equação (5.8) para dar a evolução temporal para a grandeza de interesse A .

A evolução do sistema, em geral, depende das condições iniciais. Em uma sequência de eventos que são gerados por uma escolha apropriada das probabilidades de transição, supomos que cada medida de A , em todo passo

¹ $\sum_{in} f_{in} + \sum_d f_d = \sum_e f_e$

Monte Carlo, corresponde a algum valor médio que pode ser resultante de várias transições virtuais. Desta forma, podemos supor a validade de (5.10) e (5.11) com \bar{w}_- e \bar{w}_+ sendo as taxas médias instantâneas de decréscimo e acréscimo de A que são geradas pelo algoritmo. Estas taxas são relacionadas às probabilidades de transição T^* por $\bar{w}_{ks} = \frac{T_{ks}^*}{\tau}$, em que ks significa a taxa de transição do estado “ k ” no tempo “ t ” para o estado “ s ” no tempo “ $t + \Delta t$ ” diminuindo ou aumentando A . A constante de tempo τ é um fator que normaliza T^* tal que $T_{kk}^* + T_{ks}^* = 1$. Note que para propósitos teóricos, τ é somente um fator de escala arbitrário porque a equação Mestra (5.1) permanece inalterada se a multiplicamos por uma constante. Na prática, podemos escolher τ para obter o valor correto de \bar{w}_{ks} . As probabilidades T^* são ligadas a T pela relação: $T_{ij} = \frac{T_{ij}^*}{\Gamma_i}$, e $T_{ii} = T_{ii}^*$; Γ_i sendo o número de estados j acessíveis a partir de i . O problema que abordaremos consistirá de uma rede, então podemos fazer $\Gamma_i = N$, o número de sítios na rede. O procedimento gera os T_{ij}^{*s} escolhendo randomicamente os sítios da rede, então efetuando as transições com a probabilidade T_{ij}^* , de i para j . É necessário reforçar que esta escolha randômica de um sítio sobre a rede é necessária para satisfazer a relação entre T^* e T acima. Geramos esta distribuição escolhendo os sítios aleatoriamente, e começando com a mesma condição inicial, executamos várias vezes o experimento em diferentes trajetórias (gerando várias cadeias de Markov). Este procedimento pode ser desenvolvido calculando uma quantidade física A no tempo t_0 usando a equação (5.2). Para fazer isto, supomos que temos equilíbrio local, tal que podemos medir as propriedades do sistema. Se escolhemos um dado estado i do sistema com probabilidade $P_i^*(t_0)$, podemos reescrever (5.2) como[11]:

$$\langle A(t_0) \rangle = \frac{\sum_i P_i(t_0) A / P_i^*(t_0)}{\sum_i P_i(t_0) / P_i^*(t_0)} \quad (5.16)$$

Se fazemos $P_i^*(t_0) = P_i(t_0)$ em equilíbrio, obtemos

$$\langle A(t_0) \rangle = \frac{\sum_{i=1}^{L^*} A_i}{L^*}, \quad (5.17)$$

na qual L^* é o número de todos os possíveis estados do sistema no tempo t_0 . As probabilidades de estado no tempo t_0 são obtidas construindo um “ensemble” de configurações usando as taxas de transição apropriadas. Este procedimento pode ser estendido para qualquer tempo t . O procedimento

prático é o seguinte: em um dado experimento da simulação numerado por m podemos obter a medida de qualquer quantidade física A_m e os intervalos de tempo Δt_m . Depois de realizar L experimentos, em um tempo t , o valor médio de A é $A(t) \approx \sum_{m=1}^L \frac{A_m}{L}$ e $\Delta t \approx \sum_{m=1}^L \frac{\Delta t_m}{L}$. Note que se idealizamos este procedimento tomando $L \rightarrow \infty$, obtemos um “ensemble” completo que nos dá o valor médio da quantidade física para cada tempo t . O tempo t é atualizado a cada *passo* adicionando o valor calculado Δt . Podemos tomar os intervalos de tempo Δt_m pelo uso das expressões (5.12 - 5.13). Enfatizamos que estas médias devem ser calculadas em um determinado tempo t e isto não pode ser realizado diretamente se a relação entre *passo* e tempo real não for linear. Outra maneira de obter os incrementos de tempo é considerar o fluxo de eventos e então usar diretamente a equação (5.8):

$$\Delta t_m = \frac{\Delta A}{\bar{w}_+ A^\dagger - \bar{w}_- A}, \quad (5.18)$$

usando o primeiro método, descrito pelas equações (5.12 - 5.15), o *passo* e o tempo real são relacionados diretamente, mas com o outro (dado por (5.18)), não². Uma consideração adicional é necessária: para usar (5.18), é necessário ter as taxas médias, enquanto para usar (5.12 - 5.15) não é . Então para o primeiro método executando vários experimentos, construímos a distribuição dos Δt 's e A em cada *passo*, que corresponderá ao tempo real calculado. Garantindo que diferentes experimentos são independentes, podemos calcular o erro para as quantidades envolvidas no processo para cada tempo t pela expressão [11]

$$\frac{\sigma}{\sqrt{L}} = \sqrt{\frac{\langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2}{L}}, \quad (5.19)$$

na qual Q é uma grandeza qualquer como energia, ou o tempo real.

5.3 Adsorção-dessorção de Langmuir

A equação cinética (3.9) pode ser obtida rigorosamente usando a expressão (5.8) (veja o Apêndice D).

²Se usamos (5.18) para obter valores médios, podemos construir funções “fitting”, uma para cada trajetória, e então obter os valores médios correspondentes da quantidade física para cada passo de tempo escolhido.

Utilizaremos o formalismo desenvolvido até aqui neste capítulo para resolvermos numericamente (3.9) pelo método Monte Carlo, considerando a adsorção/dessorção como um processo markoviano. Embora já tenhamos resolvido o problema anteriormente, como um processo poissoniano, utilizaremos novamente este modelo para mostrar a validade de nossa simulação, bem como, mostrar alguns resultados que podem ser obtidos quando o tempo é calculado a partir das equações (5.12, 5.13) ou 5.18.

Começamos então, construindo trajetórias com probabilidades de transição T_A^* de adsorção e T_D^* de dessorção. Estas são relacionadas a w_A e w_D respectivamente por $w_A = \frac{T_A^*}{\tau}$ e $w_D = \frac{T_D^*}{\tau}$. Podemos escolher $1/\tau = \max(w_A, w_D)$ isto garante que $0 \leq T_A^*, T_D^* \leq 1$. Seja M_s o número de sítios ocupados em um dado tempo t e N o número total de sítios na rede, a concentração é dada por: $\theta_i = \frac{M_i}{N}$. Os intervalos de tempo foram calculados usando os métodos prescritos na seção anterior. Primeiro consideramos intervalos de tempo com os dois eventos: quando ocorre uma dessorção,

$$\Delta t = \frac{1}{w_D M_s} \frac{f_D}{f_A + f_D}, \quad (5.20)$$

ou quando ocorre adsorção

$$\Delta t = \frac{1}{w_A (N - M_s)} \frac{f_A}{f_A + f_D}, \quad (5.21)$$

na qual f_A e f_D são respectivamente o número total de adsorções e dessorções no passo s da simulação. Para o outro método, usamos um balanço extraído diretamente de (3.9)

$$\Delta t = \frac{\Delta M_s}{w_A (N - M_s) - w_D M_s}. \quad (5.22)$$

Neste procedimento, que chamaremos de “coarse-grained”, tomamos um fluxo de eventos dados pelo balanço entre entrada de partículas e saídas. Como um exemplo, fixamos $w_A = 1.0(\text{sítios})^{-1}$ e $w_D = 2.0(\text{sítios})^{-1}$. A simulação foi executada sobre uma rede quadrada de 200×200 sítios. A probabilidade de transição foi definida pela normalização das taxas pela taxa de dessorção (maior delas neste caso), ou seja, $T_A^* = 1/2$ e $T_D^* = 1.0$. O número $L = 20$ de experimentos foi muito satisfatório para este caso, dando uma precisão da ordem de 0,1% comparado com o resultado exato fora e no equilíbrio figura [5.1].

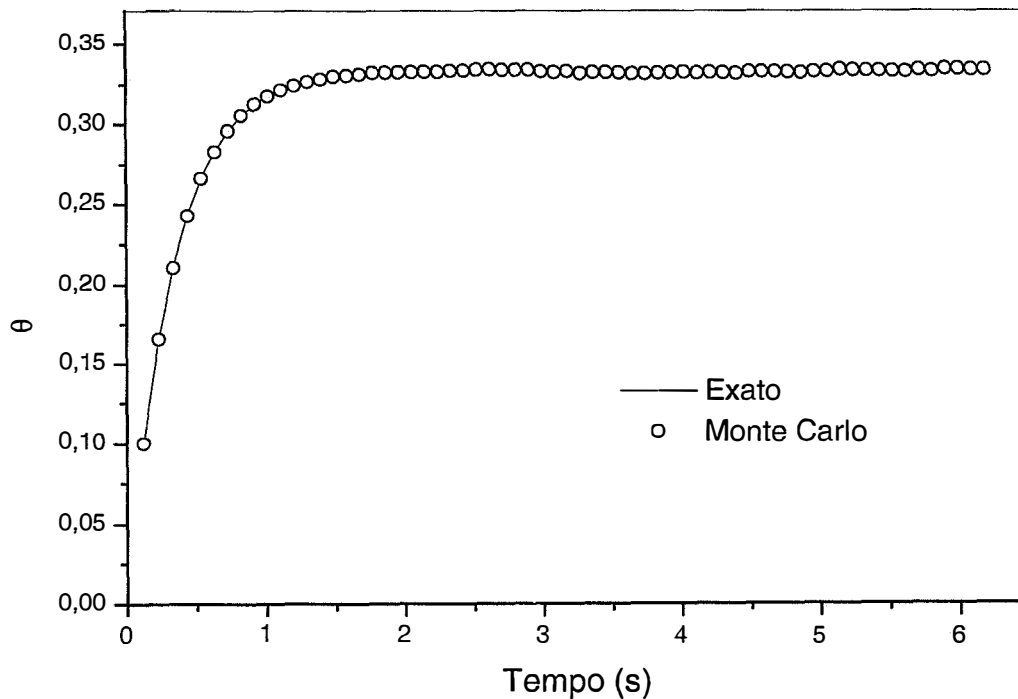


Figura 5.1: Soluções da equação [3.9]. Os círculos representam a simulação Monte Carlo Dinâmica e linha corresponde a solução exata. As taxas usadas foram $r_A = 2.0(\text{sítio}/s)$ e $r_D = 1.0(\text{sítio}/s)$. O número de 20 trajetórias (para a solução MCD) independentes foram suficientes para produzir estes resultados.

O método “coarse-grained” foi executado de duas maneiras distintas. Primeiro fixamos $C = 100 \text{ MCS}$ e coletamos os valores de M_i antes e depois de realizados estes C passos para calcular os intervalos de tempo Δt . Neste caso quando o sistema aproxima-se do equilíbrio, temos problemas numéricos, dando $\Delta t_s \ll 0$ ou $\Delta t_s \gg 0$, isto causa uma regressão no tempo levando os pontos para frente e para trás, tornando visível quando o sistema atinge o equilíbrio figura [5.2]. Da segunda maneira, impomos $\Delta t \geq 0$,

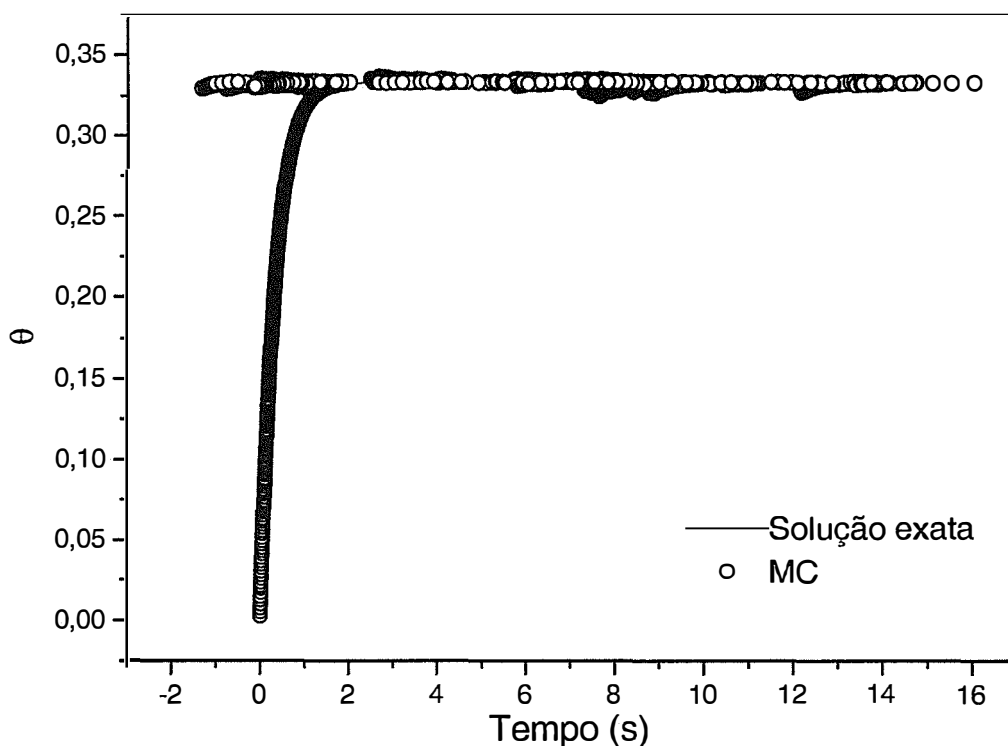


Figura 5.2: Soluções da equação (3.9). Os círculos representam a simulação Monte Carlo e linha corresponde a solução exata. Os intervalos de tempo são calculados pela equação 5.22

aumentando C . Quando o sistema acha o equilíbrio, $C \rightarrow \infty$, temos a im-

pressão de que o tempo “para” figura [5.3]. A distribuição poissoniana dos intervalos de tempo é mostrada na figura [5.4].

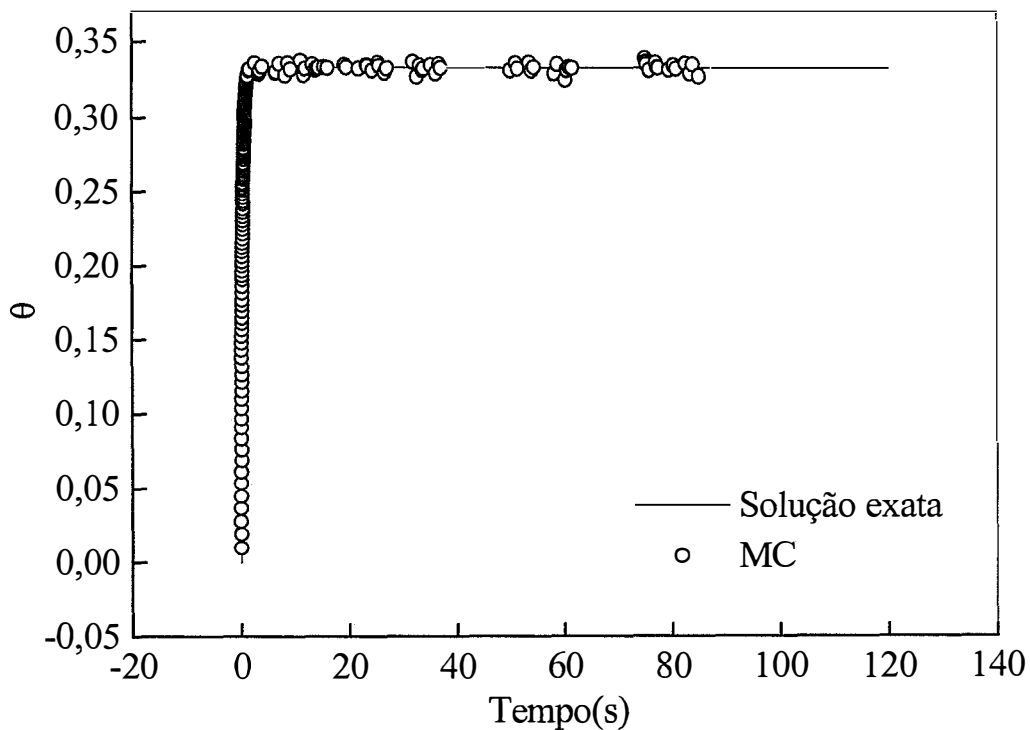


Figura 5.3: Soluções da equação (3.9). Conforme a figura [3.4]. Os intervalos de tempo são calculados pela equação (5.22), impondo a positividade de Δt .

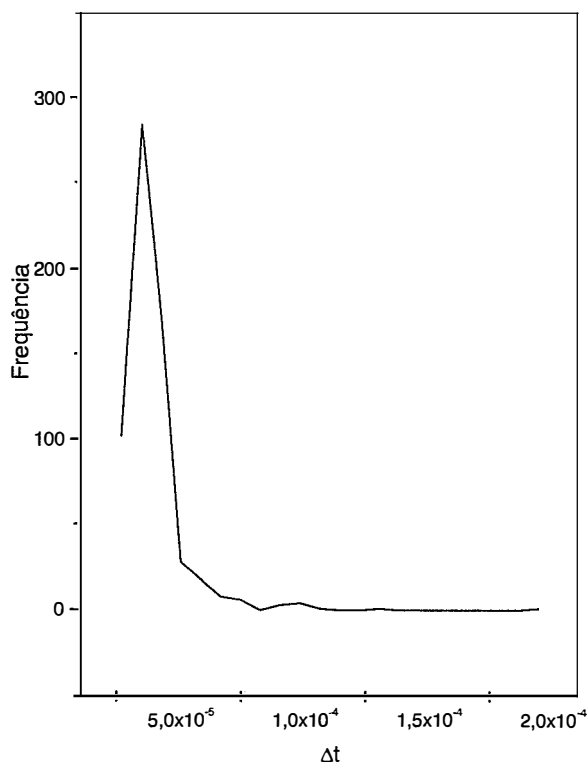


Figura 5.4: Distribuição dos intervalos de tempo, utilizados nas simulações Monte Carlo, mostrando a forma Poissoniana esperada.

Capítulo 6

Outros resultados e perspectivas

O método apresentado no capítulo anterior pode ser aplicado a uma grande variedade de sistemas. Neste capítulo analisaremos o modelo epidêmico *SIRS* com interações locais fracas (regime poissoniano) e com interações locais fortes (não poissoniano). Apreciaremos ainda a mudança entre estados epidêmicos para não-epidêmicos. A evolução temporal para o modelo gás-rede é também apresentada nos regimes de altas temperaturas (acima de T_C) e baixas temperaturas (abaixo de T_C). A região crítica é evidenciada de uma maneira inédita. Finalmente neste capítulo resolvemos as equações de Newton para um pêndulo elástico.

6.1 modelo epidêmico

O modelo epidêmico SIR(S), representado pelas equações (4.1) - (4.3), pode ser analisado pelo método desenvolvido no capítulo anterior. Primeiro, para identificar as taxas para o processo, escrevemos um sistema de equações mais geral para o modelo baseando-se na equação (5.8)

$$\frac{dS}{dt} = w_{R \rightarrow S}R - w_{S \rightarrow I}S \quad (6.1)$$

$$\frac{dI}{dt} = w_{S \rightarrow I}S - w_{I \rightarrow R}I \quad (6.2)$$

$$\frac{dR}{dt} = w_{I \rightarrow R}I - w_{R \rightarrow S}R, \quad (6.3)$$

em que $w_{S \rightarrow I}$, $w_{I \rightarrow R}$ e $w_{R \rightarrow S}$ e são respectivamente as taxas de infecção, remoção e de recuperação. Assim, comparando as equações acima com as equações (4.1) - (4.3), estabelecemos formalmente as relações para as taxas, como em (4.7) - (4.9). Para resolver as equações (6.1) - (6.3) utilizamos a mesma hierarquia do capítulo 4, com a diferença que o cálculo dos intervalos de tempo agora são feitos utilizando diretamente as equações (5.12 - 5.13) conforme o procedimento delineado no capítulo 5. Por exemplo, quando ocorre uma infecção, o incremento de tempo atribuído será:

$$\Delta t = \frac{\Delta I}{w_{I \rightarrow R} I} \quad (6.4)$$

na qual $w_{I \rightarrow R} = a$, é uma constante. Na figura [6.1] parte *a*, *b*, *c* mostramos a evolução temporal de $I(t)$, $R(t)$ e $S(t)$ respectivamente. As linhas contínuas representam a solução obtida pelo método Runge-Kutta de quarta ordem, os quadrados representam a solução utilizando a técnica de Fichthorn, enquanto que as cruces foram obtidos pelo nosso método. Os parâmetros utilizados foram: $a = 0.8$, $b = 0.2$, $m = 0.01$, $\mu = 2$, $I_0 = 10$ e $\Lambda = 0$. O erro estimado é da ordem de 0.1%. A parte *c* representa a solução no espaço dos parâmetros S e I .

A despeito da excelente concordância obtida no caso de interação do tipo campo médio, observamos que o mesmo não ocorre no caso em que a interação local passa a ter importância significativa. A figura [6.2] mostra uma comparação entre as soluções de Fichthorn e as nossas para alguns valores do parâmetro Λ (as soluções Runge-Kutta são deixadas como uma lembrança da solução de campo médio). No caso $\Lambda = 0.1$ a concordância ainda é bastante boa pois o processo, como uma boa aproximação, ainda é do tipo Poisson. Entretanto para $\Lambda = 0.5$ já podemos observar, por simples inspeção da figura [6.2] parte *b*, que as soluções se deslocam um pouco. Em $\Lambda = 0.9$ a divergência é notável. Neste caso o sistema deixa totalmente o regime poissoniano pois o critério de independência entre eventos exigido nos processos poissonianos não é mais verdadeiro.

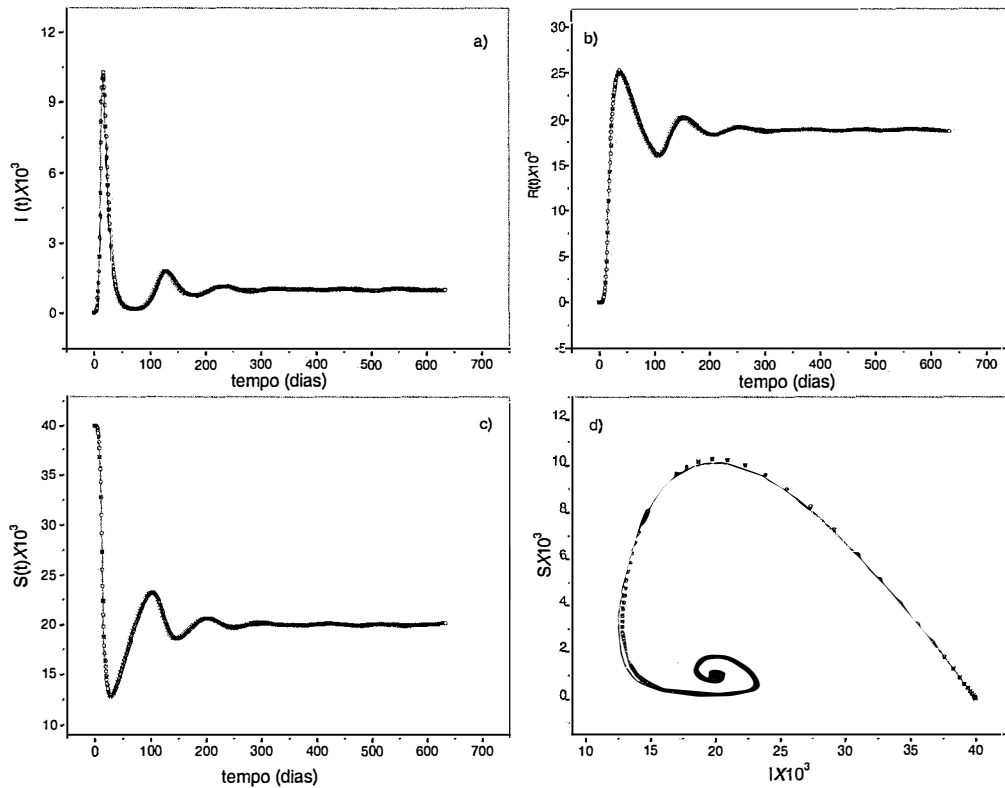


Figura 6.1: modelo SIRS; curvas epidêmicas. As partes *a*, *b* e *c* mostram, respectivamente, como o número de suscetíveis S , infectados I e recuperados R evoluem com o tempo t , a parte *d* mostra a trajetória para o equilíbrio. Esta figura busca mostrar a equivalência das três soluções obtidas por Runge-Kutta (linha), pela simulação de Fichthorn (quadrados) e pela nossa (cruzes).

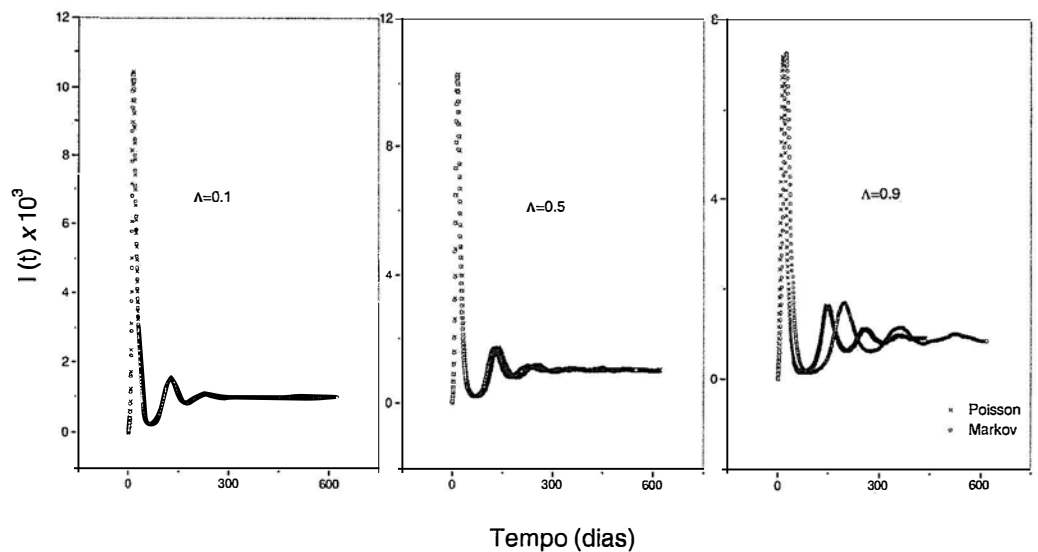


Figura 6.2: modelo *SIRS* considerando interações locais e globais. Comparamos as Soluções obtidas pelo método Fichthorn (processo Poisson) e pelo método desenvolvido por nós (processo Markoviano). Na parte *a*, onde prevalece a interação global as soluções são praticamente idênticas. No entanto quando a interação local é forte as soluções divergem. O processo deixa de ser de natureza Poissoniana.

6.2 Transições entre fases epidêmicas e não-epidêmicas

O modelo epidêmico SIR clássico apresenta um limiar que separa as fases epidêmica da não epidemia. Este limiar ocorre em $\rho = \frac{w_{S \rightarrow I}}{w_{I \rightarrow R}} = 1$, como pode ser verificado diretamente das equações para este modelo [37]. Na simulação Monte Carlo, este limiar também pode ser visualizado [39].

Quando utilizamos a simulação Monte Carlo Dinâmico, calculamos os intervalos de tempo entre eventos, a partir das grandezas conhecidas. Estes intervalos de tempo refletem as características do sistema e portanto podem ser usados para identificar mudanças qualitativas e quantitativas de comportamento. Consideremos os inversos dos intervalos de tempo, $\gamma = \langle 1/\Delta t \rangle$, esta grandeza mostra-nos que há um ponto crítico em $\rho = 1$, para o sistema *SIR*. Na figura [6.3] temos a primeira derivada do parâmetro γ , mostrando uma mudança de comportamento em torno de $\rho = 1$.

Para o caso *SIRS*, teríamos vários pontos críticos, entre dois estados bem caracterizados. Isto pode ser visto na figura [6.4]. Podemos observar que há uma região de transição entre dois estados, um abaixo de $\rho = 7$ e outro acima de $\rho = 34$.

6.3 modelo gás-rede

No modelo gás-rede a superfície sólida é representada por uma rede bidimensional com M_i sítios. No caso mais simples, cada sítio da rede pode apresentar dois estados distintos: ocupado ou vazio. Ao contrário de um descrição macroscópica, em termos de equações diferenciais, como a adsorção de Langmuir, o modelo gás-rede representa uma descrição microscópica que pode levar em conta a ordem local dos adsorbatos e as interações energéticas entre estes.

O estado do sistema a cada instante t é definido pelo conjunto dos números de ocupação $\{n_i\}$. Assim para uma rede de N sítios ocupados por M_i adsorbatos a concentração é dada por $\theta = M_i/N$. Para simular a evolução temporal da concentração θ do modelo gás-rede faremos a suposição de que a equação que descreve a evolução temporal deste tem a mesma forma que aquela do caso de adsorção-dessorção de Langmuir (3.9), com taxas que dependem da energia local. Para as probabilidades de transição utilizamos

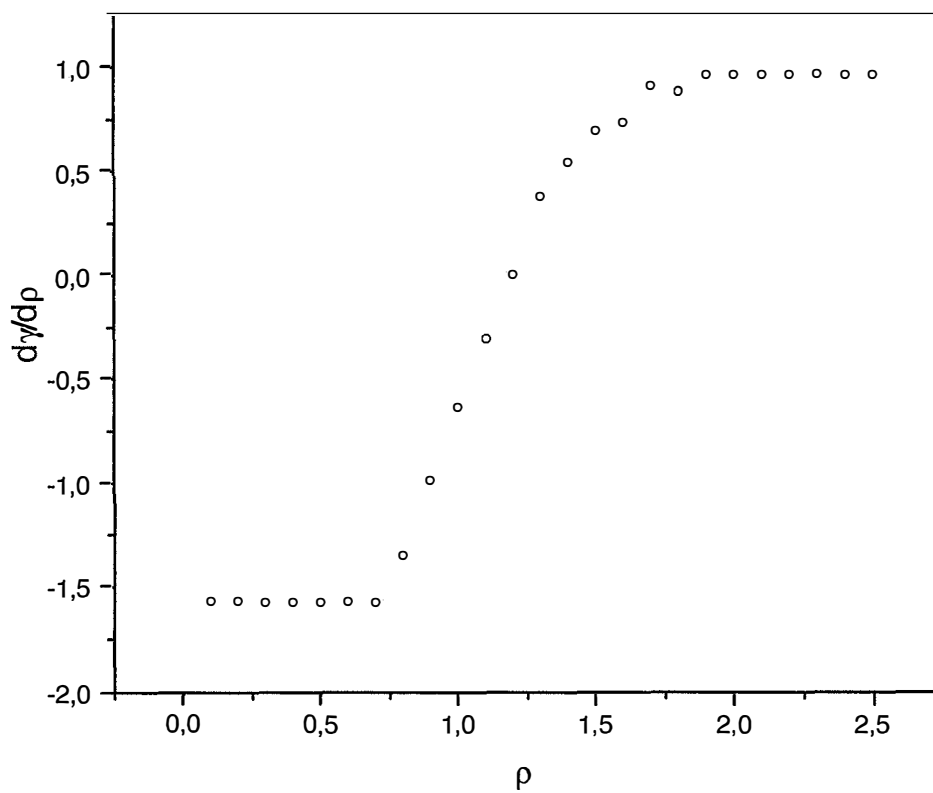


Figura 6.3: Transição entre as fases epidêmica e não epidêmica para o modelo SIR clássico. A mudança é caracterizada por um salto na derivada do parâmetro γ .

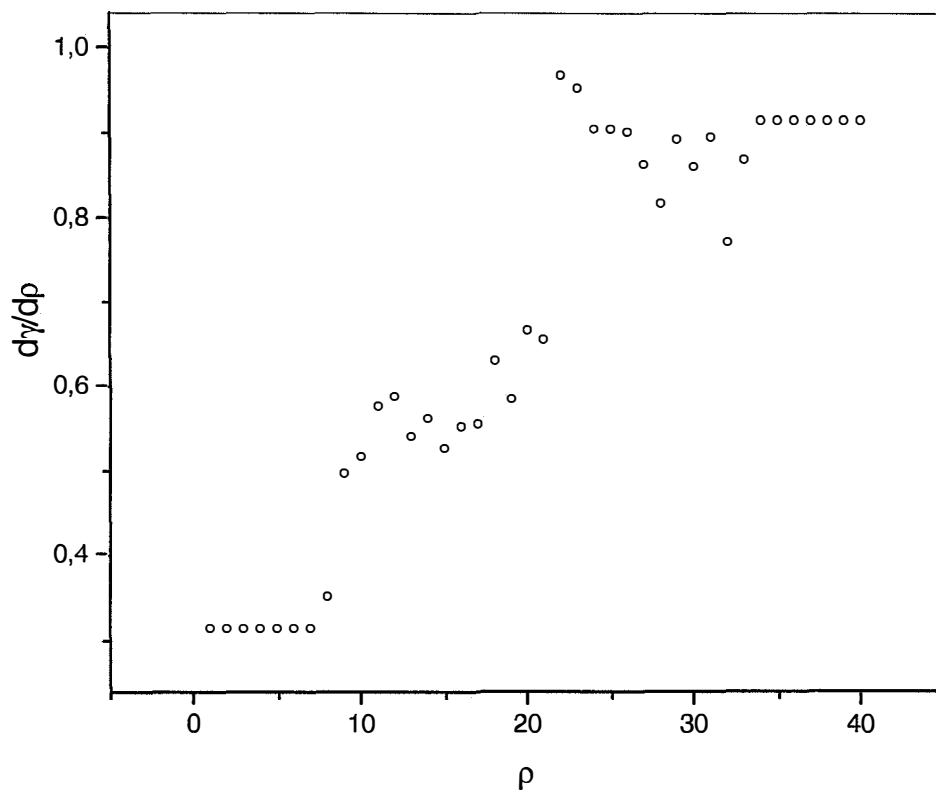


Figura 6.4: Transições entre fases epidêmicas e não epidêmicas para o modelo SIRS. A separação entre as fases epidêmica e não epidêmica é caracterizada por vários saltos na derivada do parâmetro γ .

Glauber [41]

$$w_\alpha = \frac{\exp(-\beta\Delta E)}{1 + \exp(-\beta\Delta E)}, \quad (6.5)$$

com esta escolha e sendo $T_\alpha = w_\alpha/\zeta_{\max}$ e com $\frac{w_A}{w_D} = \frac{T_A}{T_D}$ podemos delinear a evolução temporal para este modelo. Consideraremos duas soluções distintas, uma utilizando a simulação poissoniana de Fichthorn e a outra utilizando a nossa técnica para processos markovianos. Comparamos as duas soluções na figura [6.5]. A parte *a* indica a evolução temporal para uma situação tipicamente poissoniana, obtida graças a temperatura elevada. Para temperaturas altas, os sítios podem ser considerados praticamente independentes um do outro. Entretanto quando a temperatura é baixa, a correlação entre os sítios se torna importante e a aproximação poissoniana se torna inválida, como mostrado na parte *b*.

Como visto no capítulo 1 o modelo gás-rede apresenta transição de fase de segunda ordem em $\alpha/k_B T \simeq 1.76$. Calculamos, inspirados no calor específico, a grandeza dinâmica:

$$C_{\Delta t} = \frac{\langle \gamma^2 \rangle - \langle \gamma \rangle^2}{k_B T^2} \quad (6.6)$$

na qual $\gamma = \langle 1/\Delta t \rangle$, e verificamos um ponto crítico em $\alpha/k_B T \simeq 1.76$, figura [6.6]. Isto sugere-nos uma maneira alternativa de localizar transições de fase, esta transição foi obtida calculando $C_{\Delta t}$ desde o início da simulação, sem nenhum descarte de configurações. Devemos enfatizar que na simulação dinâmica as correlações entre estados gerados não representam mais um obstáculo ao cálculo da grandeza desejada.

A distribuição mostra a existência de várias escalas de tempo. A figura [6.7] mostra a distribuição dos intervalos de tempo para temperatura $T = 1.5$, acima da temperatura crítica. A figura [6.8] mostra a distribuição dos intervalos de tempo para o caso de temperatura abaixo da temperatura crítica.

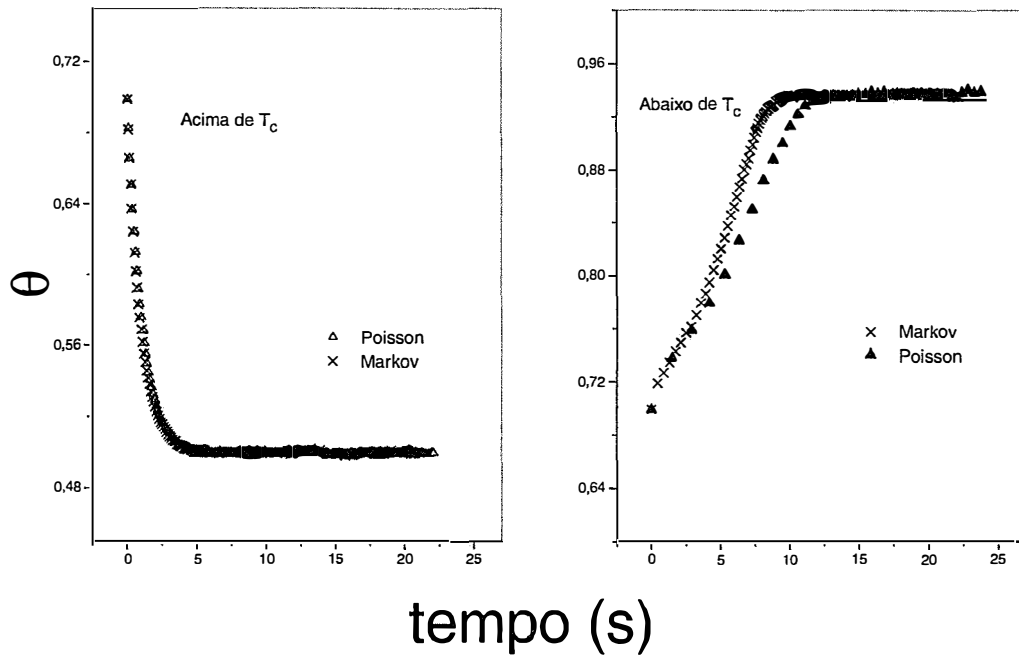


Figura 6.5: Evolução temporal para o sistema gas-rede, começando com 70% dos sítios ocupados. Na parte *a* a temperatura considerada é $kT/\alpha = 0.5$ (abaixo de T_C). Na parte *b* a temperatura é $kT/\alpha = 1.5$ (acima de T_C). Estes resultados representam uma média de 20 experimentos independentes. Observa-se (parte *a*) que acima de T_C as soluções (Poisson=triângulos) e (Markov=cruz) são idênticas. Entretanto abaixo de T_C (parte *b*) o que vale é a solução Markoviana.

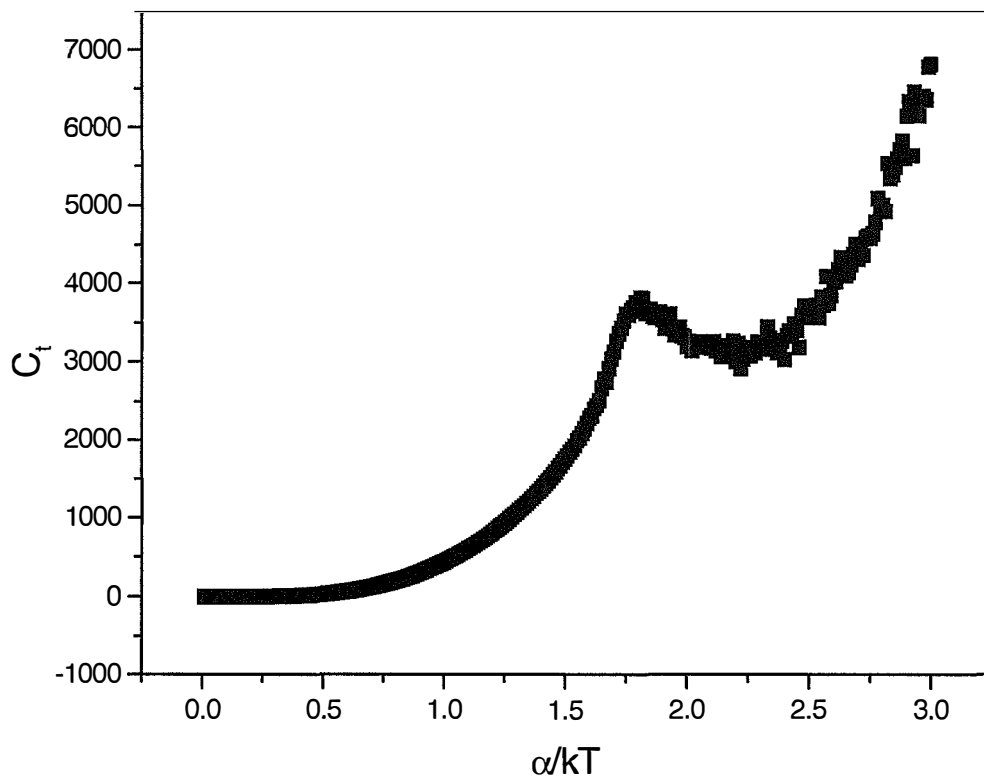


Figura 6.6: Transição de fase para o modelo gás-rede. O parâmetro C_t é utilizado para mostrar a transição mesmo antes do sistema entrar em equilíbrio.

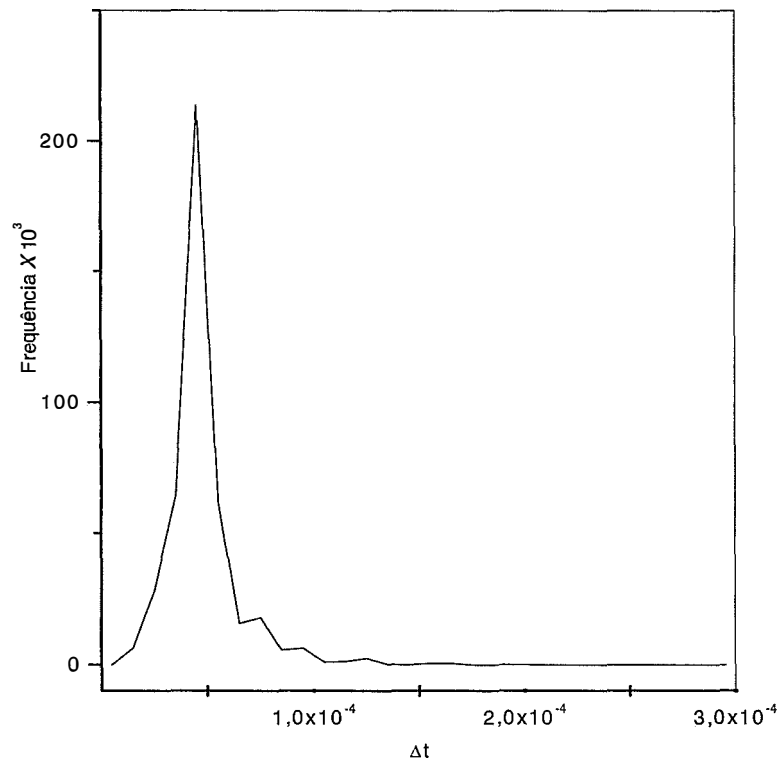


Figura 6.7: Distribuição dos intervalos de tempo utilizados na simulação Monte Carlo para o modelo gás-rede a temperatura $T = 1.5$.

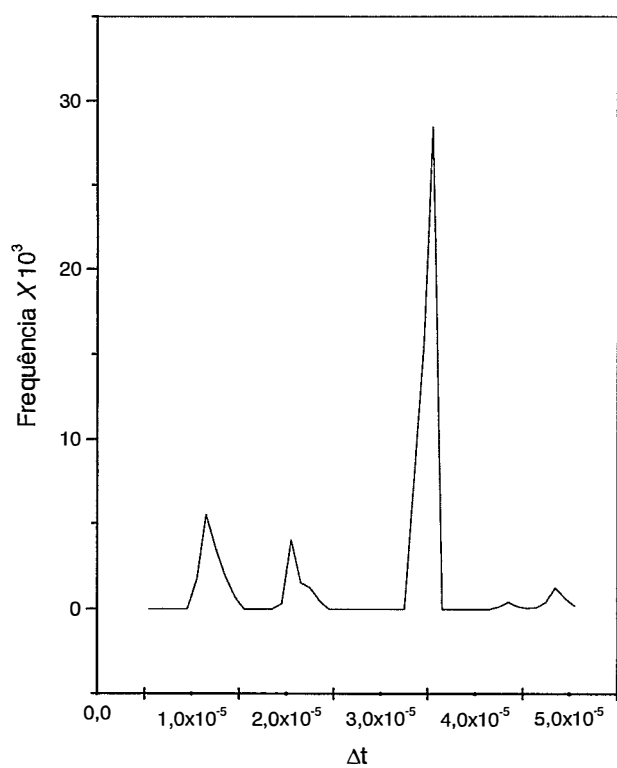


Figura 6.8: Distribuição dos intervalos de tempo utilizados na simulação Monte Carlo para o modelo gás-rede a temperatura $T = 0.5$.

6.4 Perspectivas

Para resolver sistemas complexos usando o método descrito no capítulo 5 consideramos uma equação mais geral

$$\frac{du}{dt} = f(u, t) \quad (6.7)$$

em que u é uma variável positiva no intervalo $0 \leq u \leq 1$, e $f(u, t)$ é uma função geral de u e de uma outra variável positiva t (que pode ser o tempo). Para prosseguir queremos construir uma equação Mestra na forma dada por (5.8). Para fazer isto utilizamos uma função positiva $f_a = |f(u, t)| + C$, em que C é uma constante positiva arbitrária e então fazemos a seguinte transformação:

$$\frac{du}{dt} = w^+ u^\dagger - w^- u, \quad (6.8)$$

na qual $w^+ = (f_{(u,t)} + f_a)/u^\dagger$, $w^- = f_a/u$ e $u^\dagger = 1 - u$, a lei de conservação para obter o balanço. Note que para construir (6.8) podemos ter outras escolhas para w^+ e w^- . Então, como no problema de adsorção-dessorção podemos construir a hierarquia para a simulação considerando $1/\tau = \max(w^+, w^-)$, e com o mesmo procedimento *MC* descrito para o sistema Langmuir podemos resolver a equação (6.8). Esta hierarquia pode não ter relação com o comportamento do sistema, por causa disso a chamamos de “pseudo-hierarquia”. Agora seja uma partícula cuja componente de momento é definida por

$$p_i = m \frac{dx_i}{dt} \quad (6.9)$$

na qual x_i representa a componente do vetor posição com $i = 1, 2, 3$, e m a massa da partícula. Por simplicidade consideremos $x_i \geq 0$. Considerando x_{\max} o valor máximo de x_i podemos fazer a transformação $x_i = x_{\max} u_i$ para termos $0 \leq u_i \leq 1$, então podemos escrever $\frac{du_i}{dt} = \frac{p_i}{m x_{\max}} = f(u_i, t)$. Esta equação tem a mesma forma de (6.7), e então podemos escrever as taxas de transição

$$w^+ = \frac{\frac{p_i}{m x_{\max}} + f_a}{u_i^\dagger} \quad (6.10)$$

e

$$w^- = \frac{f_a}{u_i} \quad (6.11)$$

na qual $f_a = \frac{|p_i|}{mx_{\max}} + C$.

Notamos que esta hierarquia é arbitrária porque podemos escolher outras formas para f_a ou outras transformações que levam a balanços equivalentes, e mesmo nesta forma podemos ter um constante arbitrária C . usando a segunda lei de Newton:

$$F_i = \frac{dp_i}{dt} \quad (6.12)$$

podemos obter recursivamente os incrementos de momento $dp_i = F_i dt$, usando o intervalo de tempo dt obtido de (6.9). Na simulação, procedemos como segue: começando da mesma condição inicial escolhemos alguma componente i do vetor posição e usamos as taxas de transição para dar o primeiro intervalo de tempo Δt , então esta componente do vetor posição é calculada diretamente da “concentração” da rede virtual. Então, os momentos são estimados por

$$p_k = p_{k_0} + F_k \Delta t, \quad (6.13)$$

$k = 1, 2, 3$ e as outras componentes do vetor posição são dadas por

$$x_j = x_{j_0} + \frac{p_j}{m} \Delta t, \quad (6.14)$$

com $j \neq i$. Sucessivamente interagimos e atualizamos o tempo e as outras variáveis em cada tentativa bem sucedida. É necessário enfatizar que as probabilidades de transição são dependentes da força F por que os momentos são dependentes dela, e também da componente i escolhida.

6.5 Pêndulo

Nesta seção aplicamos o desenvolvimento da seção anterior para obter a solução, via Monte Carlo, de um sistema composto de um pêndulo acoplado a uma mola, ou seja um pêndulo elástico em duas dimensões com as soluções mostradas na figura [6.9]. Comparamos com a solução exata, e a

concordância é excelente, sem efetuar médias. As médias neste caso não podem ser feitas como anteriormente, pois a relação entre o passo MC e o tempo real não é linear; uma maneira alternativa é armazenar os valores para alguns pontos, suficientes para construir a curva, e tirar as médias em tempos iguais ou o mais próximo possível.

6.6 Considerações finais

O método MCD desenvolvido neste trabalho para processos Markovianos contribui para a Mecânica Estatística de não equilíbrio, abrindo novas possibilidades de modelar processos de não equilíbrio com interpretação estocástica. Uma vez estabelecida a hierarquia para as probabilidades de transição, podemos obter a evolução temporal real. A evolução temporal depende da equação Mestra usada, porque a evolução temporal dos valores médios das quantidades físicas são calculados através dela. Os intervalos de tempo são variáveis estocásticas, dependentes funcionalmente da hierarquia escolhida. Foi apontado por Frensley [42] que a equação Mestra de Pauli tem problemas relacionados com a condição de continuidade. A despeito destes problemas que a equação Mestra possa ter no contexto da mecânica quântica, ela descreve bem vários sistemas, incluindo modelos sem Hamiltoniana como os modelos epidêmicos. Mas, independente da polêmica sobre a validade da equação Mestra, podemos usar as idéias do procedimento delineado neste trabalho para qualquer equação Mestra construída. Contudo, uma melhor compreensão da equação Mestra, em termos de primeiros princípios, é bem vinda no sentido de estabelecer relações rigorosas entre probabilidades de transição e a verdadeira hierarquia de processos que ocorrem na natureza e isto ainda é um problema que não foi resolvido. É importante apontar que a simulação é uma boa ferramenta para tal fim.

Nós obtemos com o método desenvolvido aqui, a distribuição real dos intervalos de tempo. Estes tempos são calculados usando qualquer propriedade física extensiva do sistema. Entretanto, precisamos ser cuidadosos na escolha desta quantidade e também na sua aplicação, para descrever adequadamente o fluxo de eventos. Tendo a evolução real de quantidades físicas, podemos ver as propriedades do sistema no equilíbrio e fora do equilíbrio. Quanto a sistemas clássicos, fica como futura pretensão, extender o método para sistemas de muitas partículas.

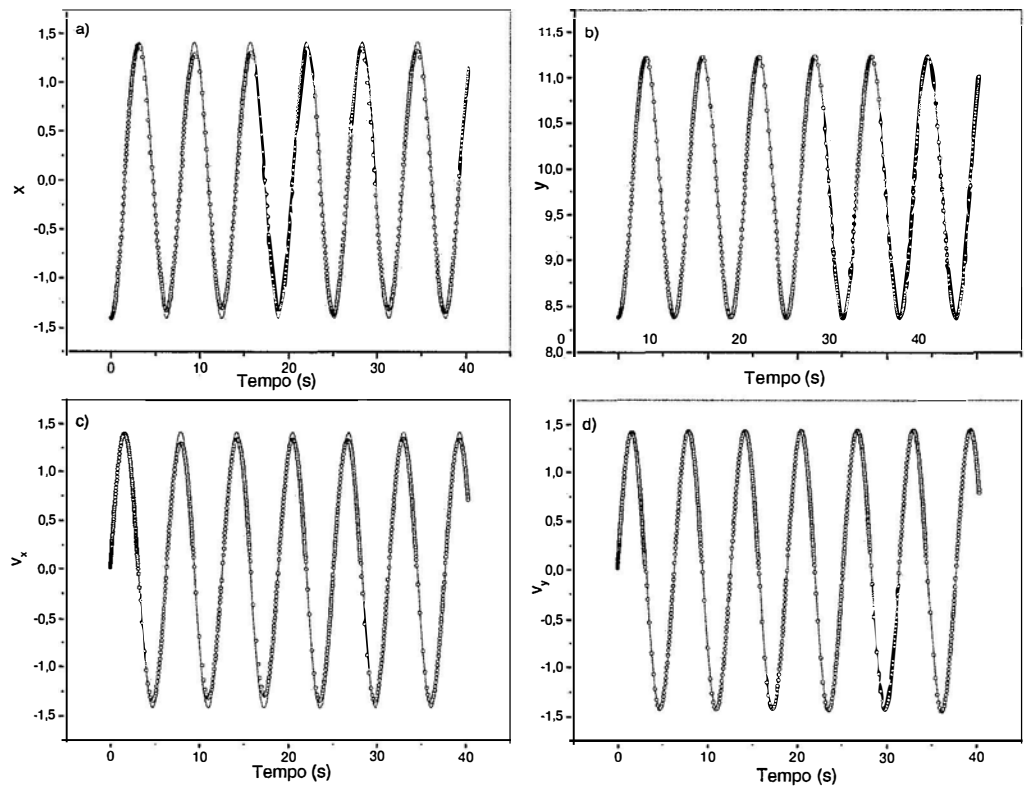


Figura 6.9: Pêndulo elástico; soluções obtidas pelo método Monte Carlo (círculos) e comparada à solução exata (linha). Na parte *a* e *b* são mostradas as componentes x e y respectivamente e nas partes *c* e *d* são mostradas as componente x e y da velocidade.

Capítulo 7

Apêndice A

Processos Estocásticos

Um processo estocástico é uma coleção de variáveis randômicas X_t , em que t pode ser discreto ou contínuo. As propriedades estocásticas de $\{X_t\}$ são expressas pela função de distribuição conjunta ([17])

$$\begin{aligned} P_n(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_n, t_n) dx_1 dx_2 \dots dx_n &= \text{probabilidade que} \\ x_1 &< X_{t_1} < x_1 + dx_1 \\ x_2 &< X_{t_2} < x_2 + dx_2, \dots, \\ x_n &< X_{t_n} < x_n + dx_n \end{aligned}$$

O processo é definido de maneira única pelo conjunto destas funções distribuição para $n = 1, 2, \dots$, que em geral é infinita. Quando os valores $X_{t_1} = x_1, X_{t_2} = x_2, \dots, X_{t_k} = x_k$ são dados, as variáveis restantes obedecem a função de distribuição de probabilidade

$$P(x_{k+1}, t_{k+1}; \dots; x_n, t_n \mid x_1, t_1; \dots; x_k, t_k) = \frac{P_n(x_1, t_1; \dots; x_k, t_k; x_{k+1}, t_{k+1}, \dots, x_n, t_n)}{P_k(x_1, t_1; \dots; x_k, t_k)}$$

esta é a distribuição de probabilidades de $X_{t_{k+1}}, \dots, X_{t_n}$, na qual x_1, \dots, x_k entram como parâmetros. Colocando os t_i em ordem cronológica, então o processo é Markoviano¹ se esta probabilidade condicional depende somente

¹Andrei Andreevitch Markov (1856-1922).

do último valor x_k em t_k e é independente dos valores anteriores $x_{i < k}$. Isto deve valer para todo n , para qualquer escolha de k e para qualquer t_1, \dots, t_k e x_1, \dots, x_k . Se este for o caso, todos P_n podem ser construídos uma vez que P_1 e P_2 são dados, por exemplo, $P_3(x_1, t_1; x_2, t_2, x_3, t_3) = P(x_3, t_3 \mid x_1, t_1; x_2, t_2)P_2(x_1, t_1; x_2, t_2)$

Para processos Markovianos então é natural denominar a função $P(x_2, t_2 \mid x_1, t_1)$ com o nome probabilidade de transição.

A equação Mestre

As probabilidades de transição para um processo Markoviano X que começa em um estado i e vai para um estado j no tempo $(t+s)$ passando por um estado intermediário k satisfazem a equação de Chapman-Kolmogorov ([15], [17]):

$$P_{ij}(t+s) = \sum_k P_{ik}(t)P_{kj}(s).$$

No instante zero, qualquer que seja o processo, a derivada de P_{ij} deve satisfazer a :

$$\dot{P}_{ij}(0) = -\alpha\delta_{ij} + \alpha Q_{ij} \quad (\text{A.1})$$

na qual $\delta_{ij} = 0$ para $i \neq j$ e 1 para $i = j$, ou seja a derivada é negativa para o sistema permanecer no estado i ; positiva, caso contrário, e $\sum_j Q_{ij} = 1$.

Derivando a equação de Chapman-Kolmogorov em relação ao tempo teremos:

$$\dot{P}_{ij}(t+s) = \sum_k P_{ik}(t)P'_{kj}(s)$$

em $s = 0$ a equação acima fica

$$\dot{P}_{ij}(t) = \sum_k P_{ik}(t)P'_{kj}(0)$$

substituindo (A.1) na equação anterior teremos

$$\begin{aligned}
 \dot{P}_{ij}(t) &= \sum_k P_{ik}(t) [-\alpha\delta_{kj} + \alpha Q_{kj}] \\
 &= \sum_k P_{ik}(t) \alpha \delta_{kj} Q_{kj} - \sum_k \alpha P_{ik}(t) \delta_{kj} \\
 &= \sum_k P_{ik}(t) \alpha Q_{kj} - \sum_k \alpha P_{ik}(t) \delta_{kj} \\
 &= \sum_k P_{ik}(t) \alpha Q_{kj} - \alpha P_{ij}(t) .1
 \end{aligned}$$

mas $\sum_k Q_{jk} = 1$, assim temos:

$$\begin{aligned}
 \dot{P}_{ij}(t) &= \sum_k \alpha Q_{kj} P_{ik}(t) - \sum_k \alpha Q_{jk} P_{ij}(t) \\
 \dot{P}_{ij}(t) &= \sum_k w_{k \rightarrow j} P_{ik}(t) - \sum_k w_{j \rightarrow k} P_{ij}(t)
 \end{aligned}$$

alternativamente podemos obter:

$$\begin{aligned}
 P_j(t) &= \sum_i \Pi_{(i)} P_{ij}(t) \\
 \dot{P}_j(t) &= \sum_k w_{k \rightarrow j} P_k(t) - \sum_k w_{j \rightarrow k} P_j(t)
 \end{aligned}$$

que é a Equação Mestra usual.

Capítulo 8

Apêndice B

Método Runge-Kutta

Os métodos numéricos para problemas de valor inicial cujos valores de partida são implícitos, em geral, são chamados de Runge-Kutta. São caracterizados por expressar a solução com diferentes argumentos. Este método é extremamente popular devido a facilidade de sua implementação computacional.

Seja um sistema de equações diferenciais dado por:

$$\dot{y} = f(x, y, z)$$

$$\dot{z} = g(x, y, z);$$

$$y(x_0) = y_0, \quad z(x_0) = z_0,$$

sendo y_0 e z_0 os valores iniciais. Restringimo-nos a um sistema de duas equações por questão de simplicidade. As soluções são dadas por:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \tag{B.1}$$

$$z_{n+1} = z_n + \frac{1}{6}(l_1 + 2l_2 + 2l_3 + l_4) \quad (\text{B.2})$$

na qual

$$k_1 = hf(x_n, y_n, z_n)$$

$$l_1 = hg(x_n, y_n, z_n)$$

$$k_2 = hf\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_1, z_n + \frac{1}{2}l_1\right)$$

$$l_2 = hg\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_1, z_n + \frac{1}{2}l_1\right)$$

$$k_3 = hf\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_2, z_n + \frac{1}{2}l_2\right)$$

$$l_3 = hg\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_2, z_n + \frac{1}{2}l_2\right)$$

$$k_4 = hf\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_3, z_n + \frac{1}{2}l_3\right)$$

$$l_4 = hg\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_3, z_n + \frac{1}{2}l_3\right)$$

h é passo (de tempo) que deve ser escolhido para o problema particular. Ao utilizar-se as equações. (B.1) e (B.2), primeiro se calculam os diversos k 's e l 's e em seguida determina-se y_{n+1} e z_{n+1} e como cada um dos k 's e l 's dependem de x_n , y_n , e z_n eles devem ser calculados de novo para cada n .

Capítulo 9

Apêndice C

Intervalos de tempo

Para estimar o tempo entre eventos, podemos iniciar com a equação mais geral dada por 5.4 e escrever:

$$\frac{dA}{dt} = \left(\sum_{i>j} w_{j \rightarrow i} P_j A_j^\dagger + \sum_{i<j} w_{j \rightarrow i} P_j A_i \right) - \left(\sum_{i<j} w_{j \rightarrow i} P_j A_j + \sum_{i>j} w_{j \rightarrow i} P_j A_i^\dagger \right) \quad (\text{C.1})$$

por simplicidade escrevemos a equação (5.5) com taxas efetivas inspiradas em (C.1) na forma aproximada:

$$\frac{\Delta A}{\Delta t} \simeq \bar{w}_+ A^\dagger - \bar{w}_- A \quad (9.1)$$

Utilizando o número total de eventos $\sum_e f_e$ podemos escrever a relação:

$$\frac{\Delta A}{\Delta t} = \frac{\Delta A}{\Delta t_i \sum_e f_e} \quad (9.2)$$

com $\Delta t_i = \frac{\Delta A}{\sum_e f_e}$, a qual utilizamos par estimar o intervalo de tempo entre eventos sucessivos. Podemos também escrever a seguinte equação:

$$\Delta A = \sum_{in} f_{in} \Delta A_{in} + \sum_d f_d \Delta A_d$$

na qual $\Delta A_{in} = \Delta A_+$ e $\Delta A_d = \Delta A_-$ definidos no capítulo 5; Assim:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta A}{\Delta t_i \sum_e f_e} &= \sum_{in} \frac{f_{in}}{\Delta t_i \sum_e f_e} \Delta A_{in} + \sum_d \frac{f_d}{\Delta t_i \sum_e f_e} \Delta A_d \\ &\simeq \bar{w}_+ A^\dagger - \bar{w}_- A. \end{aligned}$$

Quando efetuamos uma transição em um passo MC, podemos utilizar as aproximações:

$$\frac{f_{in}}{\sum_e f_e} \frac{\Delta A_{in}}{\Delta t_i} \simeq \bar{w}_+ A_i^\dagger$$

ou

$$\frac{f_d}{\sum_e f_e} \frac{\Delta A_d}{\Delta t_i} \simeq -\bar{w}_- A_i,$$

dependendo se o evento que ocorreu aumenta ou diminui a grandeza A , respectivamente. Observe que em uma transição simples (ao nível microscópico) podemos utilizar a equação (C.1) e por exemplo, se ocorreu um aumento da grandeza A , podemos considerar apenas uma parcela das somas, isto é, $w_{j \rightarrow i} P_j A_j^\dagger$ com $i > j$. Como o estado j já é escolhido com probabilidade P_j , podemos omiti-lo dos cálculos escrevendo a equação:

$$\frac{f_{in}}{\sum_e f_e} \frac{\Delta A_{ij}}{\Delta t_i} \simeq w_{j \rightarrow i} A_j^\dagger$$

e assim estimar o intervalo de tempo ao nível microscópico:

$$\Delta t_i = \frac{f_{in}}{\sum_e f_e} \frac{\Delta A_{ij}}{w_{j \rightarrow i} A_j^\dagger}.$$

Capítulo 10

Apêndice D

Equação de Langmuir

Consideremos uma superfície de N sítios, dos quais M estão preenchidos. A concentração na configuração i é $\theta_i = \frac{M_i}{N}$. A concentração média depois de i passos é dada por:

$$\bar{\theta} = \sum_i P_i(t) \theta_i \quad (\text{D.1})$$

ou pela combinatória de N , M a M :

$$\bar{\theta} = \sum_{M=0}^N \binom{N}{M} P_M(t) \frac{M}{N}$$

ou ainda,

$$\bar{\theta} = \sum_{M=0}^N \binom{N-1}{M-1} P_M(t)$$

Portanto a derivada da equação acima fica:

$$\frac{d\bar{\theta}}{dt} = \sum_{M=0}^N \binom{N-1}{M-1} \frac{dP_M(t)}{dt} \quad (\text{D.2})$$

A equação Mestra (2.4) para o processo de adsorção-dessorção para um passo (como é realizado na simulação)

$$\frac{dP_M(t)}{dt} = w_A [MP_{M-1} - (N-M)P_M] + w_D [(N-M)P_{M+1} - MP_M] \quad (\text{D.3})$$

sendo w_A e w_D as taxas de adsorção e de dessorção. Agora, substituindo (D.3) em (D.2) temos

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{\theta}}{dt} = & w_A \left[\sum_{M=0}^N \binom{N-1}{M-1} MP_{M-1} - \sum_{M=0}^N \binom{N-1}{M-1} (N-M)P_M \right] + \\ & + w_D \left[\sum_{M=0}^N \binom{N-1}{M-1} (N-M)P_{M+1} - \sum_{M=0}^N \binom{N-1}{M-1} MP_M \right] \end{aligned}$$

usando as identidades abaixo

$$\begin{aligned} \binom{N-1}{M-1} M &= (N-1) \binom{N-2}{M-2} + \binom{N-1}{M-1} \\ (N-M) \binom{N-1}{M-1} &= (N-1) \binom{N-2}{M-1} \end{aligned}$$

$$\binom{N-1}{M-1} M = (N-1) \binom{N-2}{M-2} + \binom{N-1}{M-1}$$

e simplificando os termos idênticos temos:

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{\theta}}{dt} = & w_A \left[\sum_{M=0}^N \binom{N-1}{M-1} (N-1) P_{M-1} + \sum_{M=0}^N \binom{N-1}{M-1} P_{M-1} - \right. \\ & \left. \sum_{M=0}^N (N-1) \binom{N-2}{M-1} P_M \right] + w_D \left[\sum_{M=0}^N (N-1) \binom{N-2}{M-1} P_{M+1} \right. \\ & \left. - \sum_{M=0}^N (N-1) \binom{N-2}{M-2} P_M - \sum_{M=0}^N \binom{N-1}{M-1} P_M \right] \end{aligned}$$

Observando que:

$$\sum_{M=0}^N \binom{N-2}{M-2} P_{M-1} = \sum_{M=0}^N \binom{N-2}{M-1} P_M$$

e cancelando os termos idênticos obtemos:

$$\frac{d\bar{\theta}}{dt} = w_A \sum_{M=0}^N \binom{N-1}{M-1} P_{M-1} - w_D \sum_{M=0}^N (N-1) \binom{N-1}{M-1} P_M$$

mas,

$$\bar{\theta} = \sum_{M=0}^N \binom{N-1}{M-1} P_M \text{ e } 1 - \bar{\theta} = \sum_{M=0}^N \binom{N-1}{M} P_M.$$

Portanto, como queríamos, obtemos a equação de Langmuir:

$$\frac{d\bar{\theta}}{dt} = w_A(1 - \bar{\theta}) - w_D\bar{\theta}$$

Bibliografia

- [1] Prigogine, I., *O fim das certezas*. Tempo, caos e as leis da natureza. Tradução de Roberto Leal Ferreira. São Paulo: Editora UNESP, 1996.
- [2] Lebowitz, J.L., in "25 Years of Non-Equilibrium Statistical Mechanics", edited by J. J. Brey et al (Springer-Verlag, Barcelona, Spain, 1994).
- [3] Huang, K. *Statistical Mechanics*, John Wiley and Sons, New York London (1963).
- [4] Pathria, R.K., *Statistical Mechanics*, Pergamon Press, Oxford, 1972.
- [5] McQuarrie, D. *Statistical Mechanics*, Oxford University Press, Oxford, 1951.
- [6] Ma, S.K., *Statistical Mechanics*, World Scientific, Philadelphia, 1985.
- [7] Chandler, D., *Introduction to modern Statistical Mechanics*, Oxford University Press, New York, 1987.
- [8] Thompson, C. J., *Classical Equilibrium Statistical Mechanics* (Clarendon Press - Oxford, 1988)
- [9] Heermann, D.W., *Computer Simulation Methods in Teoretical Physics* Springer-Verlag Berlin Heidelberg 1986.
- [10] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller, *J. Chem. Phys.* **21**, 1087 (1953).
- [11] Binder, K., *Topics in Current Physics*, (Springer, Berlin, 1986), Vol. 7.
- [12] Gillespie, D. T. , *J. Comp. Phys.*, 22 (4), 403-34 (1976).

- [13] K. A. Fichthorn and W. H. Weinberg, *J. Chem. Phys.* 95, 1090 (1991).
- [14] O.E. Aiélo, V.J. Haas, A. Caliri and M.A. A. Silva, *Physica A.*, **282**, 546-558 (2000).
- [15] E. Çinlar, *An Introduction to Stochastic Processes* (Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1975).
- [16] W. Feller, *An Introduction to Probability Theory and Its Applications* (Wiley, New York, 1975).
- [17] Van Kampen, N. G., *Stochastic Processes in Physics and Chemistry* (North-Holland, Amsterdam, 1990).
- [18] G. Arfken, *Mathematical Methods for Physicists, 3rd*, Orlando, FL: Academic Press, pp 492-493, 1985.
- [19] L. D. Fosdick in: "Methods Comp. Phys.", *Academic Press*, Edts. B. Alder, S. Fernback and M. Røttenberg, vol. 1, pg. 245(1963).
- [20] Da Silva, M. A. A., Tese apresentada ao instituto de Física e Química de São Carlos, USP, para obtenção do Título de Doutor em Ciências Físicas, 1987.
- [21] Mouritsen O. G., *Computer Studies of Phase Transitions and Critical Phenomena*, Springer-Verlag (1984), pgs. 3-29).
- [22] A.B. Bortz, M., H. Kalos and J.L. Lebowitz, *Comput. Phys.* 17, 10 (1975).
- [23] A. Prados, J.J. Brey and B. Sánchez-Rey, *Journal of Statistical Physics*, 89, 709 (1997).I.
- [24] Stark, H., Woods, J. W., *Probability, Random Process, and Estimation Theory for Engineers* (Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1986).
- [25] *Surface Physics of Materials*, edited by J. M. Blakely (Academic Press, New York, 1975), volume
- [26] Marro, J., Bortz, A. B., Kalos, M. H., Lebowitz, J. L. *Phys. Rev. B* 12, 2000 (1975).

- [27] A.J. Lotka, *J. Am. Chem. Soc.* 42, 1595 (1920); Proc. Natl. Acad. Sci. U. S., 6, 410 (1920); N.S. Goel, S.C. Mintra, and E. W. Montroll, *Rev. Mod. Phys.*, 43, 231 (1971).
- [28] H.E. Stanley, N. Ostrowsky, *On Growth and Form*. Martinus Nijhoff Publishers, 1986.
- [29] C.B. dos Santos, D. Bardin, A. Caliri,, *Phys. Lett A* 238: (1) 54-58 JAN 26 (1998).
- [30] R.W. Thomas ed., *Spatial Epidemiology*, Pion Limited, London (1990).
- [31] D. Mollison, editor, *Epidemic Models: Their Structure and Relation to Data*, Cambridge Univ Press (1995); J. D. Murray, *Mathematical Biology*, Springer-Verlag, New York, Berlin (1989).
- [32] Binder, Kurt, *Topics in Applied Physics*, edited by K. Binder (Springer-Verlag, Berlin Heidelberg 1992), volume 71.
- [33] W.O. Kermack, A.G. McKendrick, *Proc. Roy. Soc. A* 115, 700-721 (1927); 138, 55-83 (1932); 141, 94-122 (1933).
- [34] T.H. Keitt, and A.R. Anderson, *Philos. T. Roy Soc. B* 351: (1338) 1679 (1996).
- [35] G.H. Weiss and M. Dishon, *Math. Biosci.* 11, 261 (1971)
- [36] C.J Rhodes and R.M. Anderson, *Philos. Trans. Roy. Soc. B* 351: (1348) 1679 (1996)
- [37] N.T.J. Bailey, *The Mathematical Theory of Infectious Diseases and its Applications*, Charles Griffin & Company LTD, 1975.
- [38] A. Johansen, *J. Theo. Biol.* 178, 45 (1996)
- [39] V.J. Haas, A. Caliri and M.A.A. da Silva, *J. of Biol. Phys.*, 25, 309 (1999).
- [40] O.E. Aiélo, A. Caliri, M.A.A. Silva, a ser submetido.
- [41] R.J. Glauber, *J. Math. Phys.* 4, 294 (1963).
- [42] W.R. Frenseley, *Rev. Mod. Phys.*, 62,745 (1990)