

Tiago Boff Pedro

**ESTUDO DE MODELO EPIDEMIOLÓGICO COMPETITIVO COM
DINÂMICA ESTOCÁSTICA NÃO-MARKOVIANA**

Tese submetida ao Programa de Pós-Graduação
em Física para a obtenção do Grau de Dou-
tor em Física.

Orientador: Prof. Dr. Wagner Figueiredo

Florianópolis(SC)

2017

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor,
através do Programa de Geração Automática da Biblioteca Universitária da UFSC.

Pedro, Tiago Boff

Estudo de modelo epidemiológico competitivo com
dinâmica estocástica não-Markoviana / Tiago Boff
Pedro ; orientador, Wagner Figueiredo, 2017.
140 p.

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Santa
Catarina, Centro de Ciências Físicas e Matemáticas,
Programa de Pós-Graduação em Física, Florianópolis,
2017.

Inclui referências.

1. Física. 2. Dinâmica estocástica. 3. Aproximação
de campo médio. 4. Simulação de Monte Carlo dinâmico.
5. Modelos epidemiológicos. I. Figueiredo, Wagner.
II. Universidade Federal de Santa Catarina.
Programa de Pós-Graduação em Física. III. Título.


**ESTUDO DE MODELO EPIDEMIOLÓGICO COMPETITIVO COM
DINÂMICA ESTOCÁSTICA NÃO-MARKOVIANA**

Tiago Boff Pedro

Esta Tese foi julgada adequada para a obtenção do título de **DOUTOR EM FÍSICA**, na área de concentração **Física da Matéria Condensada e Mecânica Estatística** e aprovada em sua forma final pelo Programa de Pós-Graduação em Física.



Prof. Dr. Wagner Figueiredo
(UFSC - orientador)



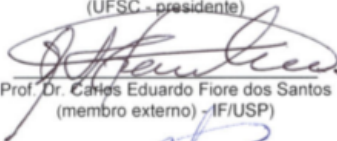
Ivan Helmuth Bechtold
(UFSC - Coordenador do Programa)



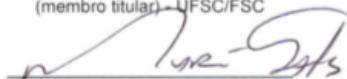
Prof. Dr. Wagner Figueiredo
(UFSC - presidente)



Prof. Dr. Paulo Juliano Liebgott
(membro titular) - UFSC/FSC



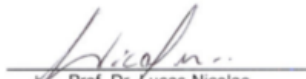
Prof. Dr. Carlos Eduardo Fiore dos Santos
(membro externo) - IF/USP



Prof. Dr. Márcio Santos
(membro titular) - UFSC/FSC



Prof. Dr. Jeferson Jacob Arenzon
(membro externo) - IF/UFRGS



Prof. Dr. Lucas Nicolao
(membro titular) - UFSC/FSC

Prof. Dr. Nilton da Silva Branco
(membro suplente) - UFSC/FSC

AGRADECIMENTOS

Um princípio interessante da física estatística é a universalidade, então escrevo uma página de agradecimentos com caráter universal. O curso de doutorado foi uma fase bastante importante na minha formação pessoal, um tanto pelo aprendizado acadêmico, um tanto pelo conhecimento do mundo, e especialmente pela sabedoria e autoconhecimento que adquiri com as pessoas que me ajudaram a aprender e enfrentar as dificuldades sentidas durante o período no qual escrevi esta Tese. Agradeço às pessoas que dedicaram seu tempo e atenção e colaboraram com esse processo, compartilhando conhecimento técnico e teórico, fazendo leituras e revisões, ou apenas ouvindo eu falar sobre assuntos dessa Tese, conduzindo o pensamento até uma ideia interessante a ser implementada, ou um erro importante a ser corrigido. Agradeço à todas as pessoas que participaram de alguma forma positiva em algum momento ao longo dessa jornada, enfim, a quem contribuiu com uma micro-parte, para que esta macro-coisa viesse a existir, gratidão!

O futuro é uma probabilidade,
a única estabilidade é aceitar a incerteza.
Probabilidade, Banda Eddie.

RESUMO

Nesta Tese, estudamos o comportamento estacionário e dinâmico de um sistema de partículas interagentes não-Markoviano. Com base em modelos epidemiológicos clássicos espacialmente estruturados, apresentamos um modelo de rede com dinâmica estocástica que considera interações competitivas dependentes da história evolutiva do sistema e da topologia da rede em que a dinâmica é realizada. Para um dado nodo i com grau k_i , além das variáveis de estado $s_i = v, A, B$, que representam nodo vazio, ocupado por uma partícula do tipo A ou ocupado por uma partícula do tipo B , respectivamente, também atribuímos a cada nodo um estado de adaptação, ou *fitness*, f_i , que evolui no tempo e determina as taxas dos processos dinâmicos possíveis na vizinhança do nodo i através de uma dada função $\varepsilon(f_i, f_j, k_i, t)$. No contexto epidemiológico, um nodo vazio representa um indivíduo suscetível ao contágio de duas epidemias. Incluímos um processo de interação entre essas doenças, no qual uma partícula A transforma-se numa partícula B , representando uma tipo de *mutação epidêmica* definida pela taxa λ_m . Atribuímos ao sistema uma capacidade de memorização de *fitness*, regulada por um parâmetro de decaimento τ , e investigamos os efeitos provenientes da memória e da topologia através de simulações de Monte Carlo Dinâmico na rede quadrada e Barabási-Albert com diferentes valores de τ . As simulações apresentam concordância qualitativa com as previsões de campo médio para o comportamento estacionário do modelo. Os diagramas de fases para as redes consideradas são semelhantes, apresentando uma fase com a presença de ambas epidemias, dependendo da taxa de mutação λ_m .

Palavras-chave: Dinâmica estocástica. Aproximação de campo médio. Simulação de Monte Carlo dinâmico. Modelos epidemiológicos.

ABSTRACT

In this thesis we study the stationary and dynamic behavior of a non-Markovian interacting particle system. Based on spatially structured classic epidemiological models, we present a network model with stochastic dynamics that considers competitive interactions dependent on the evolutionary history of the system, and also on the network topology over which the dynamics is performed. For a given node i with degree k_i , in addition to the state variables $s_i = v, A, B$, which represent vacant node, occupied by particle of type A or occupied by particle of type B , respectively, we also assign to each node an adaptation, or fitness state, f_i , which evolves in time and determines the rates of the possible dynamic processes in the neighborhood of the node i by means of a given function $\varepsilon(f_i, f_j, k_i, t)$. In the epidemiological context, an empty node represents an individual susceptible to the contagion of two epidemics. We have included an interaction process between these diseases, in which an A particle becomes a B particle, representing a type of *epidemics mutation* defined by the rate λ_m . We attribute to the system a memory fitness capability, regulated by a decay parameter τ , and investigate the effects of memory and topology through Dynamic Monte Carlo simulations in the square lattice and the Barabási-Albert network with different values of τ . The simulations show qualitative agreement with the mean field predictions for the stationary behavior of the model. The phase diagrams for the networks considered are similar, presenting a phase with the presence of both epidemics, depending on the mutation rate λ_m .

Keywords: Stochastic dynamics. Mean-field theory. Dynamic Monte Carlo simulation. Epidemiological models.

LISTA DE FIGURAS

- Figura 1 Comportamento do parâmetro de ordem como função da taxa de espalhamento no Processo de Contato. O ponto crítico λ_c localiza a transição contínua entre a fase absorvente ($\rho = 0$) e a fase ativa ($\rho > 0$). 24
- Figura 2 Densidade de indivíduos infectados em função do tempo em um surto epidêmico, segundo os modelos SIS e SIR. 26
- Figura 3 Exemplos de redes homogêneas regulares e aleatórias em uma e duas dimensões. 35
- Figura 4 Exemplo de rede de *pequeno-mundo* com $N = 8$ e $m = 2$ inicialmente conectada. Após o religamento das arestas a rede passa a ter nodos altamente conectados, conhecidos como *hubs*. 37
- Figura 5 Exemplo de rede heterogênea construída com o mecanismo de ligação preferencial de Barabási-Albert. 38
- Figura 6 No Processo de Contato bidimensional (esquerda), a probabilidade de ocupação do nodo vazio é proporcional a 4λ , caracterizando a aditividade das interações. Com a introdução de memória (centro), as partículas podem ter diferentes estados de adaptação e as taxas de criação para cada conexão são calculadas de forma independente. Numa situação genérica do modelo que estudamos (direita), as taxas de criação características são distintas e determinantes na competitividade entre as espécies. 40
- Figura 7 Perfil da função $\varepsilon(f, k) = \left[1 + \exp\left(\frac{k}{4} \frac{f-5}{5}\right)\right]^{-1}$. Partículas ocupando nodos de grau elevado são mais efetivas quando possuem *fitness* maior que o da vizinhança, e menos efetivas caso contrário. 43
- Figura 8 Na configuração do quadro 1a, o processo com menor tempo de realização é uma mutação do tipo $BA \rightarrow B^*B^*$, destacada com uma seta cinza. No passo seguinte (quadro 1b), o processo de menor tempo é uma aniquilação $B \rightarrow v$ realizada pela partícula em destaque, que gera

um nodo vazio (quadro 1c). Nesse caso a trajetória leva o sistema até a fase absorvente. De forma semelhante, mostramos nos quadros (2a) a (2d) as configurações de outra trajetória que leva o sistema até a fase Av. Cores representam diferentes estados e diâmetros representam valores de *fitness*. 48

Figura 9 Diagrama esquemático representando os processos de *reação-difusão* do modelo proposto no caso sem memória. Cada transição possível (setas) ocorre com taxa característica definida pelos parâmetros indicados. 49

Figura 10 Probabilidades características dos processos dinâmicos do modelo como funções do parâmetro de controle. 50

Figura 11 Densidade de partículas A e B em função do tempo para diferentes valores de λ_m , obtidos na aproximação de campo médio para o sistema sem memória. 54

Figura 12 Densidade de partículas A e B em função do tempo para diferentes valores de λ_m , obtidos na aproximação de campo médio para o sistema com memória infinita. 55

Figura 13 *Fitness* total como função do tempo para diferentes valores de λ_m , e o correspondente diagrama com os valores de $\langle f_i \rangle$ no instante final de iteração, obtidos na aproximação de campo médio para o sistema com memória infinita. 56

Figura 14 Densidades e parâmetro de ordem $p = p_B + p_v$ como funções de λ_m no regime estacionário, obtidos na aproximação de campo médio para os casos de sistemas sem memória e com memória infinita. 57

Figura 15 Diagrama de blocos para o algoritmo implementado nas simulações computacionais. 61

Figura 16 Evolução temporal das densidades de partículas partindo de diferentes condições iniciais na rede quadrada, nos casos $\tau = 0$ (esquerda) e $\tau = 1$ (direita). 63

Figura 17 Configurações do sistema em diferentes passos de Monte Carlo,

partindo da configuração A50B50 nos casos $\tau = 0$ (acima) e $\tau = 1$ (abaixo). Partículas A aparecem em azul, partículas B em verde, e nodos vazios em vermelho.	64
Figura 18 Configurações do sistema em diferentes passos de Monte Carlo, partindo da configuração ClusterAseedB nos casos $\tau = 0$ (acima) e $\tau = 1$ (abaixo). Partículas A aparecem em azul, partículas B em verde, e nodos vazios em vermelho.	64
Figura 19 Evolução temporal das densidades de partículas partindo de diferentes condições iniciais na rede Barabási-Albert, nos casos $\tau = 0$ (esquerda) e $\tau = 1$ (direita).	65
Figura 20 Densidades de partículas e nodos vazios em função do tempo (passos de Monte Carlo) para vários valores de λ_m e o correspondente diagrama de coberturas que apresenta os valores estacionários das densidades.	69
Figura 21 Susceptibilidade em função do parâmetro de controle λ_m para $\tau = 0$. Incluímos também as susceptibilidades associadas às densidades de partículas e nodos vazios.	70
Figura 22 Valores médios das distribuições de <i>fitness</i> das partículas $\langle f_A \rangle(t)$ e $\langle f_B \rangle(t)$, e do <i>fitness</i> total do sistema $\langle f_{tot} \rangle(t)$ em função do tempo (passos de MC) para vários valores de λ_m , e o correspondente diagrama apresentando os respectivos valores estacionários.	71
Figura 23 Parâmetro de ordem e susceptibilidade como funções do parâmetro de controle para a rede quadrada com $\tau = 0.5$	73
Figura 24 Comportamento temporal de $\langle f_{tot} \rangle(t)$ e valores estacionários $\langle f_i \rangle(\infty)$ para a rede quadrada com $\tau = 0.5$	74
Figura 25 Parâmetro de ordem e susceptibilidade como funções do parâmetro de controle para a rede quadrada com $\tau = 1$	75
Figura 26 Comportamento temporal de $\langle f_{tot} \rangle(t)$ e valores estacionários $\langle f_i \rangle(\infty)$ para a rede quadrada com $\tau = 1$	76
Figura 27 Parâmetro de ordem e susceptibilidade como funções do parâ-	

metro de controle na rede quadrada com diferentes valores de τ . Os picos de χ_p localizam as respectivas transições λ_m^1 e λ_m^2 78

Figura 28 Parâmetro de ordem e susceptibilidade (acima); densidades e valores estacionários de $\langle f_i \rangle(\infty)$ (abaixo), como funções do parâmetro de controle λ_m 79

Figura 29 Parâmetro de ordem e susceptibilidade (acima); densidades e valores estacionários de $\langle f_i \rangle(\infty)$ (abaixo), como funções do parâmetro de controle λ_m 80

Figura 30 Parâmetro de ordem e *fitness* total como funções de λ_m para diferentes tamanhos da rede quadrada, nos casos $\tau = 0$ (esquerda) e $\tau = 1$ (direita). A localização da primeira transição é pouco afetada, entretanto, efeitos de tamanho finito são observados na transição para o estado absorvente. Esperamos que no limite $N \rightarrow \infty$ uma transição contínua seja observada para λ_m^2 suficientemente grande. 82

Figura 31 Parâmetro de ordem e *fitness* total como funções de λ_m para diferentes tamanhos da rede Barabási-Albert, nos casos $\tau = 0$ (esquerda) e $\tau = 1$ (direita). Efeitos de tamanho finito nas proximidades dos pontos de transição são mais pronunciados. 83

Figura 32 Diagramas de fases no plano τ vs λ_m para as redes quadrada (acima) e Barabási-Albert (abaixo), com $N = 400$ 84

Figura 33 Gráficos log-log para a probabilidade de sobrevivência, o número médio de partículas e o deslocamento quadrático médio de partículas do tipo B em função do tempo. Exceto pelo expoente δ no caso $\tau = 0$, os expoentes dinâmicos obtidos não concordam com os valores de referência para a classe de universalidade da PD em duas dimensões, $\delta = 0.4505(10)$, $\eta = 0.2295(10)$ e $\zeta = 1.1325(10)$ (MARRO; DICKMAN, 1999). 87

Figura 34 Configurações do sistema ($L = 100$) em diferentes passos de Monte Carlo durante o espalhamento de partículas B com $\lambda_m = 0.5$, no caso $\tau = 0$. Partículas A aparecem em azul, partículas B em verde, e nodos vazios em vermelho. 88

Figura 35 Diferentes configurações do sistema, agora no caso $\tau = 1$ com $\lambda_m = 1$ 89

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	21
1.1	MODELOS EPIDEMIOLÓGICOS CLÁSSICOS	22
	Processo de Contato	22
	Modelos SIS, SIR e SEIR	25
1.2	MOTIVAÇÕES	26
2	FUNDAMENTOS BÁSICOS DA TEORIA DE REDES	31
2.1	PROPRIEDADES MÉTRICAS DE REDES	31
	Grau, distribuição de grau e grau médio	31
	Correlações de grau	32
	Comprimento de menor caminho	33
2.2	CLASSES DE REDES	33
	Redes homogêneas	34
2.2.0.1	Redes regulares	34
2.2.0.2	Redes aleatórias	34
	Redes heterogêneas	34
2.2.0.3	Redes Watts-Strogatz	36
2.2.0.4	Redes Barabási-Albert	36
	Redes direcionadas	37
3	PROCESSOS DE CONTATO INTERAGENTES COM MEMÓRIA	39
3.1	DESCRIÇÃO DO MODELO	39
	Efeitos de Memória	40
3.1.0.5	<i>Fitness</i> e tempo de memorização	40
	Efeitos topológicos	41
3.1.0.6	Racionalidade dependente do grau	41
	Processos dinâmicos	42
3.1.0.7	Efetividade	42
3.1.0.8	Regras de evolução temporal	42
3.1.0.9	Parametrização	46
3.2	MÉTODO DE CAMPO MÉDIO	47

Evolução temporal	53
Estado estacionário	53
4 SIMULAÇÃO DE MONTE CARLO DINÂMICO	59
4.1 MÉTODO DE SIMULAÇÃO	59
4.2 COMPORTAMENTO DEPENDENTE DO TEMPO	60
Rede Quadrada	62
Rede Barabási-Albert	65
4.3 DIAGRAMA DE COBERTURA	66
Rede quadrada	67
4.3.0.10 Caso $\tau = 0$	67
4.3.0.11 Caso $\tau = 0.5$	68
4.3.0.12 Caso $\tau = 1$	72
4.3.0.13 Casos $\tau = 0, 0.3, 0.6, e 0.9$	72
Rede Barabási-Albert	77
4.3.0.14 Caso $\tau = 0$	77
4.3.0.15 Caso $\tau = 1$	77
4.4 DIAGRAMA DE FASES	81
5 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	85
APÊNDICE A – Artigos publicados durante o doutorado ..	136
REFERÊNCIAS	137

1 INTRODUÇÃO

Uma quantidade de água fervente para preparar um chimarrão e um bloco de gelo para resfriar uma bebida são exemplos de diferentes estados termodinâmicos da água. A termodinâmica é um ramo da física que utiliza os conceitos de temperatura, calor, energia, trabalho e entropia para caracterizar o estado de um sistema no equilíbrio térmico, e possui aplicações em várias áreas da ciência e engenharia, como físico-química e nas engenharias química e mecânica. Decorrente das investigações de Sadi Carnot em 1824, Rudolf Clausius, William Thomson, James C. Maxwell e Ludwig Boltzmann em 1860, e Josiah Willard Gibbs em 1873, foi possível estabelecer um conjunto de 4 princípios conhecidos como leis da termodinâmica, que mais tarde foram explicadas em termos das propriedades dos constituintes microscópicos do sistema pela mecânica estatística (GIBBS, 1902).

A mecânica estatística é um ramo da física que estuda o comportamento médio de um sistema físico no qual o estado do sistema é incerto, ou probabilístico. Utilizando a teoria da probabilidade, a mecânica estatística justifica os conceitos de propriedades termodinâmicas macroscópicas em termos de grandezas microscópicas, além disso, torna possível estudar problemas fora do equilíbrio com base em conceitos semelhantes aos utilizados na descrição de equilíbrio. A mecânica estatística de *não-equilíbrio*, trata da modelagem microscópica da velocidade, ou taxa, de processos irreversíveis fora do equilíbrio, tais como reações químicas ou fluxos de partículas e de calor. O seu arcabouço teórico matemático desenvolvido até hoje vem sendo aplicado em áreas multidisciplinares do conhecimento, tais como ciências biológicas, sociais e econômicas, nas quais o conceito de equilíbrio termodinâmico geralmente não pode ser aplicado.

Uma ampla variedade de fenômenos naturais podem ser representados por processos estocásticos (ou aleatórios), desde o movimento de moléculas de um gás, ou a adsorção e reação de monômeros em um catalisador, até o crescimento de uma população viral ou bacteriana, e são usualmente investigados através de conjuntos de equações diferenciais e/ou simulados numericamente em computadores (TOMÉ; OLIVEIRA, 2001). De modo geral, as quantidades de interesse fundamentais são as frações de partículas (ou indivíduos) que compõem uma dada espécie, ou um dado compartimento do sistema. Por exemplo, considere um ecossistema natural fechado, composto de três espécies seguindo uma cadeia alimentar: um tipo de vegetação que se reproduz espontaneamente, e que serve de alimento para uma população de presas que, por sua vez, servem de alimento para uma terceira espécie predadora. Sistemas compostos de multi-agentes interdependentes como esse

podem apresentar uma fase *ativa* em que vegetação, presas e predadores sobrevivem, entretanto caso uma das espécies desapareça completamente, o sistema experimenta uma transição irreversível para uma fase *absorvente*, da qual a espécie extinta nunca volta a existir.

A estabilidade das fases ativas em sistemas como esse está diretamente ligada às relações entre as taxas, ou probabilidades por unidade de tempo, dos processos de reprodução e morte das espécies envolvidas (SATULOVSKY; TOMÉ, 1994). Se a população de presas cresce continuamente, a disponibilidade de vegetação irá diminuir; por outro lado, quando existem muitas presas, a população de predadores também tende a crescer, e como consequência do aumento da predação, a fração de presas deverá diminuir. Uma situação semelhante pode ocorrer em um sistema epidemiológico, no qual indivíduos podem estar suscetíveis, infectados, ou imunizados (ARGOLO et al., 2010). Dependendo das relações entre as velocidades de propagação, recuperação e imunização da epidemia, o sistema pode apresentar fases ativas endêmicas, nas quais um fração da população permanece infectada; ou fases absorventes, nas quais todos estão suscetíveis ou imunizados. Na seção seguinte veremos exemplos de modelos epidemiológicos clássicos apresentados na literatura, que formam a base para a construção do modelo que estudamos nesta Tese.

1.1 MODELOS EPIDEMIOLÓGICOS CLÁSSICOS

Modelos epidemiológicos clássicos têm como objetivo principal a previsão da prevalência epidêmica, definida como a fração de indivíduos infectados em relação ao total de uma população de indivíduos interagentes. Alguns exemplos de modelos clássicos nessa área de pesquisa são os modelos PC, SIS, SIR e SEIR.

PROCESSO DE CONTATO

Um modelo bastante simples que apresenta transição contínua entre uma fase ativa e uma fase absorvente é o Processo de Contato (PC). Proposto por T.E. Harris em 1974, trata-se de um modelo de rede com dinâmica estocástica caracterizada por processos de criação autocatalítica e aniquilação espontânea de partículas, e foi originalmente desenvolvido para descrever a propagação de uma doença epidêmica (HARRIS, 1974). Nós de uma rede podem estar vazios, representando indivíduos sadios, ou ocupados por uma partícula, representando indivíduos infectados. Para que um nó vazio torne-se ocupado é necessária a existência de pelo menos um nó ocupado

na sua vizinhança imediata, representando o processo de contágio epidêmico. Por outro lado, um dado nodo ocupado pode tornar-se vazio independentemente de sua vizinhança, representando um processo de recuperação espontânea.

A densidade média de partículas no regime de tempos longos é o parâmetro de ordem do modelo. A razão entre as taxas de criação e aniquilação, $\lambda = \beta/\mu$, conhecida como taxa de espalhamento, é o parâmetro de controle que determina em qual fase se encontrará o sistema no regime estacionário. Por simplicidade, define-se a taxa de aniquilação $\mu = 1$ para que a taxa de espalhamento seja equivalente à taxa de criação, e o parâmetro de controle possa ser definido através de uma única quantidade. O valor específico do parâmetro de controle para o qual o sistema experimenta uma transição de fase é o ponto crítico do modelo, como está ilustrado na Fig. 1. Para $\lambda < \lambda_c$ o sistema se encontra na fase absorvente, em que todos os nodos da rede estão vazios (sádios); para $\lambda > \lambda_c$ uma fração de nodos permanece ocupada (infectada), e o sistema encontra-se na fase ativa. No contexto epidemiológico, o ponto crítico λ_c representa o *limiar epidêmico*, separando as situações em que a prevalência epidêmica é zero (fase absorvente) e maior que zero (fase ativa endêmica).

Diferentes versões do PC já foram apresentadas na literatura, por exemplo o PCD, *Processo de Contato Difusivo* (LIGGETT, 1985), que permite que as partículas possam realizar um passeio aleatório ou um processo de exclusão; e o PCG, *Processo de Contato Generalizado* (DURRETT; GRIFFEATH, 1983), que introduz um novo parâmetro para a taxa de criação de partículas. Recentemente, de Oliveira e Dickman (de Oliveira; DICKMAN, 2011) propuseram um processo de contato bidimensional com dinâmicas competitivas, no qual observam uma fase ativa assimétrica incomum em que as sub-redes do sistema estão desigualmente povoadas. Nós também estudamos um sistema semelhante, onde consideramos interações locais competitivas para o processo de contato de duas espécies em uma e duas dimensões (PEDRO; SZORTYKA; FIGUEIREDO, 2014). Os efeitos de diferentes tipos de interações também foram analisados por Pianegonda e Fiore (PIANEGONDA; FIORE, 2014a), que relatam diferenças notáveis tais como transições de fase descontínuas (mesmo entre fases ativas), o aparecimento de pontos tricríticos e a estabilização de fases ativas para valores maiores do parâmetro de controle.

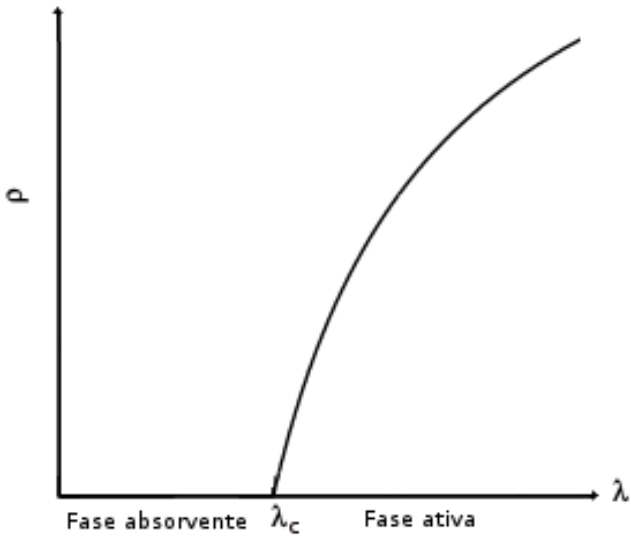


Figura 1 – Comportamento do parâmetro de ordem como função da taxa de espalhamento no Processo de Contato. O ponto crítico λ_c localiza a transição contínua entre a fase absorvente ($\rho = 0$) e a fase ativa ($\rho > 0$).

MODELOS SIS, SIR E SEIR

O modelo SIS, sigla para Suscetível-Infectado-Suscetível, considera uma população de indivíduos que podem estar em um dentre dois estados: suscetível ao contágio, ou infectado com uma dada doença. O estado da população evolui no tempo através de processos de contágio entre um indivíduo suscetível e um infectado, representado pela reação $S + I \rightarrow 2I$; e processos de recuperação espontânea, representados por $I \rightarrow S$. A dinâmica de evolução do sistema considera que esses processos ocorrem com taxas fixas, definidas pelos parâmetros β e μ que determinam as velocidades de contágio e recuperação, respectivamente. Como no Processo de Contato, a razão entre essas taxas define a taxa de espalhamento da doença, $\lambda = \beta/\mu$, que determina o estado final de prevalência epidêmica. Quando λ é menor que um certo valor λ_c , a população se recupera completamente e o sistema atinge o estado absorvente, sem epidemia. Se $\lambda > \lambda_c$, uma fração de indivíduos permanece infectada, e o sistema persiste em um estado ativo (endêmico) por tempo indeterminado.

O modelo Suscetível-Infectado-Removido (SIR), considera um terceiro estado acessível para os indivíduos da população, que confere imunidade eterna ao contágio da doença. Após ser infectado, o indivíduo é removido ao invés de se tornar suscetível novamente. Com essa modificação o sistema não apresenta estados estacionários ativos e sempre atinge o estado absorvente após o regime transiente, isso porque após ser removido, o indivíduo não volta a participar da dinâmica. As reações que caracterizam as regras do modelo são $S + I \rightarrow 2I$, representando processos de infecção que ocorrem com taxa β ; e $I \rightarrow R$, representando processos de cura que conferem imunidade ao contágio da doença, ocorrendo com taxa μ . O modelo Suscetível-Exposto-Infectado-Removido (SEIR), é um variante do modelo SIR que inclui o estado *exposto*, representando indivíduos recém infectados que ainda não são capazes de transmitir a doença. A inclusão do estado exposto é uma modificação com intuito de investigar efeitos provenientes de períodos encubados em doenças virais, tal como a gripe. As reações características da dinâmica do modelo SEIR são $S + I \rightarrow E + I$, com taxa β ; $E \rightarrow I$, com taxa γ ; e $I \rightarrow R$, com taxa μ .

Os comportamentos temporais da prevalência epidêmica para os modelos SIS e SIR (Fig. 2, adaptada de (PASTOR-SATORRAS et al., 2015)) no regime inicial são semelhantes, apresentando crescimento exponencial da fração de indivíduos infectados. Após o regime transiente, o modelo SIS converge para um estado estacionário ativo (endêmico), enquanto que o modelo SIR sempre converge para o estado absorvente. Recentemente, os autores da referência (CHEN et al., 2013) investigaram um modelo do tipo SIR que in-

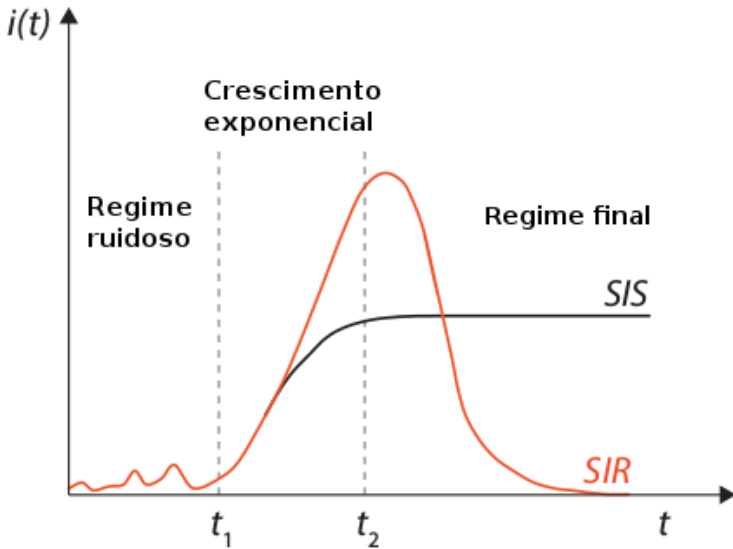


Figura 2 – Densidade de indivíduos infectados em função do tempo em um surto epidêmico, segundo os modelos SIS e SIR.

clui o efeito da *coinfecção cooperativa*. Nesse modelo, cada indivíduo pode ser infectado por duas doenças diferentes, sendo que um indivíduo infectado com uma doença tem uma probabilidade maior de ser infectado pela outra. Através do método de campo médio, os autores puderam observar transições de fase contínuas onde ambas as doenças devem coexistir, e também transições descontínuas onde uma parcela finita da população está afetada por ambas as doenças.

1.2 MOTIVAÇÕES

Transições de fase descontínuas entre fases ativas e fases absorventes são fenômenos interessantes que ocorrem em sistemas de partículas interagentes fora do equilíbrio, e constituem um importante campo de pesquisa em física estatística (MARRO; DICKMAN, 1999; ÓDOR, 2004; HENKEL; HINRICHSSEN; LÜBECK, 2008). Estudos recentes têm como objetivo identificar as diferentes propriedades e mecanismos mínimos necessários para permitir a estabilidade das fases ordenadas que caracterizam as transições

de fase descontínuas (ELGART; KAMENEV, 2006; FIORE, 2014; PEDRO; FIGUEIREDO; FERREIRA, 2015). Em modelos unidimensionais com interações de curto-alcance e com um único tipo de partícula, não se espera observar transições de fase descontínuas, porque a ausência de uma dependência da tensão superficial nas interfaces em relação ao tamanho dos domínios e o aumento das flutuações em sistemas de baixa dimensionalidade, não permitem a estabilização da coexistência ordenada das fases ativa e absorvente. O caráter da transição de fase é às vezes difícil de se determinar através de simulações numéricas, sendo necessários grandes sistemas e longos tempos de simulação (HENKEL; HINRICHSEN; LÜBECK, 2008; ÓDOR; DICKMAN, 2009). Em dimensões acima de um, o modelo do Processo de Contato pode exibir um comportamento tricrítico, no qual é observada a separação entre transições de fase contínuas e descontínuas (LÜBECK, 2006; GRASSBERGER, 2006; PIANEGONDA; FIORE, 2014b; OLIVEIRA; DICKMAN, 2014).

Em modelos com interações de curto alcance, com parâmetro de ordem de apenas um componente e um único estado absorvente, sem simetrias adicionais e sem desordem congelada, espera-se observar transições de fase contínuas caracterizadas pelo mesmo tipo de comportamento coletivo em grandes escalas, pertencentes à classe de universalidade da Percolação Dirigida (PD) (HINRICHSEN, 2000). A classe PD é provavelmente a classe de transição mais simples para sistemas fora do equilíbrio térmico. A Percolação Dirigida é um modelo paradigmático na física estatística de não-equilíbrio, de forma semelhante ao Modelo de Ising para sistemas magnéticos no equilíbrio térmico (BAXTER, 1982). Existem diferentes formulações para o modelo da PD. De modo geral, o sistema é definido através de um conjunto de conexões entre sítios de uma rede, representando caminhos possíveis para o escoamento de fluídos em um material poroso. Quando a conectividade microscópica entre os sítios é variada, o sistema exibe uma transição de fase de um estado macroscopicamente permeável, ou percolante, que tem como característica a presença de um componente gigante no sistema; para um estado impermeável, ou não percolante, no qual o maior componente do sistema é menor que um dado tamanho crítico. A PD também é utilizada como modelo para a descrição de propagação de epidemias, e apresenta uma transição entre estados em que a doença permanece ou é extinta no sistema, dependendo da taxa de propagação epidêmica.

A grande maioria de modelos de rede com dinâmica estocástica estudados recentemente possui regras de evolução temporal com base em processos de Markov, nos quais a taxa de transição para um estado futuro do sistema é determinada somente pelo seu estado atual, sendo independente do tempo passado e da história do sistema. Processos de Markov possuem aplicações

em uma ampla gama de tópicos, tais como física, química, computação, teoria de jogos, entre outros, contudo, a propriedade Markoviana não é uma condição necessária para o estudo de sistemas fora do equilíbrio. A introdução de memória permite que o estado do sistema em instantes de tempo anteriores influencie na evolução para o estado em instantes futuros, e pode originar novos e interessantes comportamentos que em geral não estão presentes em sistemas Markovianos (BOGUÑA; SERRANO, 2013; QIN et al., 2008; GERAMI, 2002; DOROGOVTSEV; MENDES, 2001; OHIRA, 2000).

Em uma formulação Markoviana para o modelo SIS, por exemplo, as probabilidades por unidade de tempo de um nodo suscetível tornar-se infectado ou de um nodo infectado se recuperar, são determinadas somente pelos parâmetros constantes β e μ , respectivamente. Essa formulação é baseada na aproximação de Poisson (TIJMS, 2003), na qual o tempo total que um dado nodo permanece suscetível quando encontra-se vizinho a um nodo infectado é uma variável aleatória, t_s , que segue uma distribuição de probabilidade exponencial, $P_s(t_s) = \beta e^{-\beta t_s}$. De forma análoga, o tempo total que um nodo permanece infectado, t_i , também segue uma distribuição de probabilidade exponencial, porém na forma $P_i(t_i) = \mu e^{-\mu t_i}$. Do ponto de vista da modelagem epidemiológica, as taxas de infecção e recuperação podem depender da história de evolução do indivíduo. O tempo de duração do período infectado em grande parte das doenças infecciosas têm distribuições que não corroboram com a aproximação de Poisson, apresentando um valor médio bem definido, porém com longas caudas não exponenciais (BLYTHE; ANDERSON, 1988).

É de interesse investigar se a introdução de diferentes mecanismos de memorização podem ser fatores determinantes nos diagramas de fase de modelos epidemiológicos clássicos, tendo em vista que as taxas de criação (contágio) e aniquilação (recuperação) tornam-se dependentes do tempo. Por exemplo, durante a propagação de uma epidemia real, a capacidade de memorização de eventos de contágio e recuperação pode ser fator determinante nas taxas com que os processos futuros irão ocorrer. Indivíduos que estão infectados podem memorizar e adaptar seus comportamentos com a finalidade de diminuir sua taxa de contágio no futuro; de forma semelhante, quando estão sadios podem passar a se proteger em locais infectados (FENICHEL et al., 2010). A *racionalidade* diante de um surto epidêmico real também é um fator interessante que pode depender do seu grau de conectividade, por exemplo, um indivíduo infectado que está conectado a vários indivíduos sadios pode agir racionalmente no sentido de reduzir sua taxa de contágio. Tendo isso em vista, é interessante investigar como o limiar epidêmico, ou seja, a taxa crítica de propagação acima da qual a epidemia torna-se endêmica pode depender da capacidade de memorização e da topologia da rede de interações na qual a epidemia se propaga (PASTOR-SATORRAS et al., 2015).

Investigamos os efeitos de memória no comportamento de um sistema de partículas interagentes que evoluem em redes com diferentes topologias. Com motivação em processos biológicos, tal como a propagação de epidemias e/ou crescimento de tumores, e com inspiração em modelos epidemiológicos clássicos, apresentamos um modelo de rede competitivo com dinâmica estocástica no qual cada nodo pode estar em um dentre três estados: nodo vazio; ocupado por uma partícula do tipo *A*; ou ocupado por uma partícula do tipo *B*. De forma semelhante ao modelo de Ising (BAXTER, 1982), as partículas interagem com a vizinhança alterando a configuração da rede. A dinâmica de interação é não-Markoviana, com taxas de transição que dependem do tempo através dos estados de *fitness*, ou *adaptação* das partículas. Nessa formulação, os processos associados a uma partícula adaptada podem ocorrer antes que outros processos possíveis na mesma vizinhança ocorram, de modo que a competição entre as diferentes espécies no sistema torna-se dependente da evolução histórica do estado de adaptação, e também da capacidade de memorização.

Esta Tese está organizada como segue. Alguns dos fundamentos básicos da teoria de redes são apresentados no capítulo 2, onde abordamos redes regulares e complexas. O capítulo 3 é dedicado à apresentação das regras e definições do modelo estudado, bem como das aproximações de campo médio. No capítulo 4 realizamos simulações de Monte Carlo Dinâmico para determinar o diagrama de fases e investigar seu comportamento estacionário e dependente do tempo, explorando efeitos de condições iniciais e diferentes parametrizações. Por fim, no capítulo 5 apresentamos nossas conclusões e perspectivas.

2 FUNDAMENTOS BÁSICOS DA TEORIA DE REDES

Neste capítulo apresentamos um breve resumo de alguns dos fundamentos e definições gerais relacionadas à teoria de redes. A teoria de redes fornece um quadro geral para investigação de fenômenos relacionados às interações entre indivíduos, com aplicações em várias áreas do conhecimento. Discussões mais extensas e aprofundadas podem ser encontradas em livros recentes (NEWMAN, 2010; BARRAT; BARTHÉLEMY; VESPIGNANI, 2008; DOROGOVTSSEV; MENDES, 2003).

2.1 PROPRIEDADES MÉTRICAS DE REDES

Redes são usualmente caracterizadas por diferentes quantidades estruturais: o número total de *nodos* que compõem a rede (também chamados de *sítios* no jargão da física da matéria condensada ou *agentes* nas ciências computacionais, biológicas e sociais); o número total de *arestas* que conectam um dado nodo, conhecido por *grau* ou *número de coordenação*; a *distribuição de grau* e o *grau médio* da rede, entre outras. No caso geral, as arestas de uma rede podem ser *ponderadas* e também *direcionadas*. Aqui serão consideradas apenas redes não-ponderadas e não-direcionadas, nas quais todas as arestas possuem o mesmo peso estatístico em qualquer direção.

GRAU, DISTRIBUIÇÃO DE GRAU E GRAU MÉDIO

Dado um nodo i , o grau k_i corresponde ao número de arestas (ou conexões) que i possui. Nas redes homogêneas todos os nodos possuem o mesmo número z de conexões, então $k_i = z$ é uniforme, de modo que o grau médio da rede nesse caso é $\langle k \rangle = z$. Em redes heterogêneas, o grau muda de nodo para nodo, então define-se a distribuição de grau $P(k)$ como a probabilidade de um dado nodo escolhido aleatoriamente ter grau k . O primeiro momento da distribuição de grau fornece o grau médio da rede, $\langle k \rangle$, que nos diz o quão densa é a rede. Os demais momentos da distribuição de grau também são úteis em varias situações, e podem ser calculados através de

$$\langle k^n \rangle = \sum_k k^n P(k). \quad (2.1)$$

O grau médio também pode ser obtido conhecendo-se o número total de nodos, N , e o número total de arestas, E , através da relação $\langle k \rangle = 2E/N$ (DO-

ROGOVTSEV; MENDES, 2003).

CORRELAÇÕES DE GRAU

Dada uma rede heterogênea com distribuição de grau $P(k)$, a distribuição conjunta $P(k, k')$ descreve a probabilidade de um nodo de grau k estar conectado a um nodo de grau k' . No caso descorrelacionado as variáveis k e k' são independentes, então $P(k, k') = P(k)P(k')$. De um modo geral, fortes correlações de grau são observadas em redes reais, entretanto a distribuição completa $P(k, k')$ é difícil de ser medida com precisão devido à estatística inevitavelmente insuficiente. Outras formas de medir correlações de grau-grau são a *conformidade* (do inglês *assortativity*) e a *conectividade de vizinhos*. A caracterização da conformidade de redes é útil em estudos epidemiológicos. Visto que redes sociais apresentam conectividade conforme (NEWMAN, 2002), doenças que atingem indivíduos de grau elevado têm maior probabilidade de se propagar para outros indivíduos de grau também elevado.

O coeficiente de conformidade, também conhecido como coeficiente de correlação de Pearson (DOROGOVTSSEV et al., 2010), é uma medida da correlação linear entre duas variáveis aleatórias, definido como a razão entre a covariância das variáveis (nesse caso os graus k e k'), pelo produto dos seus desvios padrão. A covariância é dada por

$$\begin{aligned} cov(k, k') &= \langle (k - \langle k \rangle)(k' - \langle k' \rangle) \rangle \\ &= \langle kk' - k\langle k' \rangle - \langle k \rangle k' + \langle k \rangle \langle k' \rangle \rangle, \\ &= \langle kk' \rangle - \langle k \rangle^2, \end{aligned}$$

onde usamos $\langle k \rangle = \langle k' \rangle$, visto que as variáveis k e k' tem a mesma distribuição de probabilidade. O desvio padrão é dado por

$$\sigma_k = \sqrt{\langle k^2 \rangle - \langle k \rangle^2}, \quad (2.2)$$

com isso temos o coeficiente de Pearson,

$$r = \frac{cov(k, k')}{\sigma_k \sigma_{k'}} = \frac{\langle kk' \rangle - \langle k \rangle^2}{\langle k^2 \rangle - \langle k \rangle^2}. \quad (2.3)$$

O coeficiente r está compreendido entre -1 e 1 , sendo que valores positivos indicam uma correlação entre os nodos de graus semelhantes, enquanto que valores negativos indicam correlação entre nodos de graus diferentes. No limite $r \rightarrow 1$ significa máxima correlação positiva, ou seja, trata-se de uma

rede perfeitamente *conforme*. No caso $r = 0$ a rede é dita não-conforme, e no limite $r \rightarrow -1$ a rede é completamente *disforme*.

A conectividade de primeiros-vizinhos, ou o grau médio de primeiros-vizinhos de um nodo com grau k , $\langle k_{pv} \rangle$, é outra forma de medir correlações estruturais em redes complexas, e é definida como

$$\langle k_{pv}(k) \rangle = \sum_{k'} k' P(k'|k), \quad (2.4)$$

onde $P(k'|k)$ é a probabilidade condicional de encontrar uma aresta com nodos de graus k e k' . Quando $\langle k_{pv} \rangle$ é função crescente de k , os nodos de grau elevado conectam-se, em média, aos nodos de grau também elevado, então a rede é dita *conforme*. Por outro lado, se $\langle k_{pv} \rangle$ é decrescente, nodos de grau elevado tendem a conectar-se aos nodos de grau baixo, então a rede é dita *disforme*.

COMPRIMENTO DE MENOR CAMINHO

Considere dois nodos quaisquer, v e v' de uma rede não-ponderada e não-direcionada. Um caminho de v até v' é uma sequência de nodos $P = (v_1 = v, v_2, \dots, v_n = v')$, de modo que o nodo v_i seja adjacente ao nodo v_{i+1} para $1 \leq i \leq n$, cujo comprimento é $n - 1$. O comprimento de menor caminho corresponde ao menor número de passos (ou nodos) necessários para gerar uma sequência de v até v' .

2.2 CLASSES DE REDES

Uma rede é uma construção geométrica composta por uma coleção de elementos conectados entre si. As conexões definem interações entre esses elementos, podendo estas ser direcionadas ou não-direcionadas. Uma rede de elementos conectados de forma regular, onde todos os elementos da rede possuem um número uniforme de conexões, é dita homogênea. Quando esses elementos conectam-se de forma variada, ou seja, conectando-se com uma quantidade não uniforme de vizinhos, essa rede é dita heterogênea, ou complexa.

REDES HOMOGÊNEAS

Redes homogêneas são construídas de maneira que todos os N nodos possuam um mesmo número fixo de vizinhos, ou seja, todos os nodos têm o mesmo grau, $k = z$. Redes homogêneas podem ser construídas com diferentes arquiteturas, dependendo do grau e da forma com que os nodos são conectados. Nesta seção consideramos redes regulares, nas quais a estrutura da rede é ordenada e as conexões entre nodos mantêm distâncias métricas fixas; ou aleatórias, nas quais os nodos podem estar conectados de maneira desordenada, com distâncias métricas que variam de nodo para nodo.

2.2.0.1 Redes regulares

Redes regulares têm padrão de conectividade ordenado. O exemplo mais simples de rede regular é aquele em que cada nodo conecta-se a dois vizinhos mais próximos (grau $z = 2$), com condições de contorno periódicas constituindo uma estrutura unidimensional circular. Exemplos de redes bidimensionais são a rede hexagonal ($z = 3$), a rede quadrada ($z = 4$) e a rede triangular ($z = 6$).

2.2.0.2 Redes aleatórias

Nas redes aleatórias o padrão de conexão entre nodos não é ordenado, nesse sentido difere de uma rede regular porque a distância entre nodos não é uniforme. Existem diferentes formas de aleatorizar uma rede, uma delas é selecionar aleatoriamente duas arestas que unem pares de nodos diferentes e religá-los alternadamente com probabilidade p , de modo que se $p \rightarrow 1$ a rede torna-se totalmente aleatória e possui máxima desordem.

REDES HETEROGÊNEAS

Redes heterogêneas constituem objetos multidimensionais com arquitetura complexa. Os nodos da rede têm grau k que pode variar de nodo para nodo de acordo com uma dada distribuição de grau $P(k)$. Outra quantidade muito importante que deve ser considerada em sistemas heterogêneos altamente correlacionados (o que ocorre quando o sistema está próximo ao ponto crítico) é a probabilidade condicional, $P(k'|k)$, de encontrar um dado par de nodos vizinhos que possuem graus k e k' . Redes com arquiteturas diferen-

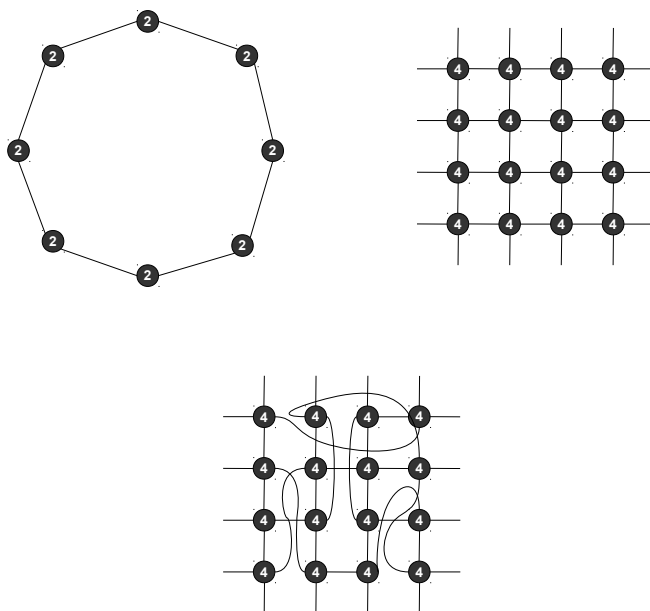


Figura 3 – Exemplos de redes homogêneas regulares e aleatórias em uma e duas dimensões.

tes possuem diferentes distribuições de probabilidade conjunta, $P(l, k)$, que caracterizam seus padrões de conectividade. Redes *conformes* são redes nas quais nodos de grau alto ligam-se mais provavelmente aos nodos de grau também alto. Nas redes *disformes* ocorre que nodos de grau alto ligam-se preferencialmente a nodos de grau baixo.

2.2.0.3 Redes Watts-Strogatz

O modelo de *pequeno-mundo* de Watts-Strogatz (WATTS; STROGATZ, 1998) considera uma rede com N nodos construída da seguinte maneira: inicialmente, cada nodo é conectado de forma ordenada e simétrica aos seus $2m$ vizinhos mais próximos. A partir dessa configuração inicial, uma fração p de arestas da rede é religada. Isso pode ser feito visitando todas as m arestas à direita de cada nodo considerado, religando-os com probabilidade p a um outro nodo qualquer escolhido aleatoriamente. O parâmetro m é o *grau mínimo desejado*, que indica o grau de conectividade da rede. Esta construção permite ajustar a topologia da rede, desde $p = 0$ (rede regular) até $p = 1$ (rede completamente desordenada). As redes que satisfazem $0 < p < 1$ têm as chamadas propriedades de pequeno-mundo. Uma importante propriedade das redes de pequeno-mundo está na relação entre a distância típica entre dois nodos escolhidos aleatoriamente, L , e o número total de nodos da rede, N , dada por

$$L \propto \log N. \quad (2.5)$$

Essa propriedade é bastante relevante em estudos de sistemas epidêmicos que evoluem em redes de pequeno-mundo, dado que a distância L pode ser entendida como o número de ‘passos’ que um agente epidêmico precisa realizar até atingir um nodo qualquer da rede. Como essa distância cresce com o logaritmo do número total de nodos, espera-se que a propagação epidêmica seja facilitada mesmo em redes grandes.

2.2.0.4 Redes Barabási-Albert

Uma rede de Barabási-Albert é um exemplo de rede livre de escala, cuja distribuição de grau $P(k)$ segue uma lei de potência

$$P(k) \sim k^{-\gamma}, \quad (2.6)$$

onde o expoente γ é tipicamente compreendido no intervalo $2 < \gamma < 3$. O modelo de Barabási-Albert (BA) define um algoritmo que utiliza o mecanismo

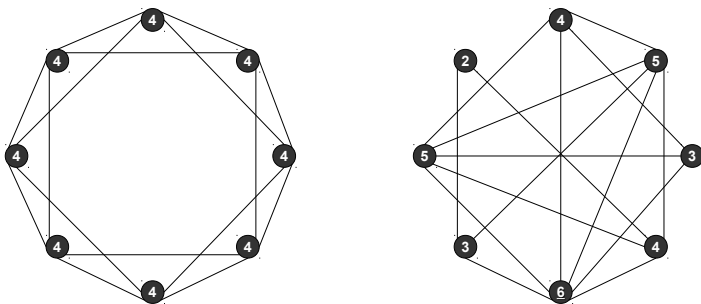


Figura 4 – Exemplo de rede de *pequeno-mundo* com $N = 8$ e $m = 2$ inicialmente conectada. Após o religamento das arestas a rede passa a ter nodos altamente conectados, conhecidos como *hubs*.

de *ligação preferencial*, que consiste em adicionar nodos à rede ligando-os a nodos já existentes que possuem maior grau com maior probabilidade. No contexto de redes sociais, esse mecanismo assume que indivíduos adicionados à rede têm maior chance de ligarem-se aos indivíduos ‘populares’, ou seja, indivíduos que possuem um número maior de conexões.

REDES DIRECIONADAS

Redes direcionadas são redes em que a conexão entre um par de nodos pode ter sentido único, de modo que um nodo em consideração afeta o estado de seu vizinho, porém não é afetado pelo estado desse mesmo vizinho. Redes direcionadas podem ser utilizadas para estudar modelos para a dinâmica do mercado de negócios, onde busca-se prever as probabilidades de compra e venda entre agentes que mantêm relações unilaterais. O direcionamento das conexões entre nodos também é relevante do ponto de vista de um sistema epidêmico. Em um processo de propagação contagiosa podem haver interações bloqueadas em um sentido, porém ativas no outro. Por exemplo, um indivíduo que pode infectar os seus vizinhos com uma dada doença B , mas que ao mesmo tempo é imune ao contágio de uma outra doença A que provém da sua vizinhança.

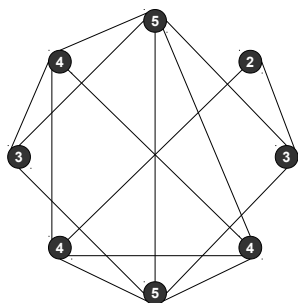


Figura 5 – Exemplo de rede heterogênea construída com o mecanismo de ligação preferencial de Barabási-Albert.

3 PROCESSOS DE CONTATO INTERAGENTES COM MEMÓRIA

Neste capítulo vamos apresentar as definições gerais e regras dinâmicas do modelo de propagação epidêmica que investigamos nesta Tese.

3.1 DESCRIÇÃO DO MODELO

Consideramos interações de curto alcance entre nodos de uma rede que podem estar em um dentre três estados acessíveis: nodo vazio v ; ocupado por uma partícula do tipo A ; ou ocupado por uma partícula do tipo B . De modo geral, o sistema evolui no tempo devido aos processos de criações autocatalíticas, que ocorrem pela interação entre um nodo ocupado e um nodo vazio; e aniquilações de partículas, que ocorrem de forma espontânea e independente da vizinhança. No contexto epidemiológico, um nodo vazio representa um indivíduo saudável que é suscetível ao contágio de duas epidemias, A ou B , sendo que processos de criação correspondem ao contágio entre indivíduos infectados e sadios, e aniquilações correspondem aos eventos de recuperação. Incluímos um terceiro processo de interação entre partículas de tipos diferentes, no qual a partícula A torna-se uma partícula B , representando uma forma de *mutação epidêmica*. Também consideramos interações entre duas partículas B , sendo que nesse caso ambas permanecem na rede e apenas os seus estados de *fitness* são modificados.

No Processo de Contato usual, a taxa de criação de uma partícula em um nodo vazio v com grau k é proporcional ao número n_{ocp} de primeiros-vizinhos ocupados, e é dada por $\lambda \frac{n_{ocp}}{k}$. Um nodo torna-se ocupado com taxa duas vezes maior quando tem o dobro de primeiros-vizinhos ocupados. A aditividade das interações não é uma condição estritamente necessária para estudos de propagação epidêmica. No contexto do modelo que estudamos, os indivíduos infectados propagam-se de maneira independente e competitiva, de modo que os processos mais rápidos ocorrem antes que outros processos que também são possíveis na vizinhança considerada. Na figura 6 mostramos configuração genéricas na rede bidimensional, comparando os modelos PC com e sem memória, e também do modelo competitivo que estudamos. Detalhes das definições, regras de interação e evolução temporal serão apresentadas nas seções a seguir.

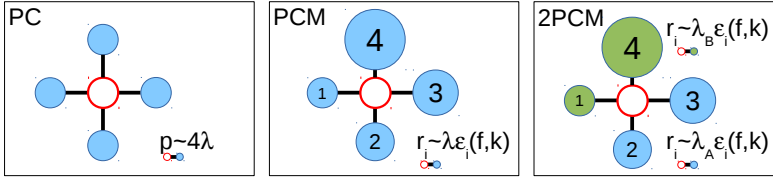


Figura 6 – No Processo de Contato bidimensional (esquerda), a probabilidade de ocupação do nodo vazio é proporcional a 4λ , caracterizando a aditividade das interações. Com a introdução de memória (centro), as partículas podem ter diferentes estados de adaptação e as taxas de criação para cada conexão são calculadas de forma independente. Numa situação genérica do modelo que estudamos (direita), as taxas de criação características são distintas e determinantes na competitividade entre as espécies.

EFEITOS DE MEMÓRIA

3.1.0.5 *Fitness* e tempo de memorização

Incluimos o caráter não-Markoviano nas regras do modelo através de uma segunda variável que fornece informação histórica sobre a evolução do estado de cada nodo da rede. A grosso modo, o *fitness* de uma partícula armazena o número de vezes que essa partícula interagiu. Cada processo realizado por uma partícula gera um novo estado de *fitness*, cuja evolução temporal segue regras que dependem da *hereditariedade*. Consideramos que o *fitness* é uma propriedade que pode ser hereditária ou parcialmente hereditária, e investigamos como essas diferentes regras de evolução podem afetar a competitividade na dinâmica do sistema. Tendo isso em vista, definimos processos semi-hereditários para partículas do tipo *A* e hereditários para partículas do tipo *B*.

Nos processos de criação semi-hereditários do tipo *A*, a partícula criadora evolui herdando seu *fitness* acumulado, entretanto, a partícula descendente é criada com *fitness* herdado do nodo vazio que acabou de ocupar. Então definimos que, para uma criação realizada por uma partícula *A* localizada no nodo *i* através de um nodo vizinho *j* que está vazio,

$$f_i(t + dt) = \tau(f_i(t) + df), \quad (3.1)$$

$$f_j(t + dt) = \tau(f_j(t) + df). \quad (3.2)$$

Nos processos de criação hereditários de partículas do tipo B , a partícula descendente também herda o *fitness* da partícula criadora. Definimos então que, para uma criação realizada por uma partícula do tipo B localizada no nodo i através de um nodo vizinho j que está vazio,

$$f_i(t + dt) = \tau(f_i(t) + df), \quad (3.3)$$

$$f_j(t + dt) = f_i(t + dt). \quad (3.4)$$

Em ambos os casos, hereditário e semi-hereditário, definimos $df = 1$. O parâmetro de decaimento τ , $0 \leq \tau \leq 1$, define um dado tempo médio de memória,

$$t_m = -\frac{1}{\ln(\tau)}. \quad (3.5)$$

Para $\tau = 0$ o tempo de memória é nulo, e somente registros instantâneos são considerados, por outro lado, o caso $\tau = 1$ corresponde a um tempo de memória infinito, sendo que registros mais antigos têm contribuições exponencialmente menores no valor de *fitness* acumulado (QIN et al., 2008).

O caso hereditário simula populações que se propagam através de processos que geram pares de partículas idênticas. Nesse modo, o *fitness* sempre aumenta a cada nova geração. No caso semi-hereditário a partícula criadora mantém seu *fitness* acumulado e recebe uma unidade df , porém a partícula descendente é criada com *fitness* herdado do nodo vazio que passou a ocupar. No contexto de processos epidêmicos, indivíduos infectados pela epidemia A propagam-se sem afetar diretamente o estado de adaptação dos indivíduos que infectaram. Por outro lado, a epidemia do tipo B propaga-se modificando o estado de *fitness* dos indivíduos.

EFEITOS TOPOLÓGICOS

3.1.0.6 Racionalidade dependente do grau

A estrutura topológica da rede na qual a dinâmica do sistema é realizada também é relevante. Para descrever a propagação de uma epidemia de forma realista, deve-se levar em conta que as redes de indivíduos no mundo real exibem padrões de organização heterogêneos que afetam profundamente a evolução da epidemia. Como vimos no capítulo 3, redes heterogêneas apresentam alguns nodos altamente conectados, os *hubs*, cuja participação no processo de contágio global é de grande relevância. Tendo isso em vista, incluímos um efeito de racionalidade na atividade de indivíduos infectados

que depende da razão $k/\langle k \rangle$, e que também afeta a *efetividade* de propagação e recuperação da doença, como será visto a seguir.

PROCESSOS DINÂMICOS

3.1.0.7 Efetividade

Efetividade é a capacidade de produzir o seu efeito habitual, de funcionar normalmente. Introduzimos os efeitos topológicos e de memória definidos anteriormente através de uma *função efetividade*, $\varepsilon(f_1, f_2, k, t)$, definida como

$$\varepsilon(f_1, f_2, k, t) = \frac{1}{1 + \exp \left[-\frac{k}{\langle k \rangle} \frac{f_1 - f_2}{\langle f_{tot} \rangle(t)} \right]}, \quad (3.6)$$

onde $\langle k \rangle$ é o grau médio da rede, $\langle f_{tot} \rangle$ é o *fitness* total do sistema no instante de tempo considerado. As variáveis f_1 e k correspondem ao *fitness* e ao grau da partícula que *realiza* o processo em consideração, enquanto que f_2 está associado ao nodo vizinho que participa do processo. No contexto epidemiológico, a função $\varepsilon(f_1, f_2, k, t)$ pode ser interpretada como uma característica adaptativa dos indivíduos infectados e suscetíveis, mensurada através da diferença entre os estados de adaptação do nodo em consideração, em relação à sua vizinhança.

Para redes homogêneas com dinâmica sem memória, as distribuições de grau $P(k)$ e de *fitness* $P(f)$ são uniformes e constantes, ou seja, $k/\langle k \rangle = 1$ e $f_1 - f_2 = 0$, de modo que o termo exponencial é igual a 1 e a efetividade é sempre igual a 0.5; entretanto, no caso geral a distribuição $P(f)$ depende do tempo e torna-se um fator definitivo de efetividade. Nos casos de redes heterogêneas, os nodos com grau maior que o grau médio da rede ($k > \langle k \rangle$) têm racionalidade maior, de modo que o efeito da adaptação torna-se mais acentuado; por outro lado, quando $k < \langle k \rangle$, a acumulação de *fitness* produz um efeito mais suave. Isso pode ser percebido observando o comportamento de $\varepsilon(f_1, f_2, k, t)$ para um caso particular, como está apresentado nas curvas da Fig. 7.

3.1.0.8 Regras de evolução temporal

Como dito anteriormente, consideramos um sistema dinâmico em que nodos de uma rede, representando indivíduos interagentes, podem estar em

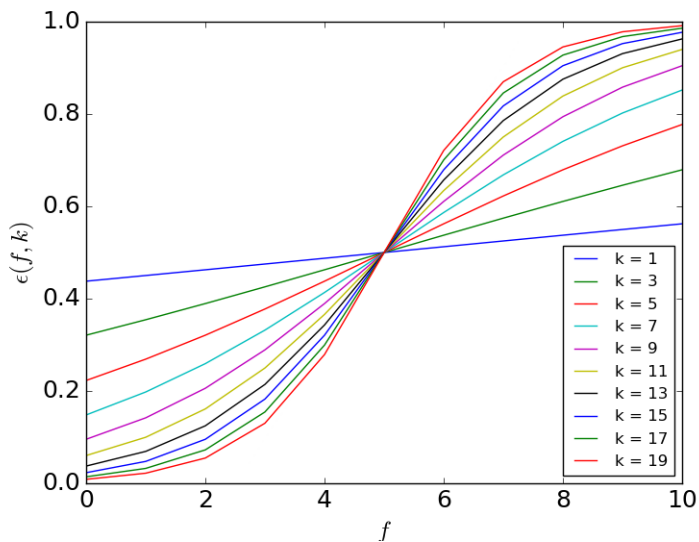


Figura 7 – Perfil da função $\epsilon(f, k) = \left[1 + \exp\left(\frac{k}{4} \frac{f-5}{5}\right) \right]^{-1}$. Partículas ocupando nodos de grau elevado são mais efetivas quando possuem *fitness* maior que o da vizinhança, e menos efetivas caso contrário.

um dentre três estados: indivíduo sadio; infectado por uma doença A; ou infectado por uma doença B. Consideramos que esses indivíduos possuem uma característica adaptativa, indexada por uma segunda variável de estado, f_i . Definimos as taxas de transição de maneira que quando um indivíduo infectado possui *fitness* superior ao da sua vizinhança, a sua efetividade de propagação torna-se maior. Simultaneamente, a sua efetividade de recuperação espontânea também torna-se maior. Nesse sentido, estamos considerando um sistema dinâmico em que as taxas de transição associadas a um dado nodo, são determinadas pelo *fitness* desse nodo em relação ao *fitness* de cada nodo na sua vizinhança imediata. Esse tipo de dinâmica espacialmente estruturada é comum em sistemas competitivos, e também surge em modelos da Teoria de Jogos, como o Dilema do Prisioneiro (FERREIRA et al., 2016).

As regras de evolução temporal do sistema e as respectivas taxas dos processos dinâmicos envolvidos são:

1. Criações autocatalíticas

Correspondem aos processos de propagação devido ao contato entre um nodo infectado (estados ocupados A ou B) e um nodo sadio (estado vazio v). A taxa de criação do tipo $Av \rightarrow A^*A$ é dada por

$$T(Av) = \lambda_A \mathcal{E}(f_A, f_v, k, t) = \frac{\lambda_A}{1 + \exp \left[-\frac{k}{\langle k \rangle} \frac{(f_A - f_v)}{\langle f_{tot} \rangle(t)} \right]}, \quad (3.7)$$

onde λ_A é um parâmetro fixo que define a taxa de contágio característica do tipo A , f_A é o *fitness* da partícula criadora A e f_v é o *fitness* do nodo vazio que será ocupado. A notação A^* indica que o estado de *fitness* da partícula evolui após a criação. A notação sem estrela indica que a partícula criada é *nova*, ou seja, tem *fitness* herdado do nodo vazio que acabou de ocupar. De forma semelhante, para os processos de criação do tipo $Bv \rightarrow B^*B^*$ temos

$$T(Bv) = \lambda_B \mathcal{E}(f_B, f_v, k, t) = \frac{\lambda_B}{1 + \exp \left[-\frac{k}{\langle k \rangle} \frac{(f_B - f_v)}{\langle f_{tot} \rangle(t)} \right]}. \quad (3.8)$$

2. Mutações

Correspondem aos processos de contato entre dois nodos infectados A e B . A taxa de mutação para o caso $AB \rightarrow B^*B^*$, quando A interage com

B é

$$T(AB) = \lambda_m \varepsilon(f_A, f_B, k, t) = \frac{\lambda_m}{1 + \exp \left[-\frac{k}{\langle k \rangle} \frac{(f_A - f_B)}{\langle f_{tot} \rangle(t)} \right]}, \quad (3.9)$$

por outro lado, quando B interage com A temos $BA \rightarrow B^*B^*$

$$T(BA) = \lambda_m \varepsilon(f_B, f_A, k, t) = \frac{\lambda_m}{1 + \exp \left[-\frac{k}{\langle k \rangle} \frac{(f_B - f_A)}{\langle f_{tot} \rangle(t)} \right]}, \quad (3.10)$$

onde o parâmetro λ_m define a taxa de mutação característica, sendo esse o parâmetro de controle¹ que escolhemos para estudar o comportamento do modelo. Em ambos os casos, o *fitness* dos nodos resultantes é igual ao maior valor de *fitness* entre os nodos iniciais mais uma unidade df , ou seja,

$$f_B(t + dt) = \tau(\max[(f_A(t), f_B(t))] + df). \quad (3.11)$$

Optamos por essa definição para que o acréscimo de *fitness* associado às mutações seja uma grandeza acumulativa sempre crescente.

3. Mutações por aglomeração B

Correspondem às interações de dois nodos infectados B . A taxa do processo $BB' \rightarrow B^*B^*$ é dada por

$$T(BB') = \varepsilon(f_B, f_{B'}, k, t) = \frac{1}{1 + \exp \left[-\frac{k}{\langle k \rangle} \frac{(f_B - f_{B'})}{\langle f_{tot} \rangle(t)} \right]}. \quad (3.12)$$

Nesse caso o *fitness* de ambos os nodos aumenta em uma unidade df , de modo que

$$f_B(t + dt) = \tau(f_B(t) + df), \quad (3.13)$$

$$f_{B'}(t + dt) = \tau(f_{B'}(t) + df). \quad (3.14)$$

4. Aniquilações espontâneas

Correspondem aos processos de recuperação de nodos infectados. A taxa desse tipo de processo é independente da vizinhança, e depende somente do *fitness* do nodo considerado. Para os processos $A \rightarrow v$ e

¹Veremos mais detalhes sobre a escolha da parametrização na seção seguinte.

$B \rightarrow v$ temos

$$T(A0) = \mu_A \varepsilon(f_A, 0, k, t) = \frac{\mu_A}{1 + \exp \left[-\frac{k}{\langle k \rangle} \frac{f_A}{\langle f_{tot} \rangle(t)} \right]}. \quad (3.15)$$

$$T(B0) = \mu_B \varepsilon(f_B, 0, k, t) = \frac{\mu_B}{1 + \exp \left[-\frac{k}{\langle k \rangle} \frac{f_B}{\langle f_{tot} \rangle(t)} \right]}. \quad (3.16)$$

Em ambos os casos o *fitness* do nodo v resultante é igual a $f_v(t + dt) = \tau(f_i(t) + df)$.

3.1.0.9 Parametrização

Tendo em vista que o modelo possui uma quantidade relativamente grande de parâmetros, a escolha de uma parametrização apropriada é importante para estabelecer um foco de estudo e garantir a tratabilidade dos cálculos e posterior análise dos resultados. Dentro de uma ampla gama de possibilidades, decidimos por uma parametrização simplificada, na qual definimos $\lambda_A = 3$, $\mu_A = 10^{-7}$, $\lambda_B = 0.3$ e $\mu_B = 1$ como parâmetros fixos, tendo como objetivo simular dois processos de propagação epidêmica interagentes com características diferentes.

Com essa parametrização, a propagação de partículas A representa um surto ativo (endêmico) de uma epidemia com taxa de espalhamento supercrítica, visto que o parâmetro μ_A é extremamente pequeno; por outro lado, a propagação de partículas do tipo B age como um protocolo de *imunização*, no qual uma segunda epidemia com taxa de espalhamento subcrítica, é capaz de induzir mutações nos agentes transmissores da epidemia A , transformando-os em agentes do tipo B . Esperamos que quando a taxa de mutação for suficientemente grande, a epidemia A desapareça completamente, e como consequência disso, dado que a taxa de espalhamento da epidemia B é subcrítica, essa também possa ser controlada e o sistema atinja o estado absorvente, sem qualquer epidemia.

No caso particular de um sistema sem memória, $\tau = 0$, podemos visualizar as regras do modelo através de uma perspectiva semelhante àquela do modelo SIS, considerando apenas o estado suscetível e os estados infectados A e B . Na Figura 9 mostramos a representação das reações possíveis nessa condição. No caso geral para $0 < \tau \leq 1$, além dos estados ocupados e vazios, é necessário considerar também o valor de *fitness* e grau de cada nodo. Nos quadros da figura 8 exemplificamos duas diferentes evoluções temporais

quando a dinâmica do modelo é realizada em uma rede complexa com $N = 4$ nodos. Partindo da mesma configuração inicial, porém com diferentes valores de λ_m , o sistema pode atingir diferentes estados finais.

3.2 MÉTODO DE CAMPO MÉDIO

Para prever a evolução temporal do estado de um sistema de partículas interagentes, é necessário saber a força (ou o campo) total resultante sobre cada partícula, portanto, trata-se de um problema complexo de N corpos interagentes. A descrição matemática exata de sistemas dinâmicos complexos requer um conjunto de equações diferenciais não-lineares que geralmente são de difícil solução analítica, principalmente para sistemas estocásticos, nos quais o número de partículas é grande. O método de campo médio se apresenta como uma alternativa muito útil nesse sentido.

A aproximação de campo médio mais simples considera que o campo total resultante agindo sobre uma partícula é, em média, aproximadamente igual para todas as partículas, de modo que torna-se possível estudar um sistema de N corpos através de um sistema de apenas um corpo. Outra aproximação mais avançada consiste em considerar o campo médio produzido por um par de partículas, ao invés de uma, de modo que as correlações entre um nodo e seus primeiros vizinhos passam a ser consideradas. Os resultados das aproximações de campo médio tendem a melhorar quanto maior for a quantidade de informação introduzida na teoria, ou seja, quanto maior for a ordem das correlações consideradas na descrição das taxas dos processos envolvidos. Nesta seção, apresentamos a análise feita através de uma aproximação campo médio de um nodo, com dinâmica de tempo discreto realizada em rede regular, que pode ser aplicada nos casos extremos de memória infinita e nula.

Definimos $p_v(f, t)$ como a probabilidade de um nodo estar vazio, com *fitness* f , no instante de tempo t . As quantidades $p_A(f, t)$ e $p_B(f, t)$ correspondem às probabilidades de um nodo estar ocupado por uma partícula do tipo A ou B , respectivamente, que têm *fitness* f no tempo t . Essas probabilidades devem satisfazer a condição de normalização

$$\sum_f [p_v(f, t) + p_A(f, t) + p_B(f, t)] = p_v(t) + p_A(t) + p_B(t) = 1. \quad (3.17)$$

O *fitness* médio das partículas e dos nodos vazios no instante de tempo t é dado por

$$\langle f_i \rangle(t) = \sum_f f p_i(f, t) / p_i(t), \quad (3.18)$$

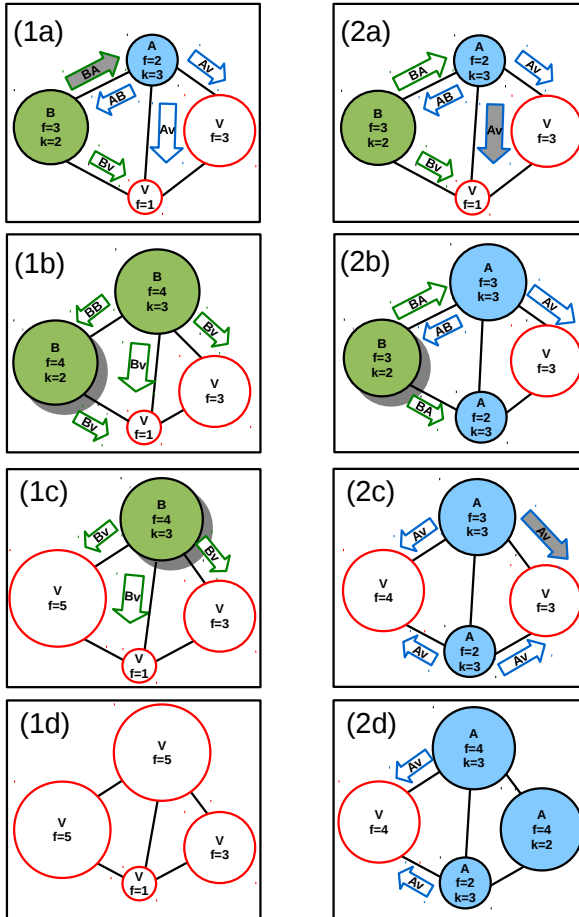


Figura 8 – Na configuração do quadro 1a, o processo com menor tempo de realização é uma mutação do tipo $BA \rightarrow B^*B^*$, destacada com uma seta cinza. No passo seguinte (quadro 1b), o processo de menor tempo é uma aniquilação $B \rightarrow v$ realizada pela partícula em destaque, que gera um nodo vazio (quadro 1c). Nesse caso a trajetória leva o sistema até a fase absorvente. De forma semelhante, mostramos nos quadros (2a) a (2d) as configurações de outra trajetória que leva o sistema até a fase Av . Cores representam diferentes estados e diâmetros representam valores de *fitness*.

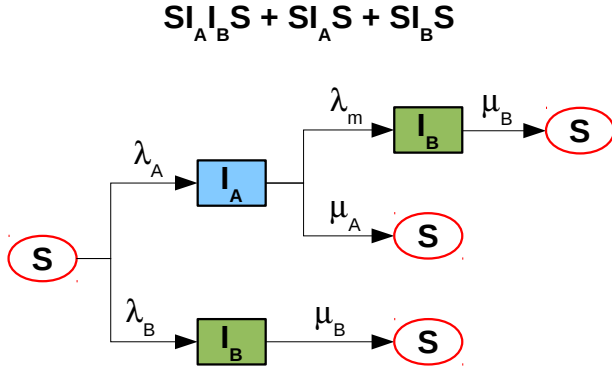


Figura 9 – Diagrama esquemático representando os processos de *reação-difusão* do modelo proposto no caso sem memória. Cada transição possível (setas) ocorre com taxa característica definida pelos parâmetros indicados.

onde $i = v, A, B$ e o *fitness* médio do sistema é $\langle f_{tot} \rangle(t) = (\langle f_v \rangle(t) + \langle f_A \rangle(t) + \langle f_B \rangle(t))$. Com isso, para cada processo possível podemos calcular a efetividade

$$\varepsilon(f_1, f_2, t) = \frac{1}{1 + \exp \left[-\frac{f_1 - f_2}{\langle f_{tot} \rangle(t)} \right]}. \quad (3.19)$$

A evolução temporal das probabilidades depende dos parâmetros fixos $\lambda_A = 3$, $\lambda_B = 0.3$, $\mu_A = 10^{-7}$, $\mu_B = 1$, que definem as probabilidades características dos processos de criação de partículas $P_{Av} = \lambda_A / (\lambda_A + \mu_A + \lambda_m)$ e $P_{Bv} = \lambda_B / (\lambda_B + \mu_B + \lambda_m + 1)$; da interação entre partículas de tipos diferentes, $P_{AB} = \lambda_m / (\lambda_A + \mu_A + \lambda_m)$ e $P_{BA} = \lambda_m / (\lambda_B + \mu_B + \lambda_m + 1)$; da interação entre partículas B , $p_{BB} = 1 / (\lambda_B + \mu_B + \lambda_m + 1)$; e de aniquilação $P_{A0} = \mu_A / (\lambda_A + \mu_A + \lambda_m)$ e $P_{B0} = \mu_B / (\lambda_B + \mu_B + \lambda_m + 1)$. Na figura 10 temos o comportamento dessas probabilidades em função do parâmetro de controle λ_m .

Considere a probabilidade de um nodo estar ocupado por uma partícula do tipo A com *fitness* f no instante de tempo $t + 1$, $p_A(f, t + 1)$. Essa probabilidade depende dos seguintes processos:

1. Uma partícula A com *fitness* $f_A = f - df$ cria outra partícula A em um nodo vazio com $f_v = f'$ qualquer. Nesse caso $p_A(f, t + 1)$ aumenta,

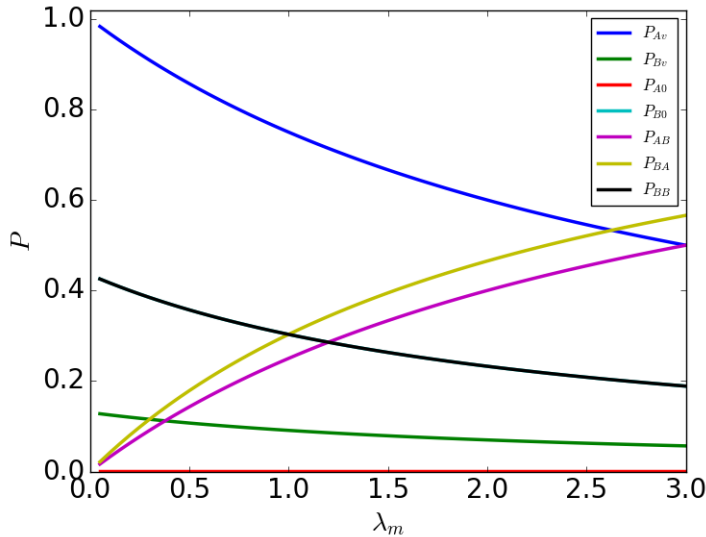


Figura 10 – Probabilidades características dos processos dinâmicos do modelo como funções do parâmetro de controle.

com probabilidade

$$p_A(f - df, t) P_{Av} \sum_{f'} p_v(f', t) \varepsilon(f - df, f', t). \quad (3.20)$$

2. Uma partícula A com $f_A = f$ muda para B devido à interação com uma partícula B com $f_B = f'$ qualquer. Nesse caso $p_A(f, t + 1)$ diminui, com probabilidade

$$p_A(f, t) \sum_{f'} p_B(f', t) [P_{AB} \varepsilon(f, f', t) + P_{BA} \varepsilon(f', f, t)]. \quad (3.21)$$

3. Uma partícula A com $f_A = f$ é aniquilada espontaneamente. Nesse caso $p_A(f, t + 1)$ diminui, com probabilidade

$$p_A(f, t) P_{A0} \varepsilon(f, 0, t). \quad (3.22)$$

Considere agora a probabilidade de um nodo estar ocupado por uma partícula do tipo B com *fitness* f no instante de tempo $t + 1$, $p_B(f, t + 1)$. Essa probabilidade depende dos seguintes processos:

1. Uma partícula B com *fitness* $f_B = f - df$ cria outra partícula B em um nodo vazio com $f_v = f'$ qualquer. Nesse caso $p_B(f, t + 1)$ aumenta, com probabilidade

$$p_B(f - df, t) P_{Bv} \sum_{f'} p_v(f', t) \mathcal{E}(f - df, f', t). \quad (3.23)$$

2. Uma partícula B com $f_B = f - df$ interage com uma partícula A com $f_A = f'$ qualquer, mudando seu *fitness* para $f_B = f$. Nesse caso $p_B(f, t + 1)$ aumenta, com probabilidade

$$p_B(f - df, t) \sum_{f'} p_A(f', t) [P_{BA} \mathcal{E}(f - df, f', t) + P_{AB} \mathcal{E}(f', f - df, t)]. \quad (3.24)$$

3. Uma partícula B com $f_B = f - df$ interage com outra B com $f'_B = f'$ qualquer, mudando seu *fitness* para $f_B = f$. Nesse caso $p_B(f, t + 1)$ aumenta, com probabilidade

$$p_B(f - df, t) P_{BB} \sum_{f'} p_B(f', t) \mathcal{E}(f - df, f', t). \quad (3.25)$$

4. Uma partícula B com $f_B = f$ interage com outra B com $f'_B = f'$ qualquer, mudando seu *fitness* para $f_B = f + df$. Nesse caso $p_B(f, t + 1)$ diminui, com probabilidade

$$p_B(f, t) P_{BB} \sum_{f'} p_B(f', t) \mathcal{E}(f, f', t). \quad (3.26)$$

5. Uma partícula B com $f_B = f$ é aniquilada espontaneamente. Nesse caso $p_B(f, t + 1)$ diminui, com probabilidade

$$p_B(f, t) P_{B0} \mathcal{E}(f, 0, t). \quad (3.27)$$

Por último, considere a probabilidade de um nodo estar vazio, com *fitness* f no instante de tempo $t + 1$, $p_v(f, t + 1)$. Essa probabilidade depende dos seguintes processos:

1. Uma partícula A ou B com $f = f - df$ é aniquilada e gera um nodo vazio com $f_v = f$. Nesse caso $p_v(f, t + 1)$ aumenta, com probabilidade

$$[p_A(f - df, t) P_{A0} + p_B(f - df, t) P_{B0}] \mathcal{E}(f - df, 0, t). \quad (3.28)$$

2. Um nodo vazio com $f_v = f$ torna-se ocupado devido à criação de uma partícula A ou B com $f = f'$ qualquer. Nesse caso $p_v(f, t + 1)$ diminui, com probabilidade

$$p_v(f, t) \sum_{f'} [p_A(f', t)P_{Av} + p_B(f', t)P_{Bv}] \varepsilon(f', f, t). \quad (3.29)$$

Levando-se em conta todos os processos listados acima, podemos escrever as equações de evolução temporal das probabilidades

$$\begin{aligned} p_A(f, t + 1) &= p_A(f, t) + p_A(f - df, t)P_{Av} \sum_{f'} p_v(f', t) \varepsilon(f - df, f', t) \\ &\quad - p_A(f, t) \sum_{f'} p_B(f', t) [P_{AB} \varepsilon(f, f', t) + P_{BA} \varepsilon(f', f, t)] \\ &\quad - p_A(f, t)P_{A0} \varepsilon(f, 0, t), \end{aligned} \quad (3.30)$$

$$\begin{aligned} p_B(f, t + 1) &= p_B(f, t) + p_B(f - df, t)P_{Bv} \sum_{f'} p_v(f', t) \varepsilon(f - df, f', t) \\ &\quad + p_B(f - df, t) \sum_{f'} p_A(f', t) [P_{BA} \varepsilon(f - df, f', t) + P_{AB} \varepsilon(f', f - df, t)] \\ &\quad + p_B(f - df, t)P_{BB} \sum_{f'} p_B(f', t) \varepsilon(f - df, f', t) \\ &\quad - p_B(f, t)P_{BB} \sum_{f'} p_B(f', t) \varepsilon(f, f', t) \\ &\quad - p_B(f, t)P_{B0} \varepsilon(f, 0, t), \end{aligned} \quad (3.31)$$

$$\begin{aligned} p_v(f, t + 1) &= p_v(f, t) + [p_A(f - df, t)P_{A0} + p_B(f - df, t)P_{B0}] \varepsilon(f - df, 0, t) \\ &\quad - p_v(f, t) \sum_{f'} [p_A(f', t)P_{Av} + p_B(f', t)P_{Bv}] \varepsilon(f', f, t). \end{aligned} \quad (3.32)$$

No sistema sem memória, a distribuição de *fitness* é uniforme e a efetividade é constante $\varepsilon = 0.5$. Nesse caso as equações equações 3.30 reduzem-

se a

$$\begin{aligned}
 p_A(t+1) &= p_A(t) + (1/2)p_A(t)P_{Av}p_v(t) \\
 &- (1/2)p_A(t)p_B(t)(P_{AB} + P_{BA}) \\
 &- (1/2)p_A(t)P_{A0}, \tag{3.33}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 p_B(t+1) &= p_B(t) + (1/2)p_B(t)P_{Bv}p_v(t) \\
 &+ (1/2)p_B(t)p_A(t)(P_{BA} + P_{AB}) \\
 &- (1/2)p_B(t)P_{B0}, \tag{3.34}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 p_v(t+1) &= p_v(t) + (1/2)[p_A(t)P_{A0} + p_B(t)P_{B0}] \\
 &- p_v(f,t)(1/2)[p_A(t)P_{Av} + p_B(t)P_{Bv}] \tag{3.35}
 \end{aligned}$$

EVOLUÇÃO TEMPORAL

A iteração das equações para as probabilidades dos estados fornece os seguintes resultados. Em ambos os casos de sistemas com e sem memória, as densidades evoluem no tempo de maneira oscilatória amortecida, como está apresentado nas Figs. 11 e 12. No regime de baixa taxa de mutação, $\lambda_m < \lambda_m^1$, o estado estacionário é composto somente de partículas do tipo A. Para $\lambda_m > \lambda_m^1$ a densidade estacionária de partículas B é maior que zero, e o sistema encontra-se numa fase mista. Nas proximidades do ponto de transição, o valor médio $\langle f_B \rangle$ cresce rapidamente atingindo valores maiores que $\langle f_A \rangle$, como está apresentado na Fig. 13.

ESTADO ESTACIONÁRIO

Os diagramas de cobertura apresentados na Fig. 14 mostram que a transição que ocorre em λ_m^1 é ligeiramente maior no caso com memória. A causa desse efeito ainda não está plenamente esclarecida, mas podemos supor que isso aconteça porque as taxas de criação e aniquilação de partículas A e B passam a depender das suas respectivas distribuições de *fitness*.

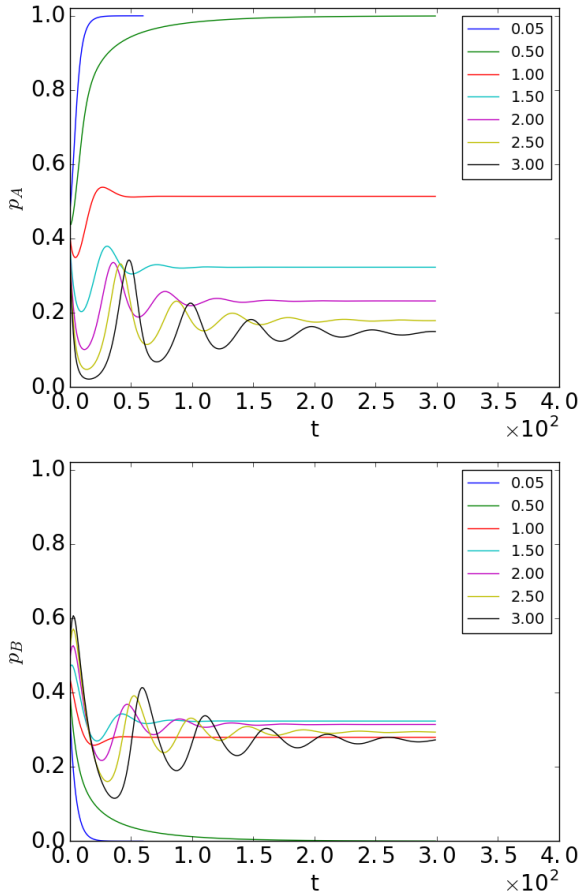


Figura 11 – Densidade de partículas A e B em função do tempo para diferentes valores de λ_m , obtidos na aproximação de campo médio para o sistema sem memória.

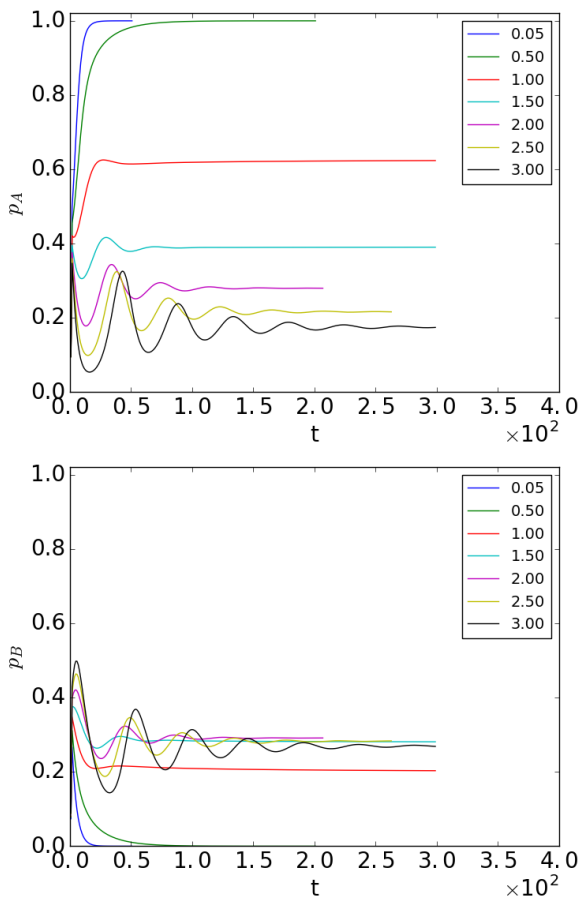


Figura 12 – Densidade de partículas A e B em função do tempo para diferentes valores de λ_m , obtidos na aproximação de campo médio para o sistema com memória infinita.

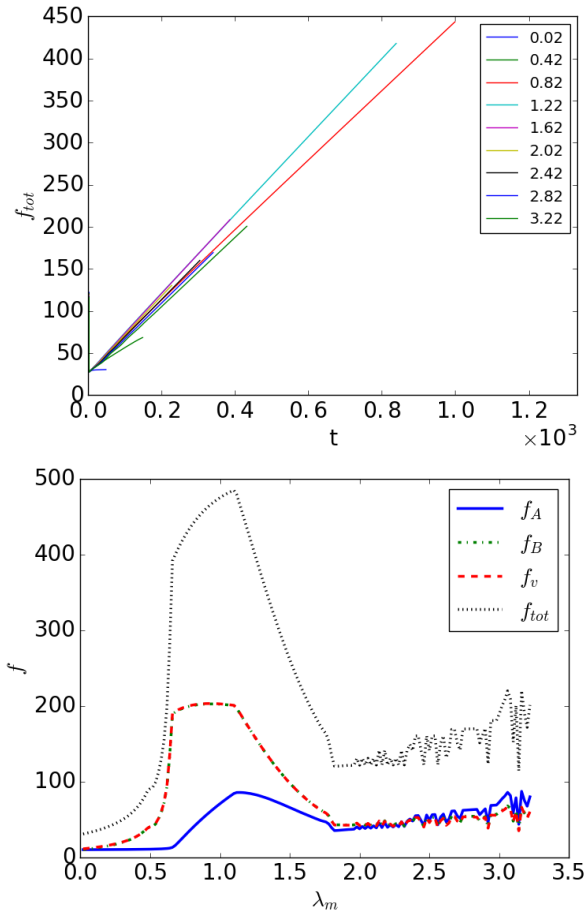


Figura 13 – *Fitness* total como função do tempo para diferentes valores de λ_m , e o correspondente diagrama com os valores de $\langle f_i \rangle$ no instante final de iteração, obtidos na aproximação de campo médio para o sistema com memória infinita.

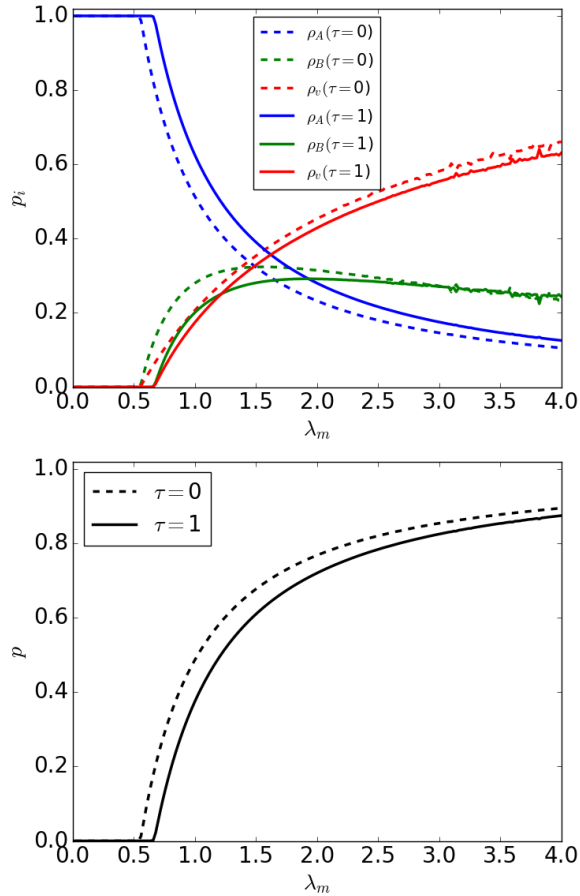


Figura 14 – Densidades e parâmetro de ordem $p = p_B + p_v$ como funções de λ_m no regime estacionário, obtidos na aproximação de campo médio para os casos de sistemas sem memória e com memória infinita.

4 SIMULAÇÃO DE MONTE CARLO DINÂMICO

4.1 MÉTODO DE SIMULAÇÃO

Como vimos anteriormente, a dinâmica do modelo que estudamos é descrita através de taxas, que dependem dos parâmetros λ_A , λ_B , λ_m , μ_A , μ_B e também das distribuições de grau, $P(k)$, e de *fitness*, $P(f)$, no instante de tempo considerado. Como essas taxas dependem do grau do nodo em consideração e também do tempo, utilizaremos o método de Monte Carlo Dinâmico, MCD. O algoritmo de Doob-Gillespie é um variante do método de Monte Carlo Dinâmico e tornou-se amplamente conhecido após ser aplicado em simulações de sistemas com reações químicas ou bioquímicas (GILLESPIE, 1976, 1977). Embora ter sido originalmente desenvolvido para simular processos estocásticos Markovianos, o algoritmo de Doob-Gillespie também pode ser generalizado para sistemas não-Markovianos (BOGUÑA; SER-RANO, 2013).

Existem diferentes métodos para a realização de simulações MCD apresentados na literatura, exemplos conhecidos são o Método de Próxima Reação, MPR (ANDERSON, 2008) e o Método de Seleção Aleatória, MSA (MENG; WEINBERG, 1994, 1996). Embora esses métodos forneçam os mesmos resultados para um dado modelo, os recursos computacionais necessários podem ser diferentes dependendo do sistema considerado. No MPR é criada uma lista contendo os tempos de realização de todos os processos possíveis no sistema. A cada passo da simulação, o processo com tempo mínimo é realizado, o tempo de evolução do sistema é atualizado de acordo com o tempo decorrido e a lista é atualizada. Esse método é eficiente em tempo de computação, pois a cada passo algum processo sempre irá ocorrer, entretanto, dependendo do nível de complexidade do modelo considerado, o consumo de memória para o armazenamento da lista pode ser excessivo caso seja aplicado em sistemas muito grandes. Uma alternativa em situações como essa é o MSA, no qual um nodo é selecionado aleatoriamente e um processo associado ocorre (ou não) comparando a probabilidade de transição com um número aleatório. Nesse método o processo escolhido pode não ocorrer, sendo necessário maior tempo de computação quando comparado ao algoritmo MPR.

O algoritmo MCD-MPR para simular a evolução temporal de um sistema cujos processos dinâmicos ocorrem com taxas conhecidas é descrito através das seguintes etapas:

1. Define o número inicial de partículas de cada tipo, em $t = 0$;

2. Calcula as taxas, r_k , para todos os M processos possíveis;
3. Gera M números aleatórios independentes e uniformes, a_k , no intervalo $(0, 1]$;
4. Define os tempos de realização $dt_k = (1/r_k) \ln(1/a_k)$ (equivalente a extrair uma variável aleatória exponencial com parâmetro r_k);
5. Define o tempo de evolução do sistema $t = dt_\mu = \min_k \{dt_k\}$ onde dt_μ é equivalente ao instante de tempo em que o processo com menor tempo é realizado.
6. Atualiza os números de partículas de acordo com o processo μ .
7. Recalcula as taxas que mudaram para cada processo possível e as denota por r_k^* .
8. Para cada $k \neq \mu$, define $dt_k = (r_k/r_k^*)(dt_k - t) + t$.
9. Para o processo μ , define $dt_\mu = \left(\frac{1}{r_\mu^*}\right) \ln(1/a) + t$, onde a é um número aleatório.
10. Para cada k , define $r_k = r_k^*$.
11. Volta ao passo 5 ou a simulação é finalizada.

Nós implementamos um método semelhante ao método MPR, que está apresentado no diagrama de blocos da figura Fig. 15. A cada passo da simulação, a atualização das taxas é feita considerando as vizinhanças dos dois nodos, i e j que participaram do processo realizado. Após terem sido atualizados os valores de f_i e f_j , recalculamos todas as taxas dos processos que i e j participavam, e atualizamos os tempos de realização de todos os outros processos subtraindo o tempo do processo que acabara de ser realizado.

4.2 COMPORTAMENTO DEPENDENTE DO TEMPO

Buscando entender o papel da capacidade de memorização e observar os possíveis efeitos provenientes do caráter não-Markoviano na dinâmica do modelo, é de interesse comparar o comportamento temporal do sistema partindo de diferentes condições iniciais. Investigamos a evolução temporal das densidades de partículas e nodos vazios em redes com tamanho $N = 10000$, considerando $\lambda_m = \lambda_A = 3$ nos casos $\tau = 0$ e $\tau = 1$, partindo das seguintes condições iniciais:

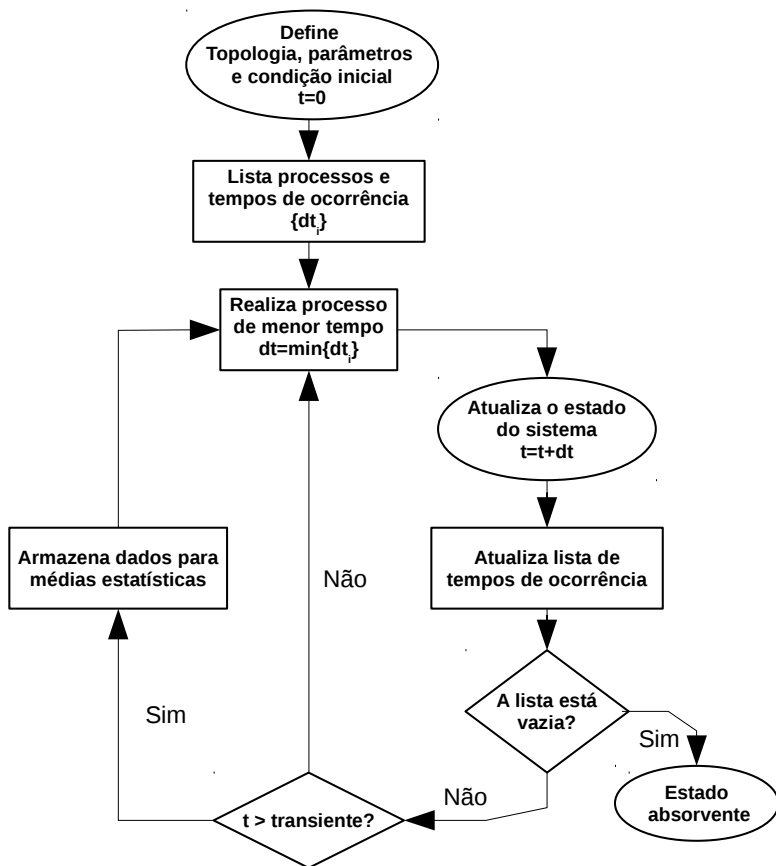


Figura 15 – Diagrama de blocos para o algoritmo implementado nas simulações computacionais.

- **A50B50** - Rede cheia de partículas distribuídas aleatoriamente.
- **ClusterAseedB** - Rede vazia com um pequeno *cluster* em uma posição aleatória, composto de um nodo com partícula *B*, mais seus *k* vizinhos com partículas *A*.
- **100AseedB** - Rede cheia de partículas *A* com uma semente *B* em uma posição aleatória.
- **100BseedA** - Rede cheia de partículas *B* com uma semente *A* em uma posição aleatória.

Em todos os casos o *fitness* inicial de partículas e nodos vazios é igual a $df = 1$.

REDE QUADRADA

Na rede quadrada, as condições iniciais de rede cheia evoluem para os mesmos estados estacionários, desde que a população de partículas *A* não desapareça completamente, caso contrário o estado absorvente é atingido, como podemos ver nos gráficos da Fig. 16. Partindo das condições *A50B50*, *ClusterAseedB* e *100AseedB* as densidades passam pelo regime transiente oscilatório até atingir estados estacionários com dinâmica mista, compostos de partículas *A* e *B* e nodos vazios; entretanto, quando a densidade inicial de partículas *A* é baixa, como é o caso da condição *100BseedA*, as densidades ρ_A e ρ_B evoluem para zero e o estado absorvente é atingido rapidamente. Os comportamentos de $\rho_A(t)$, $\rho_B(t)$ foram obtidos através de simulações em rede com $N = 10000$ considerando $r_t = 10$ amostras independentes.

Na configuração inicial *A50B50* o sistema tem um número grande de interfaces *AB*, que possibilitam o surgimento de aglomerados *BB* através de processos de mutação. Nas amostras em que a população de partículas *A* é totalmente eliminada nos instantes iniciais, as partículas *B* também desaparecem e o sistema atinge o estado absorvente. Por outro lado, na configuração inicial *ClusterAseedB* o sistema tem interfaces *AB* e *Av* que dão origem aos aglomerados *BB* e *AA*. No regime de tempos longos, o sistema se mantém ativo na fase *ABv*. Podemos observar nas Figs. 17 e 18 as configurações do sistema em diferentes passos de Monte Carlo, obtidas através de simulação na rede quadrada com tamanho linear $L = 100$.

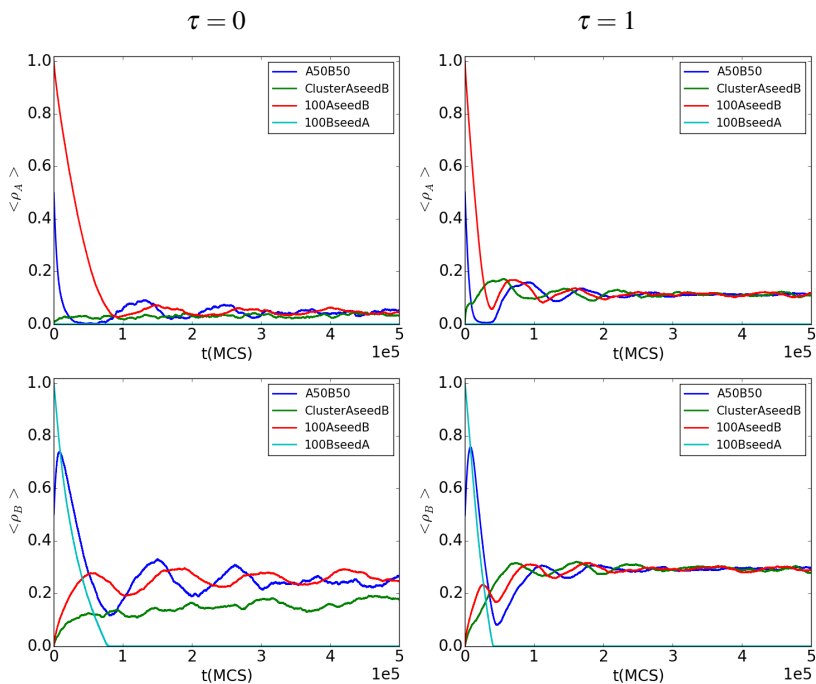


Figura 16 – Evolução temporal das densidades de partículas partindo de diferentes condições iniciais na rede quadrada, nos casos $\tau = 0$ (esquerda) e $\tau = 1$ (direita).

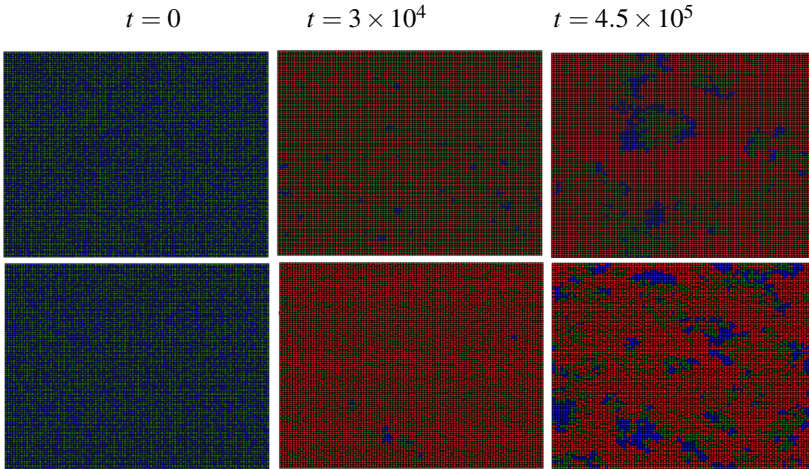


Figura 17 – Configurações do sistema em diferentes passos de Monte Carlo, partindo da configuração A50B50 nos casos $\tau = 0$ (acima) e $\tau = 1$ (abaixo). Partículas *A* aparecem em azul, partículas *B* em verde, e nodos vazios em vermelho.

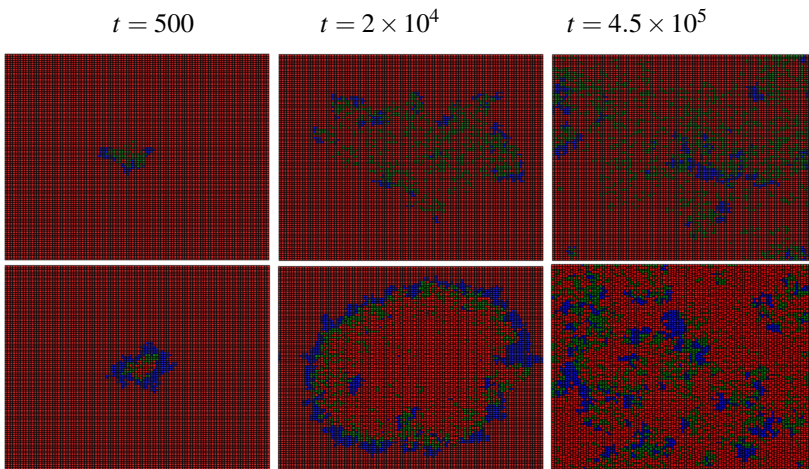


Figura 18 – Configurações do sistema em diferentes passos de Monte Carlo, partindo da configuração ClusterAseedB nos casos $\tau = 0$ (acima) e $\tau = 1$ (abaixo). Partículas *A* aparecem em azul, partículas *B* em verde, e nodos vazios em vermelho.

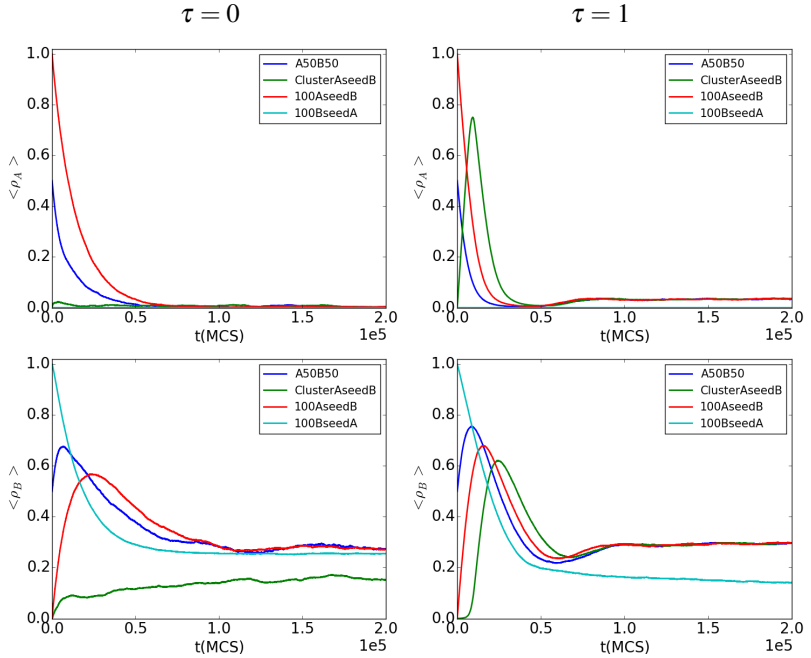


Figura 19 – Evolução temporal das densidades de partículas partindo de diferentes condições iniciais na rede Barabási-Albert, nos casos $\tau = 0$ (esquerda) e $\tau = 1$ (direita).

REDE BARABÁSI-ALBERT

Na rede Barabási-Albert, as condições iniciais de rede cheia levam o sistema sem memória para um estado estacionário único, independentemente da condição inicial. As partículas do tipo *A* desaparecem, e o sistema atinge a fase *Bv*. Com a introdução de memória infinita, o comportamento transiente das densidades é afetado e a densidade estacionária de partículas *A* é maior que zero. O efeito de memorização é mais expressivo quando a configuração inicial é *ClusterAseedB*, como apresentado na Fig. 19.

4.3 DIAGRAMA DE COBERTURA

Calculamos as densidades médias em função do tempo para diferentes valores do parâmetro de controle λ_m , considerando os casos $\tau = 0, 0.5, 1$. Através do valor médio das densidades no regime de tempos longos, obtemos os diagramas de cobertura, ou seja, as densidades estacionárias como funções do parâmetro de controle. Em todos os casos, e para todas as redes, a condição inicial é de rede cheia ($\rho_A = \rho_B = 0.5$) com partículas distribuídas aleatoriamente, e para a rede quadrada as condições de contorno são periódicas. As médias foram calculadas considerando um total de r_t amostras independentes, variando de acordo com o tamanho da rede considerada. Nos casos em que $N = 400$, $r_t = 50$; e para $N = 1600$, $r_t = 10$. Utilizamos amostragens diferentes visto que redes maiores requerem um número menor de amostras para reduzir suficientemente as flutuações. Como foi apresentado no diagrama de blocos na seção anterior, as médias são calculadas considerando somente as amostras que não entraram no estado absorvente durante todo o período de simulação considerado.

Para λ_m próximo de zero, o estado estacionário é ativo composto apenas por partículas do tipo A e nodos vazios. Para um dado valor intermediário de λ_m , a população de partículas do tipo B passa a sobreviver, o que determina uma transição de fase entre a fase pura Av e a fase mista ABv no valor λ_m^1 . Conforme λ_m cresce, a densidade estacionária de partículas B e nodos vazios também cresce, até um certo valor λ_m^2 no qual as populações de partículas A e B vão a zero de forma descontínua. A origem dessa descontinuidade aparente requer especial atenção. Analisando os gráficos das densidades em função do tempo, notamos que existe um regime transiente oscilatório para valores de $\lambda_m \approx \lambda_m^2$. Podemos supor que nessa região o sistema apresenta flutuações espaciais em escalas da ordem do tamanho do sistema, produzindo oscilações com amplitudes grandes o bastante para levar o sistema até uma fase espúria Bv , composta somente de partículas B e nodos vazios. A partir dessa fase intermediária, se a taxa de criação de partículas B for subcrítica, a densidade ρ_B também vai a zero e a fase absorvente v é atingida; caso contrário, o sistema pode permanecer ativo na fase pura Bv . Definimos como parâmetro de ordem a quantidade $p = 1 - \rho_A = \rho_B + \rho_v$, de modo que as quatro fases possíveis são determinadas através das seguintes condições: se $p = 0$, a fase é pura A ; para valores intermediários $0 < p < 1$, a fase é mista ABv ; quando $p = 1$ com $\rho_B > 0$ a fase é pura Bv e se $p = 1$ com $\rho_B = 0$ a fase é absorvente v .

REDE QUADRADA

Nesta seção, vamos estudar o comportamento estacionário do modelo através de simulações de Monte Carlo Dinâmico realizadas na rede homogênea regular bidimensional quadrada. Nessa topologia a função efetividade $\varepsilon(f_1, f_2, k, t)$ não depende do grau do nodo em consideração, portanto, nosso foco aqui é observar os possíveis efeitos nas propriedades estatísticas do modelo produzidos pelo tempo de memorização, definido pelo parâmetro τ . Nos casos em que τ é próximo de zero, significando que a efetividade é uniforme e constante, esperamos que a competição entre A e B dependa somente da razão r_A/r_B entre as taxas de espalhamento característica definidas pelos parâmetros do modelo sem memória. Nos casos em que τ é maior que zero, a dinâmica de *fitness* deve participar da definição das taxas efetivas de espalhamento; portanto, esperamos que o estado estacionário do sistema deva depender de τ .

4.3.0.10 Caso $\tau = 0$

No sistema sem memória, no regime de baixa taxa de mutação, o estado estacionário do sistema é atingido rapidamente. No caso $\lambda_m = 0.10$, um sistema com $N = 400$ (rede quadrada $L = 20$) atinge o estado estacionário com $\rho_A \approx 1$, $p = \rho_B + \rho_v \approx 0$ após $t = 1000$ MCS, onde a unidade de tempo MCS é igual a um passo da simulação, ou seja, corresponde à realização de um processo. Esse estado estacionário é esperado, pois nesse caso a taxa de espalhamento de partículas A é muito maior que a de partículas B . O tempo até atingir o estado estacionário aumenta conforme aumentamos λ_m até valores próximos de $\lambda_m^1 = 0.5$, com $t = 20000$ MCS para $\lambda_m = 0.50$. Quando $0.5 < \lambda_m < \lambda_m^2$, estados de dinâmica mista passam a existir, exibindo sincronização entre as situações em que ρ_B cresce devido aos processos do tipo $AB \rightarrow BB$, e situações em que ρ_A cresce devido à ocupação de nodos vazios gerados por processos $B \rightarrow v$. As flutuações das densidades de partículas aumentam conforme $\lambda_m \rightarrow \lambda_m^2$ e quando $\lambda_m > \lambda_m^2$ tornam-se grandes o suficiente para levar o sistema até o estado absorvente. Na figura 20 mostramos o perfil das densidades em função do tempo para diferentes valores de λ_m e o correspondente diagrama de coberturas.

A susceptibilidade é uma propriedade que quantifica a mudança de uma quantidade observável extensiva de um sistema, quando uma outra quantidade intensiva muda de valor. No contexto de sistemas magnéticos no equilíbrio termodinâmico, a susceptibilidade magnética é uma medida da variação da magnetização em relação ao campo magnético externo aplicado. Para sis-

temas no limite termodinâmico, próximos ao ponto crítico, a susceptibilidade é uma função divergente, dado que nesse regime o sistema torna-se altamente correlacionado. Os pontos críticos das transições de fase podem então ser determinados através da localização dos picos da susceptibilidade associada ao parâmetro de ordem do modelo estudado. Embora as transições que ocorrem em λ_m^1 e λ_m^2 não possam ser definidas categoricamente como contínuas, vamos considerar o comportamento nas vizinhanças desses pontos calculando a *susceptibilidade modificada* (BINDER; HEERMANN, 2010), definida pela seguinte expressão

$$\chi = N \frac{\langle \rho_i^2 \rangle - \langle \rho_i \rangle^2}{\langle \rho_i \rangle}, \quad (4.1)$$

onde o índice i refere-se a um dado componente do sistema, no nosso caso $i = v, A, B$. O comportamento de χ_p em função de λ_m , para $\tau = 0$ está apresentado na Fig. 21.

Sem a inclusão de memória, a dinâmica de *fitness* é trivial. Dado que $\tau = 0$, os valores médios $\langle f_i \rangle$ e $\langle f_{tot} \rangle$ no regime estacionário devem tender a zero, entretanto, observamos que próximo ao ponto $\lambda_m^1 \approx 0.5$, o valor estacionário de $\langle f_{tot} \rangle$ apresenta valores não nulos, como está apresentado na figura 22. Enquanto que $\langle f_A \rangle$ assume valores estacionários fixos próximos de zero, $\langle f_B \rangle$ e $\langle f_{tot} \rangle$ apresentam estados estacionários flutuantes com valores médios constantes. O motivo dessa diferença de comportamento reside no caráter hereditário da propagação das partículas B e semi-hereditário das partículas A . Enquanto que os processos hereditários produzem partículas B com acréscimo de *fitness* em nodos vazios, os processos semi-hereditários produzem partículas A com *fitness* sempre decrescentes. Os processos de mutação $AB \rightarrow B^*B^*$ nas interfaces AB também contribuem nesse aspecto. Como vimos, a dinâmica nesses processos gera partículas B^* que seguem a regra $f_B(t + dt) = \tau \max[f_A(t), f_B(t)] + df$, dessa forma as partículas B são sempre favorecidas, mesmo quando $f_A(t) > f_B(t)$.

4.3.0.11 Caso $\tau = 0.5$

Nos casos em que o tempo de memorização é intermediário, $0 < \tau < 1$, o diagrama de coberturas exhibe comportamento semelhante ao caso sem memória; entretanto, a localização dos pontos λ_m^1 e λ_m^2 é deslocada para valores maiores, como podemos ver nos gráficos da Fig. 23. Isso significa que a dinâmica de *fitness* favorece as partículas do tipo A , aumentando a taxa característica λ_m necessária para que as partículas A sofram mutações. Isso pode ser explicado observando a dinâmica de *fitness*, que varia de acordo com τ .

Rede Quadrada, $N = 400$, $\tau = 0$

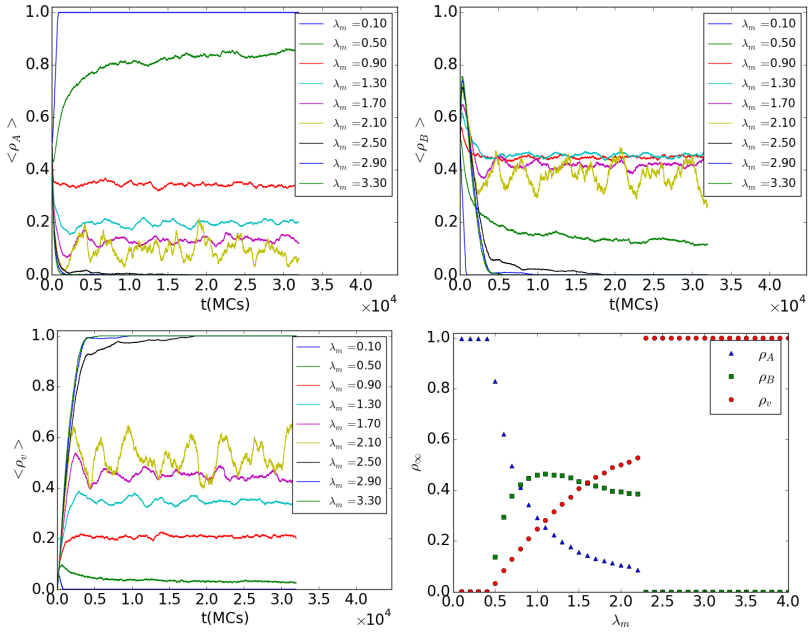


Figura 20 – Densidades de partículas e nodos vazios em função do tempo (passos de Monte Carlo) para vários valores de λ_m e o correspondente diagrama de coberturas que apresenta os valores estacionários das densidades.

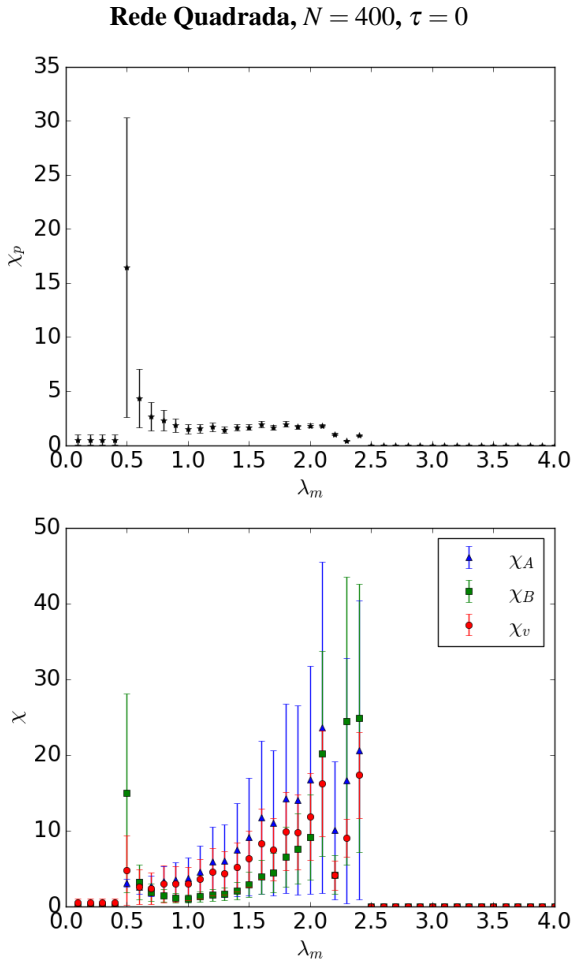


Figura 21 – Susceptibilidade em função do parâmetro de controle λ_m para $\tau = 0$. Incluímos também as susceptibilidades associadas às densidades de partículas e nodos vazios.

Rede Quadrada, $N = 400$, $\tau = 0$

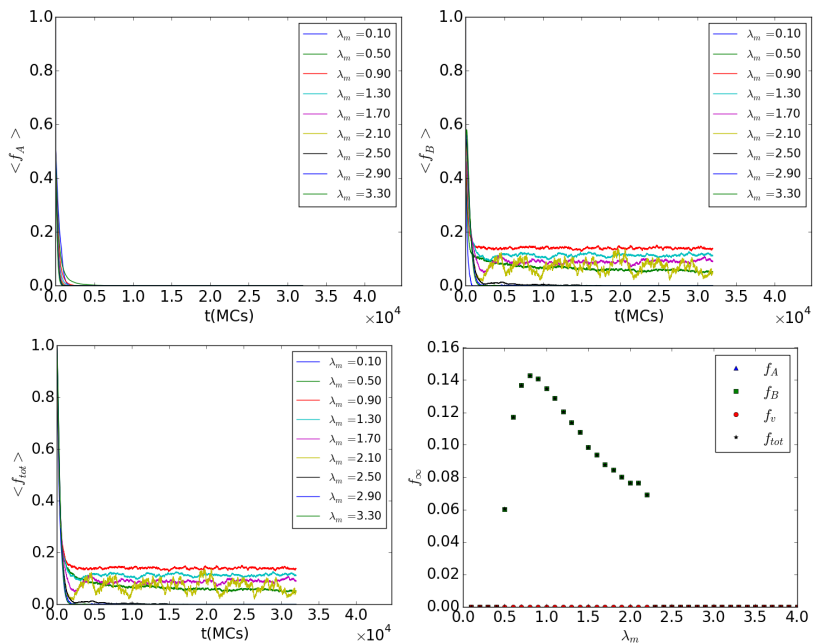


Figura 22 – Valores médios das distribuições de *fitness* das partículas $\langle f_A \rangle(t)$ e $\langle f_B \rangle(t)$, e do *fitness* total do sistema $\langle f_{tot} \rangle(t)$ em função do tempo (passos de MC) para vários valores de λ_m , e o correspondente diagrama apresentando os respectivos valores estacionários.

Se τ é maior que zero, partículas do tipo *A* têm *fitness* médio maior que zero, e passam a competir nas interfaces *AB*. Ao mesmo tempo, partículas *B* também têm seus processos de propagação e recuperação acelerados. Ou seja, enquanto que as partículas *A* propagam-se com maior velocidade, as partículas *B* recuperam-se com velocidade maior também, produzindo nodos vazios que podem ser ocupados por partículas *A*.

O tempo de simulação necessário para atingir o estado estacionário aumenta consideravelmente no caso $\tau = 0.5$. Isso pode ser entendido percebendo que as taxas efetivas de transição entre os estados acessíveis a um nodo dependem da função efetividade, que atua como um mecanismo seletor de partículas que possuem *fitness* maior que a média da população. Podemos observar isso no comportamento inicial crescente de $\langle f_{tot} \rangle(t)$ e na posterior estabilização em torno de um valor constante. O efeito da acumulação de *fitness* é percebido nos perfis de $\langle f_i \rangle$ em função do tempo e nos seus respectivos valores estacionários, como está apresentado na Fig. 24. Para valores de $\lambda_m < \lambda_m^1 \approx 0.6$, o *fitness* total estabiliza em valores iguais ao incremento df , enquanto que nos casos $\lambda_m > \lambda_m^1 \approx 0.6$, a acumulação e memorização possibilitam valores maiores que df .

4.3.0.12 Caso $\tau = 1$

No caso $\tau \rightarrow 1$, os diagramas de coberturas das densidades de partículas e nodos vazios são semelhantes aos casos anteriores; entretanto, os pontos de transição deslocam-se para valores ainda maiores (Fig. 25). No regime de memória infinita, o sistema exibe um comportamento em que o *fitness* total é sempre crescente, portanto, não existem estados estacionários para os valores médios de f_i , como podemos ver nos gráficos da Fig. 26. O *fitness* total do sistema apresenta um pico próximo ao ponto da transição, que coincide com o valor localizado através da susceptibilidade do parâmetro de ordem, $\lambda_m^1 \approx 0.7$. A origem dessa coincidência pode ser explicada observando que o sistema na transição pode estar muito correlacionado, e tem um número maior de processos dinâmicos ocorrendo por unidade de tempo, de modo que a taxa de crescimento de $\langle f_{tot} \rangle$ torna-se máxima.

4.3.0.13 Casos $\tau = 0, 0.3, 0.6, e 0.9$

O efeito de memorização no estado estacionário do sistema pode ser observado comparando-se os diagramas de cobertura para diferentes valores de τ . Apresentamos nos gráficos da Fig. 27 os perfis do parâmetro de ordem

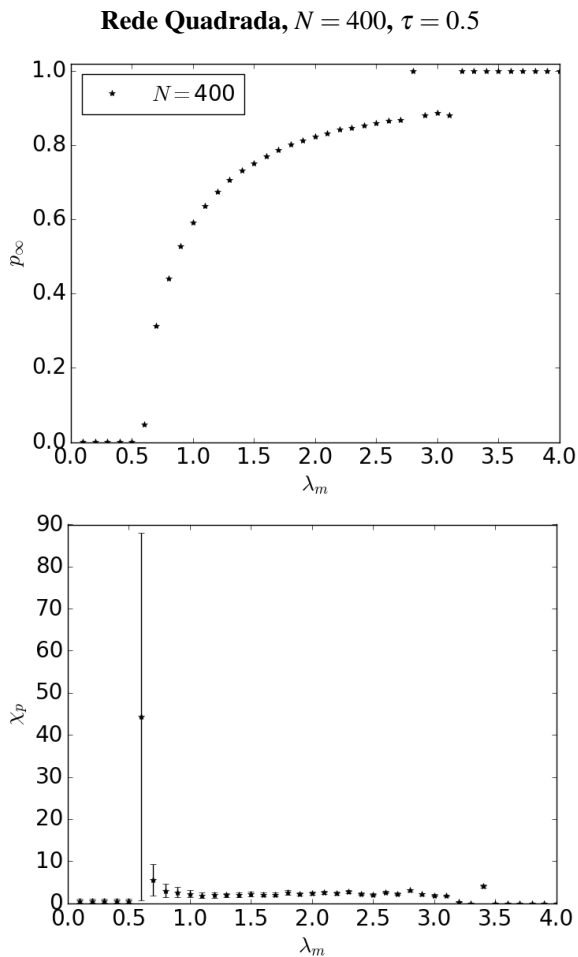


Figura 23 – Parâmetro de ordem e susceptibilidade como funções do parâmetro de controle para a rede quadrada com $\tau = 0.5$.

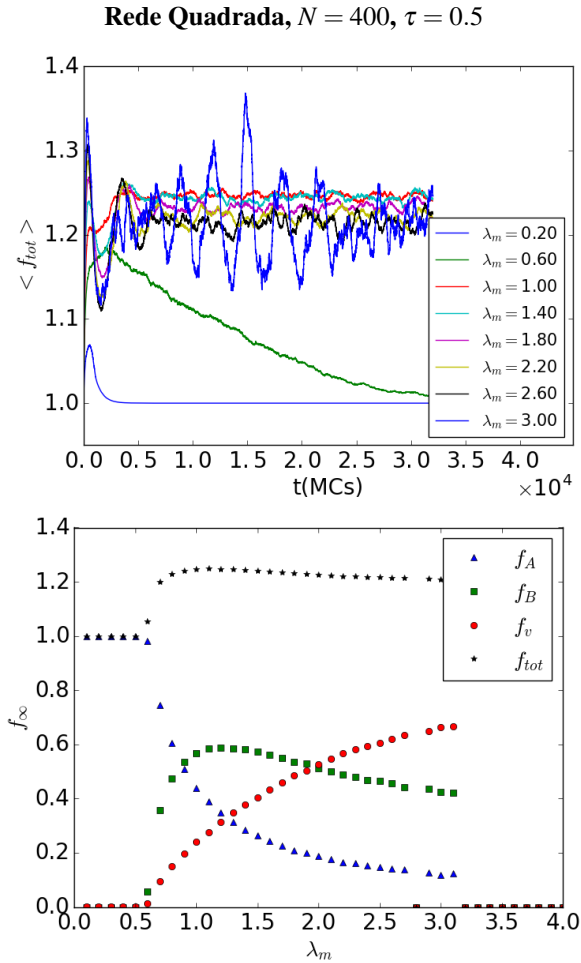


Figura 24 – Comportamento temporal de $\langle f_{tot} \rangle(t)$ e valores estacionários $\langle f_i \rangle(\infty)$ para a rede quadrada com $\tau = 0.5$

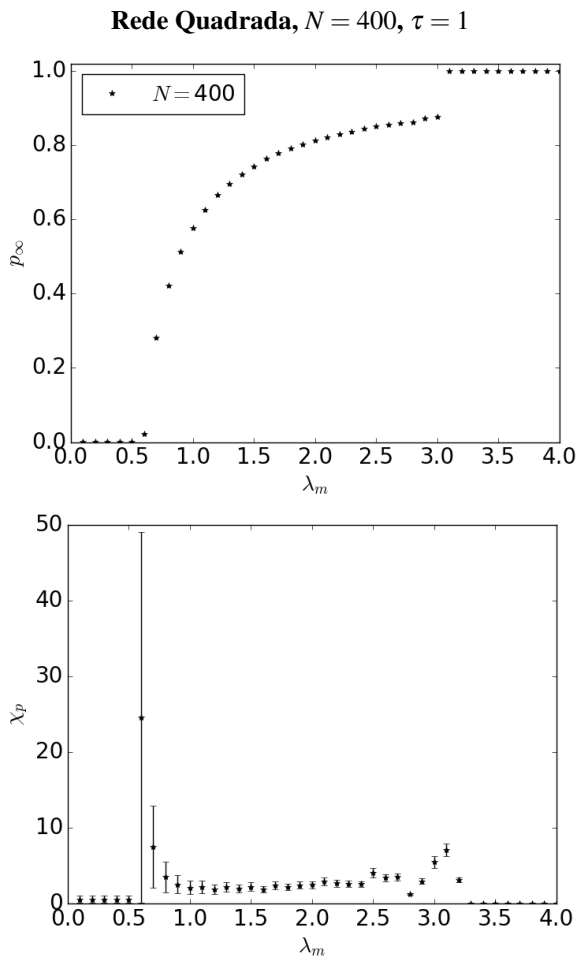


Figura 25 – Parâmetro de ordem e susceptibilidade como funções do parâmetro de controle para a rede quadrada com $\tau = 1$.

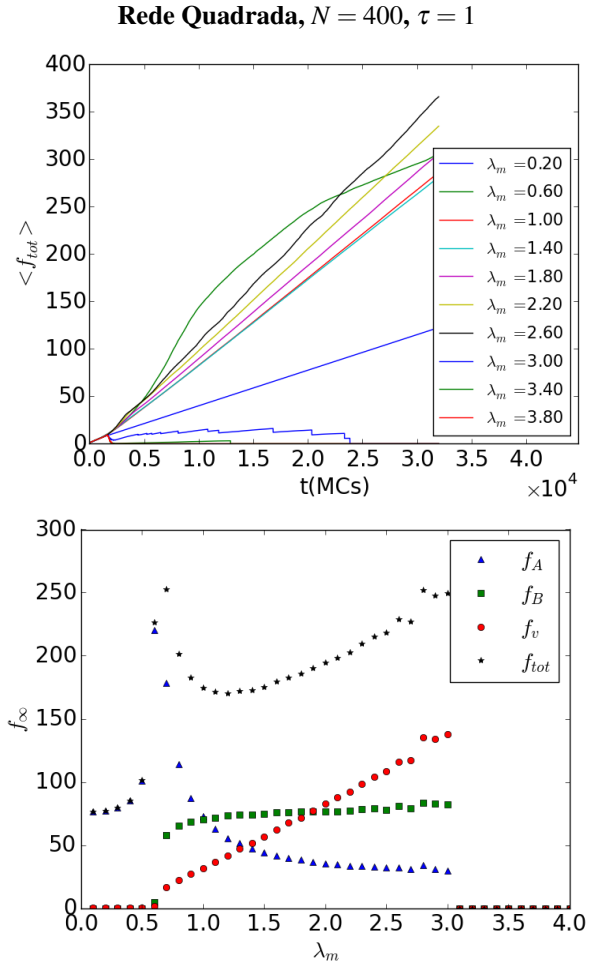


Figura 26 – Comportamento temporal de $\langle f_{tot} \rangle(t)$ e valores estacionários $\langle f_i \rangle(\infty)$ para a rede quadrada com $\tau = 1$.

e da susceptibilidade nas proximidades do ponto de transição λ_m^1 . Consideramos um total de $r_t = 50$ amostras em redes com tamanho $N = 400$.

REDE BARABÁSI-ALBERT

Para redes heterogêneas, a função efetividade $\varepsilon(f_1, f_2, k, t)$ depende do grau do nodo em consideração através da razão $k/\langle k \rangle$. Nodos de grau elevado que estão ocupados por partículas têm efetividade maior nas configurações em que $f_1 > f_2$. Por outro lado, nodos com grau baixo têm vantagem quando $f_1 < f_2$, como pode ser visto no comportamento apresentado na Fig. 7. Tendo isso em vista, repetimos o mesmo estudo apresentado na seção anterior, considerando redes construídas com o mecanismo de Barabási-Albert. Para fins de comparação, mantemos a mesma parametrização anterior, e o grau médio também é mantido em $\langle k \rangle = 4$.

4.3.0.14 Caso $\tau = 0$

O comportamento do sistema na rede BA sem memória é semelhante ao da rede quadrada, com parâmetro λ_m na primeira transição, $\lambda_m^1 \approx 0.3$, entretanto, a transição de fase para o estado absorvente observada anteriormente é substituída por uma transição para uma fase ativa Bv , localizada no ponto $\lambda_m^2 \approx 2.0$. Nessa fase, as densidades estacionárias são independentes de λ_m , visto que a dinâmica depende somente da interação entre partículas B e nodos vazios, caracterizada pela taxa $\lambda_B = 0.3$. Na figura 28 reunimos os resultados para o comportamento estacionário do modelo simulado em redes Barabási-Albert com tamanho $N = 400$.

4.3.0.15 Caso $\tau = 1$

A introdução de memória infinita pouco afeta o comportamento do sistema no regime de baixa mutação; entretanto, a dinâmica de *fitness* passa a ter efeito no regime de alta mutação. O valor de λ_m na segunda transição é alterado para $\lambda_m^2 \approx 2.5$. O valor estacionário da densidade de nodos vazios aumenta consideravelmente, chegando próximo ao estado absorvente. Nesse regime, o *fitness* acumulado nos nodos vazios é maior que o de partículas B , diminuindo a efetividade das partículas e conferindo proteção aos processos de criação. Esses resultados estão apresentados nos gráficos da Fig. 28.

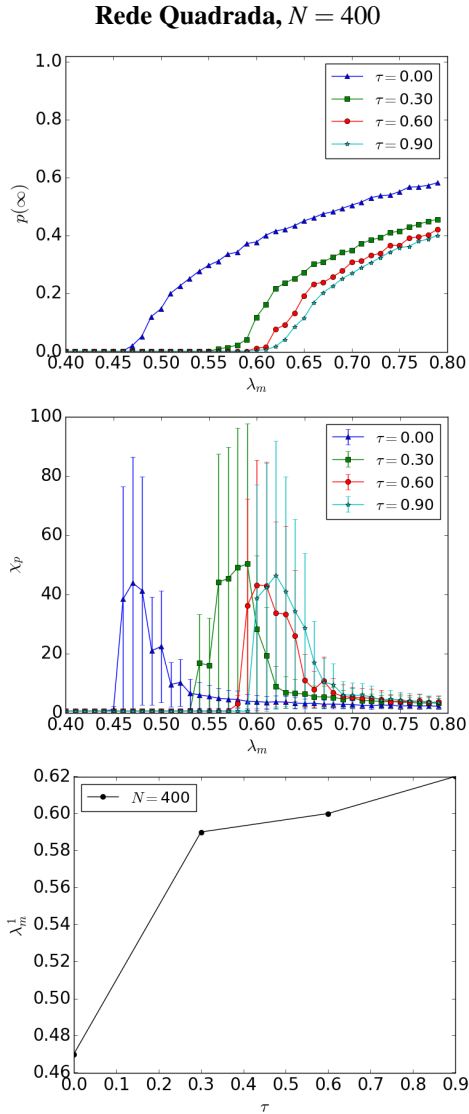


Figura 27 – Parâmetro de ordem e susceptibilidade como funções do parâmetro de controle na rede quadrada com diferentes valores de τ . Os picos de χ_p localizam as respectivas transições λ_m^1 e λ_m^2 .

Rede Barabási-Albert, $N = 400$, $\tau = 0$

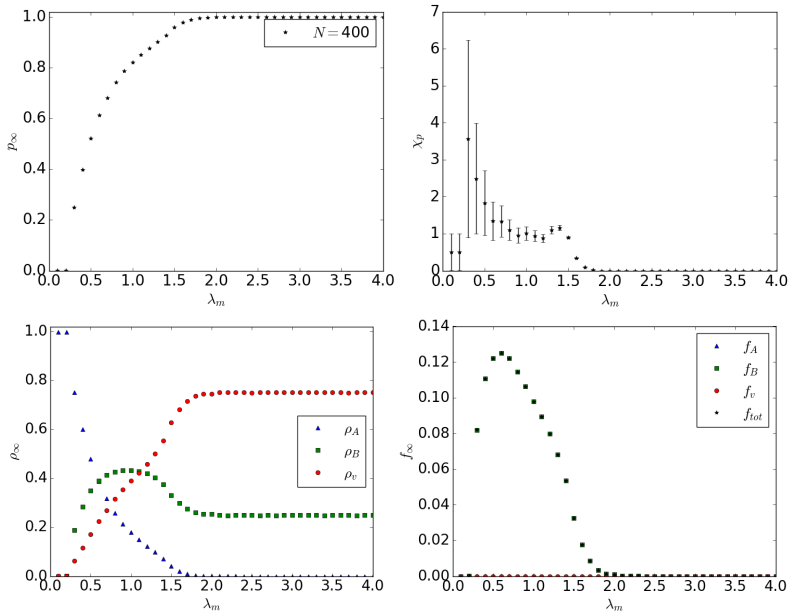


Figura 28 – Parâmetro de ordem e susceptibilidade (acima); densidades e valores estacionários de $\langle f_i \rangle(\infty)$ (abaixo), como funções do parâmetro de controle λ_m .

Rede Barabási-Albert, $N = 400$, $\tau = 1$

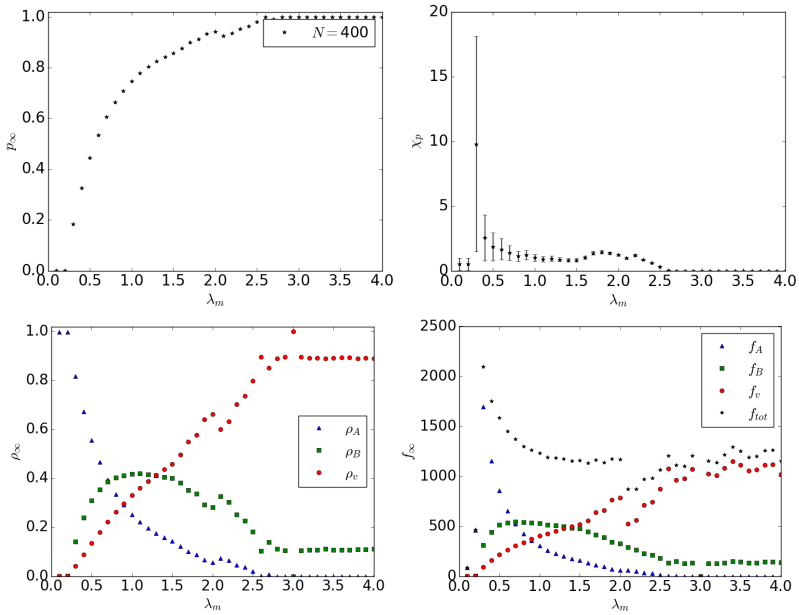


Figura 29 – Parâmetro de ordem e susceptibilidade (acima); densidades e valores estacionários de $\langle f_i \rangle(\infty)$ (abaixo), como funções do parâmetro de controle λ_m .

4.4 DIAGRAMA DE FASES

A determinação dos diagramas de cobertura e pontos associados às transições de fase do modelo deve ser realizada considerando os possíveis efeitos provenientes do tamanho finito da rede utilizada. As localizações dos pontos λ_m^1 e λ_m^2 podem depender da topologia e do tamanho da rede, e também do parâmetro de memorização τ ; portanto, antes de determinar o diagrama de fases do modelo é necessário analisar os perfis do parâmetro de ordem p para diferentes valores de L e τ , e assim podermos ter uma estimativa de qual tamanho de rede é suficiente. Aqui, nós consideramos os tamanhos $N = 100, 400, 900, 1600$ para os casos $\tau = 0$ e 1 .

Para a rede quadrada, observamos que o ponto de transição λ_m^1 varia tanto com N quanto com τ , se aproximando de valores bem definidos quando N cresce. A descontinuidade aparente na segunda transição é na verdade um efeito do tamanho finito do sistema. Conforme N cresce, taxas de mutação maiores são necessárias para que o salto no valor estacionário das densidades seja observado, entretanto, é plausível supor que no limite termodinâmico de $N \rightarrow \infty$, uma taxa de mutação infinita também seja capaz de produzir os mesmos efeitos observados em redes com tamanho finito. Efeitos semelhantes ocorrem na rede BA, com a diferença de que ambos os pontos de transição são afetados, sendo que λ_m^1 desloca-se para esquerda e λ_m^2 para a direita. Mostramos nas Figs. 30 e 31 os comportamentos de p e $\langle f_{tot} \rangle$ como funções de λ_m no regime estacionário.

O modelo que estudamos apresenta até quatro fases distintas: Av , Bv , ABv e v . O diagrama de fases demonstra em qual dessas fases o sistema está conforme variamos um ou mais parâmetros do modelo, localizando os pontos nos quais as transições ocorrem, e estamos interessados em analisar como esses pontos dependem do parâmetro de memorização. Para a transição $Av \rightarrow ABv$, calculamos esses pontos através do método da bissecção. Definimos um intervalo de λ_m entre dois valores predefinidos λ_m^- e λ_m^+ e simulamos o sistema considerando o valor médio $\lambda_m^s = (\lambda_m^+ + \lambda_m^-)/2$. Caso o sistema esteja na fase Av , tomamos $\lambda_m^- = \lambda_m^s$; caso a fase seja ABv ou v , tomamos $\lambda_m^+ = \lambda_m^s$. Repetimos esse procedimento até que a diferença $\lambda_m^+ - \lambda_m^-$ seja menor que 0.01. O mesmo método é aplicado para as transições $ABv \rightarrow v$ e $Bv \rightarrow v$ na rede quadrada, e $ABv \rightarrow Bv$ na rede Barabási-Albert.

Na rede quadrada, no regime de λ_m pequeno, o sistema está na fase pura Av , composta somente de partículas A e poucos nodos vazios; na região intermediária, a fase é mista ABv , com partículas A , B e nodos vazios; no regime de λ_m grande, todas as partículas desaparecem e existem somente nodos vazios. O efeito de memorização é pouco expressivo na transição entre as fases Av e ABv ; entretanto, a transição de fase para o estado absorvente

Rede Quadrada

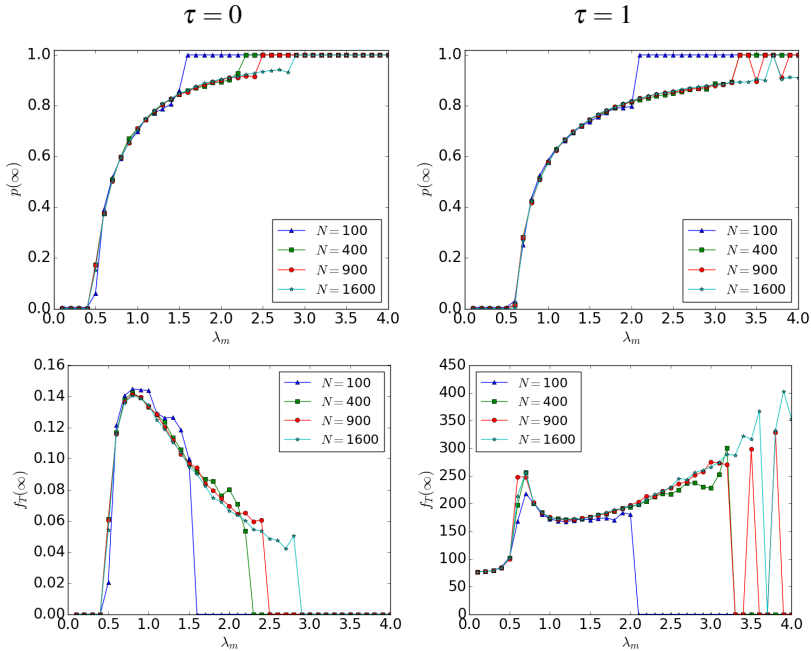


Figura 30 – Parâmetro de ordem e *fitness* total como funções de λ_m para diferentes tamanhos da rede quadrada, nos casos $\tau = 0$ (esquerda) e $\tau = 1$ (direita). A localização da primeira transição é pouco afetada, entretanto, efeitos de tamanho finito são observados na transição para o estado absorvente. Esperamos que no limite $N \rightarrow \infty$ uma transição contínua seja observada para λ_m^2 suficientemente grande.

Rede Barabási-Albert

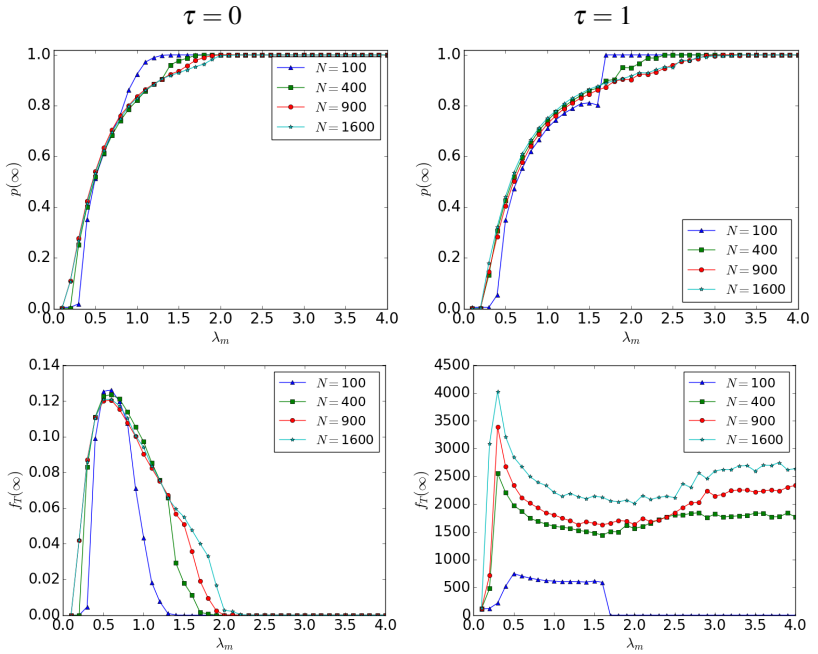


Figura 31 – Parâmetro de ordem e *fitness* total como funções de λ_m para diferentes tamanhos da rede Barabási-Albert, nos casos $\tau = 0$ (esquerda) e $\tau = 1$ (direita). Efeitos de tamanho finito nas proximidades dos pontos de transição são mais pronunciados.

tem seu comportamento afetado nos regimes de baixas e altas memorizações. O diagrama de fases na rede BA apresenta comportamento semelhante. A localização das transições de fase varia pouco em relação ao parâmetro de memorização. Uma diferença importante é que a fase absorvente não está presente, sendo substituída pela fase ativa pura Bv . Essa mudança ocorre porque o valor mínimo de λ_B para o qual as partículas B sobrevivem através de criações em nodos vazios é menor na rede BA, possibilitando a existência de uma fase ativa mesmo para $\lambda_B = 0.3$.

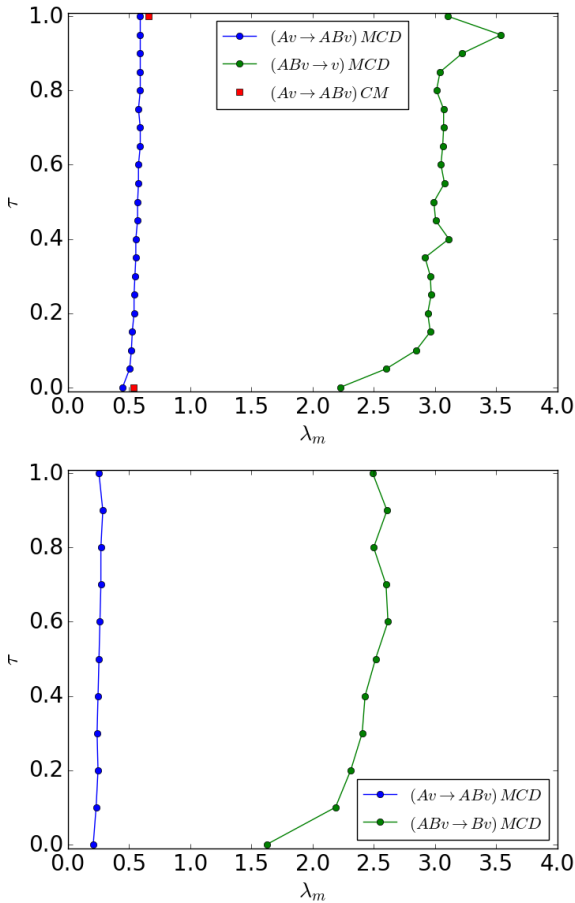


Figura 32 – Diagramas de fases no plano τ vs λ_m para as redes quadrada (acima) e Barabási-Albert (abaixo), com $N = 400$.

5 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Nesta Tese, estudamos o comportamento estacionário de um sistema de partículas interagentes não-Markoviano. Com base em modelos epidemiológicos clássicos espacialmente estruturados, apresentamos um modelo de rede com dinâmica estocástica que considera interações competitivas dependentes da história evolutiva do sistema e da topologia da rede em que a dinâmica é realizada. Investigamos os efeitos provenientes da memória e da topologia do sistema através de aproximações de campo médio, e da realização de simulações computacionais com o método de Monte Carlo Dinâmico.

Através de aproximações de campo médio, mesmo que em uma formulação bastante simplificada, pudemos observar o comportamento qualitativo obtido nas simulações de MCD para os casos extremos de memória nula e infinita, prevendo o deslocamento da taxa de mutação para a qual a fase com dinâmica mista passa a ocorrer. O comportamento divergente do *fitness* total do sistema próximo ao ponto de transição pôde ser previsto pelas equações de campo médio, e se mostrou como um possível indicador de grandes flutuações no parâmetro de ordem do modelo.

Um efeito interessante, e de certa forma inesperado, do aumento da capacidade de memorização é a persistência da presença de partículas do tipo A no sistema, que ocorre devido ao caráter semi-hereditário dos processos de criação de partículas desse tipo. Os diagramas de fases obtidos para as redes quadrada e Barabási-Albert apresentam comportamentos muito semelhantes, diferindo somente na localização dos pontos de transição. Na rede heterogênea de Barabási-Albert, a transição para o estado absorvente no regime de altas mutações não ocorre, e o sistema permanece numa fase ativa pura, composta somente de partículas B e nodos vazios.

Além da transição entre a fase ativa A_v e a fase mista AB_v , o modelo apresenta uma transição entre a fase AB_v e a fase absorvente. Inicialmente, acreditávamos que essa transição fosse descontínua, entretanto, a análise de tamanho finito mostrou que no limite de redes muito grandes a transição parece ser contínua. A descontinuidade observada ocorre devido às grandes flutuações que o sistema apresenta desde os instantes iniciais, até a sua relaxação para o estado estacionário. Um ponto importante que pretendemos investigar no futuro refere-se às transições de fase observadas. É nosso objetivo desvendar se essas transições são contínuas, ou transições de primeira ordem fracas, e nesse caso poderíamos determinar os expoentes críticos, estáticos e dinâmicos associados ao modelo. Esse tipo de comportamento nós já havíamos observado na referência 10 desta Tese, onde a largura da fase mista é nula em uma dimensão, porém apresenta uma largura finita em duas

dimensões, caso estudado aqui na rede quadrada.

Para se ter uma ideia da dificuldade encontrada nesse caso, calculamos os expoentes dinâmicos δ , η e ζ , associados à probabilidade de sobrevivência, $P_{s_B}(t)$; ao número total de partículas B , $N_B(t)$; e ao deslocamento quadrático médio, $R_B^2(t)$, relativos ao espalhamento de partículas do tipo B , partindo-se da condição de uma rede cheia de partículas A , com somente uma partícula B no centro da rede. No ponto de transição, é esperado que essas quantidades obedeçam leis de potência com expoentes universais, cujo paradigma nesse caso seria o modelo da Percolação Dirigida. Consideramos um total de $r_t = 10^4$ amostras em uma rede quadrada com tamanho $L = 100$, e desconsideramos as amostras em que a atividade alcançou os contornos da rede. Os expoentes obtidos para o modelo estudado não concordam com os esperados para a classe PD em duas dimensões, nem mesmo no caso $\tau = 0$, como está mostrado no gráficos da Fig. 33.

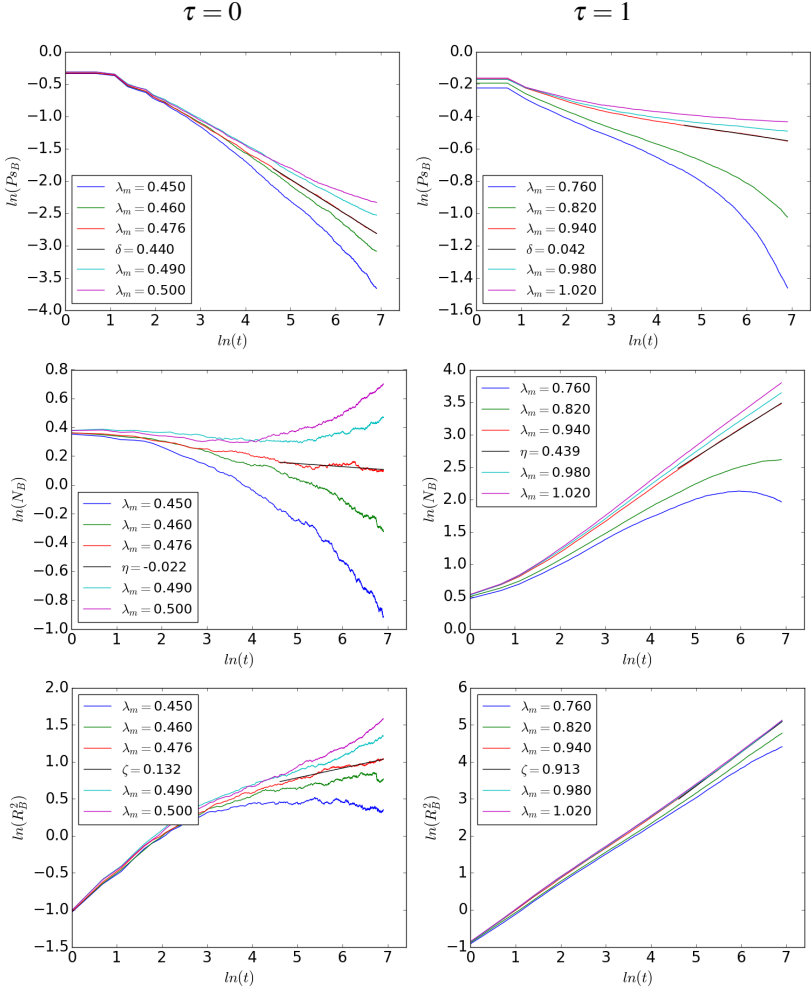


Figura 33 – Gráficos log-log para a probabilidade de sobrevivência, o número médio de partículas e o deslocamento quadrático médio de partículas do tipo B em função do tempo. Exceto pelo expoente δ no caso $\tau = 0$, os expoentes dinâmicos obtidos não concordam com os valores de referência para a classe de universalidade da PD em duas dimensões, $\delta = 0.4505(10)$, $\eta = 0.2295(10)$ e $\zeta = 1.1325(10)$ (MARRO; DICKMAN, 1999).

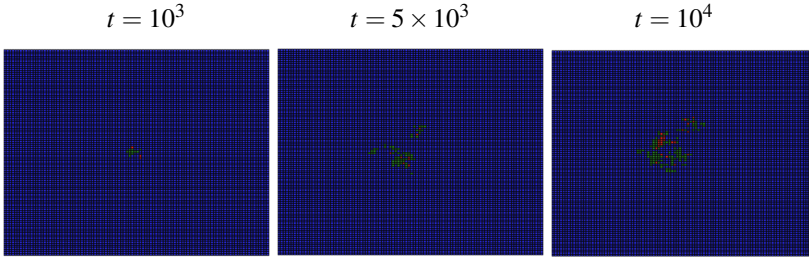


Figura 34 – Configurações do sistema ($L = 100$) em diferentes passos de Monte Carlo durante o espalhamento de partículas B com $\lambda_m = 0.5$, no caso $\tau = 0$. Partículas A aparecem em azul, partículas B em verde, e nodos vazios em vermelho.

Buscando entender o que está acontecendo, pelo menos de forma qualitativa, percebemos que, no caso sem memória o expoente δ está próximo do valor esperado para a PD; o expoente η está próximo de zero e não concorda com a PD; e o expoente ζ é maior que zero, porém está abaixo do valor esperado para a PD. O comportamento observado pode ser explicado qualitativamente lembrando que a taxa de espalhamento de partículas B através de nodos vazios é subcrítica, de modo que o aumento do número médio de partículas B é devido especialmente às mutações de partículas A que ocorrem nas fronteiras do espalhamento. Nessa região, a razão entre as taxas λ_m e μ_B necessária para a sobrevivência de partículas B é satisfeita, e talvez por isso o expoente δ obtido seja compatível com aquele esperado para a PD. Por outro lado, no interior do *cluster*, o número de interfaces AB é reduzido, de modo que o número médio de partículas B não cresce com o expoente η esperado. O deslocamento desacelerado de partículas B pode estar sendo causado pelo retardamento gerado por processos de interação entre duas partículas B , que tornam o *cluster* mais compacto e reduzem a velocidade de crescimento do raio de espalhamento. É importante notar que o espalhamento não ocorre sobre uma rede vazia, como no processo de contato usual. Em nosso caso, as partículas A competem nas interfaces de espalhamento e invadem o *cluster* espalhante, impedindo que esse cresça da mesma maneira.

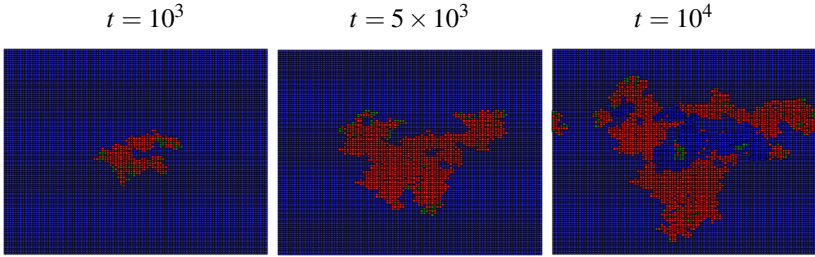


Figura 35 – Diferentes configurações do sistema, agora no caso $\tau = 1$ com $\lambda_m = 1$.

No caso do sistema com memória, a discordância começa pela localização do ponto crítico $\lambda_m^1 = 0.94$, que não corresponde ao valor obtido na análise estacionária $\lambda_m^1 = 0.65$. Essa diferença pode ter origem nas condições iniciais empregadas, visto que são diferentes. Para obter os diagramas de fases, preparamos condições iniciais aleatórias com alta densidade de pares AB , enquanto que na análise de espalhamento, no instante inicial há somente uma partícula B conectada às quatro partículas A . Em relação aos expoentes de espalhamento obtidos nesse caso, observamos que o expoente δ é próximo de zero e não concorda com a classe da PD; o expoente η é cerca do dobro daquele esperado para a classe da PD; o expoente ζ está um pouco abaixo do esperado para a classe da PD. A probabilidade de sobrevivência de partículas B é decrescente mesmo para valores de $\lambda_m > 0.65$, e só apresenta comportamento linear para valores de λ_m próximos de $\mu_B = 1$, acima do qual passa a ser constante. Supomos que isso ocorra porque os processos de recuperação 'imunizam' a rede criando uma ilha compacta de nodos vazios com alto valor de *fitness* acumulado, impedindo que esses sejam reinfectados. O perfil de espalhamento acelerado ($\eta > \eta_{PD2d}$) pode ser devido aos processos de mutação consecutivos que ocorrem nas fronteiras, que no caso com memória tornam-se mais efetivos a cada nova mutação, acelerando o crescimento do número de partículas no *cluster*. Tudo isso nos leva a pensar que o modelo estudado não esteja na classe de universalidade da PD. Entretanto, mais estudos são necessários para se ter uma ideia mais clara sobre a natureza dessas transições de fases.

Apesar da premissa que serviu de base para desenvolver o modelo estudado ser verdadeira, i.e., a dinâmica de propagação epidêmica depende da adaptação dos indivíduos no sistema, e por isso deve depender da capacidade de memorizar e aprender com as experiências passadas, o modelo estudado, definido como está, ainda não é capaz de captar suficientemente os efeitos observados num sistema real. Possíveis alterações no modelo a fim

de torná-lo um pouco mais realista incluem considerar diferentes mecanismos de memorização; modificar a definição da função efetividade, incluindo aleatoriedade através de ruídos; e redefinir a dinâmica de *fitness* de forma não-determinística, possibilitando diferentes incrementos df , que podem ser tanto positivos quanto negativos dependendo do processo considerado.

APÊNDICE A – Artigos publicados durante o doutorado

Two competitive contact processes with local interactions

T B Pedro¹, M M Szorzyka² and W Figueiredo¹

¹ Departamento de Física, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, Santa Catarina, Brazil

² Universidade Federal de Santa Catarina, Campus Araranguá, Santa Catarina, Brazil

E-mail: tiago.b.p@posgrad.ufsc.br, szorzyka@gmail.com and wagner.figueiredo@ufsc.br

Received 18 December 2013

Accepted for publication 30 March 2014

Published 22 May 2014

Online at stacks.iop.org/JSTAT/2014/P05016

[doi:10.1088/1742-5468/2014/05/P05016](https://doi.org/10.1088/1742-5468/2014/05/P05016)

Abstract. We present a simple lattice model that consists of two competitive contact processes with local interactions on a one-dimensional lattice. The sites of the lattice can be empty or occupied by particles of type A or type B. The time evolution of the densities is governed by a master equation, whose transition among the states depends essentially on the spreading and annihilation rates of both particles. This is a competitive model where the stationary states are determined as a function of the spreading and annihilation rates. We employ mean-field approximations, at the level of one and two sites, and we obtain a phase diagram that shows four well distinguished phases, including a mixed one in which both particles coexist. Monte Carlo simulations show that this mixed phase no longer exists in the limit of large one-dimensional lattices. However, simulations of the model in two dimensions show that the mixed phase does not disappear as in the one-dimensional case. We also calculate some static critical exponents of the one-dimensional version of the model and we have shown that they belong to the directed percolation universality class.

Keywords: phase diagrams (theory), phase transitions into absorbing states (theory)

Contents

1. Introduction	2
2. Model and calculations	3
2.1. Site approximation	4
2.2. Pair approximation	4
2.3. Simulations	5
3. Results and discussion	6
4. Mixed phase in two dimensions	14
5. Conclusions	15
Acknowledgments	15
References	15

1. Introduction

Spatiotemporal processes, such as for instance general epidemic spreading and tumor growth, can be modeled by cellular automata and stochastic processes with absorbing states [1]–[3]. For example, in tumor tissue, normal and tumor cells reproduce themselves consuming nutrients and do not survive in an environment with relatively few nutrients. The phase diagram of the model studied in [4] displays a phase transition belonging to the directed percolation (DP) universality class in the region of the phase diagram with a low supplying rate of nutrients. Models of tumor growth share many properties that are also common to models of the predator–prey type, which are relevant to biological ecosystems [5].

Phase transitions into absorbing states have been studied extensively in recent years since they serve as a prototype for irreversible phase transitions. One of the topics of great interest is the critical behavior of the system in the vicinity of its critical point, i.e. when it passes from an active to an absorbing state. The critical exponents associated with such phase transition in general belong to the well known DP universality class [6]–[9]. Examples of the models belonging to the DP universality class are the contact process [10, 11], the cellular automaton of Domany–Kinzel [12], and models that describe heterogeneous catalytic reactions [13, 14]. In order to describe the general properties that a model must satisfy to belong to the DP universality class, Janssen and Grassberger [15, 16] proposed a number of conditions that became known as the DP conjecture. According to this conjecture, a model belongs to the DP universality class if it exhibits a continuous transition between an active phase and a single absorbing state, its order parameter is a positive scalar, only short-range interactions are considered, and it cannot present additional symmetries, such as conservation laws or the presence of random impurities.

We had to wait a long time to find a system exhibiting a critical behavior in the DP universality class, mainly because it is very difficult to produce a pure absorbing state [7]. However, Takeuchi *et al* [17, 18] recently found the first experimental evidence of the critical behavior in the DP universality class. Studying the turbulent transition between two phases of a nematic liquid crystal, they have determined several critical exponents and scaling functions in agreement with the theoretical predictions.

In this paper, we consider two competitive contact processes with local interactions on a one-dimensional lattice, with a single-site occupancy. The processes are described by spreading rates λ_a and λ_b , and the interaction between particles occurs when a nearest neighbor of a particle of type A is occupied by a particle of type B. When this happens, an A particle can turn into a type B particle with rate λ_{ab} . We consider that both particles spontaneously annihilate and we choose a rate, 1, for the A particles, and μ for the B particles.

We employ mean-field calculations and Monte Carlo simulations to determine the phase diagram of the model. The results show that a transition from the active to the absorbing state is described by critical exponents belonging to the DP universality class, as is to be expected by the DP conjecture. A similar two-type contact process [19] where two individuals can occupy the same site also gives critical exponents compatible with the DP universality class.

This paper is organized as follows. In section 2 we present the model and the mean-field calculations in the site and pair approximations, as well as the details of the Monte Carlo simulations. In section 3 we present general results and discussions. Section 4 is dedicated to the analysis of the mixed phase of the two-dimensional system and finally, in section 5, we present our conclusions.

2. Model and calculations

Consider a one-dimensional lattice model where each site can be occupied by a single particle or can be empty. The occupied sites are represented by A and B and an empty site by v (vacant site). The temporal evolution of the system is governed by local Markovian rules, governing the possible transitions in the model. The basic processes are as follows:

- (i) $(A + v \rightarrow 2A)$, rate λ_a ;
- (ii) $(B + v \rightarrow 2B)$, rate λ_b ;
- (iii) $(B + A \rightarrow 2B)$, rate λ_{ab} ;
- (iv) $(A \rightarrow v)$, rate 1;
- (v) $(B \rightarrow v)$, rate μ .

Processes (i) and (ii) represent auto-catalytic creation of particles, directly dependent on the presence of neighboring vacant sites, which is a characteristic of the contact process. Process (iii) represents the interaction between the two contact processes, and can be seen as a predator–prey rule, in which a particle of type A is seen as a prey and that of type B as a predator. Finally, processes (iv) and (v) are spontaneous particle annihilations, which are common to both particles.

2.1. Site approximation

In this approximation we disregard correlations between nearest neighbor sites. We define the densities ρ_v , ρ_A and ρ_B , corresponding to empty sites, occupied by particles of types A and B, respectively. From the processes presented one can write rates of gain and loss for the densities through the master equation. Neglecting correlations between nearest neighbor sites, the time evolutions of the densities of particles are given by

$$\frac{d\rho_A}{dt} = -\rho_A - \frac{\lambda_{ab}}{2}\rho_A[1 - (1 - \rho_B)^2] + \frac{\lambda_a}{2}\rho_v[1 - (1 - \rho_A)^2], \quad (1)$$

$$\frac{d\rho_B}{dt} = -\mu\rho_B + \frac{\lambda_b}{2}\rho_v[1 - (1 - \rho_B)^2] + \frac{\lambda_{ab}}{2}\rho_A[1 - (1 - \rho_B)^2], \quad (2)$$

together with the normalization condition

$$\rho_v + \rho_A + \rho_B = 1. \quad (3)$$

2.2. Pair approximation

This is the simplest approximation beyond the one-site approximation. Here, we introduce the correlation between two nearest neighbor sites of the lattice. We introduce the conditional probability $P(i|j)$, which is the probability that a given site will be of type i , given that one of its nearest neighbors is of type j . Therefore, we can write for the probability of a nearest neighbor pair (ij) in the lattice

$$p_{ij} = p_j P(i|j), \quad (4)$$

and additionally it is assumed that the system is translationally invariant, so that $p_{ij} = p_{ji}$.

The pair probabilities are related to the densities of particles A and B and to the fraction of vacant sites v by the relations

$$\begin{aligned} \rho_v &= p_{vv} + p_{vA} + p_{vB}, \\ \rho_A &= p_{AA} + p_{vA} + p_{AB}, \\ \rho_B &= p_{BB} + p_{vB} + p_{AB}. \end{aligned} \quad (5)$$

The normalization equation for the pair approximation is

$$p_{vv} + p_{AA} + p_{BB} + 2(p_{vA} + p_{vB} + p_{AB}) = 1. \quad (6)$$

Therefore, the time evolution of the pair probabilities is written as a function of the transition rates among pairs of sites: vv , AA , BB , vA , vB and AB . Fifteen transition rates are required to write the equations that determine the time evolution of the system (see table 1).

In this approximation [20, 21] we assume that the probability of a larger cluster is written as a product of nearest neighbor pair probabilities. In table 1 the (x) means that the transition is not possible. For example, in the case of transition $vv \rightarrow vA$, the existence of a pair vv whose probability is p_{vv} is supposed, and then it is assumed that there is at least one nearest neighbor site occupied by a particle of type A, so we have

$$T_{vv \rightarrow vA} = \frac{\lambda_a}{2} p_{vv} \left(\frac{p_{vA}}{p_v} \right), \quad (7)$$

Table 1. Possible transitions in the pair approximation. Transitions marked by an x are forbidden.

To ↓ From →	vv	AA	BB	vA	vB	AB
vv	x	x	x	T_7	T_{10}	x
AA	x	x	x	T_8	x	x
BB	x	x	x	x	T_{11}	T_{13}
vA	T_1	T_3	x	x	x	T_{14}
vB	T_2	x	T_5	T_9	x	T_{15}
AB	x	T_4	T_6	x	T_{12}	x

where (p_{vA}/p_v) is equal to the probability of existence of a pair vA with respect to a site v. After we calculate the other transition rates of table 1, we can establish the set of gain–loss equations for the pair densities as follows:

$$\frac{dp_{vv}}{dt} = 2 \left[p_{vA} + \mu p_{vB} - \frac{\lambda_a}{2} p_{vv} \left(\frac{p_{vA}}{p_v} \right) - \frac{\lambda_b}{2} p_{vv} \left(\frac{p_{vB}}{p_v} \right) \right], \quad (8)$$

$$\frac{dp_{AA}}{dt} = 2 \left[\frac{\lambda_a}{2} \frac{p_{vA}^2}{p_v} - p_{AA} - \frac{\lambda_{ab}}{2} p_{AA} \left(\frac{p_{AB}}{p_A} \right) \right], \quad (9)$$

$$\frac{dp_{BB}}{dt} = 2 \left[\frac{\lambda_b}{2} \frac{p_{vB}^2}{p_v} + \frac{\lambda_{ab}}{2} \frac{p_{AB}^2}{p_A} - \mu p_{BB} \right], \quad (10)$$

$$\frac{dp_{vA}}{dt} = \frac{\lambda_a}{2} p_{vv} \left(\frac{p_{vA}}{p_v} \right) + p_{AA} + \mu p_{AB} - p_{vA} - \frac{\lambda_a}{2} \frac{p_{vA}^2}{p_v} - \frac{\lambda_{ab}}{2} p_{vA} \left(\frac{p_{AB}}{p_A} \right) - \frac{\lambda_b}{2} \frac{p_{vB}^2}{p_v}, \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \frac{dp_{vB}}{dt} = & \frac{\lambda_b}{2} p_{vv} \left(\frac{p_{vB}}{p_v} \right) + \frac{\lambda_{ab}}{2} p_{vA} \left(\frac{p_{AB}}{p_A} \right) \\ & + p_{AB} + \mu p_{BB} - \mu p_{vB} - \frac{\lambda_a}{2} p_{vB} \left(\frac{p_{vA}}{p_v} \right) - \frac{\lambda_b}{2} \frac{p_{vB}^2}{p_v}, \end{aligned} \quad (12)$$

$$\frac{dp_{AB}}{dt} = \frac{\lambda_a}{2} p_{vB} \left(\frac{p_{vA}}{p_v} \right) + \frac{\lambda_b}{2} p_{vA} \left(\frac{p_{vB}}{p_v} \right) - \frac{\lambda_{ab}}{2} p_{AA} \left(\frac{p_{AB}}{p_A} \right) - (1 + \mu) p_{AB} - \frac{\lambda_{ab}}{2} \frac{p_{AB}^2}{p_A}. \quad (13)$$

2.3. Simulations

We determine the phase diagram and the critical behavior of the model through Monte Carlo simulations. We consider a linear lattice of size L ranging from 256 to 65 536. We employ periodic boundary conditions and apply a continuous time algorithm in order to save time. In this way, instead of looking for active (A or B) particles in the whole lattice, the search is restricted to a list of active sites at each instant of time. This is very efficient, because close to the absorbing state the number of active sites is very small.

Our simulations begin with a random distribution of A and B particles, with $\rho_A = \rho_B = 0.5$, that is, a fully active initial state. The total number of simulation steps to reach the stationary state, as well as the number of independent samples to calculate the averages of interest, depends on the size of the system. For instance, the total simulation time, measured in Monte Carlo steps per site (MCS/site), ranges from 800 for $L = 256$

up to 12800 for $L = 4096$. After a given sample enters into its quasi-steady state, we choose a time window where the values of the densities are collected. As the lattice sizes considered are finite, the simulation cannot run for a long time because the system could enter into the absorbing state. This situation occurs in particular for small lattices and close to the critical point. Afterwards, we calculate the averages over the total number of samples. In the case of a lattice of size $L = 256$, the typical number of samples we use is 5×10^4 , while for $L = 4096$ it is 3125.

In the following we present the steps of the algorithm employed in the simulations: a site i is randomly selected from the list of active sites; in our case it can be occupied by a particle of type A or type B. Then, the selected particle attempts to spread. For that, a nearest neighbor site j is selected, also randomly, and we call it j . When site i is occupied by a particle of type A and if site j is vacant, site j will be occupied by a particle of type A with a probability given below, otherwise site i becomes empty, which means an annihilation event. On the other hand, when site i is occupied by a particle of type B, and if site j is empty or occupied by a particle of type A, this site will become occupied by a B particle with a probability defined below, otherwise site i becomes empty.

The spreading of particles is described by probabilities which depend directly on the parameters λ_a , λ_b , λ_{ab} and μ . For spreading to vacant sites we define

$$p(A) = \frac{\lambda_a}{1 + \lambda_a}, \quad p(B) = \frac{\lambda_b}{\mu + \lambda_b}, \quad (14)$$

and for the spreading of a particle of type B over one of type A

$$p(AB) = \frac{\lambda_{ab}}{\mu + \lambda_{ab}}. \quad (15)$$

For the spontaneous annihilations, we have $q(i) = 1 - p(i)$, so that

$$q(A) = \frac{1}{1 + \lambda_a}, \quad q(B) = \frac{\mu}{\mu + \lambda_b}, \quad (16)$$

and

$$q(AB) = \frac{\mu}{\mu + \lambda_{ab}}. \quad (17)$$

3. Results and discussion

As the spontaneous annihilation of a particle of type A has a fixed rate equal to one, the model still contains four independent rates. As a matter of simplification, we assume in our analysis that the rates λ_a and λ_{ab} are equal, and the rate μ is also equal to one. Later on in this work we investigate another set of parameters where λ_a and λ_b are fixed, with $\lambda_b > \lambda_a$, so we take λ_{ab} and μ as free parameters.

We now present the stationary behavior of the model for the case where the rate λ_{ab} is equal to λ_b and the rate μ is equal to 1. With this choice of parameters the particles of type B do not distinguish vacant sites from sites occupied by particles of type A, which means that they experience a simple contact process. We also take the same rate for the

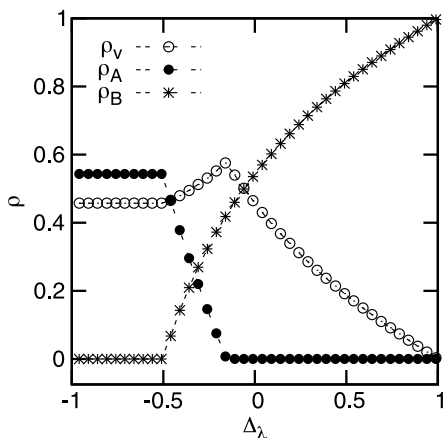


Figure 1. Stationary densities as a function of the parameter Δ_λ , for the particular case $\lambda_a = 3.0$, in the site approximation. At the point $\Delta_\lambda = -0.5$, the corresponding value of $\lambda_b = 1.0$.

spontaneous annihilation for both particles. To better appreciate the competition between these two interacting contact processes it is convenient to define the following parameter:

$$\Delta_\lambda = \frac{\lambda_b - \lambda_a}{\lambda_b + \lambda_a}, \quad (18)$$

where $-1 < \Delta_\lambda < 1$.

The mean-field equations for both site and pair approximations were solved by the fourth-order Runge-Kutta method with different initial conditions. In order to observe the competition, it is necessary to have initial conditions with a non-zero value of both particles. As is to be expected, if we consider initial conditions with only one type of particle present, we obtain the usual results of the contact process.

The stationary densities as a function of the parameter Δ_λ are shown in figure 1, for the *site approximation* for the particular case $\lambda_a = 3.0$, and initial condition $\rho_V = 0.6$, $\rho_A = 0.2$ and $\rho_B = 0.2$. We note that for values of $\Delta_\lambda < -0.5$ only A particles survive. This is expected because for $\lambda_a = 3.0$ and $\Delta_\lambda = -0.5$, the corresponding value of $\lambda_b = 1.0$, which is the critical value for the contact process in the site approximation. We also observe in this figure a region ($-0.5 < \Delta_\lambda < -0.1$) where the two particles coexist. Finally, for values of $\Delta_\lambda > -0.1$ the steady state is formed only by particles of type B. The extinction of the A particles coincides with the maximum in the vacant sites.

We show in figure 2 the phase diagram of the model in the site approximation. We choose to plot the phase diagram in the plane λ_a versus Δ_λ because in this case the mixed phase becomes more visible than in the plane λ_a versus λ_b . We observe four different

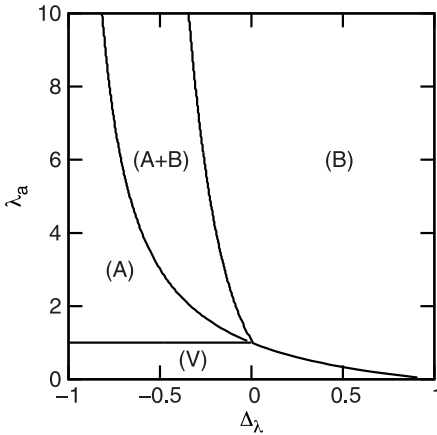


Figure 2. Phase diagram in the plane λ_a versus Δ_λ . In this site approximation we observe four different regions, which are indicated in the figure. The region (V) is the absorbing phase of the model.

regions in the phase diagram. The region indicated by (V) corresponds to the absorbing phase of the model where only vacant sites are present, that is, $\rho_v = 1$. In the region represented by (A) we always have $\rho_A > 0$ and $\rho_B = 0$, and in region (B) we have $\rho_B > 0$ and $\rho_A = 0$. In the mixed region, represented by (A + B) in the figure, both $\rho_A > 0$ and $\rho_B > 0$. We will see next that the mixed phase is an artifact of the mean-field approximation.

The results for the *pair approximation* were calculated with the same initial condition used in the site approximation, and for $\lambda_a = 3.0$. For instance, we show in figure 3(a) the stationary pair probabilities as a function of the parameter Δ_λ , and in figure 3(b) the corresponding densities calculated through equations (5). As is to be expected, the steady-state value of the pair probability p_{AB} is always zero. Figure 3(b) is similar to figure 1, however, for $\lambda_a = 3.0$ and $\Delta_\lambda = -0.20$, we have $\lambda_b = 2.0$, which is the critical value of the contact process in the pair approximation in one dimension. The phase diagram in this approximation is similar to the one in the site approximation; they differ mainly in the width of the mixed region, which is narrower in the pair approximation. We anticipate that, for higher-order approximations, the width of the mixed region gets even narrower, as we introduce more correlations into the system.

Next, we present the results of *Monte Carlo simulations*. We show in figure 4 the comparison between mean-field results and simulations for the density of particles of type B for the particular value $\lambda_a = 4.0$. It is clearly observed that the critical point moves to larger values of λ_b as we go from site to pair and to simulations. Figure 5 shows the phase diagram of the model for the size $L = 4096$. We note that in this case the phase diagram is in the plane λ_a versus Δ_λ , and that the line separating the (A) and (B) phases is indeed

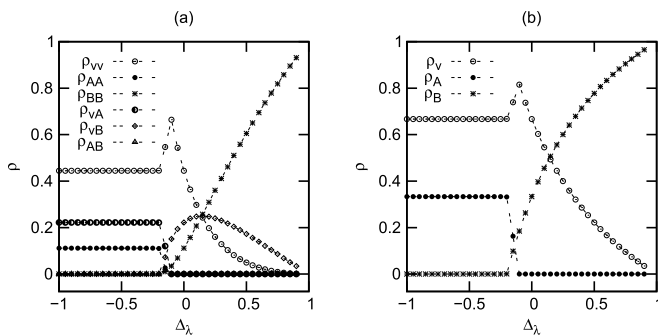


Figure 3. Pair probabilities (a) and densities of particles and vacant sites (b) as a function of $\Delta\lambda$ in the pair approximation for $\lambda_a = 3.0$. The symbols are indicated in the figures.

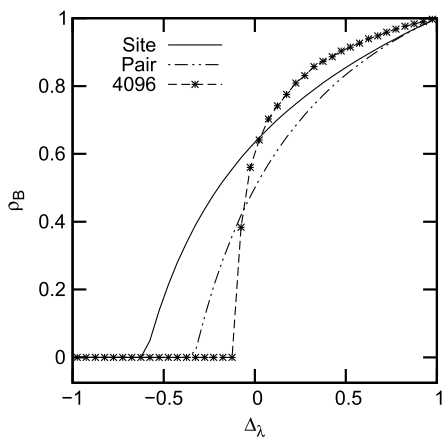


Figure 4. Density of B particles as a function of the reduced parameter $\Delta\lambda$. Here $\lambda_a = 4.0$, and we compare the results of the mean-field approximations and simulations.

a very small region where the mixed phase is present as in the mean-field calculations. This is shown in the inset of figure 5.

In order to better understand the mixed phase, we have determined the behavior of ρ_A and ρ_B as a function of λ_b for the particular value $\lambda_a = 5.0$, and different lattice sizes, as

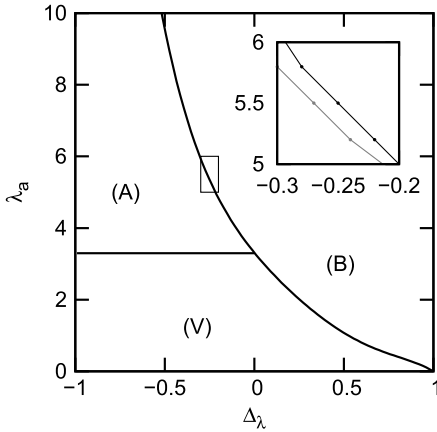


Figure 5. Phase diagram of the model in the Monte Carlo simulations for $L = 4096$. The inset displays a very small region where the A and B particles coexist.

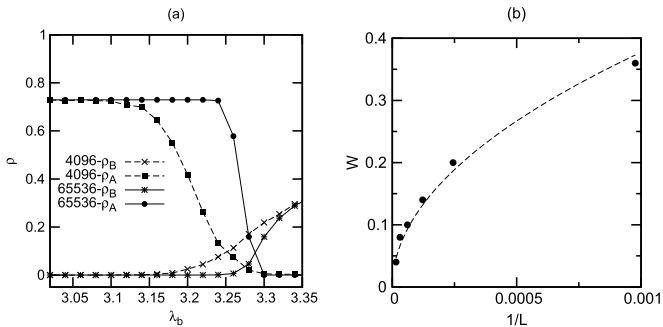


Figure 6. (a) Densities ρ_A and ρ_B as a function of λ_b crossing the mixed region for the lattice sizes $L = 4096$ and $L = 65536$. (b) Width (W) of the mixed stationary phase as a function of the reciprocal length of the system ($1/L$). In this figure $\lambda_a = 5.0$ and the lines are guides to the eyes.

seen in figure 6(a). With these values we can measure the width of the mixed region (W) as a function of the lattice size. This is shown in figure 6(b) and we observe that the width goes to zero for very large lattices. In the limit of large lattices the mixed phase is replaced by a single line where the density of vacant sites approaches its highest possible value. As

Table 2. Static critical exponents β and ν_{\perp} obtained for the (A) \rightarrow (V) phase transition. In the bottom line are the corresponding values of the DP universality class [25].

Δ_{λ}	β/ν_{\perp}	ν_{\perp}	β
-0.75	0.252(4)	1.12(3)	0.28(1)
-0.50	0.231(6)	1.20(6)	0.29(2)
-0.25	0.238(3)	1.16(4)	0.27(1)
0.00	0.251(2)	1.12(3)	0.28(1)
PD	0.252 071	1.096 854	0.276 486

will be shown in section 4, the mixed phase is present in both mean-field calculations and simulations, for the two-dimensional version of the model.

Now we study the critical behavior of the model relative to the phase transition to the absorbing phase. As we have seen in figure 5, the phase diagram exhibits two different types of phase transitions from active to absorbing phases. There is a transition from phase (A), where only vacant sites and sites occupied by particles of type A are present, to the absorbing phase (V), where all sites are vacant. On the other hand, there is also a similar transition from the (B) to the absorbing (V) phase. In the following, we present the results only for the transition between the (A) and (V) phases, although the critical exponents are the same for the other transition. Indeed, both transitions are essentially identical to the one observed in the one-dimensional contact process. We choose for the order parameter of the transition the density ρ_A of particles of type A, and we perform a finite-size scaling analysis [6]. It is assumed that the order parameter is a generalized homogeneous function of variable L , the length of the system, and $\Delta = (\lambda_a - \lambda_a^c)$, which measures the distance from the critical point λ_a^c ,

$$\rho_A(\Delta, L) \propto L^{-\beta/\nu_{\perp}} f(\Delta L^{1/\nu_{\perp}}), \quad (19)$$

where β and ν_{\perp} are the order parameter critical exponent and the critical exponent associated with the spatial correlation length, respectively. The scaling function $f(x) \propto x^{\beta}$ holds for large values of x . At the critical point, where $\Delta = 0$, one can write

$$\rho_A \propto L^{-\beta/\nu_{\perp}}, \quad (20)$$

and we can find the ratio β/ν_{\perp} from the straight line behavior of the log-log plots of ρ_A versus L . Figure 7 shows the behavior of ρ_A versus L for the fixed value of $\Delta_{\lambda} = -0.75$ and different values of λ_a close to the critical point. The central curve in figure 7 gives the critical value $\lambda_a^c = 3.297(5)$ and the ratio $\beta/\nu_{\perp} = 0.252(4)$. We perform the same analysis for other values of Δ_{λ} and the critical point and the ratio β/ν_{\perp} are the same within the uncertainty errors. Some of these values are presented in table 2. As is to be expected, the critical value for λ_a is the same as the contact process in one dimension calculated through simulations [6].

Up to now we have calculated only the ratio between the critical exponents β and ν_{\perp} . In order to determine each one of these exponents, one can use the fact that some

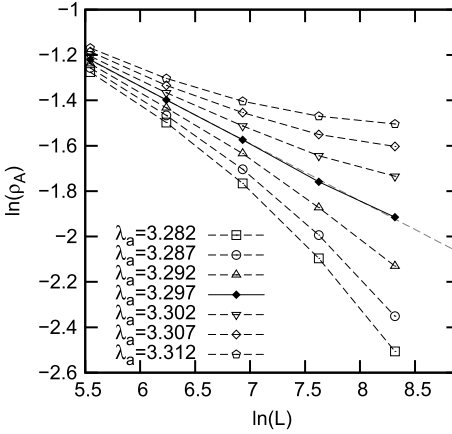


Figure 7. Log-log plot of the order parameter ρ_A versus the length L for some selected values of λ_a as indicated in the figure. We have $\Delta_\lambda = -0.75$ and the straight line (diamonds) gives the critical value of the parameter λ_a . A linear fit provides $\beta/\nu_\perp = 0.252(4)$ and $\lambda_a^c = 3.297(5)$.

ratios between different moments of the order parameter do not depend upon the system size at the critical point, showing universal values [22, 23]. In particular, we use the ratio $R = \langle \rho_A^4 \rangle / \langle \rho_A^2 \rangle^2$, which appears in the Binder cumulant expression $U = 1 - R/3$ [24]. In figure 8 the quantity R is plotted as a function of λ_a for the fixed value $\Delta_\lambda = -0.75$, and for different length sizes of the system. As one can see, they cross themselves at the critical point $\lambda_a^c = 3.296(1)$, which is in excellent agreement with our previous determination based on the behavior of the density defined in equation (20). Furthermore, one can find the value of the critical exponent ν_\perp by calculating the slope of the Binder cumulant at the critical point, that is, $U' = -R'/3 \approx L^{1/\nu_\perp}$ [24]. By doing that, we find $\nu_\perp = 1.12(3)$. In table 2, we report the values of the exponents β and ν_\perp for other values of the parameter Δ_λ . The calculated exponents are the same as those of the contact process and the present model belong to the *DP* universality class.

Let us look at the behavior of the model for other selected values of the parameters. Up to now we have had λ_a and λ_b as free positive non-zero parameters, measuring the rates of the spreading of the particles. Now, we introduce the ratio $\kappa = \lambda_b/\lambda_a > 1$ in order to investigate a typically advantageous situation. This ratio is similar to the one employed by Williams and Bjerknes [1] in their studies concerning tumor growth. The interaction parameter λ_{ab} and the rate μ are now the parameters defining the phase diagram of the model. It is important to note that both λ_a and λ_b are chosen to be greater than the critical value for the spreading rate of the one-dimensional CP model, $\lambda \simeq 3.297$, which means that both particles have non-zero steady-state densities.

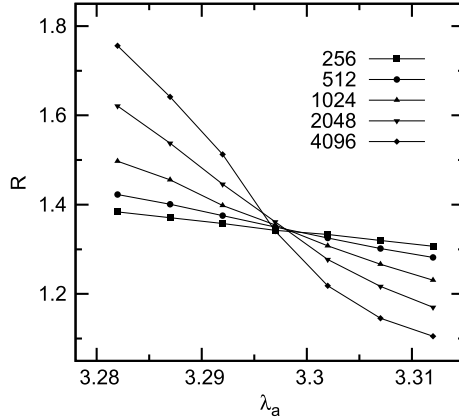


Figure 8. Moment ratio $R = \langle \rho_A^4 \rangle / \langle \rho_A^2 \rangle^2$ as a function of the control parameter λ_a , calculated for $\Delta_\lambda = -0.75$, for different lattice sizes as indicated in the figure. The critical point is $\lambda_a^c = 3.296(1)$.

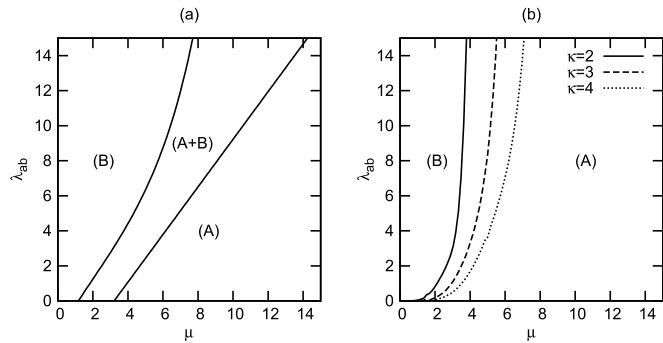


Figure 9. Phase diagrams of the model in the plane λ_{ab} versus μ . (a) *Site approximation*, here $\kappa = 2.0$ and $\lambda_a = 6.0$. We observe three different regions, where (A + B) is the mixed phase consisting of both A and B particles. (b) *MC simulations*, for three different values of κ . On the left of each curve we have a region with only particles of type B, and on the right, we have only particles of type A.

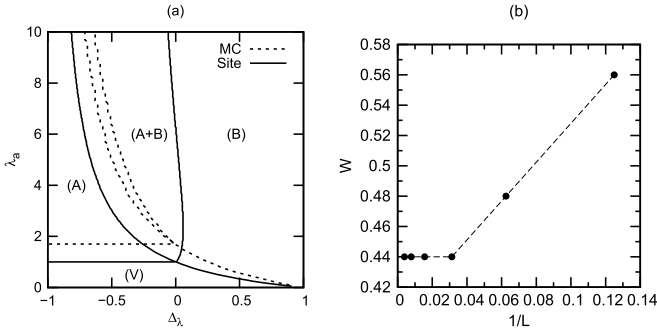


Figure 10. (a) Phase diagram in the plane λ_a versus Δ_λ in two dimensions. We display in the same figure the mean-field (full lines) and simulations, for $L = 128$ (dashed lines). (b) Width W of the mixed phase versus $1/L$, for $\lambda_a = 6$, with L ranging from 16 to 512. The corresponding width in mean-field calculation is $W \cong 5.3$. The lines are guides to the eyes.

The phase diagrams obtained with mean-field approximations and Monte Carlo simulations are now presented in the plane λ_{ab} versus μ . Figure 9(a) shows the phase diagram in the site approximation for $\kappa = 2.0$ and $\lambda_a = 6.0$. As before, also for this new set of parameters, the mixed region is present. This kind of coexistence also appears in the work of Chan *et al* [26] regarding the multitype contact process with seasons in their mean-field calculation. We exhibit in figure 9(b) the phase diagram in the Monte Carlo simulations for three values of κ and $L = 65\,536$. An interesting fact to observe in this phase diagram is that there is a maximum value for the rate μ above which only A particles survive, whatever the value of the rate λ_{ab} . Also, increasing the advantage parameter κ the annihilation rate μ moves to larger values.

4. Mixed phase in two dimensions

As we have seen the one-dimensional version of our model presented conflicting results concerning the presence of the mixed phase in the phase diagram. While mean-field calculations give support to this mixed phase, its width goes to zero when we perform Monte Carlo simulations for very large lattices. In order to know whether the presence of the mixed phase is an artifact of the mean-field or whether it is related to the system dimensionality, we decided to study this problem in two dimensions.

We present in figure 10 the results of the mean-field calculations and the simulations. We plot in the same figure, figure 10(a), the mean-field results and Monte Carlo simulations for a square lattice of linear size $L = 128$. The width of the mixed phase in the mean-field calculations is wider than in one dimension, however the Monte Carlo simulations show a well defined mixed phase. In figure 10(b) we plot the width of the mixed phase for λ_a as a

function of the reciprocal linear length of the system. The width is measured in units of λ_b . The results clearly show that the width W does not go to zero as in the one-dimensional case. Therefore, the non-existence of the mixed phase is a particular feature of the model in one dimension.

5. Conclusions

We have studied a one-dimensional lattice model composed of two competitive contact processes with local interactions. Each lattice site can be in one of the three states: vacant (v), or occupied by a particle of type A or of type B. We have employed in our analysis mean-field calculations, at the level of one- and two site approximation, as well as through Monte Carlo simulations. Depending on the values of the selected parameters, the phase diagram can exhibit up to four different regions: one region free of A particles, another free of B particles, a mixed one where both A and B particles coexist, and an absorbing region where all sites are vacant.

Simulations of the 1D model for very large lattices have shown that the width of the mixed phase goes to zero as the system size L is increased. On the other hand, the two-dimensional model presents a phase diagram exhibiting a mixed phase whose width does not change for large values of L . The non-existence of the mixed phase in the one-dimensional model is a particular feature of our model in one dimension.

We also calculated the static critical exponents β and ν_{\perp} for the one-dimensional version of the model, concerning the phase transitions between the active phases and the absorbing one. We have shown that the model belongs to the DP universality class in one dimension. The phase diagram in the plane λ_{ab} versus μ shows only two surviving phases. For increasing values of the interaction parameter λ_{ab} , there is a limiting value of the annihilation rate of the B particles for their extinction.

Acknowledgments

The authors would like to acknowledge the Brazilian agencies CAPES and CNPq for the financial support. This work is also partially supported by INCT-FCX (FAPESP-CNPq), and FAPESC-SC. We also acknowledge Ron Dickman for suggesting to us some references on absorbing phase transitions.

References

- [1] Williams T and Bjercknes R, 1972 *Nature* **236** 19
- [2] Zhdanov V P, 2008 *Eur. Biophys. J.* **37** 1329
- [3] Ferreira A L, Lipowska D and Lipowski A, 2012 *Phys. Rev. E* **85** 010901
- [4] Wendykier J, Lipowski A and Ferreira A L, 2011 *Phys. Rev. E* **83** 031904
- [5] Satulovsky J E and Tomé T, 1994 *Phys. Rev. E* **49** 5073
- [6] Marro J and Dickman R, 1999 *Nonequilibrium Phase Transitions in Lattice Models* (Cambridge: Cambridge University Press)
- [7] Henkel M, Hinrichsen H and Lübeck S, *Nonequilibrium phase transitions*, 2008 *Absorbing Phase Transitions* vol 1 (Berlin: Springer)

- [8] Henkel M and Pleimling M, *Non-equilibrium phase transitions*, 2010 *Ageing and Dynamical Scaling Far from Equilibrium* vol 2 (Berlin: Springer)
- [9] Ódor G, 2004 *Rev. Mod. Phys.* **76** 663
- [10] Harris E T, 1974 *Ann. Probab.* **2** 969
- [11] Grassberger P and de la Torre A, 1979 *Ann. Phys.* **122** 373
- [12] Domany E and Kinzel W, 1984 *Phys. Rev. Lett.* **53** 311
- [13] Ziff R M, Gulari E and Barshad Y, 1986 *Phys. Rev. Lett.* **56** 2553
- [14] Meakin P and Scalapino D J, 1987 *J. Chem. Phys.* **87** 731
- [15] Janssen H K, 1981 *Z. Phys. B* **42** 151
- [16] Grassberger P, 1982 *Z. Phys. B* **47** 365
- [17] Takeuchi K A, Kuroda M, Chaté H and Sano M, 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 234503
- [18] Takeuchi K A, Kuroda M, Chaté H and Sano M, 2009 *Phys. Rev. E* **80** 051116
- [19] de Oliveira M M, Santos R V D and Dickman R, 2012 *Phys. Rev. E* **86** 011121
- [20] Dickman A G, Grandi B C S, Figueiredo W and Dickman R, 1999 *Phys. Rev. E* **59** 6361
- [21] Hoenicke G L and Figueiredo W, 2000 *Phys. Rev. E* **62** 6216
- [22] Dickman R and da Silva J K L, 1998 *Phys. Rev. E* **58** 4266
- [23] Andrade M F and Figueiredo W, 2011 *Phys. Rev. E* **83** 031108
- [24] Landau D P and Binder K, 2000 *A Guide to Monte Carlo Simulation in Statistical Physics* (Cambridge: Cambridge University Press)
- [25] Hinrichsen H, 2000 *Adv. Phys.* **49** 815
- [26] Chan B, Durrett R and Lanchier N, 2009 *Ann. Appl. Probab.* **19** 1921

Mean-field theory for the long-range contact process with diffusion

T. B. Pedro,^{1,*} W. Figueiredo,^{1,†} and A. L. Ferreira^{2,‡}

¹*Departamento de Física, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 88040-900 Santa Catarina, Brazil*

²*Departamento de Física, 13N, Universidade de Aveiro, 3810-193 Aveiro, Portugal*

(Received 10 February 2015; published 21 September 2015)

The effect of diffusion in the one-dimensional long-range contact process is investigated by mean-field calculations. Recent works have shown that diffusion decreases the effectiveness of long-range interactions, affecting the character of the phase transition: for higher values of the diffusion coefficient, stronger long-range interactions are required to enable phase coexistence and first-order behavior. Here we apply a generalized mean-field approximation for the master equation of the model that considers states of an aggregate of L lattice sites. The phase diagram of the model for values of L up to 10 is obtained, and for some values of the diffusion rate extrapolations to infinite-sized systems are given. For low-diffusive systems, approximations with $L \geq 3$ are able to reveal the suppression of the phase coexistence induced by diffusion, however, in the high-diffusion regime, larger values of L are necessary to correctly account for the higher range of correlations. We present a very efficient method to study the mean-field equations and determine the nature of the phase transitions that may be of general utility.

DOI: 10.1103/PhysRevE.92.032131

PACS number(s): 02.50.-r, 05.50.+q, 05.10.-a

I. INTRODUCTION

First-order phase transitions into absorbing states are an interesting phenomenon that occurs in nonequilibrium interacting particle systems and constitutes an important field of research in statistical physics [1–3]. Models with short-range interactions, with a one-component order parameter and a single absorbing state, without additional symmetries and without quenched disorder, are expected to show continuous phase transitions belonging to the directed percolation universality class. In dimensions higher than 1, modifications of the contact process (CP) show tricritical behavior separating a region of first-order phase transitions from second-order ones [4–7]. Recent studies aim to reveal the different properties and dynamical mechanisms needed to enable stability of the ordered phases that characterize first-order transitions [8,9]. One-dimensional short-range models with a single kind of particles are not expected to show first-order phase transitions because the absence of a surface tension dependence on the domain size and the enhancement of fluctuations in low-dimensional systems do not allow for stabilization of the coexisting ordered phases [3]. The correct character of the phase transition is sometimes difficult to determine by numerical simulations, large systems and long simulation times being required [3,10].

The one-dimensional long-range sigma-contact process (σ -CP) was proposed to capture some aspects of the physics of interface depinning [11]. Regions where the interface is pinned to the substrate correspond to active regions in the analogous CP. The growth of the pinned regions corresponds to particle creations at neighboring empty sites of already existing particles, and depinning processes correspond to particle annihilation. The growth rate of a pinned region depends on the length of the nearby detached region according to a power

law whose exponent σ determines the effective range of the interactions. It is known that long-range interactions introduce a collective behavior that can effectively reduce fluctuations in the system and thus prevent the formation of minority islands often responsible for phase instability [11–15].

The inclusion of particle diffusion may have nontrivial effects in the phase diagrams [16] and may also fundamentally change the nature of some models [7,17]. Recently, the effect of diffusion in the dynamics of the one-dimensional σ -CP was studied by mean-field calculations at the pair approximation level and numerical simulations [18]. Those authors showed that diffusion has a suppression effect for the first-order phase transitions, changing the location of the tricritical points, $\sigma_c(D)$, to lower values with an increasing rate of diffusion, D . The question of how finite diffusion affects the particle clusters in the model still deserves some attention. Results for the pair mean-field approximation are in contradiction with numerical simulation by predicting an increase in σ_c with diffusion. It is expected that a high-order mean-field method, accounting for a higher range of correlations, will ultimately be able to qualitatively correctly predict the behavior observed in numerical simulations. Some questions are worth considering: What is the minimum order of approximation so that the mean-field method is able to predict the suppression of phase coexistence? Is there a maximum diffusion rate such that the mean-field approximations fail? Can the increasing-order mean-field approximations be used to make reliable extrapolations of the phase diagram to infinite systems? In order to answer these questions and investigate the connection between the diffusion coefficient and the interaction range necessary for phase stabilization, we have studied the σ -CP model by applying a mean-field theory [19–21] that takes into account correlations within the states of aggregates of arbitrary size, L . Our calculations were made from $L = 2$ (pair approximation) up to $L = 10$ and we made, in some cases, extrapolations to the infinite-size limit. To locate the phase transitions predicted by the mean-field equations and to study the character of these phase transitions a very efficient numerical method is proposed. We believe that this

*tiago.b.p@posgrad.ufsc.br

†wagner.figueiredo@ufsc.br

‡alf@ua.pt

method may have general applicability to and utility for other studies.

The outline of this paper is as follows. In Sec. II we present the model definition and master equation, in Sec. III the mean-field approximation method is described, in Sec. IV we give analytical results for the single-site and pair mean-field approximations, and in Sec. V the numerical method used to study the mean-field equations is presented. Results and discussion are presented in Sec. VI, and Sec. VII is left for conclusions.

II. MODEL AND MASTER EQUATION

The model is defined in a one-dimensional lattice where each site may be occupied by a particle, $\eta_i = 1$, or be vacant, $\eta_i = 0$. Particles may diffuse at a rate D and can spontaneously annihilate at a rate $(1 - D)\alpha$. A particle can create another particle at a nearest-neighbor vacant site at a rate $(1 - D)(1 + a l^{-\sigma})$, which depends on the number

l of consecutive vacant sites surrounding the particle. The annihilation parameter, α , is the control parameter of the model. For α below a certain critical value α_c , the steady state is active; otherwise the system reaches the absorbing state. The decay exponent $\sigma > 0$ defines the extent of the long-range interaction strength: for sufficiently low values of σ , the interactions are effectively long-ranged; otherwise, one recovers the short-ranged interactions of the usual CP. For comparison with previous results [11,14,15], we set the value $a = 2$.

Let us consider $\eta \equiv (\dots, \eta_1, \eta_2, \dots)$ a state of the system and the related state, $\eta^i \equiv (\dots, \eta_1, \eta_2, \dots, \bar{\eta}_i, \dots)$, where $\bar{\eta}_i = 1 - \eta_i$ and $\eta^{i+1} \equiv (\dots, \eta_1, \eta_2, \dots, \bar{\eta}_i, \bar{\eta}_{i+1}, \dots)$. The master equation for the probability of a state of the system at time t , $P(\eta, t)$, is presented in Eq. (1), where the first term corresponds to annihilation processes; the second and third terms correspond to the creation of particles to the right and to the left, respectively; and the last term corresponds to diffusion processes:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} P(\eta, t) = & (1 - D)\alpha \sum_i [\bar{\eta}_i P(\eta^i, t) - \eta_i P(\eta, t)] + (1 - D) \sum_i \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{2} (1 + a l^{-\sigma}) \eta_{i-1} \bar{\eta}_{i+1} \dots \bar{\eta}_{i+l-1} \eta_{i+l} [P(\eta^i, t) - \bar{\eta}_i P(\eta, t)] \\ & + (1 - D) \sum_i \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{2} (1 + a l^{-\sigma}) \eta_{i+1} \bar{\eta}_{i-1} \dots \bar{\eta}_{i-l+1} \eta_{i-l} [\eta_i P(\eta^i, t) - \bar{\eta}_i P(\eta, t)] \\ & + D \sum_i (\eta_i \bar{\eta}_{i+1} + \bar{\eta}_i \eta_{i+1}) [P(\eta^{i+1}, t) - P(\eta, t)]. \end{aligned} \quad (1)$$

III. MEAN-FIELD THEORY

Consider the state of an aggregate of size L , $\eta_L \equiv (\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_L)$. We want to write an equation for the time dependence of the probability of the state of the aggregate, $P(\eta_L, t)$. For each one of the 2^L states it is possible to enumerate all the processes that change the state into another state.

A. Annihilation processes

For each particle in the aggregate with $\eta_i = 1$, $\eta_L \equiv (\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_i = 1, \dots, \eta_L)$ there is a generated state $\eta_L^i \equiv (\eta_1, \eta_2, \dots, \bar{\eta}_i = 0, \dots, \eta_L)$, corresponding to the annihilation of a particle, with a negative contribution, $(1 - D)\alpha P(\eta_L, t)$, to $\frac{d}{dt} P(\eta_L, t)$ and an equal positive contribution to $\frac{d}{dt} P(\eta_L^i, t)$.

B. Diffusion processes

Diffusion can occur inside a given aggregate when the states of adjacent sites are different. For example, for a state with $\eta_i = 1$ and $\eta_{i+1} = 0$, such as the state $\eta_L \equiv (\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_i = 1, \eta_{i+1} = 0, \dots, \eta_L)$, diffusion generates a new state, $\eta_L^i \equiv (\eta_1, \eta_2, \dots, \bar{\eta}_i = 0, \bar{\eta}_{i+1} = 1, \dots, \eta_L)$. This process gives a negative contribution, $D P(\eta_L, t)$, to $\frac{d}{dt} P(\eta_L, t)$ and an equal positive contribution to $\frac{d}{dt} P(\eta_L^i, t)$.

Diffusion can also occur past the left or the right border of the aggregate. In the case of the left border, for example, the generated state is $\eta_L^1 \equiv (\bar{\eta}_1, \eta_2, \dots, \eta_L)$ and occurs only for the case where $\eta_0 = \bar{\eta}_1$. The rate for this process depends

on the probability of the state of an aggregate of size $L + 1$, $\eta_{L+1} \equiv (\eta_0 = \bar{\eta}_1, \eta_1, \dots, \eta_L)$, which needs to be approximated by the probabilities of the state of the aggregates of size L , $P(\eta_{L+1}, t) = P(\eta_0 = \bar{\eta}_1 | \eta_1, \dots, \eta_L, t) P(\eta_L, t)$, where $P(\eta_0 = \bar{\eta}_1 | \eta_1, \dots, \eta_L, t)$ is the conditional probability for the variable $\eta_0 = \bar{\eta}_1$, given the values of the variables inside the aggregate. This probability is approximated by

$$P(\eta_0 = \bar{\eta}_1 | \eta_1, \dots, \eta_L, t) \cong \frac{P(\eta_0 = \bar{\eta}_1, \eta_1, \dots, \eta_{L-1}, t)}{P(\eta_1, \dots, \eta_{L-1}, t)}, \quad (2)$$

where the denominator is the probability of the state of an aggregate of size $L - 1$, which is equivalent to the sum of the probabilities of aggregates of size L , that is,

$$P(\eta_1, \dots, \eta_{L-1}, t) = P(\eta_0 = \eta_1, \eta_1, \dots, \eta_{L-1}, t) + P(\eta_0 = \bar{\eta}_1, \eta_1, \dots, \eta_{L-1}, t), \quad (3)$$

and the rate of the process is then written as

$$D P(\eta_0 = \bar{\eta}_1 | \eta_1, \dots, \eta_L, t) P(\eta_L, t), \quad (4)$$

with a negative contribution to $\frac{d}{dt} P(\eta_L, t)$ and an equal positive contribution to $\frac{d}{dt} P(\eta_L^1, t)$. For diffusion past the right border a similar calculation can be done. This method of approximation of probabilities has been considered before [19–21].

C. Particle creation

Consider first a particle inside the aggregate, located at $2 \leq i + 1 \leq L$, adjacent to a vacant site, i . In this case it is possible to create a new particle at the adjacent site. Considering the

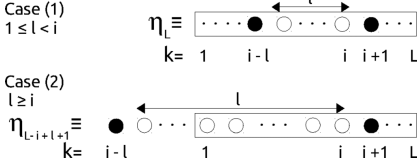


FIG. 1. Examples of particle creation on the left. The nearest particle to the left can be inside the aggregate as in case (1), where $1 \leq l < i$, or outside the aggregate as in case (2), where $l \geq i$.

situation where creation occurs to the left of the particle, there are two cases to consider: (1) the nearest particle to the left is inside the aggregate; and (2) the nearest particle to the left is outside the aggregate (see Fig. 1).

For the first case, the state is $\eta_L \equiv (\eta_1, \dots, \eta_{i-l} = 1, \eta_{i+l} = 0, \dots, \eta_i = 0, \eta_{i+1} = 1, \dots, \eta_L)$ and the rate of the process is $\frac{1}{2}(1-D)(1+aL^{-\sigma})P(\eta_L, t)$, l being the number of vacant sites to the left of the particle. The state generated by this process is $\eta_L^i \equiv (\eta_1, \dots, \eta_{i-l} = 1, \eta_{i+l} = 0, \dots, \eta_i = 1, \eta_{i+1} = 1, \dots, \eta_L)$.

In case (2), the nearest particle can be anywhere outside the aggregate and the contribution from all the possibilities needs to be considered. We consider the state $\eta_{L-i+l+1} \equiv (\eta_{i-l} = 1, 0, \dots, \eta_i = 0, \eta_{i+1} = 1, \dots, \eta_L)$ with $l \geq i$. When $i \leq l < L$ the probability of this state is approximated by

$$\begin{aligned} P(\eta_{L-i+l+1}) &\cong \frac{P(\eta_{i-l} = 1, 0, \dots, \eta_1, \dots, \eta_{i-l+L-1}, t)}{P(\eta_{i-l+1} = 0, \dots, \eta_1, \dots, \eta_{i-l+L-1}, t)} \\ &\times \frac{P(\eta_{i+l} = 0, 0, \dots, \eta_1, \dots, \eta_{i+L}, t)}{P(\eta_{i+l+2} = 0, \dots, \eta_1, \dots, \eta_{i+L}, t)} \times \dots \\ &\times \frac{P(\eta_0 = 0, 0, \dots, \eta_i = 0, \eta_{i+1} = 1, \dots, \eta_{L-1}, t)}{P(\eta_1 = 0, \dots, \eta_i = 0, \eta_{i+1} = 1, \dots, \eta_{L-1}, t)} \\ &\times P(\eta_L, t), \end{aligned} \quad (5)$$

and the rate of creation of particle is then given by

$$\frac{(1-D)}{2} P(\eta_{L-i+l+1}, t)(1+aL^{-\sigma}). \quad (6)$$

When $l \geq L$ it is possible to use the recursion relation

$$P(\eta_{L-i+l+1}, t) = P(\eta_{L-i+l}, t)\tilde{P}(t), \quad (7)$$

where

$$\tilde{P}(t) = \frac{P(\mathbf{0}_L, t)}{P(\mathbf{0}_L, t) + P(\mathbf{0}_L^1, t)}, \quad (8)$$

and $\mathbf{0}_L$ and $\mathbf{0}_L^1$ represent the states

$$\mathbf{0}_L = (0, 0, \dots, 0), \quad \mathbf{0}_L^1 = (1, 0, \dots, 0).$$

For the case $l = L$, we have (see Fig. 2)

$$P(\eta_{2L-i+1}, t) = P(\eta_{2L-i}, t)\tilde{P}(t),$$

with the contribution

$$\frac{(1-D)}{2} P(\eta_{2L-i}, t)\tilde{P}(t)(1+aL^{-\sigma}). \quad (9)$$

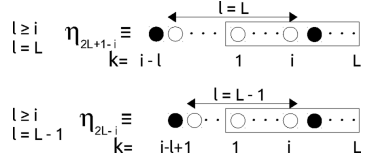


FIG. 2. Example of particle creation on the left for the case where $l = L$. The probability of state η_{2L-i+1} is related to the probability of η_{2L-i} by Eq. (7).

For arbitrary $l \geq L$, we have

$$P(\eta_{L-i+l+1}, t) = P(\eta_{2L-i}, t)\tilde{P}(t)^{l-L+1} \quad (10)$$

so we can obtain a general expression for the rate of change of the probability from all the configurations with $l \geq L$ as

$$\frac{(1-D)}{2} \sum_{l=L}^{\infty} P(\eta_{L-i+l+1}, t)(1+aL^{-\sigma}), \quad (11)$$

which is equivalent to

$$\frac{(1-D)}{2} P(\eta_{2L-i}, t) \sum_{l=L}^{\infty} \tilde{P}(t)^{l-L+1} (1+aL^{-\sigma}), \quad (12)$$

and finally, separating the sum above we can write

$$\frac{(1-D)}{2} P(\eta_{2L-i}, t) \left[\frac{\tilde{P}(t)}{1-\tilde{P}(t)} + \sum_{l=L}^{\infty} aL^{-\sigma} \tilde{P}(t)^{l-L+1} \right]. \quad (13)$$

Another process to be considered corresponds to a particle outside the aggregate creating a particle inside the aggregate. Consider, for example, a particle at $i = L+1$ that creates a particle to the left, at the vacant site $i = L$. A state $\eta_L \equiv (\eta_1, \dots, \eta_{L-1} = 1, \eta_{L+1} = 0, \dots, \eta_L = 0)$ generates, by this process, the state $\eta_L^i \equiv (\eta_1, \dots, \eta_{L-1} = 1, \eta_{L+1} = 0, \dots, \eta_L = 1)$. If the nearest particle to the left is inside the aggregate ($1 \leq l \leq L-1$), then this process occurs at a rate

$$\begin{aligned} &\frac{(1-D)}{2} P(\eta_L, t)(1+aL^{-\sigma}) \\ &\times \frac{P(\eta_2, \dots, \eta_{L-1} = 1, \eta_{L+1} = 0, \dots, \eta_L = 0, \eta_{L+1} = 1, t)}{P(\eta_2, \dots, \eta_{L-1} = 1, \eta_{L+1} = 0, \dots, \eta_L = 0, t)}. \end{aligned} \quad (14)$$

If there are no particles inside the aggregate ($\eta_L \equiv \mathbf{0}_L$), then, as before, all possibilities for the position of the nearest particle to the left need to be considered. For the case $l = L$, the rate of the process for the creation of a particle, generating the state $\eta_L^i \equiv (\eta_1 = 0, \dots, \eta_L = 1)$, is

$$\begin{aligned} &\frac{(1-D)}{2} P(\eta_{L+1}, t)(1+aL^{-\sigma}) \\ &\times \frac{P(\eta_2 = 0, \dots, \eta_L = 0, \eta_{L+1} = 1, t)}{P(\eta_2 = 0, \dots, \eta_L = 0, t)}, \end{aligned} \quad (15)$$

with

$$P(\eta_{L+1}, t) = \frac{P(\eta_0 = 1, 0, \dots, 0, \eta_{L-1} = 0, t)}{P(\eta_1 = 0, \dots, 0, \eta_{L-1} = 0, t)} P(\eta_{L+1}, t). \quad (16)$$

For $l \geq L+1$, the sum of all contributions for the rate of creation of a particle is given by

$$\begin{aligned} & \frac{(1-D)}{2} P(\eta_{L+1}, t) \left[\frac{\bar{P}(t)}{1 - \bar{P}(t)} + \sum_{l=L+1}^{l=\infty} a l^{-\sigma} \bar{P}(t)^{l-L} \right] \\ & \times \frac{P(\eta_2 = 0, \dots, 0, \eta_L = 0, \eta_{L+1} = 1, t)}{P(\eta_2 = 0, \dots, 0, \eta_L = 0, t)}. \end{aligned} \quad (17)$$

A similar analysis applies for the case where the particle is at $i = 0$ and creates a particle at the vacant site $i = 1$.

IV. ANALYTICAL RESULTS FOR SINGLE-SITE AND PAIR APPROXIMATIONS

For simplicity let us denote the state probabilities, at time t , of an L -sized aggregate, by $p_i(t)$, with $1 \leq i \leq 2^L$, and consider the actual representation of state i to be the binary representation of the integer $i - 1$, a bit equal to 1 corresponding to a particle. For any of the approximations, it is possible to use the density of particles, the order parameter, $\rho(t)$, as one of the dynamical variables replacing one of the 2^L state probabilities. The equation for $\frac{d}{dt} \rho(t)$ would then depend on ρ itself and on the probabilities of states $p_i(t)$. Finding the stationary solutions $p_i(\infty)$ as a function of ρ , it is possible to write an equation for $\rho(t)$, $\frac{d\rho}{dt} = F(\rho)$, that would give the dynamics of the density of particles when all the state probabilities (except one) take their stationary values. The first-order derivative of the function $F(\rho)$ near the origin determines the location of the phase transition: when $\left. \frac{d}{d\rho} F(\rho) \right|_{\rho=0} < 0$ we are in the absorbing state ($\alpha > \alpha_c$) and when $\left. \frac{d}{d\rho} F(\rho) \right|_{\rho=0} > 0$ we are in the active state ($\alpha < \alpha_c$). The nature of the phase transition can be related to the behavior of the second-order derivative of $F(\rho)$: when $\left. \frac{d^2}{d\rho^2} F(\rho) \right|_{\rho=0}^{\alpha=\alpha_c} > 0$ the phase transition is first-order and when $\left. \frac{d^2}{d\rho^2} F(\rho) \right|_{\rho=0}^{\alpha=\alpha_c} < 0$ it is second-order.

The single-site approximation was considered in Refs. [11] and [14] for the version of the model without diffusion. At this level of approximation, the equation for the density of particles ρ is the same with diffusion and without diffusion. It can be shown that the single-site approximation predicts a tricritical point, independent of the diffusion constant, for $a = 1/\zeta(\sigma)$, where $\zeta(x)$ is the Riemann zeta function. This result means that for $a > 1$ the phase transition is predicted to be discontinuous for any value of σ .

The equations for the pair approximation were studied analytically in Ref. [15], without diffusion, and numerically in Ref. [18], with diffusion. We have found that the phase transition occurs for $\alpha_c = \frac{2n+1}{2\eta+2}$ with $\eta = D/(1-D)$, independent of σ , and that the location of the tricritical line, $\sigma_c(D)$, is the solution of the equation

$$\zeta(\sigma_c) = \frac{a+1}{a} - \left(\frac{a-1}{aD} + \frac{a+1}{a} \right) \frac{D^2}{1+D^2}, \quad (18)$$

which reduces to the equation presented in Ref. [15] for the case $D = 0$. For $a \geq 1$, the right-hand side of Eq. (18) is smaller than unity for $D \geq D_c = 1/a$ and the phase transition becomes first-order for any value of σ .

V. NUMERICAL METHODS

For higher order approximations, we started by numerically integrating the system of equations for the time dependence of the probability of the states to determine the steady-state density of particles, ρ_s . For identification of the character of the transition we looked for jumps on ρ_s larger than a given small preset value. Although we were able, in this way, to locate the tricritical curves $\sigma_c(D)$, we verified that the values of σ_c obtained were systematically underestimated. Furthermore, the computational effort needed for the time integration of the equations, near the phase transitions, was very high. Later, we found a very efficient method that we believe may have general applicability.

Let us write the rate equations for the probabilities $p_i(t)$ as $\frac{dp_i(t)}{dt} = R_i(\{p_j(t)\})$. The order parameter, $\rho(t)$, can be obtained from the probability of the states by $\rho(t) = \sum_{i=1}^{2^L} n_i p_i(t)/L$, where n_i is the number of particles in state i . We considered a modified system of equations where the rate equation for state $i = 2^L$ was modified to $\frac{dp_{2^L}(t)}{dt} = -\sum_{i=2}^{2^L-1} n_i R_i/L$ and the rate equation for state $i = 1$ was modified to $\frac{dp_1(t)}{dt} = -\sum_{i=2}^{2^L-1} (1 - n_i/L) R_i$, such that the density of particles and the total probability are conserved. The stationary solution of the corresponding rate equations, $p_i(\infty)_\rho$, gives us the probability of the states subject to the constraint of a given density of particles in the system. The function $F(\rho)$, defined above, can then be calculated by using the identity $F(\rho) = R_{2^L}(\{p_i(\infty)_\rho\})$.

We numerically calculated $F(\rho)$ and studied the behavior of its first- and second-order derivatives close to some given small value of the order parameter, $\rho = \rho_{\min}$. The density-conserved dynamics converged to the stationary solution very rapidly compared with the time integration of the mean-field equations. For the largest aggregates studied ($L \geq 8$), and for some particular intervals of values of the annihilation coefficient α , we faced some convergence problems, possibly due to the proximity of unphysical solutions for $p_{1,\rho}$. We managed to successfully eliminate these convergence problems by not allowing the values of the probabilities $p_i(t)$ to become unphysically negative during the time integration of the equations.

To locate the critical point, α_c , and the tricritical point, σ_c , we applied a variant of the bisection method [22]. We sequentially halve the interval between a higher value of α (absorbing state), $\alpha_>$, and a lower value of α (active state), $\alpha_<$. At each iteration, we take $\alpha = (\alpha_> + \alpha_<)/2$, and if we are in the active state we take $\alpha_< = \alpha$, and otherwise, $\alpha_> = \alpha$. Given $\sigma_>$ for which the transition is continuous and $\sigma_<$ for which it is discontinuous, we consider the value $\sigma_c = (\sigma_> + \sigma_<)/2$ to determine the character of the transition: if it is continuous, we take $\sigma_> = \sigma_c$, and otherwise we take $\sigma_< = \sigma_c$. We iterate until the quantities $\Delta\alpha_c = (\alpha_> - \alpha_<)$ and $\Delta\sigma_c = (\sigma_> - \sigma_<)$ reach some preset value.

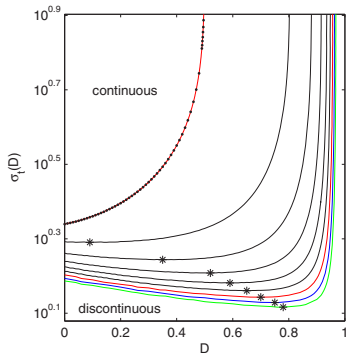


FIG. 3. (Color online) Phase diagram for $L = 2$ (top line) up to $L = 10$ (bottom line). Asterisks correspond to the minimum values observed for $\sigma_c(D)$. As L increases, $\sigma_c(D)$ approaches the behavior predicted by the numerical simulation obtained in Ref. [18].

VI. RESULTS AND DISCUSSION

The complete phase diagrams for the case $a = 2$ and different aggregate sizes ($2 \leq L \leq 10$) are shown in Fig. 3. For the integration of the time-dependent equations we have used a fourth-order Runge-Kutta method with a time step $dt = 0.1$, equal for all the aggregate sizes, and when $\sqrt{\sum_i (dp_i/dt)^2} \leq 10^{-12}$ we considered that the stationary regime was reached. The errors for α_c and σ_c for a given value of D were taken as $\Delta\alpha_c = \Delta\sigma_c = 10^{-3}$. We found that using $\rho_{\min} = 10^{-4}$ or $\rho_{\min} = 10^{-5}$ leads to values of $\sigma_c(D)$ within the error. For $L = 2$ we have the monotonically increasing behavior of $\sigma_c(D)$, as obtained in Ref. [18] and in full agreement with the analytical result in Eq. (18). For increasing L and small D , $\sigma_c(D)$ decreases with D , in agreement with the behavior obtained from numerical simulations [18]. However, when D is larger than some value $D^*(L)$, $\sigma_c(D)$ starts to increase with D , diverging at $D = D_c(L)$. The phase transition is first-order for any value of σ for D larger than $D_c(L)$.

The first-order phase transitions are associated with the occurrence of clusters of particles with a nonzero density of particles (compact clusters). For a small enough $\sigma < \sigma_c(D)$ the enhancement in the rate of creation of particles in the neighborhood of a region of empty sites is strong enough to lead to compact clusters. Near the continuous phase transition the clusters of particles have a fractal-like structure with a fractal dimension, $d_F = 0.74792 \dots < 1$, characteristic of the directed percolation universality class [15,18], which corresponds to a vanishing density of particles in the critical cluster. The effect of diffusion is to smoothen the boundaries of the particle clusters and to destabilize the phase coexistence between high-particle-density phases and regions of empty sites. Consequently, increasing D requires a smaller value of $\sigma_c(D)$ for the long-range rate of creation of particles to be effective in the generation of compact clusters.

The phase transitions are expected to occur for values of the annihilation rate α that balance the effective rate of creation of particles such that for $\alpha > \alpha_c$ the absorbing state is reached for long times. It is interesting to note that the α_c values have a very weak dependence on σ , which may be explained by the fact that stronger rates of creation of particles associated with lower values of σ are counterbalanced by a reduction in the creation rate associated with the shortage of long empty regions in the critical clusters. As diffusion favors the occurrence of less dense clusters, this same effect explains the observed increase in the values of α_c with the diffusion rate D . In [6] a similar effect of diffusion on the critical annihilation rate was reported.

For an aggregate of size L a high enough diffusion rate succeeds in destroying the correlations between the positions of the particles. This effect can easily be seen by looking at the equations for the pair approximation in the limit of high diffusion. In this limit the pair approximation becomes equivalent to the single-site approximation. For higher order approximations we also expect that for a high enough diffusion rate these approximations become equivalent to the single-site approximation. In the symbiotic CP studied in [7], the phase diagram of the model, for strong diffusion, was also related to the destruction of correlations by diffusion. For the case $a = 2$, studied in this work, this means that, for $D > D_c(L)$, the phase transitions are expected to be first-order for any value of σ , as this is the behavior predicted by the single-site approximation. For $a \leq 1$, we expect that $D_c(L) = 1$ for any order of approximation, L . For the diffusion to succeed in destroying correlations inside an aggregate of size L , the parameter D should be such that a particle diffuses at length scale L for a time of order $1/(1 - D)$ which corresponds to the characteristic time of creation and annihilation of particles. From this argument it follows that the critical diffusion constant must obey $L^2 \sim D_c \frac{1}{1 - D_c}$, which corresponds to a dependence of $D_c(L)$ in the order of approximation, given by $D_c(L) \sim \frac{L^2}{1 + L^2} \sim 1 - L^{-2}$.

In Fig. 4(a), we present the values of σ_c for $D = 0$, $D = 0.5$, and different values of L up to $L = 12$ obtained using $\Delta\alpha_c = \Delta\sigma_c = 10^{-4}$ and $\rho_{\min} = 10^{-5}$. We made nonlinear fits of the data to the behavior, $\sigma_{c,L} = \sigma_c + b L^{-\phi}$, and the values of the exponent ϕ obtained, including data for $L \geq 7$, were consistent with a value $\phi = 0.50(2)$. From linear least square fits, using L^ϕ with $\phi = 0.5$ as a variable, we got the infinite system estimates $\sigma_c(0) = 1.10(1)$ with a goodness of fit [23] 0.98 and $\sigma_c(0.5) = 0.86(2)$ with a goodness of fit 0.85. These estimates are in agreement with the results obtained by numerical simulation: $\sigma_c = 1.0(1)$ for $D = 0$ and $\sigma_c = 0.8(1)$ for $D = 0.5$ [11,14,18]. We also studied the L dependence of the minimum of $\sigma_c^* = \sigma_c(D^*)$ of the curves presented in Fig. 3 for values of $L \leq 10$. The nonlinear fits, taking values $L \geq 8$, are also consistent with $\phi = 0.5$, and from the linear fit we got $\sigma_c^* = 0.60(3)$ with a goodness of fit 0.99. The results are shown in Fig. 4(b). We expected the infinite system estimate of σ_c^* to be comparable with the $\sigma_c \sim 0.3$ value reported in Ref. [18] for $D = 0.99$, very close to the full diffusive limit. However, the much higher estimate for σ_c^* obtained by us may indicate the need for higher order mean-field approximations to get reliable infinite system estimates in the high-diffusion regime. We also present in Fig. 4(b) values of $D_c(L)$ obtained

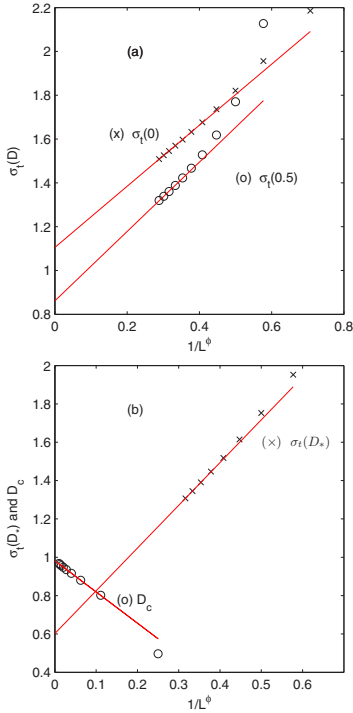


FIG. 4. (Color online) Extrapolations for infinite aggregate size. (a) Values of σ_c for the cases $D = 0$ and $D = 0.5$ for different aggregate sizes L . As $L \rightarrow \infty$, $\sigma_c(D = 0) \rightarrow 1.10(1)$ and $\sigma_c(D = 0.5) \rightarrow 0.86(2)$. (b) D^* represents the values of D for which $\sigma_c(D) = 8$, and σ_c^* are the minimum values of $\sigma_c(D)$. With increasing L , $\sigma_c^* \rightarrow 0.60(3)$ and $D_c \rightarrow 0.98(1)$.

from the condition $\sigma_c(D) = 8$. For this case we expected an exponent $\phi = 2$. A nonlinear fit taking values $L \geq 3$ gives a consistent value $\phi = 1.9(1)$. Making a linear fit, with $\phi = 2$, we obtained $D_c(\infty) = 0.98(1)$ with a goodness of fit 0.99, which is marginally consistent with the expected $D_c(\infty) = 1$.

VII. CONCLUDING REMARKS

We have presented a mean-field theory for the one-dimensional long-range CP (σ -CP), with diffusion. The proposed method results in approximations of arbitrary level, being able to include the long-range correlations relevant to the correct description of the dynamic behavior of the model. We calculated the location of the tricritical line, $\sigma_c(D)$, for aggregates of lattice sites of size $L \leq 10$. An analytical solution for the pair mean-field approximation was found. For higher values of L our results were obtained by using a novel and very efficient numerical method that can have general applicability. For sufficiently large L , the tricritical line behaves nonmonotonically with the diffusion constant D . For low diffusion, $\sigma_c(D)$ decreases with D , but for D sufficiently close to 1, $\sigma_c(D)$ starts to increase. The existence of a critical diffusion rate $D_c(L)$ for a mean-field approximation of order L was explained as a breakdown of correlations inside finite aggregates of size L such that the higher order approximations become equivalent to the single-site approximation. The critical diffusion rate was seen to approach $D_c = 1$ for large systems with a power-law exponent $\phi = 2$. The results of the extrapolations for infinite aggregate sizes of $\sigma_c(D)$ for $D = 0$ and $D = 0.5$ were also found to be in agreement with the available results from Monte Carlo simulations of large systems.

ACKNOWLEDGMENTS

We thank the referees for their comments and recommendations. We acknowledge support from the joint bilateral project FCT/1909/27/2/2014/S and CAPES 385/14. This work was also partially funded by FEDER funds through the COMPETE 2020 Programme and National Funds through the FCT-Portuguese Foundation for Science and Technology under Project No. UID/CTM/50025/2013. The authors also acknowledge the support of the Brazilian agency CNPq, Grant No. 2013/303253-4.

- [1] J. Marro and R. Dickman, *Nonequilibrium Phase Transitions in Lattice Models* (Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1999).
- [2] G. Ódor, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 663 (2004).
- [3] M. Henkel, H. Hinrichsen, and S. Lübeck, *Nonequilibrium Phase Transitions, Absorbing Phase Transitions*, Vol. 1 (Springer, Berlin, 2008).
- [4] S. Lübeck, *J. Stat. Phys.* **123**, 193 (2006).
- [5] P. Grassberger, *J. Stat. Mech.* (2006) P01004.
- [6] S. Pianegonda and C. E. Fiore, [arXiv:1410.0831v1](https://arxiv.org/abs/1410.0831v1) [cond-mat.stat-mech].
- [7] M. M. de Oliveira and R. Dickman, *Phys. Rev. E* **90**, 032120 (2014).
- [8] V. Elgart and A. Kamenev, *Phys. Rev. E* **74**, 041101 (2006).
- [9] C. E. Fiore, *Phys. Rev. E* **89**, 022104 (2014).
- [10] G. Ódor and R. Dickman, *J. Stat. Mech.* (2009) P08024.
- [11] F. Ginelli, H. Hinrichsen, R. Livi, D. Mukamel, and A. Politi, *Phys. Rev. E* **71**, 026121 (2005).
- [12] F. Ginelli, H. Hinrichsen, R. Livi, D. Mukamel, and A. Torcini, *J. Stat. Mech.* (2006) 08008.
- [13] H. Hinrichsen, *J. Stat. Mech.* (2007) P07006.
- [14] C. E. Fiore and M. J. de Oliveira, *Phys. Rev. E* **76**, 041103 (2007).
- [15] C. E. Fiore and M. J. de Oliveira, *Phys. Rev. E* **87**, 042101 (2013).
- [16] R. Dickman, *Phys. Rev. B* **40**, 7005 (1989).

- [17] M. Henkel and H. Hinrichsen, *J. Phys. A: Math. Gen.* **37**, R117 (2004).
- [18] C. E. Fiore and G. T. Landi, *Phys. Rev. E* **90**, 032123 (2014).
- [19] D. ben-Avraham and J. Köhler, *Phys. Rev. A* **45**, 8358 (1992).
- [20] A. L. C. Ferreira and S. K. Mendiratta, *J. Phys. A: Math. Gen.* **26**, L145 (1993).
- [21] M. C. Marques and A. L. Ferreira, *J. Phys. A: Math. Gen.* **27**, 3389 (1994).
- [22] R. L. Burden and J. D. Faires, in *Numerical Analysis*, 3rd ed. (PWS, Boston, MA, 1985).
- [23] W. H. Press, S. A. Teukolski, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Numerical Recipes, The Art of Scientific Computing*, 3rd ed. (Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2007).

PAPER: Interdisciplinary statistical mechanics

Prisoner's dilemma on directed networks

A L Ferreira¹, A Lipowski², T B Pedro³, M Santos³
 and W Figueiredo³

¹ Departamento de Física, I3N, Universidade de Aveiro, 3810-193 Aveiro, Portugal

² Faculty of Physics, Adam Mickiewicz University, Poznań, Poland

³ Departamento de Física, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 88040-900 Santa Catarina, Brazil

E-mail: alf@ua.pt, lipowski@amu.edu.pl, tiago.b.p@posgrad.ufsc.br,
marcio.santos@ufsc.br and wagner.figueiredo@ufsc.br

Received 1 July 2016, revised 14 September 2016

Accepted for publication 18 November 2016

Published 22 December 2016

Online at stacks.iop.org/JSTAT/2016/123405
[doi:10.1088/1742-5468/aa4f97](https://doi.org/10.1088/1742-5468/aa4f97)



CrossMark

Abstract. We study the prisoner's dilemma model with a noisy imitation evolutionary dynamics on directed out-homogeneous and uncorrelated directed random networks. A heterogeneous pair mean-field approximation is presented showing good agreement with Monte Carlo simulations in the limit of weak selection (high noise) where we obtain analytical predictions for the critical temptations. We discuss the phase diagram as a function of temptation, intensity of noise and coordination number of the networks and we consider both the model with and without self-interaction. We compare our results with available results for non-directed lattices and networks.

Keywords: absorbing states, classical phase transitions, evolutionary game theory, random graphs, networks

J. Stat. Mech. (2016) 123405

Contents

1. Introduction	2
2. The model on directed random networks	4
3. Mean field theory	5
4. Out-homogeneous directed network	8
4.1. Mean-field approximations	8
4.2. $z = 1$ case	9
4.3. $z > 1$ case	13
4.4. Model without self-interaction	15
5. Random directed networks	17
6. Concluding remarks	18
Acknowledgments	19
References	19

1. Introduction

Dilemmas arise when it is advantageous for an individual to act selfishly by not taking into account the overall performance of the group it belongs to [1–4]. Such dilemmas can be modeled by simple two agent games where each agent follows two strategies, cooperation (C) and defection (D) and receive a payoff after each round that depends on the chosen strategy. In the prisoners dilemma game [5, 6] (PD) a defector facing a cooperator receives the highest payoff (T-temptation) higher than the second best payoff (R-reward) received from mutual cooperation. The smallest payoff is received by a cooperator facing a defector (S-sucker payoff), even smaller than the payoff received from mutual defection (P-punishment). In a population of defectors, an agent does not increase its payoff by changing its strategy to cooperation contrary to the case of a population of cooperators where it is advantageous for an agent to change to defection. Defection is the best reply to defection which classifies this strategy as a Nash equilibrium in a game theory framework [2]. However, cooperation is observed in social and biological systems even when from an agent point of view it is better not to cooperate. Evolutionary games are obtained when the best strategies become more frequent by giving an higher reproductive ability to the agents following those strategies. Several mechanisms for the evolution of cooperation were proposed, some of them relying on strategies that assume repeated encounters and some sort of memory [7].

Considering only pure strategies (C and D), it was found that cooperation is favored by the introduction of a spatial or a network structure in the population [8–12] where an agent plays two agent games with its nearest neighbors (possibly including itself) and collects a total payoff given by the sum of the payoffs obtained in each of those games. The PD game has been studied in structured populations such as lattices [8–10, 13, 14],

hierarchical lattices [15], empirical social networks [16], small world networks [17–23], homogeneous random networks [24], single scale [23, 25] and scale-free networks [22, 23, 25–27]. In the case of well mixed populations and fully connected networks, where the payoff of each agent depends directly on the frequency of each strategy in the whole population, the PD model evolves to a phase where all agents are defectors. The clustering of cooperators in a spatial/network structure allows cooperators to resist exploitation and the population may evolve to a coexistence phase of cooperators and defectors [28]. Structural heterogeneity in the number of neighbors was found to favor generically cooperation in the PD game [7, 21, 25, 27] although this effect may depend on the details of the adopted evolutionary rule [3, 29].

The distinction between the lattice/network of interactions specifying the neighboring agents for payoff determination and the lattice/network of evolutionary updating specifying the neighboring agents for imitation (or replacement) of strategies [30–32] was previously introduced. In those studies both networks were considered to be non-directed. The influence between agents in empirical social networks is sometimes found to be asymmetric and requiring modeling by directed networks [33]. This asymmetry may be taken into account in the framework of evolving networks by considering time evolving weights which depend on the outcome of ongoing interactions between the agents [3, 34–36]. In this work we study the PD model in the case where the network of interactions and the network of evolutionary updating are identical directed networks. Specifically, we consider that when an agent A plays with its neighbor agent B (which does not have A as its own neighbor) only A collects the payoff for the game between them. Even though the PD game is a two agent game the payoffs (consequences) of the adopted strategies (actions) may be collected asymmetrically by the two players engaged in a particular interaction. Suppose a social structured population, provided with an hierarchy of agents based on some ranking, such that the payoffs come from interactions with lower ranked neighbors and evolutionary updating corresponds to the imitation of higher ranked neighbors. This plausible social setting leads directly to the consideration of social games played in directed networks. In previous works the case of a single influential node with long-range asymmetric interactions was considered [18] and the evolutionary dynamics on a directed cycle (one dimensional directed lattice) where the payoffs of the two agent games are collected asymmetrically was discussed [37].

Several techniques were used to study two player game models on spatial structures such as Monte Carlo simulation, calculations of the probability of fixation of mutant strategies [28] and the determination of the evolutionary stable strategies by deriving an effective replicator dynamics [38, 39]. The last two techniques assume the limit of weak selection and rely on mean-field (MF) pair approximation [3, 13]. Unless in conditions of weak selection, higher order cluster MF approximations [3, 13, 24], going beyond the pair approximation, are usually needed to obtain accurate results. Such higher order approximations were applied before to model dynamical processes in regular lattices [3, 13, 40, 41] and networks with an homogeneous degree structure [42]. In directed lattices with a local tree like structure single-site MF approximations may give surprisingly accurate results [43]. In this work, we present a heterogeneous single-site and pair MF approximation for the PD game on a generic directed network taking into account the degree heterogeneities and degree correlations. In general, there is no unique way of deriving mean-field approximations from the master equation describing

dynamical processes in the networks [44, 45]. Our approach is close in spirit to the annealed mean-field approximations previously used to study epidemic spreading in heterogeneous networks [46, 47].

The remaining of the paper is organized as follows: in section 2 we describe in detail the version of the PD model and the networks considered; in section 3 we present our single-site and pair MF approximations; in section 4 the results obtained for out-homogeneous directed networks of different out-degree are presented; in section 5 we compare the predictions of the pair approximation with Monte Carlo simulation for the steady-state density of cooperators in Poissonian random directed networks and finally in section 6 we summarize our main conclusions.

2. The model on directed random networks

We consider a scaled version of the payoff matrix of the PD model [8, 13] where the reward payoff for mutual cooperation is set to unity, the temptation payoff received by a D facing a C is b and all other payoffs are null. The dilemma strictly exists for $b > 1$ when defecting becomes advantageous from the individual point of view. When the game is played on a network, at each vertex, i , there is an agent that receives a total payoff, P_i , that depends on the strategies adopted by the neighbors. We study in more detail the case where self-interaction is included and the payoff for a C is then equal to $n_C + 1$ and the payoff for a D is equal to $b n_C$, being n_C the number of neighbors that follow the strategy C . The inclusion of self-interaction may be justified by seeing each agent as representing a group following a given strategy [8] in a coarse-grained sense. Unless explicitly mentioned the results presented are for the model with self-interaction. For a network with N vertexes, where a vertex i has k_i neighbors, an *imitation dynamics* is considered such that a randomly chosen agent, i , $1 \leq i \leq N$ chooses a random neighbor, i_μ , $1 \leq \mu \leq k_i$, and if this neighbor is following a different strategy it adopts the strategy of the neighbor with probability

$$p_{\text{imitate}}(P_i, P_{i_\mu}) = \frac{1}{1 + \exp(-\beta(P_{i_\mu} - P_i))}, \quad (1)$$

where $T = \beta^{-1}$ is a temperature like parameter that controls the level of noise in the strategy imitation process. The weak selection limit corresponds to large T when the dependence of the imitation probability on the agent's payoff difference is small and linear. The above imitation dynamics [13] is sometimes called pairwise comparison dynamics and it is just one of several possible reasonable evolutionary dynamics [48]. In a system where each agent has z neighbors the total payoff of the full cooperation phase would be $N(z + 1)$ and an alternating phase where each C is surrounded by D and vice-versa, if possible, would have a total system payoff $Nbz/2 + N/2$. Thus only for $b < 2 + 1/z$ ($b < 2$ without self-interaction) the full cooperation phase corresponds to the maximum system payoff but, for any value of b , the full defection phase is always the phase with the smallest system payoff. In a large fully connected network the density of cooperators $\rho(t)$ can be written as $d\rho/dt = \rho(1 - \rho) \tanh(\beta\rho(1 - b))$ which, in the limit of weak selection, has the replicator equation form [2, 4] with a solution that reaches zero for long times, when $b > 1$.

We study the model on two kinds of directed random networks where the neighbors of a vertex are connected through outgoing links starting from a vertex. In the directed out-homogeneous networks [43, 49] the number of out-links, z , is the same for all vertexes. The out-links are generated by selecting randomly, for each vertex of the network, z other (different) vertexes. The distribution of in-links is Poissonian as for random networks. For $z > 1$ the system is in a percolating phase with a giant strongly connected component containing a finite fraction of the vertexes [43]. The other kind of networks considered are directed random networks which are built by establishing an outgoing link, $i \rightarrow j$, from each vertex, i , to each other vertex, j with probability q/N . The distribution of the number of outgoing links of a given vertex as well as the distribution of the number of ingoing links is Poissonian with an average value q . For these networks, vertexes with no out-links (without neighbors) may receive an arbitrary number of in-links, thus influencing other vertexes, while their own strategies do not suffer influence from others. To avoid this behavior we generated the out-links starting from a truncated and renormalized Poisson distribution where vertexes with no out-going links have zero probability. The average number of out-links of a vertex is then $z = \langle k_{\text{out}} \rangle = \frac{q}{1 - \exp(-q)}$, always larger than unity. To generate these networks we use a method based on the configuration model [50]: the out-degrees of each vertex, i , are drawn from its probability distribution, thus generating k_i stubs which are ends of outgoing links emerging from the vertex i . These stubs are then connected to randomly chosen vertexes with the restriction of not repeating a vertex and not allowing connections to itself.

The directed networks [51–53] are characterized by a joint in-degree and out-degree distribution, $P(k_{\text{in}}, k_{\text{out}})$ and degree correlations $P_{\text{in}}(k'_{\text{in}}, k'_{\text{out}} | k_{\text{in}}, k_{\text{out}})$ and $P_{\text{out}}(k'_{\text{in}}, k'_{\text{out}} | k_{\text{in}}, k_{\text{out}})$, which measure the probability to reach a vertex of degrees k'_{in} and k'_{out} from a vertex of degrees k_{in} and k_{out} following, respectively, an in-link and an out-link. For the particular case of networks with uncorrelated in-degree and out-degree, $P(k_{\text{in}}, k_{\text{out}}) = P_{\text{in}}(k_{\text{in}})P_{\text{out}}(k_{\text{out}})$ and with uncorrelated degree vertexes, such that $P_{\text{in}}(k'_{\text{in}}, k'_{\text{out}} | k_{\text{in}}, k_{\text{out}})$ and $P_{\text{out}}(k'_{\text{in}}, k'_{\text{out}} | k_{\text{in}}, k_{\text{out}})$ are independent of k_{in} and k_{out} , it can be shown, from a detailed balance relation [53], that:

$$P_{\text{out}}(k'_{\text{out}} | k_{\text{out}}) = P_{\text{out}}(k'_{\text{out}}). \quad (2)$$

The random networks considered in this work are uncorrelated in the sense defined above.

3. Mean field theory

We derived a heterogeneous single-site and pair mean-field theory for the model on a directed network characterized by an out-link degree-degree correlation $P_{\text{out}}(k'_{\text{out}} | k_{\text{out}})$. Our approach can be easily applied to other network dynamic models. Consider the probability of having a cooperators in a vertex of out-degree k , at time t , $p_k(C, t) = 1 - p_k(D, t)$. A C in a vertex of out-degree k (C_k) can arise when a D in a vertex of out-degree k (D_k) changes its strategy to imitate a neighbor C in a vertex of arbitrary out-degree s (C_s). The rate at which this process occurs, R_1 , depends on the probability $p_s(C, t)$ and on the conditional

Table 1. Processes and corresponding rates for the single site mean-field approximation for the model with self-interaction. The quantities $B_m(x)$ represent the binomial distribution with m attempts and success probability, x .

i	Process	Rate, R_i	n -dist	l -dist
1	$\dots \leftarrow D_k \rightarrow C_s \rightarrow \dots$	$\sum_s p_s(C, t) P_{out}(s k) \binom{p_{imitate}(b(n+1), l+1)}$	$B_{k-1}(\rho_k^{(n)}(t))$	$B_b(\rho_s^{(n)}(t))$
2	$\dots \leftarrow C_k \rightarrow D_l \rightarrow \dots$	$\sum_s (1-p_s(C, t)) P_{out}(s k) \binom{p_{imitate}(n+1, b)}{l}$	$B_{k-1}(\rho_k^{(n)}(t))$	$B_b(\rho_s^{(n)}(t))$

probability of finding a vertex of out-degree s , neighbor to a vertex of out-degree k , $P_{out}(s|k)$. For the imitation to succeed, it is necessary that the defector D_k , after playing with its k neighbors accumulating the payoff P_{D_i} , chooses to imitate the cooperator C_s that plays with its s neighbors accumulating the payoff P_{C_i} . The probability of imitation is averaged over each possible configuration of the neighborhoods of D_k , and C_s . This is done by considering the binomial distribution for a vertex to have a number of C neighbors among a given total number ($k-1$ or s) with a success probability corresponding to the probability to find a C at a neighboring vertex of a vertex of a given out-degree, k (or s), at time t , $\rho_k^{(n)}(t)$, (or $\rho_s^{(n)}(t)$). This quantity can be written as $\rho_k^{(n)}(t) = \sum_m p_m(C, t) P_{out}(m|k)$. Finally, as the imitated cooperator has an arbitrary out-degree s , we must then average over all the possible values of its out-degree s , as shown in table 1. Following a similar procedure we obtain the rate R_2 , also listed in table 1, that corresponds to the appearance of a defector D_k in a vertex of out-degree k . For this defector to arise, it is needed a C_k to imitate a D_s at a neighboring vertex with arbitrary out-degree s . The single-site approximation for the time evolution equation for the probability $p_k(C, t)$ is:

$$\frac{d}{dt} p_k(C, t) = R_1 (1 - p_k(C, t)) - R_2 p_k(C, t). \quad (3)$$

Note that for a degree-degree uncorrelated network the quantity $\rho_k^{(n)}(t)$, does not depend on the out-degree k .

The derivation of the pair approximation follows a very similar reasoning now considering the probability $p_{k,m}(XY, t)$ for a vertex with out-degree k to follow strategy $X = C, D$ and for a neighbor of that vertex, with out-degree m , to follow strategy $Y = C, D$, at time t . The different processes that contribute to the time change of these probabilities are listed in table 2. A strategy C_k may arise only if a previous D_k chooses to imitate a neighbor C_m belonging to the pair under consideration (process 1) or another neighbor with out-degree s , C_s (processes 2 and 10). In a similar way a defector D_k arises from a C_k trying to either imitate a D_m (process 8) or trying to imitate another neighbor D_s (processes 4 and 9). The processes 3 and 6 correspond to the generation of a cooperator C_m in the vertex of out-degree m and the processes 5 and 7 correspond to the generation of a cooperator D_m . The imitation probabilities are averaged over the neighborhoods of the vertexes involved in the imitation process using the binomial distributions and taking into consideration the conditional probability, $\rho_k^{(n)}(X, t)$ to find a C at a vertex neighbor to a vertex of out-degree k given that the agent at this vertex is following a given strategy $X = C, D$. This quantity can be written as:

$$\rho_k^{(n)}(X, t) = \sum_m \frac{p_{k,m}(XC, t)}{p_{k,m}^{(1)}(X, t)} P_{out}(m|k), \quad (4)$$

Table 2. Processes and corresponding rates for the pair mean-field approximation for the model with self-interaction. The quantities $B_m(x)$ represent the binomial distribution as in table 1.

i	Process	Rate, R_i	n -dist	l -dist
1	$\dots \leftarrow D_k \rightarrow C_m \rightarrow \dots$	$\frac{1}{k} \langle P_{\text{imitate}}(b(n+1), l+1) \rangle$	$B_{k-1}(\rho_k^{(n)}(D, t))$	$B_m(\rho_m^{(n)}(C, t))$
2	$\dots \leftarrow C_s \rightarrow D_k \rightarrow C_m \rightarrow \dots$	$\frac{k-1}{k} \sum_s \frac{p_{k,s}(DC,t)}{p_k^{(s)}(D,t)} P_{\text{out}}(s k) \langle P_{\text{imitate}}(b(n+2), l+1) \rangle$	$B_{k-2}(\rho_k^{(n)}(D, t))$	$B_s(\rho_s^{(n)}(C, t))$
3	$C_k \rightarrow D_m \leftarrow C_s \rightarrow \dots$	$\sum_s \frac{p_{m,s}(DC,t)}{p_m^{(s)}(D,t)} P_{\text{out}}(s m) \langle P_{\text{imitate}}(b(n+1), l+1) \rangle$	$B_{m-1}(\rho_m^{(n)}(D, t))$	$B_s(\rho_s^{(n)}(C, t))$
4	$\dots \leftarrow D_k \rightarrow C_k \rightarrow C_m \rightarrow \dots$	$\frac{k-1}{k} \sum_s \frac{p_{k,s}(CD,t)}{p_k^{(s)}(C,t)} P_{\text{out}}(s k) \langle P_{\text{imitate}}(n+2, b, l) \rangle$	$B_{k-2}(\rho_k^{(n)}(C, t))$	$B_s(\rho_s^{(n)}(D, t))$
5	$C_k \rightarrow C_m \leftarrow D_s \rightarrow \dots$	$\sum_s \frac{p_{m,s}(CD,t)}{p_m^{(s)}(C,t)} P_{\text{out}}(s m) \langle P_{\text{imitate}}(n+1, b, l) \rangle$	$B_{m-1}(\rho_m^{(n)}(C, t))$	$B_s(\rho_s^{(n)}(D, t))$
6	$D_k \rightarrow D_m \leftarrow C_s \rightarrow \dots$	R_3		
7	$D_k \rightarrow C_m \leftarrow D_s \rightarrow \dots$	R_5		
8	$\dots \leftarrow C_k \rightarrow D_m \rightarrow \dots$	$\frac{1}{k} \langle P_{\text{imitate}}(n+1, b, l) \rangle$	$B_{k-1}(\rho_k^{(n)}(C, t))$	$B_m(\rho_m^{(n)}(D, t))$
9	$\dots \leftarrow D_k \rightarrow C_k \rightarrow D_m \rightarrow \dots$	$\frac{k-1}{k} \sum_s \frac{p_{k,s}(CD,t)}{p_k^{(s)}(C,t)} P_{\text{out}}(s k) \langle P_{\text{imitate}}(n+1, b, l) \rangle$	$B_{k-2}(\rho_k^{(n)}(C, t))$	$B_s(\rho_s^{(n)}(D, t))$
10	$\dots \leftarrow C_s \rightarrow D_k \rightarrow D_m \rightarrow \dots$	$\frac{k-1}{k} \sum_s \frac{p_{k,s}(DC,t)}{p_k^{(s)}(D,t)} P_{\text{out}}(s k) \langle P_{\text{imitate}}(b(n+1), l+1) \rangle$	$B_{k-2}(\rho_k^{(n)}(D, t))$	$B_s(\rho_s^{(n)}(C, t))$

where $p_{k,m}^{(1)}(X, t) = p_{k,m}(XC, t) + p_{k,m}(XD, t)$. Note that the probability for an agent to choose a specific neighbor to imitate is the inverse of its vertex out-degree and that one of the neighbors of the vertex of out-degree k has out-degree m and belongs to the pair under consideration. The remaining $k - 1$ neighbors of the vertex of out-degree k and all of the neighbors of the vertex of out-degree m give an equal additive contribution to the rates, weighted by the conditional probability to observe a neighbor of out-degree s , following a specified strategy, given the strategy followed by the vertex belonging to the pair, i.e. $p_{k,s}(XY, t)/p_{k,s}^{(1)}(X, t)$ or $p_{m,s}(XY, t)/p_{m,s}^{(1)}(X, t)$ for a neighbor of the vertex of out-degree k and for a neighbor of the vertex of out-degree m , respectively. As in the single-site approximation the rates are finally averaged over the possible out-degrees of the neighboring vertex, s . The time evolution equations for the probabilities, $p_{k,m}(XY, t)$ are then given by:

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} p_{k,m}(CC, t) &= (R_1 + R_2) p_{k,m}(DC, t) + R_3 p_{k,m}(CD, t) - (R_4 + R_5) p_{k,m}(CC, t) \\
 \frac{d}{dt} p_{k,m}(CD, t) &= R_{10} p_{k,m}(DD, t) + R_5 p_{k,m}(CC, t) - (R_3 + R_8 + R_9) p_{k,m}(CD, t) \\
 \frac{d}{dt} p_{k,m}(DC, t) &= R_4 p_{k,m}(CC, t) + R_6 p_{k,m}(DD, t) - (R_1 + R_2 + R_7) p_{k,m}(DC, t) \\
 \frac{d}{dt} p_{k,m}(DD, t) &= (R_8 + R_9) p_{k,m}(CD, t) + R_7 p_{k,m}(DC, t) - (R_{10} + R_6) p_{k,m}(DD, t)
 \end{aligned} \tag{5}$$

where a given process contributes positively for the equation corresponding to the final configuration and negatively for the equation corresponding to the starting configuration. The density of cooperators, $\rho(t)$, is obtained, in the pair approximation, from:

J. Stat. Mech. (2016) 123405

$$\rho(t) = \sum_{k,m} p_{k,m}^{(1)}(C, t) P_{\text{out}}(m|k) P_{\text{out}}(k).$$

Note that in the derivation of the pair approximation, probabilities of configurations involving more than two out-linked vertexes are effectively approximated by probabilities of configurations of pairs of out-linked vertexes in the spirit of the probability approximation methods previously applied to dynamical models on regular lattices [3, 13, 40, 41].

4. Out-homogeneous directed network

We studied the phase diagram of the prisoner's dilemma model in the out-homogeneous networks using the mean-field approximations and Monte Carlo simulations. The model exhibits, generically, at lower temptation $b_{c,1}$, a phase transition from a full cooperation phase to an intermediate active phase, where both strategies survive, and, at higher temptation, $b_{c,2}$, a phase transition to a full defection state. The comparison of the mean-field results with simulations shows that the single-site approximation is not able to describe correctly the model and that the pair approximation gives a much better agreement with simulation.

4.1. Mean-field approximations

From a high temperature expansion we were able to obtain analytical results for the transition parameters, $b_{c,1}$ and $b_{c,2}$ for a network with an arbitrary number of outgoing neighbors, z . For the single-site approximation we obtained $b_{c,1} = \frac{2z+1}{2z}$ and $b_{c,2} = 2$, and for the pair approximation:

$$\begin{aligned} b_{c,1} &= \frac{2z+1}{2z-1} \\ b_{c,2} &= 3 + \frac{1}{T} \frac{(z-1)^2}{(2z-1)^2} \end{aligned} \quad (6)$$

We also applied the method proposed in [54] to numerically study the MF phase diagram in the temptation and temperature parameters space. The rate of the time evolution of the density of cooperators in the equation $\frac{d\rho}{dt} = F(\rho)$ was obtained by solving, for each ρ , a set of modified dynamical equations that conserve ρ :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} p(CC, t) &= R(DD, t) \\ \frac{d}{dt} p(CD, t) &= -R(DD, t) \\ \frac{d}{dt} p(DC, t) &= -R(DD, t) \\ \frac{d}{dt} p(DD, t) &= R(DD, t) \end{aligned} \quad (7)$$

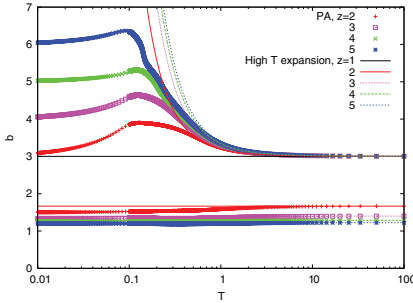


Figure 1. Phase diagrams in the pair approximation (PA) for the out-homogeneous networks with $z = 2, 3, 4$ and 5 . The lower curves are $b_{c,1}$ and the upper curves are $b_{c,2}$. The lines are the high temperature expansion results presented in equation (6).

where $R(DD, t)$ is the total rate in the equation for $\frac{d}{dt}p(DD, t)$ in the pair approximation equations (5) and $F(\rho)$ is obtained from the stationary value of $R(CD, t)$ or $R(CC, t)$, by using $F(\rho) = -R(CD, \infty) = \frac{1}{2}R(CC, \infty)$.

The zeros of $\frac{d}{d\rho}F(\rho)$ near $\rho = 1$ and near $\rho = 0$ give the location of the phase transitions at $b_{c,1}$ and $b_{c,2}$, respectively. The nature of the phase transition (continuous or discontinuous) can be obtained from the sign of the second order derivative of $F(\rho)$ at the phase transition [54]. The results obtained by integrating the equations (7) until $|R(DD, t)| < 10^{-12}$, for $z = 2, 3, 4$ and 5 are presented in figure 1. The behavior of $F(\rho)$ near $\rho = 1$ and $\rho = 0$ with density values separated by $d\rho = 10^{-5}$ was used to locate the phase transitions with an error in the temptation parameter given by $db = 10^{-4}$. Both phase transitions are predicted to be continuous at any temperature and for any coordination number, z . In agreement with the high temperature expansion results shown in equation (6) we obtained values of $b_{c,1}$ almost independent of temperature and values of $b_{c,2}$ that increase for low temperatures from high temperature values close to 3. At low temperatures the values of $b_{c,2}$ are close to $z + 1$. In figure 2 we show the behavior of $F(\rho)$ near the two phase transitions for $z = 4$ and two temperatures $T = 1$ (figure 2(a)) and $T = 0.1$ (figure 2(b)). Note that, at low T , the determination of the zeros of $F(\rho)$, corresponding to the transition at $b_{c,2} \sim z + 1$, require a high numerical precision due to the very small value taken by $F(\rho)$ near the origin. From the lower panel of figure 2 it is clear that the phase with zero density of cooperators becomes stable only for high values of the temptation parameter close to $b \sim 5.2$.

4.2. $z = 1$ case

The time integration of the pair mean-field equations and simulations, for $z = 1$, show that the two critical temptations are equal, $b_{c,1} = b_{c,2} = 3$, at any temperature, also in agreement with the high temperature expansion result equation (6).

J. Stat. Mech. (2016) 123405

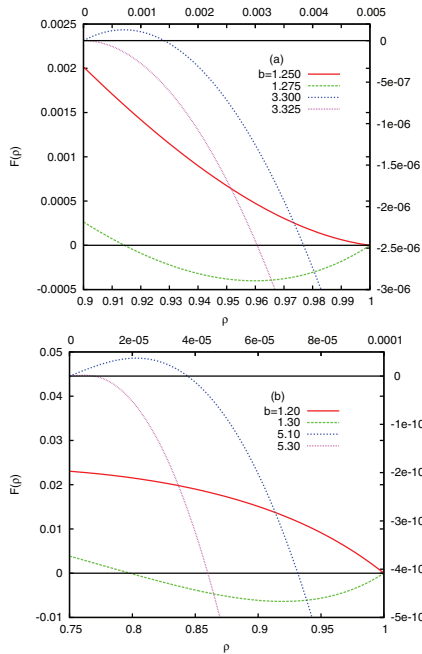


Figure 2. Function $F(\rho)$ near the phase transitions at $b_{c,1}$ (with $\rho \sim 1$, left and bottom axis) and at $b_{c,2}$ (with $\rho \sim 0$, right and upper axis) for $z = 4$ and two temperatures (a) $T = 1$ and (b) $T = 0.1$.

This behavior can be understood by looking at the payoff differences, $\Delta P = P_{i_j} - P_i$, listed in table 3 for the possible configurations at the interfaces $D \rightarrow C$ (configurations 1 and 2 in table 3) and $C \rightarrow D$ (configurations 3 and 4 in table 3). The behavior of the system is controlled by the rates associated with the motion of the interfaces $\dots \rightarrow D \rightarrow C \rightarrow C \rightarrow \dots$ and $\dots \rightarrow C \rightarrow D \rightarrow D \rightarrow \dots$ (configurations 1 and 3, respectively) because the motion of the other interfaces lead to the generation of configurations of these two types. For $b \leq 1$ the rates for the displacement of $D \rightarrow C$ interfaces are higher than the rates for $C \rightarrow D$ interfaces. For $b \geq 3/2$, the rate of increase of the number of defectors associated with configuration $\dots \rightarrow C \rightarrow D \rightarrow C \rightarrow \dots$ (configuration 4) becomes the higher rate in the system but it generates configurations $\dots \rightarrow C \rightarrow D \rightarrow D \rightarrow \dots$ (configuration 3) which moves, until $b = 3$, at a lower rate than the rate for the spreading of cooperators $\dots \rightarrow D \rightarrow C \rightarrow C \rightarrow \dots$ (configuration 1). Consequently, we expect, for $b < b_c = 3$, the system to reach full cooperation and, for $b > b_c = 3$, the system to reach full defection. This scenario remains valid at any nonzero temperature in spite of the temperature dependence of the rates of motion of the interfaces. This behavior is also

Table 3. Payoff differences, $\Delta P = P_i - P_j$ between strategies at $\dots \rightarrow D \rightarrow C \rightarrow \dots$ (configurations 1 and 2) and $\dots \rightarrow C \rightarrow D \rightarrow \dots$ (configurations 3 and 4) interfaces for the model with self-interaction with $z = 1$.

i	Configuration	ΔP
1	$\dots \rightarrow D \rightarrow C \rightarrow C \rightarrow \dots$	$2-b$
2	$\dots \rightarrow D \rightarrow C \rightarrow D \rightarrow \dots$	$1-b$
3	$\dots \rightarrow C \rightarrow D \rightarrow D \rightarrow \dots$	-1
4	$\dots \rightarrow C \rightarrow D \rightarrow C \rightarrow \dots$	$b-1$

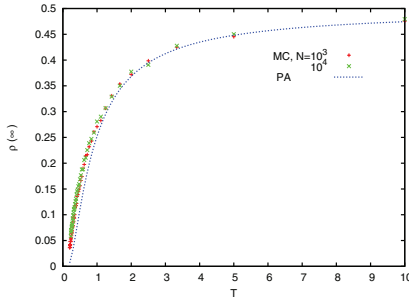


Figure 3. The stationary density of cooperators, $\rho(\infty)$ for $z = 1$ and $b = 3$ as a function of temperature from the pair approximation (PA, equation (8)) and simulations for systems of size $N = 10^3$ and $N = 10^4$, taking averages over 10^4 samples and starting from an equal density of cooperators and defectors.

in agreement with the results obtained for the pair approximation and simulations for $T = 10$ and $T = 1$ shown in figures 4(a) and (b), respectively. The time integration of the pair approximation equations reaches full cooperation and full defection very slowly especially at high temperatures (see the two curves shown in figure 4(a) obtained for a maximum integration time 10^6 and 10^7 where full cooperation for $b < b_c = 3$ and full defection for $b > b_c = 3$ are still far from being reached). In the same figure we also show the results of simulations for systems of size $N = 10^3$ and $N = 10^4$ showing a strong size dependence but approaching the expected behavior in the thermodynamic limit.

For the pair approximation, we have found that, exactly at $b = b_c = 3$, $\rho(\infty)$ depends on temperature and initial condition and is given by the following expression:

$$\rho(\infty) = \frac{(e^{2\beta} - e^\beta)\rho(0)^2 + (e^\beta + 1)\rho(0)}{e^{2\beta} + 1 - (e^{3\beta} - e^{2\beta} + e^\beta - 1)\rho(0)(\rho(0) - 1)}. \tag{8}$$

Results from simulations presented in figure 3 agree with the pair approximation result (equation (8)) at high temperatures and show some deviation at low temperatures.

At $T = \infty$, each agent adopts the strategy of a randomly selected neighbor with probability $\frac{1}{2}$ and the model is related to the direct voter model on directed networks considered in [53]. In this limit, the density of cooperators is conserved and it remains equal to its initial value.

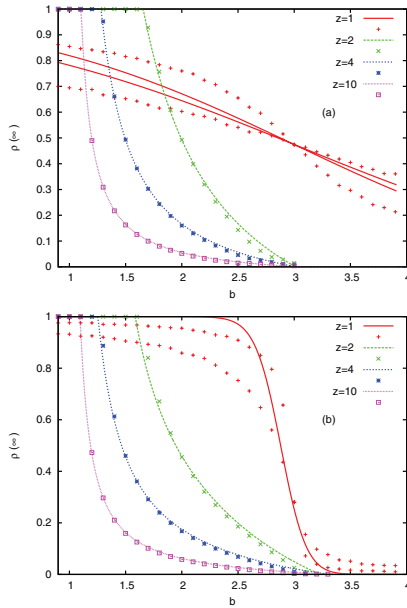


Figure 4. Comparison of the predictions of the pair approximation (lines) and Monte Carlo simulations (points) for the stationary density of cooperators $\rho(\infty)$ for (a) $T=10$ and (b) $T=1$. The simulations were done for systems of size $N=10^4$ and averages were made over 100 samples. For $z=1$ simulations are shown for system sizes $N=10^3$ and 10^4 taking averages over 10^4 samples. For the pair approximation the $z=1$ results are not stationary and correspond to cooperator densities reached at integration times 10^6 and 10^7 in (a) and 10^6 in (b).

At $T=0$ the interface dynamics becomes deterministic and some of the interfaces are frozen while others are moving depending on the value of b (only interfaces with $\Delta P \geq 0$ move). For $b \leq 1$ only the $D \rightarrow C$ interfaces are active and the system should reach full cooperation (except for frozen initial domains of defectors with a negligible weight in large systems). For $b > 1$ the interface $\dots \rightarrow D \rightarrow C \rightarrow D \rightarrow \dots$ is frozen and defectors with a neighbor cooperator that has a neighbor defector start to survive and for $b \geq 2$ the only active interface corresponds to the configuration $\dots \rightarrow C \rightarrow D \rightarrow C \rightarrow \dots$. After the disappearance of all cooperators with a neighbor defector that has a neighbor cooperator the system will reach a frozen disordered state, free of such configurations, with a final density of cooperators that depends on its value on the starting configuration.

4.3. $z > 1$ case

For networks with a number of outgoing links, z , larger than one there is a region of coexistence of strategies for b values between the two critical parameters $b_{c,1}$ and $b_{c,2}$. In figure 4 we show, for $z = 2, 4$ and 10 the stationary density of cooperators obtained by simulations of systems of size $N = 10^4$ for $T = 10$ (figure 4(a)) and $T = 1$ (figure 4(b)) taking averages over 100 samples. In all our simulations the stationary averages were obtained by neglecting the initial transient time dependence and averaging only over samples that have not reached any of the two absorbing states (full cooperation and full defection). We also plot the pair approximation predictions showing a good agreement with MC simulations except near the phase transitions where slightly different values for the critical temptation parameters are obtained. In the pair approximation, for the network with $z = 4$ at $T = 1$ we got $b_{c,1} = 1.2542(1)$ and $b_{c,2} = 3.3241(1)$ and results from simulations give $b_{c,1} = 1.274(1)$ and $b_{c,2} = 3.14(1)$. Furthermore, the agreement between simulations and the pair approximation worsens as the temperature decreases.

The payoff differences at $D \rightarrow C$ interfaces take the possible values $\Delta P_{D \rightarrow C} = m + 1 - n b$ with $0 \leq m \leq z$ and $1 \leq n \leq z$ and at $C \rightarrow D$ interfaces take the values $\Delta P_{C \rightarrow D} = n b - m - 1$ with $0 \leq m \leq z - 1$ and $0 \leq n \leq z$, where m and n are the possible number of cooperators in the neighborhood of the cooperator and of the defector, respectively. At low temperatures, the dynamics at interfaces with negative payoff differences is slow (freezing at $T = 0$) which generates plateaus in the density of cooperators in between the values of temptation, $b_{n,m} = \frac{m+1}{n}$, where the payoffs for the interfaces change sign.

Near the full cooperator state the most important configurations for the $D \rightarrow C$ interfaces correspond to $m = z$ and $n = z$ which becomes inactive (stopping creating cooperators), at very low T , for $b > b_{z,z} = 1 + 1/z$ meaning that an isolated D in a sea of C start surviving. The most important configuration for the $C \rightarrow D$ interface, near the full cooperator state, correspond to $m = z - 1$ and $n = z$ which becomes active (starting creating defectors), at very low T , for $b > b_{z,z-1} = 1$. These defectors will be at new $C \rightarrow D$ interfaces where the defector now has a neighboring defector and the new interface is active and leading to the creation of new defectors for $b > b_{z-1,z-1} = 1/(1 - 1/z) \sim 1 + 1/z$. This explains the observation of values of $b_{c,1}$ close to 1, in agreement with the high temperature expansion, equation (6), which gives a dependence on the network coordination number approaching 1 in the limit of an infinite number of neighbors.

The most important configurations for $D \rightarrow C$ interfaces, near the full defection state, correspond to $m = 0$ and $n = 1$ with $\Delta P_{D \rightarrow C} = 1 - b$ and for the $C \rightarrow D$ interface $m = 0$ and $n = 0$ with $\Delta P_{C \rightarrow D} = -1$. However the motion of the $D \rightarrow C$ interface with $m = 0$ and $n = 1$ generates a new cooperator which will be at a $D \rightarrow C$ interface with $m = 1$ and $n = 1$ corresponding to $\Delta P_{D \rightarrow C} = 2 - b$. Thus, like in the case for $z = 1$, we would expect that the processes that generate defectors will win over those that generate cooperators for $b > b_{c,2} \sim 3$. At very low T , since cooperators without any neighboring cooperators always have higher payoffs than defectors also without neighboring cooperators, independently of b , the interfaces $C \rightarrow D$ will be sluggish, and cooperators may persist in the system for long times. Furthermore, clusters of cooperators with a C connected to other C resist as long as the weakest cooperators, in the periphery of the cluster, with no neighboring cooperators resist invasion by defectors. The C in the

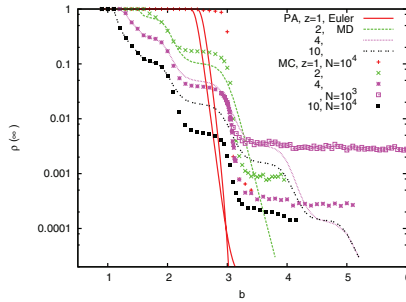


Figure 5. We compare the temptation dependence of the stationary density of cooperators, $\rho(\infty)$, for pair approximation (PA) and Monte Carlo simulations (MC) at a low temperature, $T = 0.1$, for networks with $z = 1, 2, 4$ and 10 . The PA results for $z = 1$ were obtained from time integration for 10^6 and 10^7 steps showing a slow approach to the stationary behavior. Results for other values of z were obtained from equation 7 (MD). The MC results were obtained for systems of size $N = 10^4$ and $N = 10^3$ (for $z = 4$) to show the finite size effects at large values of b , for very small densities of cooperators.

root of a cluster connected to z cooperators is a source of new C up to $b = z + 1$. The newly generated cooperators, in the new roots, have only one neighboring C and, for values of $b > 2$, do not generate further spreading of cooperators. At a finite, low T , the balance between the rate of disappearance of C in the periphery of the cluster, where the cooperators have no neighboring cooperators, and the rate of creation of new C , from a C with only one neighboring C remains the most important balance leading to $b_{c,2} = 3$. However, the pair approximation is not sensitive to the weakness of the newly generated cooperators and shows incorrectly, at low temperatures, $b_{c,2} \sim z + 1$, which is the temptation limit above which, at zero temperature, all the processes generating cooperators stop.

In figure 5 we show for the low temperature, $T = 0.1$, the stationary density of cooperators, $\rho(\infty)$, as a function of b , obtained from simulations and the pair approximation for systems of $z = 2, 4$ and 10 . The pair approximation results were obtained from the modified dynamics (MD) equation (7) and time integration of the mean-field equations (equation (5)) (for $z = 1$). The agreement of the pair approximation with simulations is good for small values of b , but the height of the plateaus in $\rho(\infty)$, for $b \gtrsim 2$, when $\rho(\infty) \lesssim 0.1$, are not correctly predicted by the pair approximation. The simulation results for $z = 4$ and sizes $N = 10^3$ and 10^4 show that for $b \gtrsim 3$ the observed plateaus have heights that decrease with the size of the system suggesting that in the thermodynamic limit the system reaches the full defection absorbing state. We determined $b_{c,2}$ from simulations of the time dependent behavior of $\rho(t)$ for a network with $z = 4$ and size $N = 10^6$ (see figure 6) obtaining $b_{c,2} = 3.11(1)$ which is much smaller than the value $b_{c,2} \sim 5$ predicted by the pair approximation. For large times we observe $\rho(t) \sim 1/t$ as expected for the mean-field universality class of phase transitions to a single absorbing state [55].

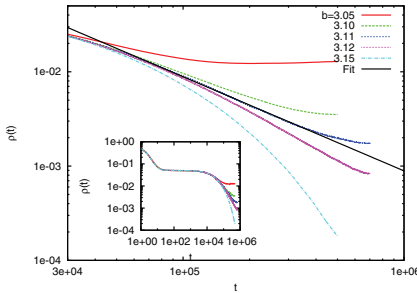


Figure 6. Monte Carlo simulations of the time dependence of the density of cooperators, $\rho(t)$, at a low temperature $T=0.1$ for a network with $z=4$ with a system size $N=10^6$ showing that $b_{c,2}=3.11(1)$, much smaller than the value predicted by the pair approximation. The power law fit of $\rho(t)$, for large times, shown in the plot, has a slope $\alpha=-0.998$. In the inset we present the full curve $\rho(t)$ including the behavior at short times.

It is interesting to comment on the behavior of the system for increasing values of z : for very large z , we approach the fully connected network limit, where it is known that the system jumps from full cooperation to full defection at $b=1$. Our results show that for large z , the critical temptation $b_{c,1}$ gets closer to 1 and the density of cooperators decays very strongly for $b > b_{c,1}$ but still shows a small nonzero value for temptation values up to $b_{c,2}$ which does not approach $b_{c,1}$ for arbitrary large z .

4.4. Model without self-interaction

We can repeat the above arguments for the model without self-interaction and conclude that for $z=1$ we have, $b_{c,1}=b_{c,2}=1$ with a suppression of cooperation for $b > 1$. For larger z we have now $b_{n,m}=\frac{m}{n}$ and near the full cooperator state a single D at a $D \rightarrow C$ interface start surviving, at low T , for $b > b_{z,z}=1$. The $C \rightarrow D$ interfaces with $m=z-1$ and $n=z$ lead to new $C \rightarrow D$ interfaces with $m=z-1$ and $n=z-1$ which are active and leading to the proliferation of defectors, for $b > b_{z-1,z-1}=1$. Consequently, we expect $b_{c,1} \sim 1$. Considering now configurations close to the full defection state we see that a single cooperator at a $C \rightarrow D$ interface in a sea of defectors has $\Delta P_{C \rightarrow D}=0$ and such interface is always active. The $D \rightarrow C$ interface for the cooperator in the sea of defectors ($m=0$ and $n=1$) has $\Delta P_{D \rightarrow C}=-b$ and it is inactive at very low T . The production of C occurs predominantly at configurations where a C has a neighboring C ($m=1$ and $n=1$) with $\Delta P_{D \rightarrow C}=1-b$ and the balance between C production and D production turns in favor of defectors for $b > b_{c,2} \sim 1$. From an high temperature expansion (weak selection limit) we obtained from the pair approximation:

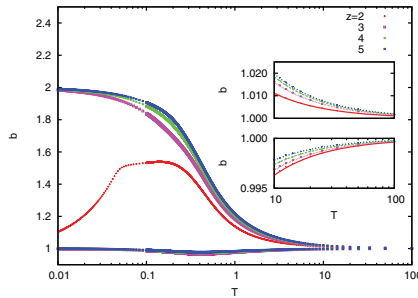


Figure 7. Phase diagram of the model without self-interaction, in the pair approximation, for the out-homogeneous networks with $z = 2, 3, 4$ and 5 . The lower curves are $b_{c,1}$ and the upper curves are $b_{c,2}$, respectively. The inset shows the high temperature region where the numerical results based on equation (7) are compared with the analytical results (lines) presented in equation (9).

$$\begin{aligned}
 b_{c,1} &= 1 - \frac{1}{T} \frac{(z-1)^2}{8z^3 - 12z^2 + 6z - 1} \\
 b_{c,2} &= 1 + \frac{1}{T} \frac{(z-1)^2}{(2z-1)^2}
 \end{aligned} \tag{9}$$

Contrary to the case with self-interaction a cluster of C in a sea of D is not stable at low T because now the cooperators in the periphery (with no neighboring C) do not resist invasion by defectors. Consider the cluster $D \rightarrow C \rightarrow C \rightarrow D$ with a $D \rightarrow C$ and a $C \rightarrow D$ interface and consider that the remaining neighbors are all D . At $T = 0$, the $D \rightarrow C$ interface is frozen for $b > 1$ and the activity at the interface $C \rightarrow D$ leads to the disappearance of the cooperators. For the cluster to be sustainable there is need for the interfaces $C \rightarrow D$ in the periphery to move at a lower rate than the interfaces $D \rightarrow C$ at the root which leads to the balance being in favor of defectors for $b > 1$. When the defector at the $D \rightarrow C$ interface is facing a C with, for example, two neighboring C , then cooperators are generated with higher rate determined by the payoff difference $2 - b$ but still the newly generated C will have only one C neighbor and again for $b > 1$ defectors will win. In figure 7 we show the pair approximation phase diagram using the same method previously applied to the model with self-interaction. In the inset we see that the high temperature expansion equation (9) agrees well with the numerical results.

At very low T we obtain for the pair approximation a value $b_{c,2} \sim 1$ for $z = 2$ and $b_{c,2} \sim 2$ for $z > 2$. This difference in behavior may be related with the different relative statistical weight given by the pair approximation to configurations with a C with one and two C as neighbors for $z = 2$ and $z > 2$ because if the configurations with two neighboring C are predominant we expect the rate of creation of C to be determined by the payoff difference $2 - b$ leading to $b_{c,2} \sim 2$. We made MC simulations of networks with, $z = 2, 4$ and 10 , at a low temperature, $T = 0.1$, and the results shown in figure 8 correspond to a value $b_{c,2} \sim 1.2$ much smaller than the pair approximation prediction.

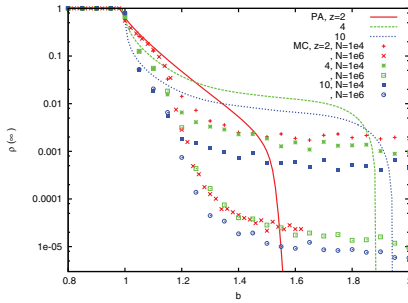


Figure 8. Comparison of pair approximation (PA) and MC simulation results for the steady state density of cooperators for the model without self-interaction at a low temperature $T = 0.1$ and for out-homogeneous directed networks with $z = 2, 4$ and 10 .

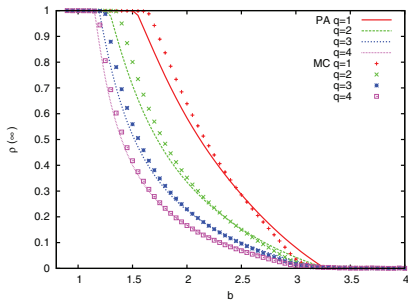


Figure 9. Comparison of the pair approximation (PA) and simulations (MC) of the PD model with self-interaction for uncorrelated directed random networks with size $N = 10^4$, with average number of neighbors, $\langle z \rangle = 1.582$ ($q = 1$), 2.313 ($q = 2$), $\langle z \rangle = 3.1572$ ($q = 3$) and $\langle z \rangle = 4.0746$ ($q = 4$), at $T = 1$.

5. Random directed networks

In random directed networks the distribution of the number of outgoing links of a given vertex is Poissonian and strongly peaked at its average number. The behavior of the stationary density of cooperators is expected to follow the same trend as for out-homogeneous directed random networks with a given number of outgoing links. To test the accuracy of the mean-field pair approximation in equation (5) for a heterogeneous case we compared it with MC simulations, for the model with self-interaction at $T = 1$ for different average number of out-neighbors. The results in figure 9 show that the pair approximation provides a reasonably good approximation for the behavior of

system. Since we use a modified Poissonian distribution, as described in section 2, the limit $q \rightarrow 0$ of these networks corresponds exactly to out-homogeneous networks with $z = 1$.

6. Concluding remarks

We have derived a heterogeneous pair mean-field approximation that is able to correctly describe the behavior of the prisoner's dilemma model in directed networks in the limit of high T (weak selection). At low T the pair approximation gives predictions for the critical parameter $b_{c,2}$ in disagreement with MC simulation. The pair approximation was numerically studied by using a very efficient method, previously applied to other models [54], which is based on modified dynamical equations that solve the time-dependent equations under the constraint of a given density of cooperators. We also obtained analytical expressions for the two critical parameters $b_{c,1}$ and $b_{c,2}$ in the limit of high temperature. For the model with self-interaction $b_{c,1}$ has a weak temperature dependence and approaches 1 for large z and $b_{c,2}$ is close but larger than 3 for any z . Without self-interaction, at any temperature, $b_{c,1}$ is close but smaller than 1 and $b_{c,2}$ is greater but close to 1. Essentially, the inclusion of the self-interaction promotes a shift of $b_{c,2}$ from values close to 1 to values close to 3. The case $z = 1$ is a special case where, in both cases, $b_{c,1} = b_{c,2}$, independent of temperature. In the model without self-interaction we find $b_{c,1} = b_{c,2} = 1$ and cooperation is fully suppressed for $b > 1$ while in the model with self-interaction the full cooperator state is still reached for temptation values up to $b_{c,1} = b_{c,2} = 3$. In both models the coexistence region does not shrink as z increases but the levels of cooperation strongly decrease with increasing z , as the networks get closer to the fully connected limit. This behavior is similar to the one previously reported for one-dimensional regular lattices with varying coordination number [22]. We can also compare our results to other available results for non-directed lattices and random networks. The inclusion of self-interaction increases $b_{c,2}$ from ~ 1.035 to ~ 1.85 , at $T = 0.1$ in the square lattice (see [13, 14]) while in our out-homogeneous directed networks we observe a much larger increase in $b_{c,2}$. In previous studies of non-directed lattices and random regular graphs [14, 24] two types of phase diagrams were found: (1) one where $b_{c,2}$ shows a non-monotonous dependence with T , being equal to 1 at $T = 0$ and $T = \infty$ and (2) another type where $b_{c,2}$ decreases with T showing the highest value in the noise-free limit $T = 0$. Our MC simulation results suggest that the phase diagram in the directed networks studied here are of the first type showing an equal high and low T limits for $b_{c,2}$ although not equal to 1 in the case of the model with self-interaction. It is not clear if it is possible to observe phase diagrams of type (2) in directed networks. Our main results were obtained for out-homogeneous networks but we expect the main conclusions to apply also to directed random networks with Poissonian in and out degree distributions.

The study of evolutionary dynamics in other types of directed networks and in mixed directed/non-directed networks taking into consideration the possible difference between interaction and evolutionary updating networks may be relevant for the modeling of real systems.

Acknowledgments

We acknowledge support from the joint bilateral project FCT/1909/27/2/2014/S and CAPES 385/14. This work was also partially funded by FEDER funds through the COMPETE 2020 Programme and National Funds through FCT—Portuguese Foundation for Science and Technology under the project UID/CTM/50025/2013. WF also acknowledge the support of the Brazilian agency CNPq, Grant no. 2013/303253-4. The research of AL was supported by Narodowe Centrum Nauki (NCN, Poland) Grant No. 2013/09/B/ST6/02277.

References

- [1] Kollock P 1998 *Annu. Rev. Sociol.* **24** 183–214
- [2] Nowak M A 2006 *Evolutionary Dynamics: Exploring the Equations of Life* (Cambridge, MA: Harvard University Press)
- [3] Szabó G and Fáth G 2007 *Phys. Rep.* **446** 97
- [4] Sigmund K 2010 *The Calculus of Selfishness* (Princeton, NJ: Princeton University Press)
- [5] Axelrod R and Hamilton W D 1981 *Science* **211** 1390–6
- [6] Axelrod R 1984 *The Evolution of Cooperation* (New York: Basic Books)
- [7] Nowak M A 2006 *Science* **314** 1560–63
- [8] Nowak M A and May R M 1992 *Nature* **359** 826–29
- [9] Nowak M A and May R M 1993 *Int. J. Bifurcation Chaos* **3** 35
- [10] Nowak M A, Bonhoeffer S and May R M 1994 *Int. J. Bifurcation Chaos* **4** 33–56
- [11] Lindgren K and Nordahl M 1994 *Physica D* **75** 292
- [12] Hauert C and Szabó G 2005 *Am. J. Phys.* **73** 405
- [13] Szabó G and Tóke C 1998 *Phys. Rev. E* **58** 69
- [14] Szabó G, Vukov J and Szolnoki A 2005 *Phys. Rev. E* **72** 047107
- [15] Vukov J and Szabó G 2005 *Phys. Rev. E* **71** 036133
- [16] Holme P, Trusina A, Kim B J and Minnhagen P 2003 *Phys. Rev. E* **68** R030901
- [17] Abramson G and Kuperman M 2002 *Phys. Rev. E* **63** R030901
- [18] Kim B J, Trusina A, Holme P, Minnhagen P, Chung J S and Choi M Y 2002 *Phys. Rev. E* **66** 021907
- [19] Masuda N and Aihara K 2003 *Phys. Lett. A* **313** 55–61
- [20] Tomochi M 2004 *Soc. Netw.* **26** 309
- [21] Santos F C, Rodrigues J F and Pacheco J M 2005 *Phys. Rev. E* **72** 056128
- [22] Pacheco J M and Santos F C 2005 *Science of Complex Networks: from Biology to the Internet and WWW* (*AIP Conf. Proc.* vol 776) ed J F F Mendes (Melville, NY: AIP) pp 90–100
- [23] Tang C L, Wang W X, Wu X and Wang B H 2006 *Eur. Phys. J. B* **53** 411–5
- [24] Vukov J, Szabó G and Szolnoki A 2006 *Phys. Rev. E* **73** 067103
- [25] Santos F C, Pacheco J M and Lenaerts T 2006 *Proc. Natl Acad. Sci.* **103** 3490–4
- [26] Santos F C and Pacheco J M 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 098104
- [27] Santos F C, Rodrigues J F and Pacheco J M 2006 *Proc. R. Soc. B* **273** 51–5
- [28] Ohtsuki H, Hauert C, Lieberman E and Nowak M A 2006 *Nature* **441** 502
- [29] Maciejewski W, Fu F and Hauert C 2014 *PLoS Comput. Biol.* **10** e1003567
- [30] Ohtsuki H, Nowak M A and Pacheco J M 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 108106
- [31] Ohtsuki H, Pacheco J M and Nowak M A 2007 *J. Theor. Biol.* **246** 681–94
- [32] Wu Z X and Wang Y H 2007 *Phys. Rev. E* **75** 041114
- [33] Guha R, Kumar R, Raghavan P and Tomkins A 2004 Propagation of trust and distrust *Proc. 13th Int. Conf. on World Wide Web* (New York, NY: ACM) pp 403–12
- [34] Wu Z X, Xu X J, Huang Z G, Wang S J and Wang Y H 2006 *Phys. Rev. E* **74** 021107
- [35] Skyrms B and Pemantle R 2000 *Proc. Natl Acad. Sci. USA* **97** 9340–46
- [36] Lipowski A, Lipowska D and Ferreira A L 2014 *Phys. Rev. E* **90** 032817
- [37] Lieberman E, Hauert C and Nowak M A 2005 *Nature* **433** 312
- [38] Ohtsuki H and Nowak M A 2006 *Proc. R. Soc. B* **273** 2249
- [39] Ohtsuki H and Nowak M A 2008 *J. Theor. Biol.* **251** 698–707
- [40] Ferreira A L and Mendiratta S K 1993 *J. Phys A: Math. Gen.* **26** L145

- [41] ben Avraham D and Köhler J 1992 *Phys. Rev. A* **45** 8358
- [42] Petermann T and Rios P D L 2004 *J. Theor. Biol.* **229** 1–11
- [43] Lipowski A, Ferreira A L, Lipowska D and Gontarek K 2015 *Phys. Rev. E* **92** 052811
- [44] Dorogovtsev S N, Goltsev A V and Mendes J F F 2008 *Rev. Mod. Phys.* **80** 1275
- [45] Vespignani A 2012 *Nat. Phys.* **8** 32
- [46] Pastor-Satorras R and Vespignani A 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 3200
- [47] Mata A S, Ferreira R S and Ferreira S C 2014 *New J. Phys.* **16** 053006
- [48] Ohtsuki H and Nowak M A 2006 *J. Theor. Biol.* **243** 86–97
- [49] Lipowski A, Gontarek K and Lipowska D 2014 *Phys. Rev. E* **91** 062801
- [50] Molloy M and Reed B 1995 *Random Struct. Algorithms* **6** 161
- [51] Dorogovtsev S N, Mendes J F F and Samukhin A N 2001 *Phys. Rev. E* **64** 025101
- [52] Boguná M and Serrano M A 2005 *Phys. Rev. E* **72** 016106
- [53] Serrano M A, Klemm K, Vazquez F, Eguiluz V M and Miguel M S 2009 *J. Stat. Mech.* **P10024**
- [54] Pedro T B, Figueiredo W and Ferreira A L 2015 *Phys. Rev. E* **92** 032131
- [55] Marro J and Dickman R 1999 *Nonequilibrium Phase Transitions in Lattice Models* (Cambridge: Cambridge University Press)

REFERÊNCIAS

- ANDERSON, D. F. A modified next reaction method for simulating chemical systems with time dependent propensities and delays. **arXiv:0708.0370 [q-bio.MN]**, 2008.
- ARGOLO, C. et al. Finite-size scaling analysis of the critical behavior of a general epidemic process in 2d. **Physica A**, 2010.
- BARRAT, A.; BARTHÉLEMY, M.; VESPIGNANI, A. **Dynamical Processes on Complex Networks**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2008.
- BAXTER, R. J. **Exactly Solved Models in Statistical Mechanics**. [S.l.]: London: Academic Press Inc., 1982.
- BINDER, K.; HEERMANN, D. W. **Monte Carlo Simulation in Statistical Physics**. 5th. ed. [S.l.]: Springer-Verlag, Berlin, 2010.
- BLYTHE, S. P.; ANDERSON, R. M. Variable infectiousness in hfv transmission models. **Mathematical Medicine and Biology**, v. 5, n. (3), p. 181, 1988.
- BOGUÑA, M.; SERRANO, M. A. Simulating non-markovian stochastic processes. **arXiv:1310.0926 [cond-mat.dis-nn]**, 2013.
- CHEN, L. et al. Outbreaks of coinfections: The critical role of cooperativity. **EPL (Europhysics Letters)**, v. 104, n. 5, 2013.
- de Oliveira, M. M.; DICKMAN, R. Contact process with sublattice symmetry breaking. **Phys, Rev. E**, v. 84, p. 011125, 2011.
- DOROGOVTSSEV, S.; MENDES, J. **Evolution of Networks From Biological Nets to the Internet and WWW**. [S.l.]: Oxford University Press Inc., 2003.
- DOROGOVTSSEV, S. N. et al. Zero Pearson coefficient for strongly correlated growing trees. **Phys, Rev. E**, v. 81, n. 3, p. 031135, 2010.
- DOROGOVTSSEV, S. N.; MENDES, J. F. F. Anomalous behavior of the contact process with aging. **Phys, Rev. E**, v. 63, p. 046107, 2001.
- DURRETT, R.; GRIFFEATH, D. Supercritical contact processes on Z . **Ann. Probab.**, v. 11, p. 1, 1983.

- ELGART, V.; KAMENEV, A. Classification of phase transitions in reaction-diffusion models. **Phys. Rev. E.**, v. 74, p. 041101, 2006.
- FENICHEL, E. P. et al. Adaptive human behavior in epidemiological models. **PNAS**, v. 108, n. 15, p. 6306, 2010.
- FERREIRA, A. L. et al. Prisoner's dilemma on directed networks. **Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment**, v. 2016, n. 12, p. 123405, 2016.
- FIORE, C. E. Minimal mechanism leading to discontinuous phase transitions for short-range systems with absorbing states. **Phys. Rev. E**, v. 89, p. 022104, 2014.
- GERAMI, R. Criticality and oscillatory behavior in non-Markovian contact process. **Phys. Rev. E**, v. 65, p. 036102, 2002.
- GIBBS, J. W. **Elementary Principles in Statistical Mechanics**. [S.l.]: Yale University Press, 1902.
- GILLESPIE, D. T. A general method for numerically simulating the stochastic time evolution of coupled chemical reactions. **J. Comput. Phys.**, v. 22, p. 403, 1976.
- GILLESPIE, D. T. Exact stochastic simulation of coupled chemical reactions. **J. Phys. Chem.**, v. 81, p. 2340, 1977.
- GRASSBERGER, P. Tricritical directed percolation in 2+1 dimensions. **J. Stat. Mech.** **P01004**, 2006.
- HARRIS, E. T. Contact interactions on a lattice. **Ann. Probab.**, v. 2, p. 969, 1974.
- HENKEL, M.; HINRICHSSEN, H.; LÜBECK, S. **Nonequilibrium phase transitions, vol.1: Absorbing phase transitions**. [S.l.]: Springer, 2008.
- HINRICHSSEN, H. Nonequilibrium critical phenomena and phase transitions into absorbing states. **Adv. Phys.**, v. 49, p. 815, 2000.
- LIGGETT, T. M. **Interacting Particle Systems**. [S.l.]: Springer, 1985.
- LÜBECK, S. Tricritical directed percolation. **J. Stat. Phys.**, v. 123, p. 193, 2006.
- MARRO, J.; DICKMAN, R. **Nonequilibrium Phase Transitions in Lattice Models**. [S.l.]: Cambridge University Press, 1999.

MENG, B.; WEINBERG, W. H. Monte carlo simulations of temperature programmed desorption spectra. **J. Chem. Phys.**, v. 100, p. 5280, 1994.

MENG, B.; WEINBERG, W. H. Dynamical Monte Carlo studies of molecular beam epitaxial growth models: interfacial scaling and morphology. **J. Chem. Phys.**, v. 364, p. 151, 1996.

NEWMAN, M. E. J. Assortative mixing in networks. **Phys. Rev. Lett.**, v. 89, p. 208701, 2002.

NEWMAN, M. E. J. **Networks An Introduction**. [S.l.]: Oxford University Press Inc., 2010.

ÓDOR, G. Universality classes in nonequilibrium lattice systems. **Rev. Mod. Phys.**, v. 76, p. 663, 2004.

ÓDOR, G.; DICKMAN, R. On the absorbing-state phase transition in the one-dimensional triplet creation model. **J. Stat. Mech.**, v. 2009, n. 08, p. 08024, 2009.

OHIRA, T. Delayed stochastic systems. **Phys. Rev. E**, v. 61, p. 1247, 2000.

OLIVEIRA, M. M. de; DICKMAN, R. Phase diagram of the symbiotic two-species contact process. **Phys. Rev. E**, v. 90, n. 3, p. 032120, 2014.

PASTOR-SATORRAS, R. et al. Epidemic processes in complex networks. **Rev. Mod. Phys.**, v. 87, p. 925, 2015.

PEDRO, T. B.; FIGUEIREDO, W.; FERREIRA, A. L. Mean-field theory for the long-range contact process with diffusion. **Phys. Rev. E**, v. 92, p. 032131, 2015.

PEDRO, T. B.; SZORTYKA, M. M.; FIGUEIREDO, W. Two competitive contact processes with local interactions. **J. Stat. Mech.**, v. 05, p. P05016, 2014.

PIANEGONDA, S.; FIORE, C. E. Contact processes with competitive dynamics in bipartite lattices: Effects of distinct interactions. **J. Stat. Mech.**, v. 5, p. P05008, 2014.

PIANEGONDA, S.; FIORE, C. E. Effect of diffusion and competitive dynamics in the simplest discontinuous absorbing transition model. **arXiv:1410.0831v1 [cond-mat.stat-mech]**, 2014.

QIN, S. et al. Effect of memory on the prisoner's dilemma game in a square lattice. **Phys. Rev. E**, v. 78, p. 041129, 2008.

SATULOVSKY, J. E.; TOMÉ, T. Stochastic lattice gas model for a predator-prey system. **Phys. Rev. E**, v. 49(6), p. 5073–79, 1994.

TIJMS, H. C. **A First Course in Stochastic Models**. [S.l.]: Wiley, 2003.

TOMÉ, T.; OLIVEIRA, M. J. de. **Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade**. [S.l.]: EDUSP, 2001.

WATTS, D. J.; STROGATZ, S. H. Collective dynamics of small-world networks. **Nature**, v. 393, p. 440–442, 1998.