

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE
INSTITUTO DE MATEMÁTICA, FÍSICA E ESTATÍSTICA
FÍSICA – BACHARELADO COM ÊNFASE EM FÍSICA MÉDICA

SIMULAÇÕES ESTOCÁSTICAS DE SISTEMAS BIOFÍSICOS E FÍSICO-
QUÍMICOS UTILIZANDO AUTÔMATOS CELULARES

SUZIELLI MARTINS MENDONÇA

RIO GRANDE – RS
2020

SUZIELLI MARTINS MENDONÇA

SIMULAÇÕES ESTOCÁSTICAS DE SISTEMAS BIOFÍSICOS E FÍSICO-
QUÍMICOS UTILIZANDO AUTÔMATOS CELULARES

Trabalho de Conclusão de Curso, Física Bacharelado, submetido por Suzielli Martins Mendonça, junto ao Instituto de Matemática, Estatística e Física da Universidade Federal do Rio Grande, para a obtenção do grau de bacharela em Física com Ênfase em Física Médica.

Orientador: Prof. Dr. Everaldo Arashiro

RIO GRANDE – RS

2020

SUZIELLI MARTINS MENDONÇA

SIMULAÇÕES ESTOCÁSTICAS DE SISTEMAS BIOFÍSICOS E FÍSICO-
QUÍMICOS UTILIZANDO AUTÔMATOS CELULARES

Trabalho de Conclusão de Curso
apresentado à Universidade Federal do Rio
Grande como exigência para a obtenção do
título de bacharela em Física com Ênfase
em Física Médica.

Aprovado em: 07/12/2020

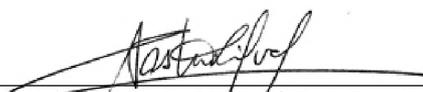
BANCA EXAMINADORA



Prof. Dr. Everaldo Arashiro



Prof. Dr. Matheus Jatkoske Lazo



Prof. Dr. Alcides Volpato Carneiro de Castro e Silva

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente aos meus pais, avós e padrinhos, pelo apoio e incentivo aos estudos; à minha mãe, Kellen, por ser incansável em me acompanhar por toda a minha trajetória, pelo amor, alicerce e exemplo de sempre. Agradeço também ao meu companheiro, Guilherme, por todo carinho e apoio durante o período final deste trabalho.

Ao meu orientador, Everaldo Arashiro, pela paciência e por todos os ensinamentos compartilhados ao longo do meu percurso acadêmico. Por todas as horas de vídeo chamadas, de programação em frente ao computador e pelo suporte de sempre.

A todos os professores do Instituto de Matemática, Física e Estatística (IMEF) que fizeram parte da minha jornada acadêmica, e à Universidade Federal do Rio Grande (FURG), pelo ensino gratuito e de qualidade.

Ao PIBIC/CNPq e PDE/FURG pelo apoio financeiro à pesquisa através de bolsas de fomento.

O cientista não estuda a natureza porque é útil; ele a estuda porque se realiza fazendo isso e porque ela é bela. Se a natureza não fosse bela, não seria suficientemente conhecida, e se não fosse suficientemente conhecida, a vida não valeria a pena.

– Henri Poincaré

RESUMO

As simulações computacionais proporcionam o estudo de diversos tipos de sistemas biofísicos e físico-químicos. Propusemos aqui dois modelos computacionais para descrever dois sistemas dinâmicos e complexos distintos: o primeiro envolvendo a aplicação de autômatos celulares para o estudo da transferência de informação entre neurônios; e o segundo sobre o estudo das transições de fase de um modelo catalítico com efeito de volume excluído. Para o primeiro sistema (neuronal), construímos um modelo bidimensional para averiguar a possível existência de fases oscilantes da atividade neuronal através da simulação de transferência de informação entre neurônios. Implementamos também ao modelo uma rede bidimensional de neurotransmissores, paralela à rede dos neurônios, a fim de prolongar ou diminuir o tempo de ativação destes. Dessa forma, foi possível estudarmos os estados absorventes e ativos do sistema de disparos neuronais. Para o modelo de reação catalítica, implementamos uma rede unidimensional onde partículas grandes e pequenas poderiam ser adsorvidas, obedecendo probabilidades características. A sua dinâmica consistia na adsorção das partículas na rede, a reação entre elas e a dessorção espontânea do par partícula grande-pequena. Obtivemos então a probabilidade crítica em que acontecia a transição de fase do seu estado absorvente para ativo, bem como obtivemos os expoentes críticos dinâmicos que caracterizavam essa transição. Ademais, implementamos a difusão de partículas na rede, e estudamos a influência da migração de partículas nos valores da probabilidade crítica e dos expoentes críticos dinâmicos do modelo.

ABSTRACT

Computer simulations provide the study of several types of biophysical and physical-chemical systems. It was proposed here two computational models to describe two distinct dynamic and complex systems: the first involving the application of cellular automata to study the transfer of information among neurons; and the second one the study of the phase transitions of a catalytic model with an excluded volume effect. For the first one (the neuronal system), a two-dimensional model was built to investigate the possible existence of oscillating phases of neuronal activity through the simulation of information transfer between neurons. A parallel two-dimensional lattice of neurotransmitters was also implemented into the model, in order to prolong or decrease their activation time. Thus, it was possible for us to study the absorbing and active states of the neuronal pulse system. For the catalytic reaction model, a one-dimensional lattice was implemented, where big and small particles could be adsorbed in, obeying its own probabilities. Its dynamics consisted of the adsorption of particles in the lattice, the reaction between them and the spontaneous desorption of the big-small particle pair. Then, the critical probability in which the phase transition took place from its absorbent to active state was obtained, as well as the dynamic critical exponents that characterized this transition were also obtained. In addition, the diffusion of particles in the lattice was implemented, and we were able to study the influence of particle migration on the values of the critical probability and the dynamic critical exponents of the model.

LISTA DE FIGURAS

| | |
|--|----|
| Figura 1 – Autômato celular unidimensional | 2 |
| Figura 2.a – Vizinhança de Neumann | 2 |
| Figura 2.b – Vizinhança de Moore | 2 |
| Figura 3 – Representação da evolução de um autômato celular (esquerda para direita), representado, aqui, pelas regras do “Game of Life”. Célula morta representada pelo quadrado branco e célula viva representada pelo quadrado preto | 3 |
| Figura 4 – Estrutura geral de um neurônio | 6 |
| Figura 5 – Dendrito de um neurônio pós-sináptico – estrutura geral das sinapses | 7 |
| Figura 6 – Transições de fase, onde os números 3, 4 e 5 representam os estados refratário, ativo e inativo, respectivamente | 9 |
| Figura 7 – Regras de interação utilizadas no modelo (primeiros vizinhos) | 10 |
| Figura 8 – Densidades médias de neurônios inativos, ativos e em estado refratário | 12 |
| Figura 9 – Simulação neuronal em $p = 0$, $c = 0.03$ e $r = 0$ | 13 |
| Figura 10 – Simulação neuronal em $p = 0$, $c = 0.17$ e $r = 0$ | 14 |
| Figura 11 – Espectro de potência da série temporal de neurônios ativos | 16 |
| Figura 12 - Espectro de potência da série temporal de neurônios ativos | 16 |
| Figura 13 – Densidades médias de neurônios inativos, ativos e em estado refratário | 17 |
| Figura 14 – Séries temporais de neurônios inativos, ativos e em estado refratário | 18 |
| Figura 15 – Fotografias das configurações da rede | 19 |
| Figura 16 – Espectro de potência das séries temporais | 20 |
| Figura 17 – Densidade de neurônios inativos, ativos e refratários em função da razão de neurotransmissores | 22 |
| Figura 18 – Evolução temporal do preenchimento da rede | 29 |
| Figura 19 – Diagrama de fase da quantidade de sítios ocupados pela probabilidade de absorção de partículas grandes p_d | 29 |
| Figura 20 – Gráfico log-log da evolução temporal da densidade de sítios vazios nas proximidades da probabilidade crítica | 30 |
| Figura 21 – Gráfico log-log da evolução temporal da densidade de sítios vazios com a rede inicialmente vazia na probabilidade crítica | 31 |
| Figura 22 – Gráfico log-log da evolução temporal de sítios vazios com a rede inicialmente preenchida | 32 |

| | |
|--|----|
| Figura 23 – Gráfico log-log da evolução temporal de sítios vazios para F_2 | 33 |
| Figura 24 – Ilustração da posição dos sítios após o sorteio para o início de uma migração | 34 |
| Figura 25 – Configuração de uma rede cujo sítio sorteado (sítio central) é ocupado por uma partícula pequena | 34 |
| Figura 26 – Configuração da rede após a troca | 35 |
| Figura 27 – Configuração da rede após a troca do sítio $L(i)$ com seu vizinho da esquerda | 36 |
| Figura 28 – Segundo exemplo de configuração de rede | 36 |
| Figura 29 – Configuração da rede após a troca | 37 |
| Figura 30 – Situação em que a troca é proibida | 38 |
| Figura 31 – Diagramas de fase com diferentes probabilidades de migração | 40 |
| Figura 32 – Relação entre a probabilidade crítica e a probabilidade de migração | 41 |

LISTA DE TABELAS

| | |
|--|----|
| Tabela 1 – Variação da probabilidade crítica em função da probabilidade de difusão de partículas na rede | 42 |
| Tabela 2 – Variação dos valores dos expoentes críticos dinâmicos do modelo para diferentes probabilidades de difusão | 42 |

SUMÁRIO

| | |
|---|-----------|
| 1. INTRODUÇÃO | 1 |
| 1.a. Autômatos celulares | 1 |
| 2. MODELAGEM NEURONAL..... | 5 |
| 2.a. Neurônios | 6 |
| 2.b. O Modelo: Variação do Modelo Predador-Presa..... | 8 |
| 2.c. Resultados e Discussão – Modelagem Neuronal | 11 |
| 3. MODELAGEM DO SISTEMA CATALÍTICO..... | 24 |
| 3.a. Transição de Fase de Sistemas Fora do Equilíbrio | 24 |
| 3.b. Dinâmica do Modelo..... | 27 |
| 3.c. Implementação da Difusão de Partículas na Rede..... | 33 |
| 4. CONCLUSÕES | 43 |

1. INTRODUÇÃO

Os autômatos celulares são modelos matemáticos discretos no espaço, no tempo e nas variáveis dinâmicas, sendo que sua evolução temporal tem como princípios regras simples. (SILVA; MARTINS, 2003). São basicamente formados por unidades simples interagentes que, ao longo do tempo, ao evoluir sua dinâmica, fazem com que comportamentos complexos sejam emergidos em decorrência dessas influências mútuas. Os autômatos obedecem a regras que dependem do sistema que queremos modelar. Essas regras dependem do estado da própria célula e das células vizinhas, podendo ser determinísticas ou probabilísticas, mas seus estados são definidos e finitos (IAROSZ, 2010).

Modelagens feitas utilizando autômatos celulares são simples, todavia bastante adequadas à descrição de sistemas naturais (WOLFRAM, 1982). A construção desses tipos de modelos é baseada nos princípios de evolução da natureza, e suas regras são aplicadas para todo o sistema modelado.

Com isso, o presente estudo objetiva a análise de dois sistemas complexos, fazendo o uso de autômatos celulares para a sua modelagem e de física estatística para a sua análise. De início, estudaremos o efeito da presença de ruído na transferência de informação entre neurônios. Para tal, faremos uma analogia ao modelo Predador-Presa, com algumas mudanças na sua dinâmica, para uma melhor adequação ao processo de excitação e inibição de neurônios. A partir disso, analisaremos as possíveis fases oscilantes, não-oscilantes e absorventes da modelagem da atividade neuronal. Depois, faremos a modelagem, simulação e análise de uma reação catalítica com efeito de volume excluído, para analisar suas possíveis transições de fase, bem como a qual classe de universalidade o sistema pertence.

1. a. Autômatos Celulares

Sistemas biológicos são sistemas complexos, compostos por inúmeros elementos que interagem de modo que o comportamento agregado não possa ser inferido do comportamento das unidades constituintes isoladamente (OTTAVIANO et al., 2004). Suas características devem ser analisadas a partir de suas propriedades emergentes (propriedades que resultam das interações entre os constituintes do sistema).

Antes da segunda metade do século XX, interessado na autorreprodução de sistemas biológicos, John Von Neumann criou um modelo matemático unidimensional determinístico

denominado autômato celular (AC). Autômatos celulares são modelos matemáticos utilizados no estudo de uma grande variedade de sistemas caracterizados por interações locais, com aplicações nas áreas de física, química e biologia, entre outras (CARVALHO, 2005). Pode-se definir um AC como um conjunto de variáveis discretas dispostas sobre sítios em uma rede, caracterizando assim um espaço também discreto. A evolução temporal de um AC se dá através de uma dinâmica imposta, que atua sobre cada variável da rede levando em consideração apenas a vizinhança mais próxima do sítio no qual está localizada a variável em questão. A dinâmica pode ser dada por regras probabilísticas ou determinísticas. Todos os sítios da rede são atualizados simultaneamente, e cada atualização corresponde a um passo de tempo. Assim, o tempo também é definido de forma discreta. As interações entre os sítios podem ser locais (primeiros ou segundos vizinhos) ou à longa distância. Inicialmente em seus estudos, Neumann utilizou uma rede unidimensional, considerando apenas os vizinhos da direita e esquerda, como mostra a Figura 1, onde $a_{0,0}$ é a célula central do AC.

Figura 1: Autômato celular unidimensional.

| | | |
|------------|-----------|-----------|
| $a_{-1,0}$ | $a_{0,0}$ | $a_{1,0}$ |
|------------|-----------|-----------|

Fonte: a autora.

Na Figura 2.a temos a ilustração de um autômato celular bidimensional, considerando os primeiros vizinhos (conhecida como vizinhança de Neumann), bem como na Figura 2.b temos a ilustração de um autômato celular bidimensional, levando em consideração os segundos vizinhos (conhecida como vizinhança de Moore), onde $a_{0,0}$ é a célula central do AC.

Figura 2.a.: Vizinhança de Neumann.

| | | |
|------------|------------|-----------|
| | $a_{0,1}$ | |
| $a_{-1,0}$ | $a_{0,0}$ | $a_{1,0}$ |
| | $a_{0,-1}$ | |

Fonte: a autora.

Figura 2.b.: Vizinhança de Moore.

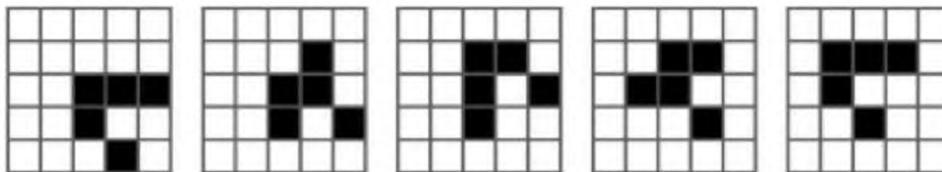
| | | |
|-------------|------------|------------|
| $a_{-1,1}$ | $a_{0,1}$ | $a_{1,1}$ |
| $a_{-1,0}$ | $a_{0,0}$ | $a_{1,0}$ |
| $a_{-1,-1}$ | $a_{0,-1}$ | $a_{1,-1}$ |

Fonte: a autora.

Uma maneira de compreender o funcionamento dos autômatos celulares é analisando o modelo “Game of Life” (na interpretação literal, Jogo da Vida), proposta por Conway (GARDNER, 1970). Este modelo reproduz alterações nos grupos de seres vivos, sendo composto por uma rede retangular onde cada sítio (ou célula) pode ter dois estados: vivo (1) ou morto (0). O estado seguinte do sistema como um todo depende do estado de cada sítio e dos estados dos seus vizinhos. Foram definidas quatro regras principais:

- Uma célula viva (1) com menos de dois vizinhos vivos (1) morre por solidão.
- Uma célula viva (1) com mais de três vizinhos vivos (1) morre por superlotação.
- Uma célula morta (0) com exatos três vizinhos vivos (1) se torna uma célula viva (1).
- Uma célula viva (1) com dois ou três vizinhos vivos (1) continua no mesmo estado para a próxima geração.

Figura 3: Representação da evolução de um autômato celular (esquerda para a direita), representado, aqui, pelas regras do "Game of Life". Célula morta representada pelo quadrado branco e célula viva representada pelo quadrado preto.



Fonte: KENSEN, 2001.

O modelo supracitado pode começar com qualquer configuração inicial de células vivas e mortas. A tendência de evolução deste modelo é ou à morte de todas as células ou a um padrão estável. Apesar de possuir regras simples, os resultados visuais obtidos são complexos e pequenas alterações nas condições iniciais do sistema podem gerar grandes alterações de comportamento (WOLFRAM, 1986).

Stephen Wolfram (WOLFRAM, 1994), teve o mérito de ser o primeiro a demonstrar que um autômato celular pode exibir comportamento complexo ainda que obedeça regras locais simples. Sua classificação demonstra que tais regras podem levar espécie de auto-organização, o que contribuiu inicialmente para a compreensão de fenômenos de formação espontânea de padrões.

- Primeira classe: a evolução temporal do AC leva todos os seus sítios a um mesmo valor de estado (estado homogêneo).

- Segunda classe: a evolução temporal do AC leva a um estado estável e periódico no tempo, mas sem homogeneidade espacial (todos sítios atingem um mesmo valor apenas em determinados intervalos de tempo).

- Terceira classe: a evolução temporal do AC leva a um estado desordenado, sem padrão reconhecível no espaço e tempo.

- Quarta classe: a evolução temporal do AC gera estruturas complexas sem evolução previsível, podendo haver então a propagação destas estruturas, criação ou aniquilação delas mesmas ou de novas estruturas. Esta evolução pode permanecer por longos períodos de tempo, até que seja finalizada.

Mas foram Domany e Kinzel (DOMANY e KINZEL, 1984) que introduziram os autômatos celulares probabilísticos. O modelo possui regras locais de curto alcance, tal como o modelo de Ising, mas diferencia-se exatamente por possuir uma transição de fase em valores específicos de distância. O autômato celular de Domany-Kinzel (DKCA), dependendo dos valores de suas probabilidades, pode apresentar, no regime estacionário, tanto um estado absorvente (onde todos os sítios estão “congelados” no estado 0) quanto pode permanecer indefinidamente com uma densidade de sítios ativos no estado 1 . Desse modo, o DKCA possui um único estado absorvente, e seu diagrama de fases possui uma linha de transição separando as fases congelada e ativa. Há uma conjectura afirmando que modelos com um estado absorvente devem pertencer genericamente à classe de percolação direcionada (DP) (MARTINS, 1981).

2. MODELAGEM NEURONAL

O cérebro, componente do sistema nervoso central, tem como principal célula o neurônio, que é submetido a diversos estímulos elétricos, reagindo de alguma forma a cada um deles (MELOTTI, 2009). Entretanto, é muito difícil fazer uma análise global desse sistema, levando em consideração todas suas sinapses físicas e químicas, a partir de equações diferenciais ordinárias e parciais. Através da utilização de métodos estatísticos e dinâmicas probabilísticas, é possível incorporar os aspectos fundamentais do sistema em questão na interação entre os seus constituintes, de forma a modelar probabilidades de estados e analisar sua evolução.

Uma habilidade fundamental para a sobrevivência de qualquer organismo é a capacidade de detectar estímulos que forneçam informações sobre aspectos relevantes do ambiente que o cerca (HILL et al., 2013). Cada grupo de organismos conta com diferentes mecanismos para detectar estímulos relacionados aos parâmetros relevantes, processar as informações obtidas e modificar seus comportamentos de acordo. Em animais, pelo menos na grande maioria dos grupos, os estímulos do meio são detectados por meio de sistemas sensoriais para diferentes modalidades de estímulo (HILL et al., 2013). Por exemplo, mesmo um animal extremamente simples, como o verme microscópico *Caenorhabditis elegans*, possui na superfície de seu corpo diferentes tipos de proteínas receptoras, algumas capazes de detectar estímulos mecânicos (como esbarrar em uma fonte de alimento), outras capazes de detectar estímulos químicos (como encontrar moléculas de vermífugo no meio) (BARGMAN, 2006; GOODMAN, 2006). Animais com maior grau de complexidade apresentam até mesmo órgãos sensoriais especializados, como as estruturas relacionadas à visão (olhos) e audição (ouvidos) em quase todos os vertebrados (HILL et al., 2013). Na maioria dos animais, a tarefa de processar a informação obtida pelos sistemas sensoriais e usá-la para modificar o comportamento cabe ao sistema nervoso e, em vertebrados e alguns invertebrados, o cérebro lida com a maior parte desse processamento de informação (KANDEL e HUDSPETH, 2013).

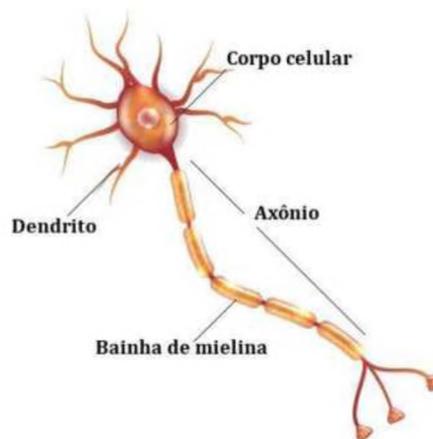
O cérebro recebe informações dos diferentes sistemas sensoriais e processa essas informações em múltiplos níveis (da representação de simples formas geométricas ao rosto de um ente querido), analisando e integrando as informações sensoriais para formar representações abstratas do ambiente que cerca o animal (AMARAL, 2013). Essas representações, juntamente com informações sobre o estado interno e as motivações do animal (fome, sede, libido, etc.) são usadas para planejar sequências coordenadas de contrações musculares - ou seja, comportamentos (HILL et al., 2013). Evidentemente, todo esse processamento realizado pelo

cérebro exige, em inúmeras ocasiões, a transferência de informação. Essa transferência ocorre não apenas entre diferentes áreas do cérebro, mas também entre as unidades computacionais básicas dentro de cada área: os neurônios (KANDEL et al., 2013).

2.a. Neurônios

Os neurônios são o principal (porém não o único) tipo celular do sistema nervoso. A estrutura geral de um neurônio é ilustrada na Figura 4 e inclui o corpo celular onde está situado o núcleo e dois tipos de projeções: os dendritos e os axônios.

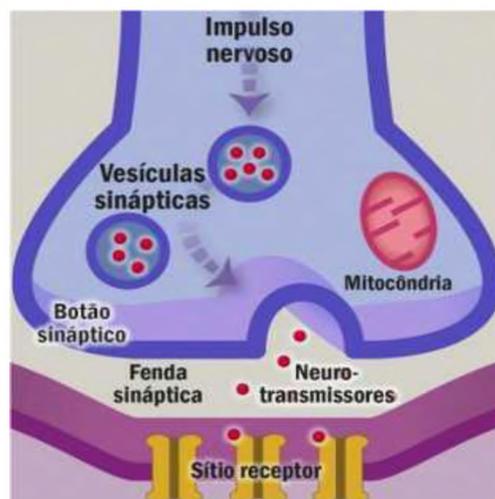
Figura 4: Estrutura geral de um neurônio.



Fonte: KANDEL et al, 2013

A membrana celular dos neurônios possui inúmeras proteínas capazes de transportar íons. Esse transporte constante de íons leva à concentração diferencial de cargas negativas na parte interna da membrana e cargas positivas na parte externa da membrana, gerando assim um potencial elétrico conhecido como potencial de membrana. Por meio de variações no potencial de membrana os neurônios são capazes de conduzir impulsos elétricos e essa capacidade permite a transferência de informação entre diferentes neurônios (KANDEL et al., 2013). A transferência de informação se dá por meio das sinapses (Figura 5), que são pontos em que o axônio de um neurônio encontra o dendrito de outro neurônio.

Figura 5: Dendrito de um neurônio pós sináptico - estrutura geral das sinapses.



Fonte: JAVITCH, 2013.

Quando um impulso elétrico (chamado de potencial de ação) é conduzido pela membrana de um axônio e chega à sinapse, ocorre a liberação de substâncias químicas conhecidas como neurotransmissores (Figura 5). Esses neurotransmissores se ligam a proteínas no dendrito no próximo neurônio, podendo facilitar ou dificultar a geração de um potencial de ação por esse neurônio, dependendo do tipo de neurotransmissor em questão (SCHWARTZ e JAVITCH, 2013). Os dois principais neurotransmissores usados no cérebro são o glutamato, que “excita” os neurônios, isto é, estimula a geração de potenciais de ação, e o ácido gama aminobutírico (GABA), que “inibe” os neurônios, que dificulta a geração de um potencial de ação (SCHWARTZ e JAVITCH, 2013).

A importância do equilíbrio entre excitação e inibição é reforçada pelo fato de que diversos fatores podem afetar esse equilíbrio. Por exemplo, em humanos o grau de excitabilidade de várias regiões do cérebro aumenta com número de horas que o indivíduo passa desperto (HUBER et al., 2013). Além disso, o equilíbrio também é afetado por fatores como o envelhecimento (OLIVIERO et al., 2006) e patologias como a demência, derrame, epilepsia, mal de Alzheimer, esclerose lateral amiotrófica, enxaqueca e diversas desordens de movimento (BADAWY et al., 2012).

Para estudar o equilíbrio entre excitação e inibição, foi criado um modelo de autômato celular (AC) (WOLFRAM, 1994) onde em cada sítio pode haver a presença de um neurônio excitatório, o qual estimula neurônios com os quais faz sinapse liberando glutamato, ou um neurônio inibitório, que inibe outros neurônios liberando GABA nas suas sinapses

(SCHWARTZ e JAVITCH, 2013). Para que a informação possa ser processada de maneira adequada, é necessário um equilíbrio entre excitação e inibição. Isso se dá porque muita inibição dificulta que sinais contendo informações relevantes sejam passados adiante e muita excitação faz que com qualquer sinal, com ou sem informação relevante, seja passado adiante (BORST e THEURNISSEN, 1999).

2.b. O Modelo: Variação do Modelo Predador-Presa

Apesar do avanço de diversas técnicas analíticas hoje disponíveis, as simulações numéricas, por sua vez, manifestam-se como parceiras fundamentais no avanço das técnicas para investigação de transições de fase em sistemas complexos. Recentemente, a alta velocidade de processamento e o acesso fácil aos computadores permitiram que as simulações numéricas se tornassem ferramentas rotineiras em modelagem de sistemas dinâmicos. Além da sua relativa simplicidade de aplicação, as simulações computacionais ainda dispõem de uma habilidade única para ilustrar e iluminar relações conceitualmente básicas. Em partículas, no estudo de fenômenos críticos, podem obter informações mais detalhadas e precisas do que as disponíveis por sistemas investigados em experimentos reais.

Na presente problemática será feito o uso da modelagem computacional e da análise físico-estatística. Sendo assim, o uso de computadores de alto desempenho se torna fundamental, utilizando no presente trabalho os *clusters* de Ouro Preto (<http://zerberus.ufop.br/>) e o do Laboratório de Computação Científica do Instituto de Matemática, Física e Estatística da Universidade Federal do Rio Grande (<http://www.pgfisica.furg.br/index.php/laboratorios/laboratorio-de-computacao-cientifica>).

O modelo de autômato celular bidimensional a ser utilizado no presente trabalho consiste em uma variação do modelo Predador-Presa (CARVALHO, 2005). No modelo do presente trabalho, é atribuída uma variável dinâmica n_i que representa a ocupação de uma célula por um *neurônio ativo*, por um *neurônio inativo*, por um *neurônio na fase refratária* que virá a ser inativo novamente, assim:

- $\eta_i = 5$, se o sítio i estiver ocupado por um neurônio inativo;
- $\eta_i = 4$, se o sítio i estiver ocupado por um neurônio ativo;
- $\eta_i = 3$, se o sítio i estiver ocupado por um neurônio no estado refratário.

E ainda, além desses estados o modelo poderá ter estados fixos μ_i cujos parâmetros

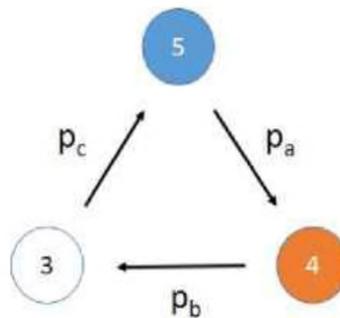
aumentam ou diminuem o tempo de ativação do neurônio. No presente caso denominaremos:

- $\mu_i = 1$, se o sítio i estiver ocupado por um neurotransmissor que diminui o tempo de ativação do neurônio;
- $\mu_i = -1$, se o sítio i estiver ocupado por um neurotransmissor que aumenta o tempo de ativação do neurônio.

Para tal modelo, consideremos que as variáveis estocásticas estão associadas às células de uma rede retangular de comprimento L isotrópica, a contribuição da interação entre dois estados é a mesma independentemente da sua orientação, e com condições periódicas de contorno.

Cada célula pode assumir somente um estado em cada passo de tempo, e as transições de estado temporais seguem regras probabilísticas.

Figura 6: Transições de fase, onde os números 3, 4 e 5 representam os estados refratário, ativo e inativo, respectivamente.



Fonte: a autora.

A configuração da rede inicial é aleatória, com uma porcentagem igual de sítios ocupados por neurônios inativos ativos, inativos e refratário.

As regras de interação, neste caso, são locais. Sendo assim, cada sítio interage apenas com seus primeiros vizinhos (*direita, esquerda, cima e baixo*), como na Figura 7. Sendo assim, o estado do sítio $a_{0,0}$ em um determinado passo de tempo dependerá apenas do estado dos seus primeiros vizinhos no passo de tempo anterior.

Figura 7: Regras de interação utilizadas no modelo (primeiros vizinhos).

| | | |
|------------|------------|-----------|
| | $a_{0,1}$ | |
| $a_{-1,0}$ | $a_{0,0}$ | $a_{1,0}$ |
| | $a_{0,-1}$ | |

Fonte: a autora.

Abaixo encontra-se a descrição das probabilidades de transição por sítio $\omega_i(\eta'_i|\eta_i)$ para cada caso, onde η_i representa o estado do sítio i no tempo t e η'_i representa o estado do sítio i no tempo seguinte ($t + 1$):

- $\eta_i = 5$: se um sítio estiver ocupado por um neurônio inativo (5), esse sítio i será ocupado por um neurônio ativo (4) com uma probabilidade p_a , que é proporcional ao número de primeiros vizinhos também ocupados por neurônios ativos, como ilustrado na Equação (1), onde o somatório em k indica a soma sobre todos os primeiros vizinhos do sítio i em um passo de tempo t .

$$\omega_i(4|5) = \frac{1}{4} p_a \sum_k \delta(\eta_k, 4) \quad (1)$$

- $\eta_i = 4$: se um sítio estiver ocupado por um neurônio ativo (4) ele irá para o estado refratário (3) com a probabilidade p_b , que é proporcional ao número de primeiros vizinhos também ocupados por neurônios refratários, como ilustrado na Equação (2), onde o somatório em k indica a soma sobre todos os primeiros vizinhos do sítio i em um passo de tempo t . Ao termo catalítico, foi adicionado uma taxa r , que dependendo da presença de neurotransmissores (μ) na posição de atualização que aumente ou que diminua o tempo de ativação, maior ou menor será a possibilidade de um neurônio ativo (4) ir para o estado refratário (3).

$$\omega_i(3|4) = \frac{1}{4} p_b \sum_k \delta(\eta_k, 3) + r\mu \quad (2)$$

Limitamos a equação (2) à situação em que $0 \leq \omega_i(3|4) \leq 1$.

- $\eta_i = 3$: se um sítio estiver ocupado por um neurônio em seu estado refratário, ele poderá se tornar inativo obedecendo a uma probabilidade p_c no passo de tempo seguinte ($t + 1$), como é mostrado na equação abaixo:

$$\omega_i(5|3) = p_c \quad (3)$$

Para o modelo descrito, a fim de facilitar as simulações as probabilidades foram limitadas no plano em que $p_a + p_b + p_c = 1$. Utilizamos ainda a parametrização representada pelas equações (4), (5) e (6):

$$p_a = \frac{1 - c}{2} - p \quad (4)$$

$$p_b = \frac{1 - c}{2} + p \quad (5)$$

$$p_c = c \quad (6)$$

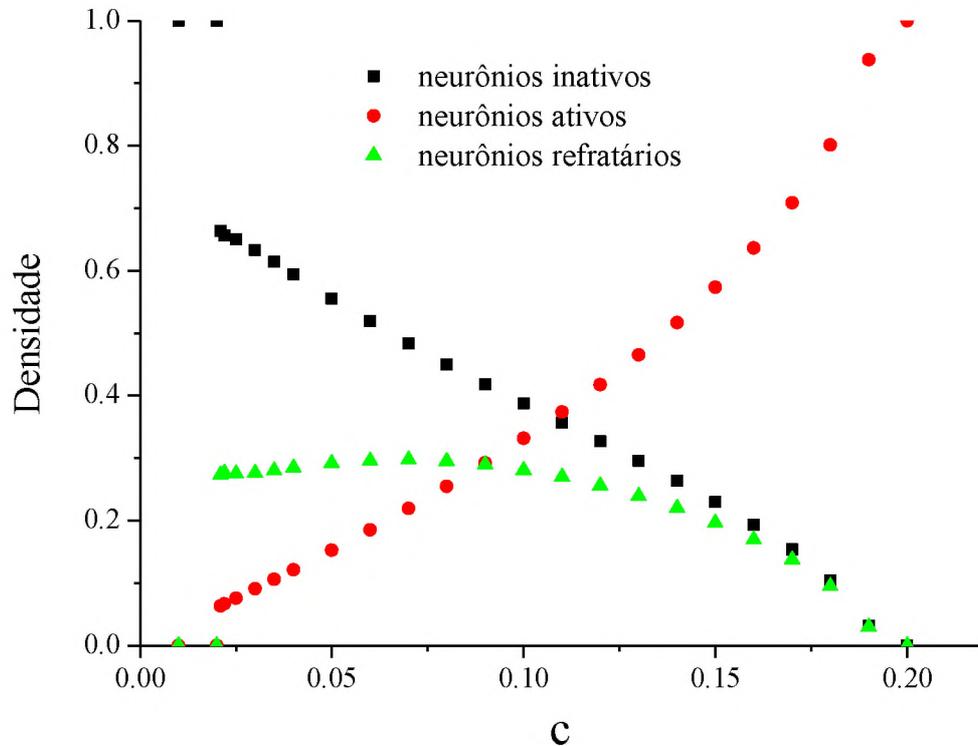
e, conseqüentemente, os novos limites de ação dos parâmetros p e c são $-0,5 \leq p \leq 0,5$ e $0 \leq c \leq (1-2|p|)$. Observe que quando $p = 0$ representa que $p_a = p_b$.

2.c. Resultados e Discussão – Modelagem Neuronal

Depois de modelado o sistema, fizemos algumas simulações com o intuito de encontrar oscilações na dinâmica de disparos neuronais. Primeiramente realizamos simulações para uma rede 160×160 com o modelo fixado para $p = 0$, ou seja, quando $p_a = p_b$, sem a atuação dos neurotransmissores. Para esse caso obtivemos o diagrama de fase da densidade dos estados dos neurônios em função da probabilidade c , apresentado abaixo na Figura 8.

É possível observar na Figura 8 a existência de estados ativos, com a coexistências de neurônios inativos, ativos e refratários, além de dois estados absorventes. Para valores mais baixos de c o sistema evolui para estado absorvente de neurônios inativos e para valores mais altos o sistema evolui para estados absorventes de neurônios ativos.

Figura 8: Densidades médias de neurônio inativos, ativos e em estado refratário versus c para $p = 0$. Simulações para uma rede 160×160 . Observamos estados ativos e dois estados absorventes. Para valores mais baixos de c o sistema evolui para estado absorvente de neurônios inativos e, para valores mais altos, o sistema evolui para estados absorventes de neurônios ativos.



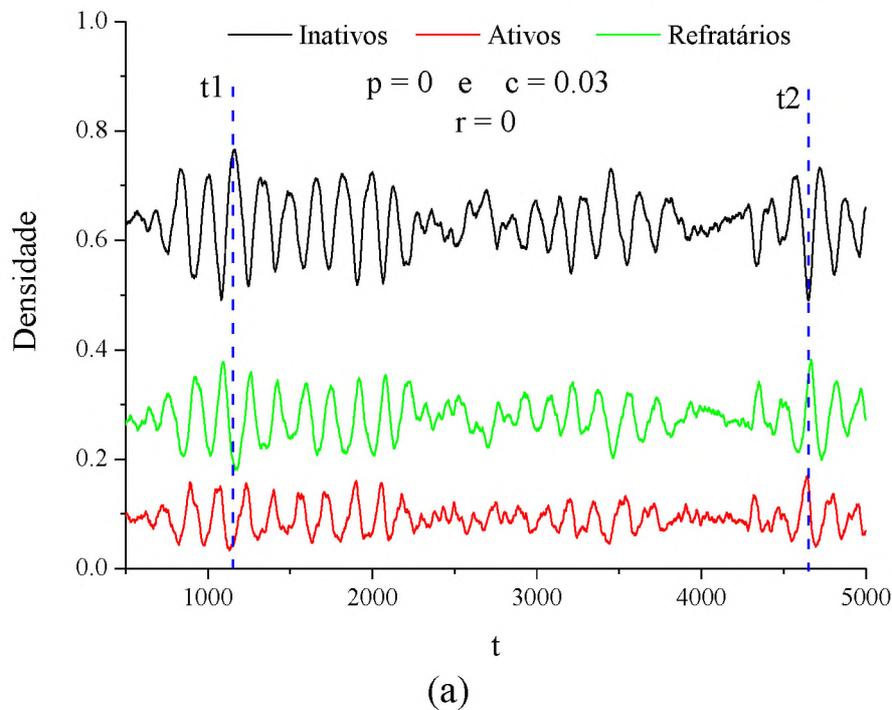
Fonte: a autora.

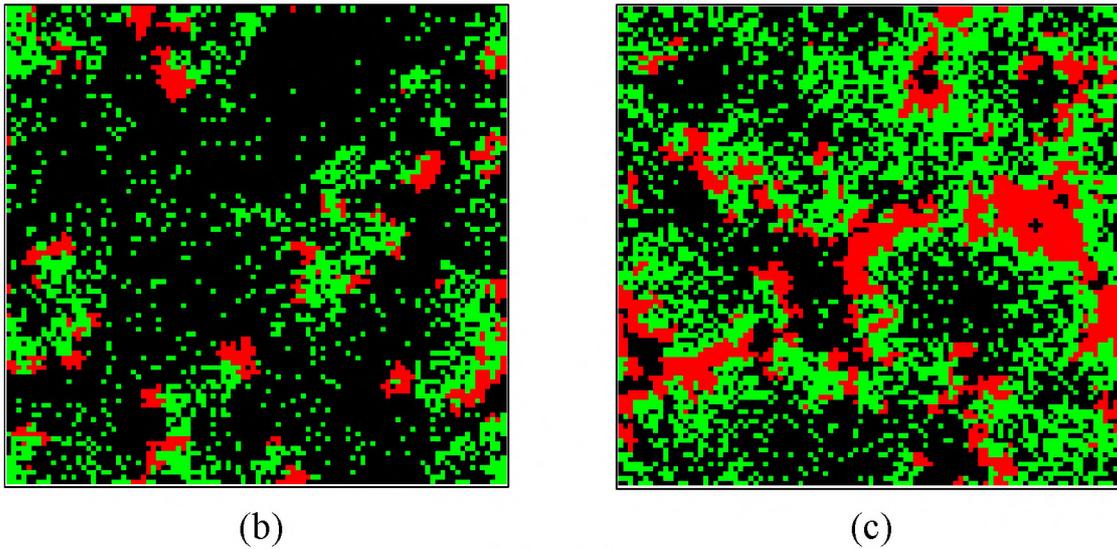
Temos então duas grandes regiões no diagrama de fase supracitado: ativa e absorvente. Na região ativa existem dois tipos de coexistência: uma com processo oscilante e outra sem oscilação, o que é possível de se observar nas Figuras 9a e 10a, com as séries temporais das densidades dos neurônios inativos, ativos e refratários. Na Figura 9, quando temos como parâmetros $p = 0$ e $c = 0.03$, é possível observar nitidamente o processo oscilante da coexistência; já na Figura 10, com parâmetros $p = 0$ e $c = 0.17$, pode ser apenas notada uma variação estocástica.

Para melhor entendermos as oscilações na Figura 9a, foram escolhidos dois momentos marcados com linhas tracejadas em azul, $t_1 = 1165$ (baixa densidade de neurônios ativos) e $t_2 = 4071$ (alta densidade de neurônios ativos), bem como nestes tempos foram capturadas as configurações da rede de neurônios, como ilustram as Figuras 8b e 8c. Percebemos a formação de clusters e uma diferença nítida da alta densidade de neurônios ativos para o de baixa densidade de neurônios ativos.

Um processo semelhante foi feito para a Figura 10a, onde também dois momentos foram marcados com linhas tracejadas em azul, $t_1 = 1249$ quando temos uma maior densidade de neurônios ativos, e em $t_2 = 4421$, com uma menor densidade de neurônios ativos. Estes tempos t_1 e t_2 foram então escolhidos para realizar a captura da configuração da rede de neurônios mostrada nas Figuras 10b e 10c. Fazendo um comparativo quantitativo e visual entre as Figuras 8 e 9, notamos que não há uma grande variação da configuração da rede nas Figuras 10b e 10c, em contrapartida ao que tínhamos constatado a respeito das Figuras 9a e 9b.

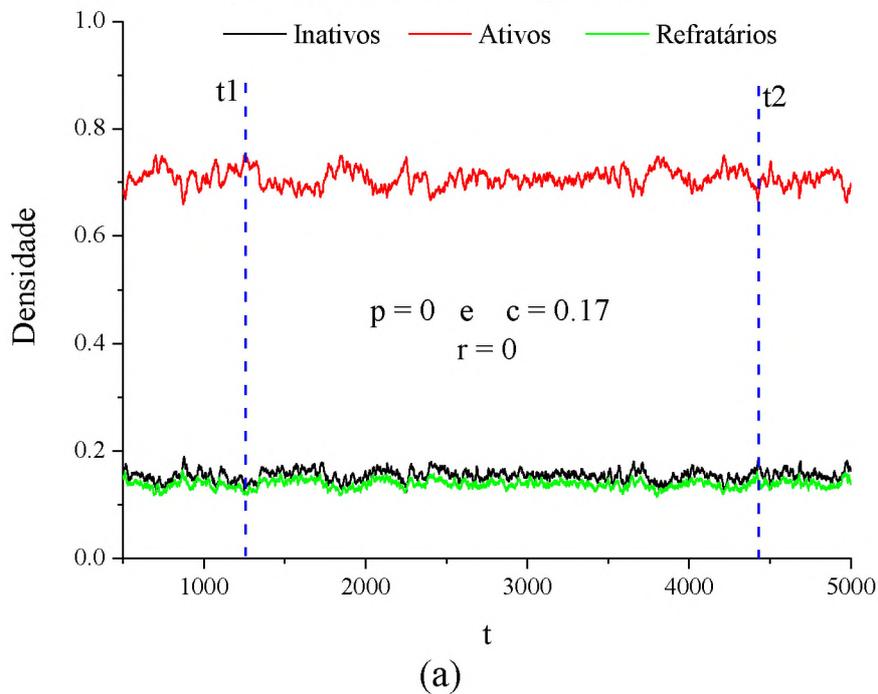
Figura 9: Simulação neuronal em $p = 0$, $c = 0.03$ e $r = 0$. (a) Série temporal da simulação onde é possível observar a coexistência entre neurônio inativos, ativos e refratários com processo de oscilação. as linhas tracejadas em azul estão os tempos $t_1 = 1165$ (baixa densidade de neurônios ativos) e $t_2 = 4071$ (alta densidade de neurônios ativos), escolhidos para se fazer fotografias da configuração da rede. (b) Fotografia da configuração da rede no tempo $t_1 = 1165$. (c) Fotografia da configuração da rede no tempo $t_2 = 4076$. As cores preta, vermelha e verde representam respectivamente os neurônios inativos, ativos e refratários.



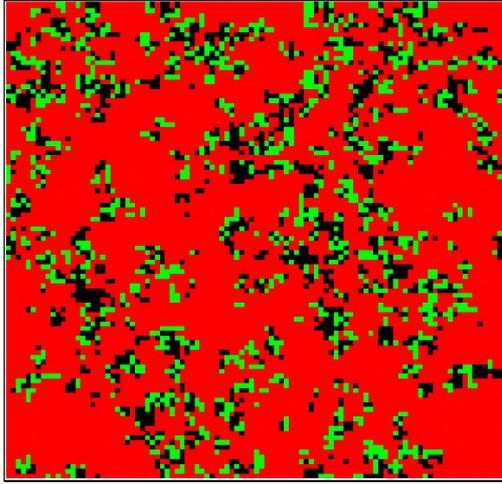


Fonte: a autora.

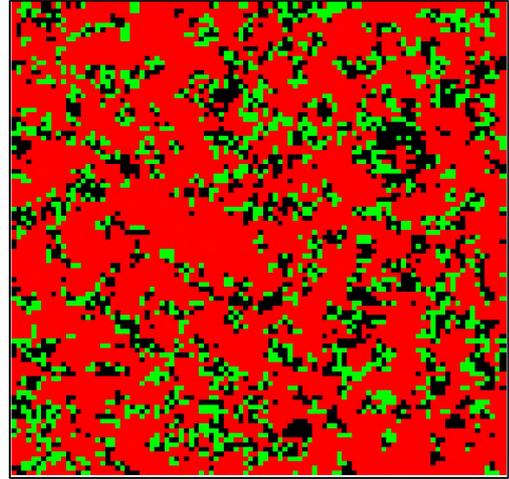
Figura 10: Simulação neuronal em $p = 0$, $c = 0.17$ e $r = 0$. (a) Série temporal onde é possível evidenciar a coexistência entre neurônio inativos, ativos e refratários, mas sem oscilações, tendo apenas variações estocásticas. Na figura, as linhas tracejadas em azul estão os tempos $t_1 = 1249$ (alta densidade de neurônios ativos) e $t_2 = 4421$ (baixa densidade de neurônios ativos), escolhidos para se fazer fotografias da configuração da rede. (b) Fotografia da configuração da rede no tempo $t_1 = 1249$. (c) Fotografia da configuração da rede no tempo $t_2 = 4421$. As cores preta, vermelha e verde representam respectivamente os neurônios inativos, ativos e refratários.



(a)



(b)



(c)

Fonte: a autora.

Para verificar quantitativamente a existência de uma frequência característica na coexistência entre os estados neuronais fizemos o uso de espectro de potência de séries temporais, descrito pela equação (7):

$$P(\omega_k) = \frac{1}{M} \left| \sum_{l=0}^{M-1} x_l e^{i\frac{2\pi}{M}kl} \right|^2, \quad k = 0, \dots, M-1 \quad (7)$$

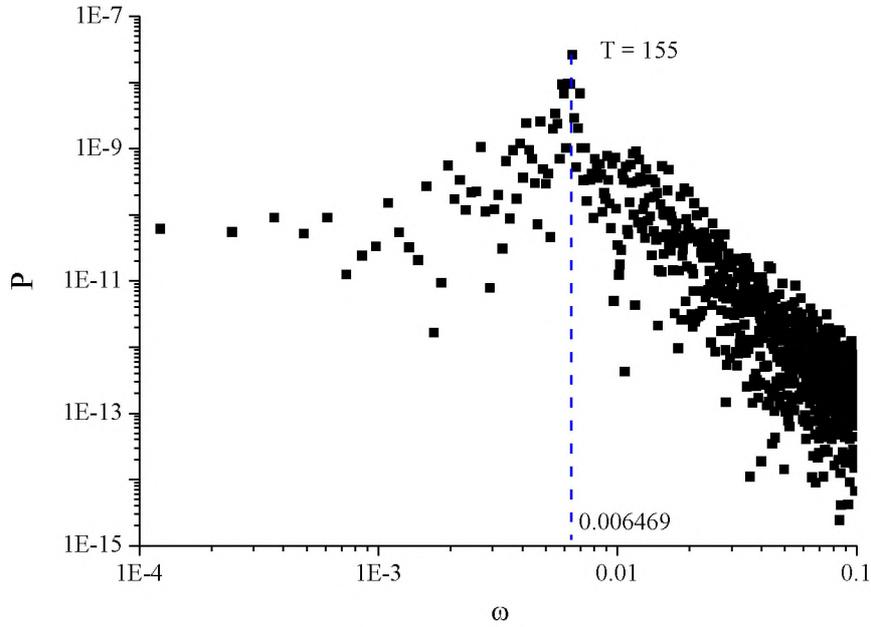
onde x_l representa as densidades no passo l de uma série temporal específica, podemos obter $P(\omega_k)$ a partir da transformada de Fourier discreta.

Os espectros de potências característicos de uma região oscilante e de uma região não oscilante estão mostrados nas Figuras 11 e 12 para o comportamento das densidades de neurônios ativos como função do tempo dos gráficos representados pelas Figuras 9 e 10. Para séries temporais associadas a neurônios inativos e refratários, os espectros de potência têm comportamento semelhante ao dos neurônios ativos, e por isso não inseridos.

Mesmo não podendo relacionarmos diretamente o espectro de potências com a amplitude, maiores amplitudes estão associadas a picos maiores. E a presença de um pico no espectro de potência que distingue uma série temporal de comportamento periódico de outra de comportamento sem periodicidade. Na Figura 11 podemos observar que as flutuações associadas ao comportamento oscilatório na série temporal produzem um pico que se sobressai

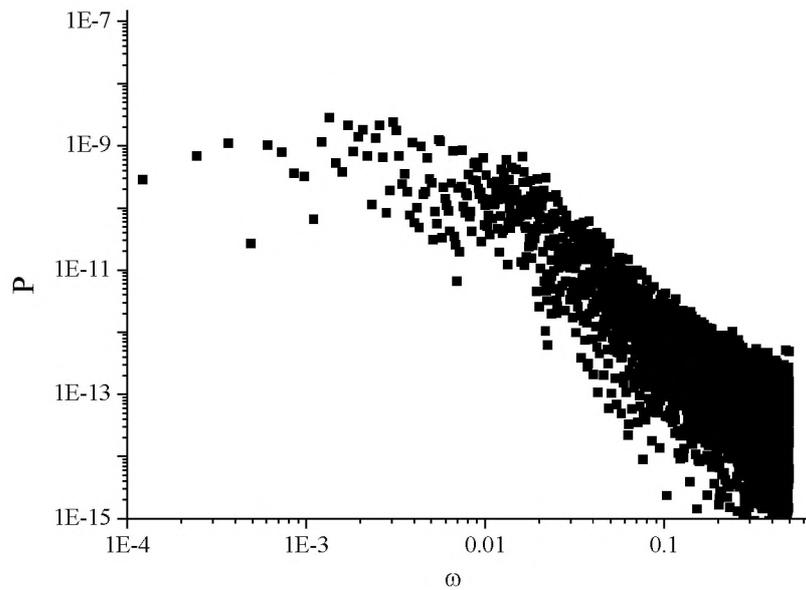
às flutuações estocásticas, e o seu período de oscilação é $T \cong 155$. Já a Figura 12 não apresenta nenhum pico, caracterizando então um caráter apenas estocástico das flutuações da série.

Figura 11: Espectro de potência da série temporal de neurônios ativos da figura 9a. O pico no espectro de potência em $\omega = 0.006469$ ($T = 155$) indica o processo de oscilação.



Fonte: a autora.

Figura 12: Espectro de potência da série temporal de neurônios ativos da figura 10a. A ausência de um pico no espectro de potência indica um comportamento não periódico.

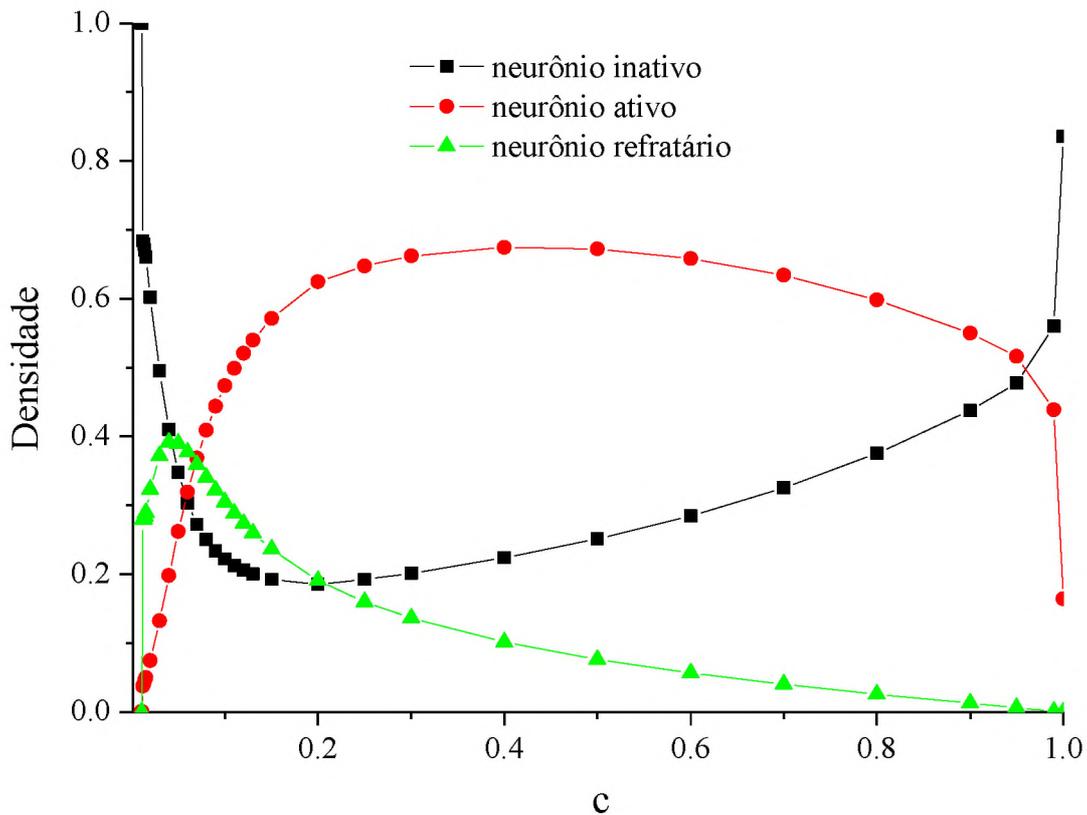


Fonte: a autora.

Até aqui, como o parâmetro r foi considerado igual a zero, não tínhamos a influência dos neurotransmissores no modelo. Para avaliar se a ação dos neurotransmissores afetava a dinâmica do modelo, fizemos o diagrama de fases fixando novamente $p = 0$, ou seja, quando $p_a = p_b$, e variando a probabilidade c , mas agora com intensidade de ação dos neurotransmissores em $r = 0.20$ e a razão de neurotransmissores $r_\mu = 0.5$, ou seja, com igual proporção de neurotransmissores que aumentam ou diminuem o tempo de ativação do neurônio.

O resultado apresentado na Figura 13 mostra que, de forma contrária à de quando havia apenas o processo catalítico como influência na probabilidade de o neurônio ativo passar para o estado refratário, agora o estado absorvente de neurônios ativos não é mais alcançado para c mais elevado. Havendo apenas o estado absorvente de neurônios inativos para $c \leq 0,10$. Além disso, há um aumento significativo da região ativa neuronal.

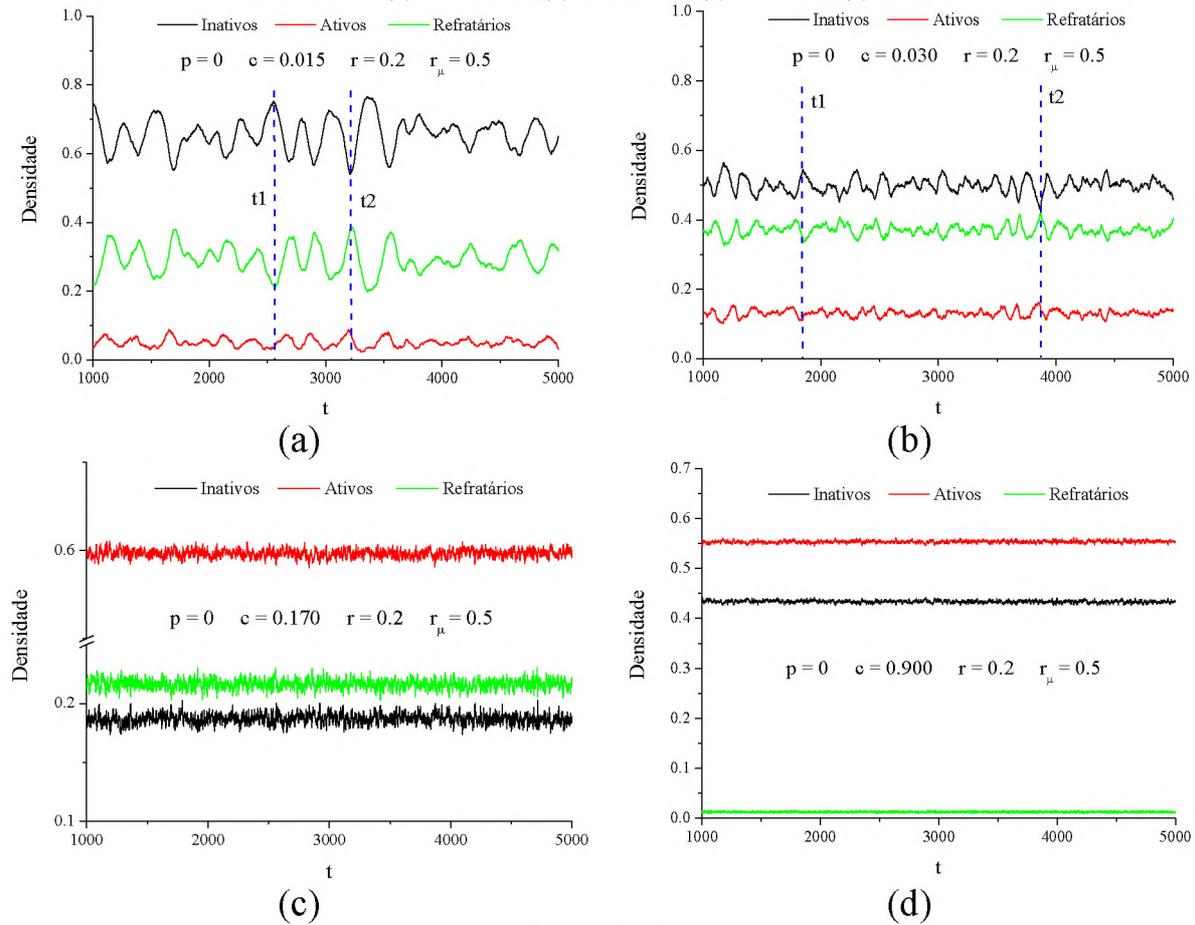
Figura 13: Densidades médias de neurônio inativos, ativos e estado refratário versus c para $p = 0$, $r = 0.2$ e $r_\mu = 0.5$. Simulações para uma rede 160×160 . Observamos que a região ativa com a coexistência dos três estados dos neurônios é maior quando comparada ao da Figura 7, além da inexistência de um estado absorvente de neurônios ativos para c mais elevado.



Fonte: a autora.

Com um aumento significativo da região ativa da Figura 13, escolhemos alguns pontos ($c = 0.015; 0.030; 0.170$ e 0.90) para analisar as séries temporais dos neurônios inativos, ativos e refratários, é mostrado na Figura 14. Mais uma vez é possível observar a existência de dois tipos de coexistência, uma com processo oscilante (Figuras 14a e 14b) e a outra sem periodicidade (Figuras 14c e 14d).

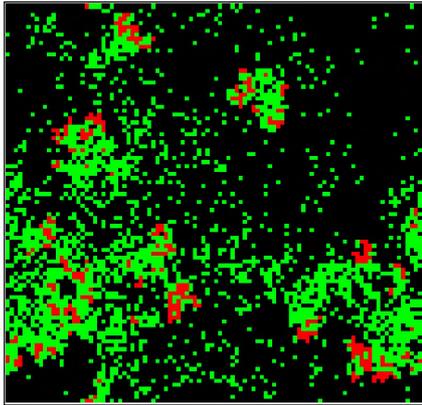
Figura 14. Séries temporais de neurônios ativos, inativos e refratários para $p = 0$, $r = 0,2$ e $r_\mu = 0,5$ para uma rede 100×100 . (a) $c = 0.015$; (b) $c = 0.030$; (c) $c = 0.17$; (d) $c = 0.90$.



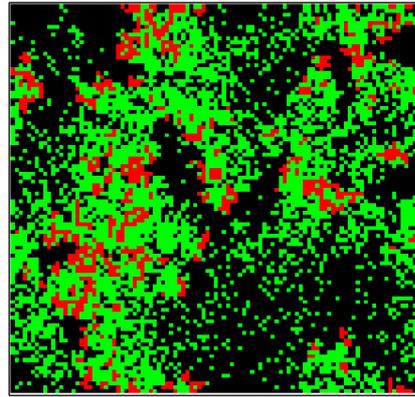
Fonte: a autora.

Determinadas as fases oscilantes (e não oscilantes) para cada um dos casos supracitados, veremos as configurações da rede em algumas situações. Na Figura 15 são apresentadas as fotografias em momentos específicos das configurações da rede das séries temporais apresentadas na Figura 14. Nas Figuras 14a e 14b foram escolhidos momentos com baixa e alta densidade de sítios ativos; já nas Figuras 14c e 14d foram escolhidos tempos arbitrários para as fotografias, pelo fato de as séries temporais correspondentes possuírem apenas variações estocásticas.

Figura 15. Fotografias das configurações da rede em $p = 0$, $r = 0$, $r_\mu = 0,5$. As cores preta, vermelha e verde representam respectivamente os neurônios inativos, ativos e refratários. (a) Quando $c = 0,015$ em dois momentos distintos escolhidos da série temporal da figura 14a quando $t_1 = 2550$ (baixa densidade de neurônios ativos) e $t_2 = 3206$ (alta densidade de neurônios ativos). (b) Quando $c = 0,030$ em dois momentos distintos escolhidos da série temporal da figura 14b quando $t_1 = 1845$ (menor densidade de neurônios ativos) e $t_2 = 3862$ (maior densidade de neurônios ativos). Para (c) para $c = 0.17$. (d) para $c = 0.90$ o tempo escolhido nas séries temporais respectivamente das figuras 14c e 14d foi de $t = 2000$.

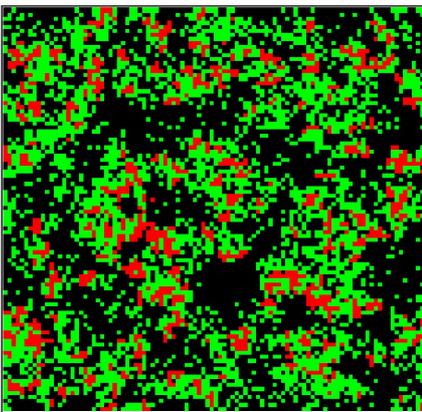


$t_1 = 2550$

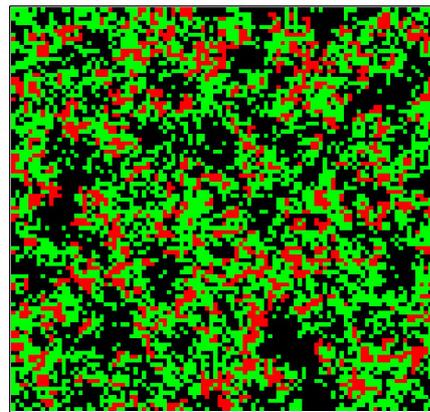


$t_2 = 3206$

(a)

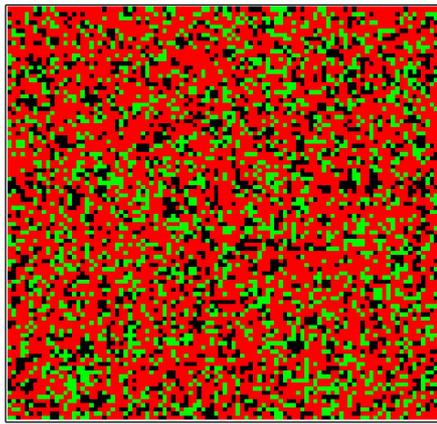


$t_1 = 1845$



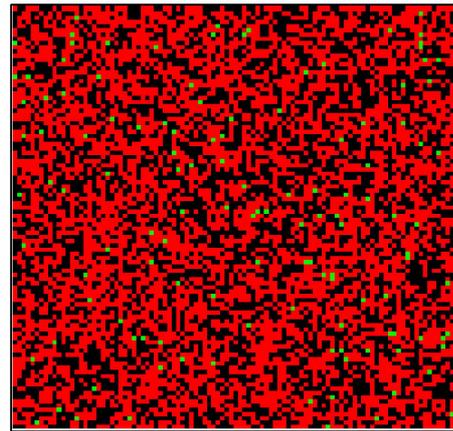
$t_2 = 3862$

(b)



t = 2000

(c)



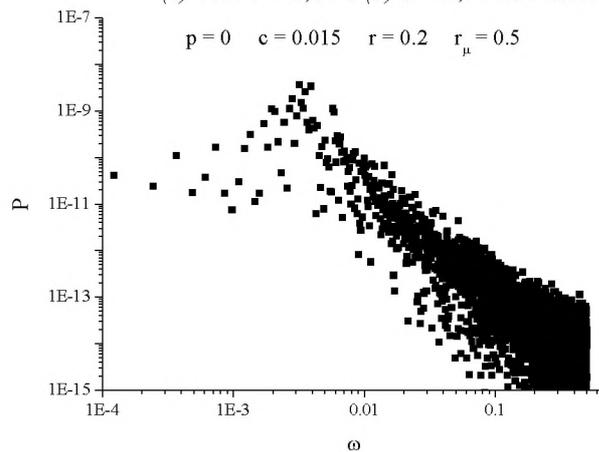
t = 2000

(d)

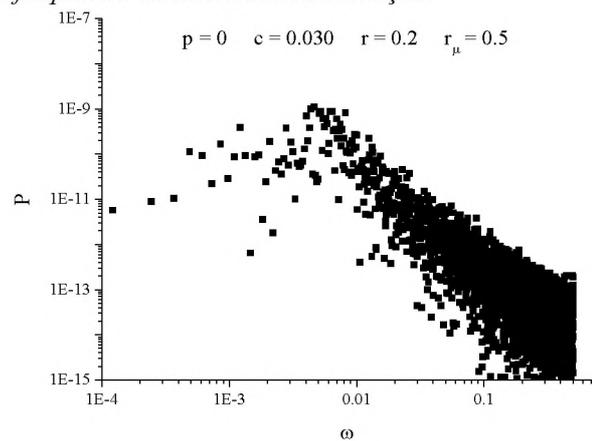
Fonte: a autora.

Além da análise das séries temporais dos neurônios ativos, inativos e refratários e das suas respectivas configurações de rede, representados pelas Figuras 14 e 15, respectivamente, estão apresentados nas Figuras 16 os espectros de potência das séries temporais dos neurônios ativos (apresentadas na Figura 14). Nas Figuras 16a e 16b percebemos a existência de um pico, ou seja, com uma frequência característica de oscilação, sendo respectivamente de 0.00317 ($T = 315.5$) e 0.00463 ($T = 216$). Já para as Figuras 16c e 16d os espectros de potência não apresentam uma frequência característica.

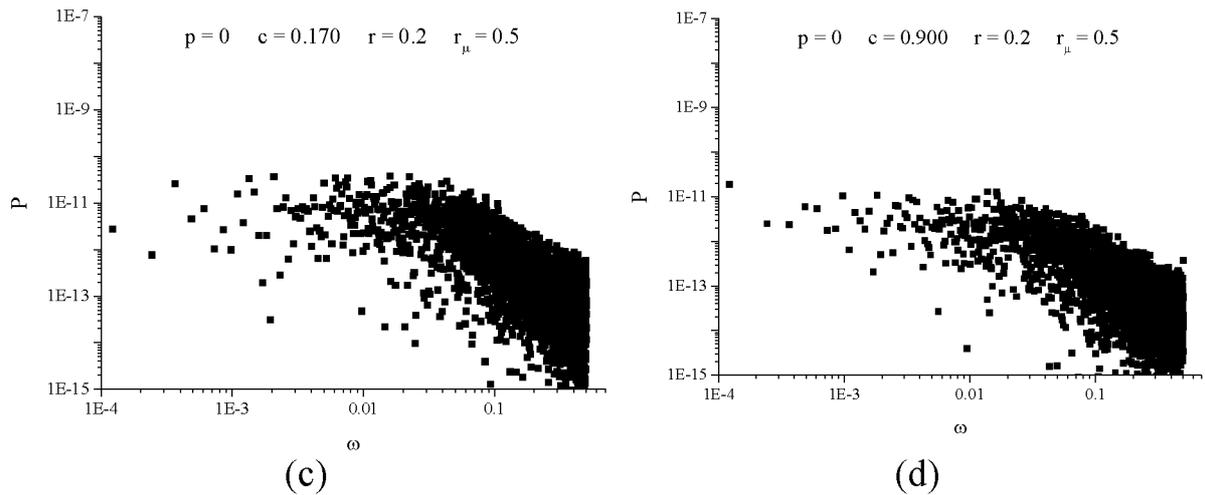
Figura 16 – Espectro de potência das séries temporais dos neurônios ativos da figura 14. (a) $c = 0,017$ o pico encontra-se em $\omega = 0,00317$ ($T = 315,5$). (b) $c = 0,030$ o pico encontra-se em $\omega = 0,00463$ ($T = 216$). Para (c) com $c = 0,17$ e (d) $c = 0,90$ não há uma frequência característica de oscilação.



(a)



(b)

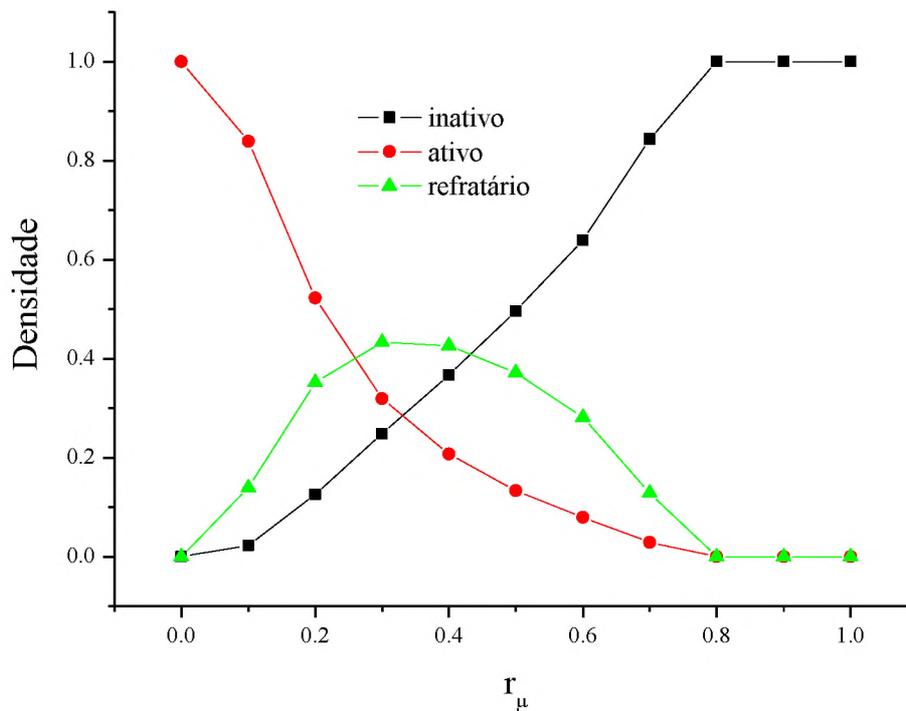


Fonte: a autora.

Até o dado momento, todas as simulações foram feitas sem nenhuma variação do parâmetro r_μ , o que faz com que nos questionemos a respeito da sua influência sobre a densidade de neurônios ativos na rede. Pensando nisso, construímos um gráfico (Figura 17) de densidades médias de neurônios inativos, ativos e refratários variando a razão de neurotransmissores r_μ de 0 até 1, onde $r_\mu = 0$ implica que só existem neurotransmissores que aumentam o tempo de ativação e $r_\mu = 1$ que só existem neurotransmissores que diminuem o tempo de ativação. As simulações foram executadas para uma rede 160×160 tendo como parâmetros fixos $p = 0$, $c = 0.3$ e a intensidade de ação dos neurotransmissores em $r = 0.2$.

Observamos que, de fato, com o aumento de r_μ (aumento correspondente a um maior número de neurotransmissores que diminuem o tempo de ativação dos neurônios), a densidade de neurônios ativos diminui, havendo então um estado absorvente de neurônios inativos a partir de $r_\mu = 0.8$.

Figura 17: Densidade de neurônios inativos, ativos e refratários em função da razão de neurotransmissores r_μ , que aumentam ou diminuem o tempo de ativação. Os parâmetros fixos da simulação foram de $p = 0$, $c = 0.3$ e a intensidade de ação dos neurotransmissores em $r = 0.2$.



Fonte: a autora.

Apresentamos um autômato celular probabilístico que reproduz o mecanismo de ativação e inativação de um sistema de neurônios. A interação ocorreu apenas entre os primeiros vizinhos de uma rede regular. Verificamos que as regras de interação consideradas (saída espontânea dos neurônios do estado refratário e a ativação e inativação catalítica dos neurônios) são importantes na manutenção de um sistema de neurônios, gerando inclusive estados oscilantes, estados estes que puderam ser mapeados através de espectros de potência das séries temporais.

Dependendo das probabilidades de p e c , observamos estados ativos e/ou estados absorventes. Para valores mais baixos de c , o sistema evolui para estados absorventes de neurônios inativos e, para valores mais altos, o sistema evolui para estados absorventes de neurônios ativos. Essa última situação pode mudar ao adicionamos a ação de neurotransmissores que aumentam ou diminuem o tempo de ativação. Pensando nisso, foram feitas simulações para

$r = 0.2$ e $r_{\mu} = 0.5$, onde o estado absorvente de neurônios ativos nunca é alcançado, ocasionando também um aumento da região ativa neuronal.

Como sugestão para trabalhos futuros temos o estudo sistematizado da intensidade de ação dos neurotransmissores e da razão de neurotransmissores (que aumentam ou diminuem o tempo de ativação dos neurônios), na influência dos processos oscilantes de coexistência. Também seria pertinente a investigação da análise das transições críticas do modelo, assim como a obtenção dos expoentes críticos dinâmicos, em especial com a variação da intensidade de ação dos neurotransmissores.

3. MODELAGEM DO SISTEMA CATALÍTICO

Processos catalíticos acontecem em uma interface entre duas fases distintas, como por exemplo o processo que envolve gases reagentes na superfície de um sólido catalítico. Um modelo muito estudado para a oxidação catalítica do dióxido de carbono foi introduzido por Ziff, Gulari and Barshard (ZIFF, GULARI, BARSHARD, 1986), e foi denominado modelo ZGB. Neste modelo, a superfície catalítica é representada por uma rede quadrada, onde moléculas de oxigênio e monóxido de oxigênio são adsorvidas.

3.a. Transição de Fase de Sistemas Fora do Equilíbrio

O estudo de sistemas complexos fora do equilíbrio tem sido amplamente estudado ao longo das últimas décadas e, com isso, tem-se obtido um grande progresso no seu entendimento. Em relação à transição de fase de sistemas em equilíbrio, a dos sistemas fora do equilíbrio é muito menos entendida, por conta da falta de estrutura geral (HUA, ZHU, MA, 2004). No caso de transições de fase contínuas, em um ponto crítico, uma vasta gama de correlações é estabelecida dentro do sistema e uma série de expoentes críticos pode ser definida para descrever o comportamento crítico de algumas propriedades termodinâmicas (DA COSTA; FIGUEIREDO, 2003).

Este estudo foi muito empregado para estudar o modelo de oxidação catalítica do dióxido de carbono introduzido por Ziff, Gulari e Barshard, (ZGB) (MEAKIN, SCALAPINO, 1987). Neste modelo de reação catalítica, a superfície catalítica é representada por uma rede quadrada, onde moléculas de oxigênio e monóxido de oxigênio, podem ser adsorvidas nos sítios da rede. O modelo apresenta uma transição de fase para um estado absorvente, onde o sistema fica repleto de partículas grandes ou pequenas, e o comportamento crítico deste pertence à mesma classe de universalidade da de percolação direcionada. Através de simulações de Monte Carlo, foi possível encontrar os expoentes críticos estáticos do modelo.

Durante muito tempo acreditou-se não haver um comportamento universal nos sistemas críticos dinâmicos não termalizados, ou seja, quando as configurações do sistema ainda não obedecem à distribuição de Boltzmann. E por isso os expoentes críticos eram calculados numericamente somente a partir da geração de configurações no equilíbrio. O problema é que, nas vizinhanças do ponto crítico, as correlações são muito intensas o que torna cada vez mais oneroso obter as configurações descorrelacionadas para fazer as médias termodinâmicas. Esse

foi um dos principais motivos para o interesse pelos trabalhos de Huse (HUSE, 1989) e Janssen (JANSSEN, 1989) que descobriram um comportamento universal muito antes que o sistema pudesse atingir o equilíbrio. Tudo se passa como se o tempo funcionasse como o comprimento, na teoria de escala para sistemas finitos. Esse novo enfoque, que tem sido chamado na literatura de simulação em tempos curtos, abriu um leque de alternativas antes não disponíveis para o estudo das propriedades dinâmicas.

Para sistemas com estados absorventes, essa descoberta pode ser traduzida na seguinte relação de escala geral (HINRICHSSEN, 2000), dada pela equação (7):

$$\langle \rho(t) \rangle \sim t^{-\beta/\nu_{\parallel}} f \left((p - p_c) t^{1/\nu_{\parallel}}, t^{d/z} L^{-d}, \rho_0 t^{\beta/\nu_{\parallel} + \theta} \right) \quad (7)$$

onde $\rho(t) = \rho_V(t)$, a densidade de sítios vazios, é o parâmetro de ordem do modelo que pode ser definido como

$$\rho(t) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L s_i, \quad (8)$$

onde $s_i = 1$ (0) quando os sítios i são vazios (preenchidos com a partícula pequena ou com a partícula grande). Na equação 7, $\langle \rho(t) \rangle$ significa a média das diferentes evoluções do sistema, d é a dimensão do sistema, L é o tamanho linear da rede e t é o tempo. Os expoentes β , ν_{\parallel} e ν_{\perp} são os expoentes estáticos, $z = \nu_{\parallel}/\nu_{\perp}$ e $\theta = \frac{d}{z} - \frac{2\beta}{\nu_{\parallel}}$ são os expoentes dinâmicos, e p_c é o ponto crítico, no caso do modelo a probabilidade de absorção das partículas grandes (p_g).

No primeiro, todos os sítios disponíveis da rede estarão inicialmente vazios e espera-se que a densidade de sítios vazios decaia algebricamente como está representado na Equação (9):

$$\langle \rho(t) \rangle \sim t^{-\beta/\nu_{\parallel}} = t^{-\delta}. \quad (9)$$

Já quando a simulação começa com todos os sítios da rede repleta por partículas pequenas, exceto por um único sítio vazio escolhido aleatoriamente, a equação 7, conduza a

$$\langle \rho(t) \rangle \sim \rho_0 t^{\frac{d}{z} - 2\frac{\beta}{\nu_{\parallel}}} = \rho_0 t^{\theta}. \quad (10)$$

Portanto, em escala de log log, as inclinações das leis de potência dadas pelas duas equações anteriores são respectivamente os $\beta/\nu_{\parallel} = \delta$ e θ .

O expoente crítico dinâmico z pode ser encontrado independentemente quando se combina as duas condições iniciais, levando ao seguinte comportamento da lei de potência descrita na Equação (11):

$$F_2(t) = \frac{\langle \rho \rangle_{\rho_0 = \frac{1}{L}}(t)}{\langle \rho \rangle_{\rho_0 = 1}^2(t)} \sim t^{\frac{d}{z}}. \quad (11)$$

Além disso, o expoente ν_{\parallel} também pode ser encontrado independentemente quando se considera a derivada

$$P(t) = \left. \frac{\partial \ln \langle \rho \rangle}{\partial p} \right|_{p=p_c} \quad (12)$$

que leva à Equação (13)

$$P(t) = t^{\frac{1}{\nu_{\parallel}}} \quad (13)$$

A partir dessas leis de potência, é possível obter os expoentes $z, \theta, \beta, \nu_{\parallel}, \nu_{\perp}$ separadamente. Essas leis de potência são observadas apenas quando o sistema está no ponto crítico. Portanto, para utilizá-la precisamos primeiramente determinar as probabilidades críticas do modelo.

No presente trabalho, é apresentado um modelo mais simples do que o proposto por Ziff, Gulari and Barshard, mas não simplista, construído em uma dimensão. A partir da simulação de um modelo proposto por Park (PARK et. al., 1993) para uma reação catalítica com efeito de volume excluído, determinamos os expoentes críticos dinâmicos para o modelo, em duas situações: a primeira, onde a dinâmica do modelo consistia somente na adsorção, reação e dessorção de partículas pequenas e grandes na rede; e a segunda, onde a difusão de partículas foi adicionada ao modelo original.

3.b. Dinâmica do Modelo

A dinâmica do modelo consiste em uma rede unidimensional com um determinado número de sítios L para se alocar partículas. Esses sítios possuem um tamanho uniforme em toda a rede e podem adsorver partículas pequena ou grandes, aqui representadas pelas letras P e G respectivamente.

A simulação foi dividida em tempos, onde em cada tempo havia n sorteios. O número de sorteios foi estabelecido como sendo n igual ao número de sítios na rede. Um sorteio é a escolha de que partícula, P ou G, será adsorvida em qual sítio da rede. A escolha da partícula é estabelecida através de uma probabilidade,

$$p_g = 1 - p_p \quad (14)$$

onde p_p e p_g são respectivamente as probabilidades das partículas pequenas ou grandes de serem escolhidas.

As partículas pequenas P, por serem menores que o tamanho dos sítios da rede, podem ser adsorvidas por quaisquer sítios que estejam vazios. Já as partículas grandes G, são ligeiramente maiores que o tamanho dos sítios e, por isso, para que um sítio possa adsorvê-la, os sítios vizinhos precisam, necessariamente conter uma partícula pequena P ou estar vazios.

Na rede, cada partícula adsorvida reage exclusivamente com seus sítios adjacentes, da direita e da esquerda. Quando dois sítios vizinhos são preenchidos por uma partícula pequena e uma grande, há a dessorção espontânea do par partícula pequena-grande, através de um processo determinístico. Após o processo de dessorção, os dois sítios, que antes se encontravam ocupados pelas partículas grande e pequena, ficam vazios, possibilitando então a adsorção de novas partículas nesses espaços. Os processos dinâmicos da rede estão representados pelas seguintes relações:



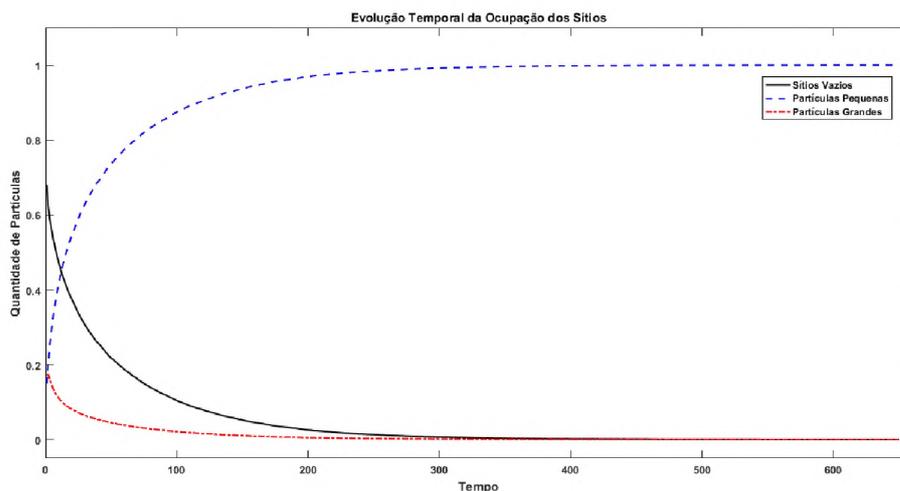
Onde:

- G : representa uma partícula grande;
- S' : representa o espaço vazio da rede que pode ser ocupado por uma partícula grande (espaço equivalente a dois sítios adjacentes vazios);
- p_g : representa a probabilidade de uma partícula grande ser adsorvida em um sítio S' ;
- G_S : representa uma partícula grande adsorvida em um sítio S' ;
- P : representa uma partícula pequena;
- S : representa o espaço vazio da rede que pode ser ocupado por uma partícula pequena (espaço equivalente a um sítio vazio);
- p_p : representa a probabilidade de uma partícula pequena ser adsorvida em um sítio S ;
- P_S : representa uma partícula pequena adsorvida em um sítio S ;
- PG : representa o par partícula pequena-grande, que é formado por duas partículas (uma grande e uma pequena) adsorvidas em dois sítios imediatamente vizinhos da rede.

A equação (15) representa o processo de adsorção de uma partícula grande no espaço vazio S' , a partir de sua respectiva probabilidade de adsorção; a expressão (16) representa um processo semelhante, mas em relação a uma partícula pequena, a ser adsorvida na rede a partir da sua respectiva probabilidade de adsorção. Já a expressão (17) representa o processo determinístico de dessorção do par partícula pequena-grande, que deixa os sítios S e S' vazios, totalizando ao final da reação três sítios adjacentes vazios na rede.

Modelada a dinâmica do modelo, foram feitas simulações com uma rede inicialmente vazia de tamanho 500, 650 passos de tempo, 500 amostras e probabilidade $p_g = 0,6$. A evolução temporal da quantidade de sítios ocupados por partículas pequenas e grandes e de sítios vazios pode ser vista na Figura 18:

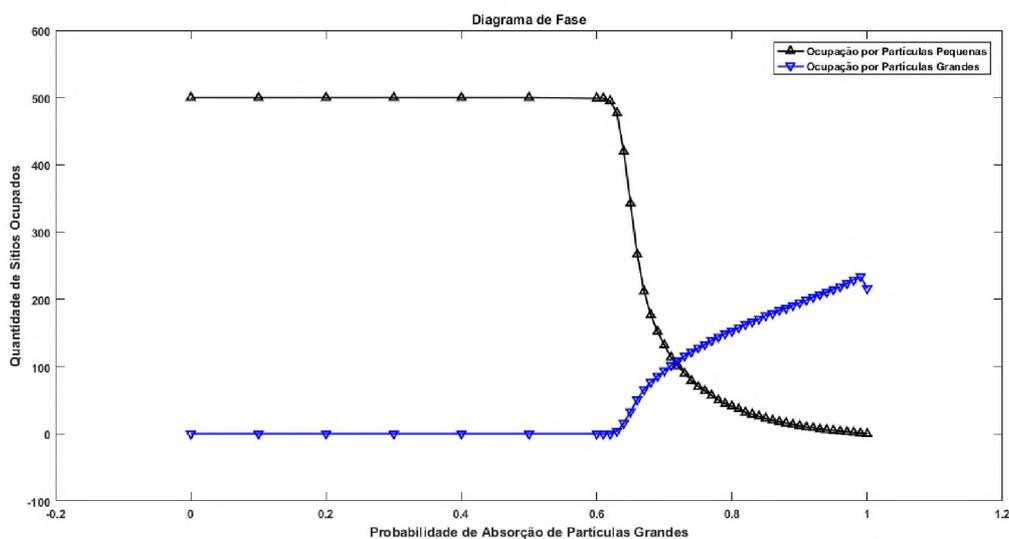
Figura 18: Evolução temporal do preenchimento da rede.



Fonte: a autora.

A partir disto, foram feitas simulações com as mesmas condições iniciais de tamanho de rede, passos de tempo e amostras, variando-se somente a probabilidade de adsorção de partículas grandes (p_g) na rede. Esta probabilidade de adsorção foi variada de 0 (probabilidade mínima de adsorção de partículas grandes na rede) até 1 (probabilidade máxima de preenchimento da rede por partículas grandes), como mostra o diagrama de fase da Figura 19. Nela, o eixo y mostra a quantidade de sítios da rede ocupados por partículas pequenas (curva em preto) e por partículas grandes (curva em azul), bem como o eixo x mostra os valores da probabilidade p_g .

Figura 19: Diagrama de fase da ocupação de sítios pela probabilidade de absorção de partículas grandes p_d .

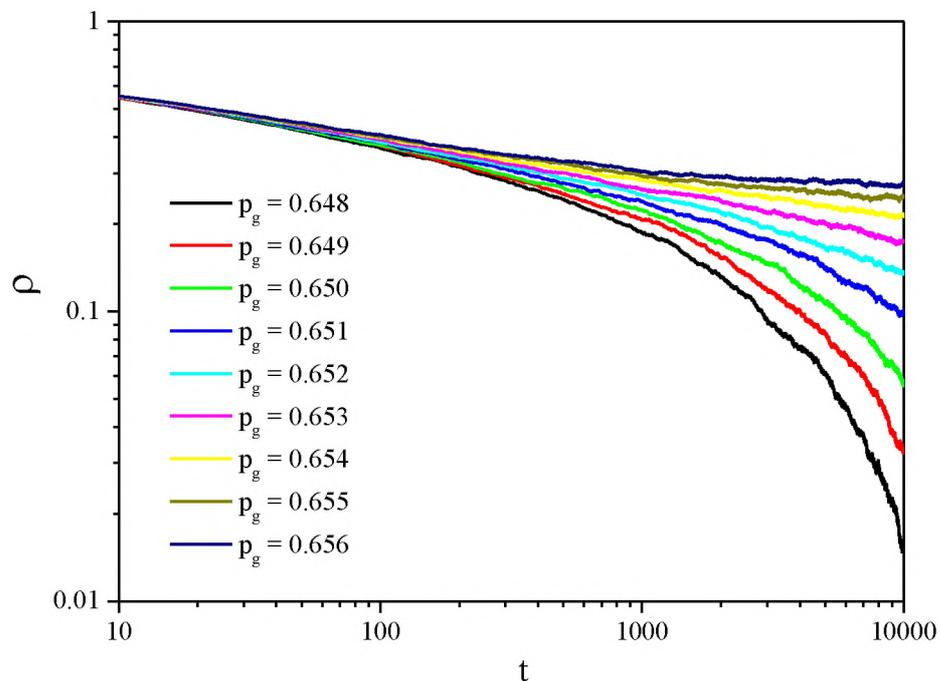


Fonte: a autora.

A partir da figura acima (Figura 19), podemos notar que há uma transição de fase para as condições supracitadas do modelo, e que esta se dá entre as probabilidades $p_g = 0.6$ e $p_g = 0.8$. A partir do momento em que sabemos em qual probabilidade a transição de fase ocorre, é possível então obtermos os expoentes críticos do modelo.

Mas como saberemos então quais as probabilidades críticas do modelo, ou seja, o valor exato em que ocorre a sua transição de fase? Segundo Lübeck (LÜBECK, 2008), o comportamento da curva da quantidade de sítios (no nosso caso, vazios) ao longo do tempo em um gráfico do tipo log-log, é diferente quando a simulação é feita abaixo da probabilidade crítica, acima dela ou exatamente nela. Quando temos a curva resultante da simulação feita na probabilidade crítica, onde $p_g = p_c$, esta é uma curva linear. A Figura 20 mostra diferentes curvas da quantidade de sítios vazios ao longo do tempo em escala log-log, a partir de simulações com a probabilidade p_g nas proximidades da probabilidade crítica p_c , bem como quando $p_g = p_c \approx 0.653$.

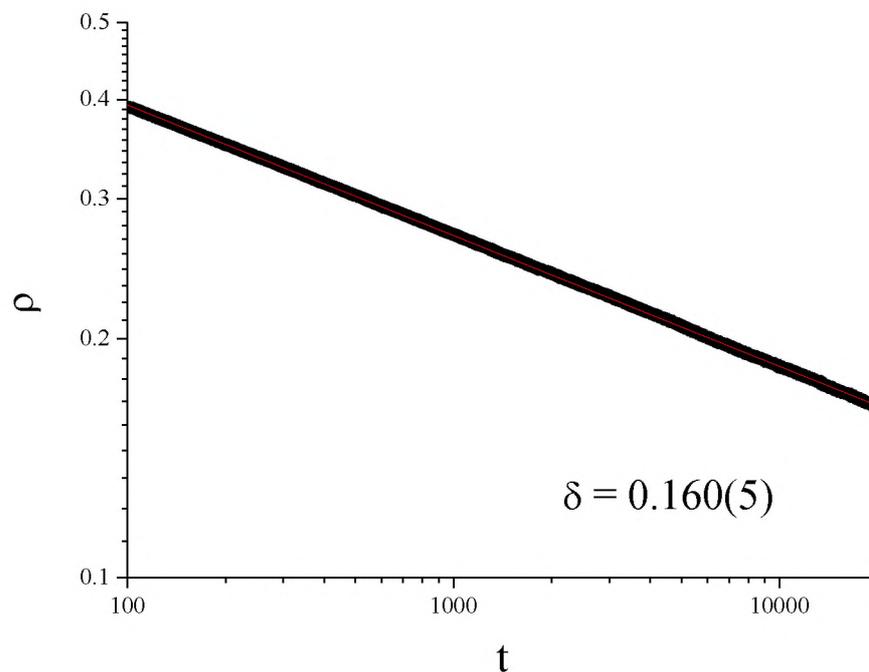
Figura 20: Gráfico log-log da evolução temporal da densidade de sítios vazios com a rede inicialmente vazia nas proximidades da probabilidade crítica.



Fonte: a autora.

Encontrado o valor da probabilidade crítica, nos resta agora fazer a regressão linear desta curva para a obtenção dos expoentes críticos dinâmicos. A Figura 21 mostra a regressão linear feita a partir da simulação com uma rede com $L = 1000$, 20000 passos de tempo, 5000 amostras e probabilidade $p_g = p_c = 0.65325(5)$. Para a obtenção do expoente crítico δ , utilizamos a rede inicialmente vazia, e chegamos ao valor de $\delta = \beta/v_{||} = 0,160(5)$. Com isto, a partir da relação $\beta = \delta/v''$ (HINRICHSEN, 2000), nos fornece o valor do expoente crítico β .

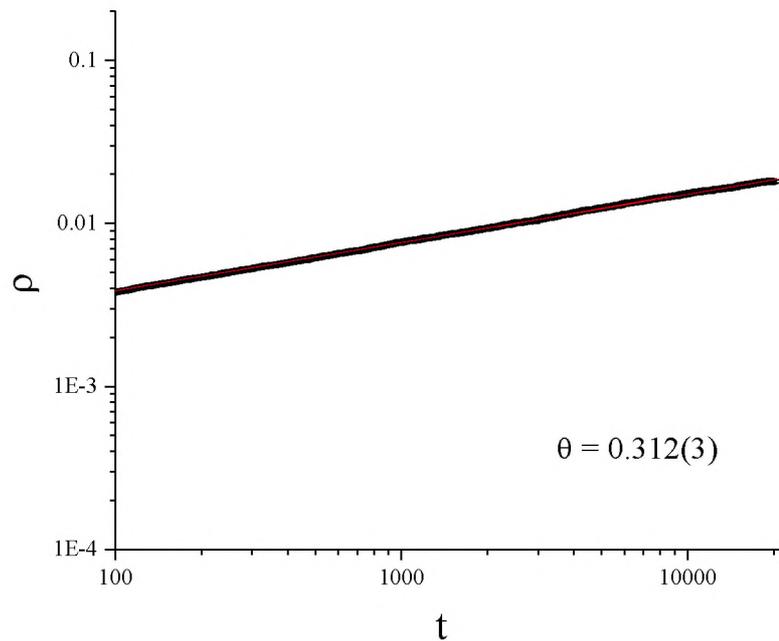
Figura 21: Gráfico log-log da evolução temporal de densidade de sítios vazios com a rede inicialmente vazia na probabilidade crítica. A linha corresponde à regressão linear considerando uma lei de potência e fornecem os valores do expoente δ .



Fonte: a autora.

Da mesma forma, para encontrar o expoente θ , fazemos a regressão linear do gráfico log-log da evolução temporal de sítios vazios proveniente de uma simulação com condições iniciais muito semelhantes às da simulação da figura anterior, com $p_g = p_c = 0.65325(5)$ (probabilidade crítica), mas com uma rede inicialmente preenchida, com apenas um sítio vazio, como mostra a Figura 22. A partir disso, obtivemos então $\theta = 0,312(3)$.

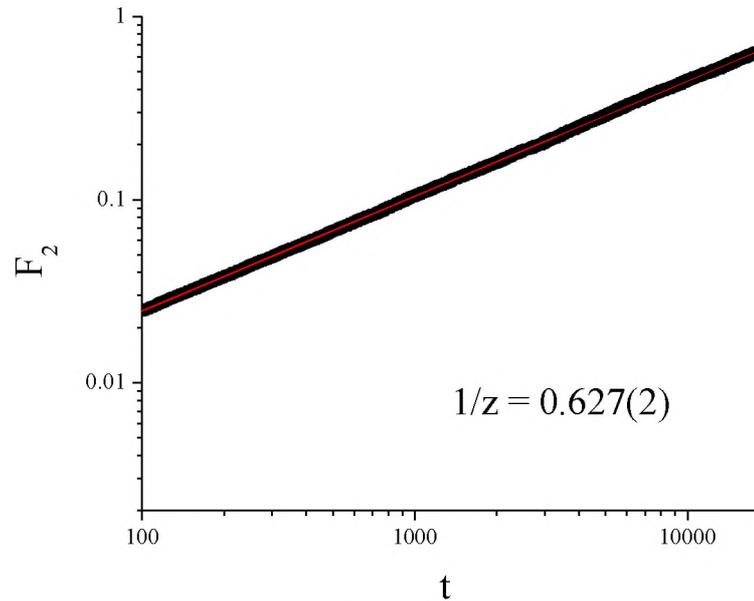
Figura 22: Gráfico log-log da evolução temporal de densidade de sítios vazios com a rede inicialmente com apenas com um sítio vazio. A linha corresponde à regressão linear considerando uma lei de potência e fornecem os valores do expoente θ .



Fonte: a autora.

Finalmente, para obtermos o expoente crítico z , resta-nos calcular a função F_2 , que combina as duas condições de preenchimento inicial da rede vistas anteriormente (rede inicial completamente vazia e rede inicialmente preenchida, com apenas um sítio vazio). Combinando-se essas duas condições iniciais, basta fazermos o gráfico em log-log desta função ao longo do tempo, bem como fazer a regressão linear, como mostra a Figura 23. Com isso, obtivemos $1/z = 0,627(2)$ ou seja $z = 1.595(5)$.

Figura 23: Gráfico log-log da evolução temporal F_2 com condições iniciais mistas. A linha corresponde à regressão linear considerando uma lei de potência e fornecem os valores do expoente $1/z$.



Fonte: a autora.

Os valores encontrados a partir das simulações encontram-se de acordo com os estimados na bibliografia (HINRICHSEN, 2000). Com isso, podemos afirmar que os expoentes críticos dinâmicos do modelo estão de acordo com a da classe de percolação direcionada.

3.c. Implementação da Difusão de Partículas na Rede

Até aqui, o sistema modelado incluía apenas duas grandes situações: o preenchimento estocástico da rede e a desorção espontânea de um par partícula pequena-grande, devido ao preenchimento de dois sítios adjacentes por uma partícula grande e uma pequena. Mas o que aconteceria se fosse fornecido ao sistema uma energia, como por exemplo um aumento da sua temperatura? Ocorreriam mudanças com relação à transição de fase do sistema, ou seja, relativas à probabilidade crítica deste? O sistema ainda pertenceria à classe de percolação direcionada? A partir de indagações como estas, foi modelada então o que denominamos migração (ou difusão) de partículas na rede.

A difusão de sítios na rede se dá sob a forma da troca das ocupações dos sítios, e obedece a uma probabilidade de migração p_m que antecede ao procedimento da escolha de qual partícula que será adsorvida na rede. Para melhor ilustrar esta dinâmica, pensemos em cinco sítios da rede, onde o sítio central é o sítio que foi sorteado para que a troca seja feita. Esta difusão

obedece às mesmas regras do modelo, e envolve o sítio sorteado e as suas primeiras e segundas vizinhanças. Como mostra a Figura 24, temos o sítio central sorteado $L(i)$, seus primeiros vizinhos da direita ($L(i+1)$) e da esquerda ($L(i-1)$) e seus segundos vizinhos da direita ($L(i+2)$) e da esquerda ($L(i-2)$). Para fins didáticos, utilizaremos as cores preta para o sítio sorteado, cinza escuro para os seus primeiros vizinhos e cinza claro para os seus segundos vizinhos.

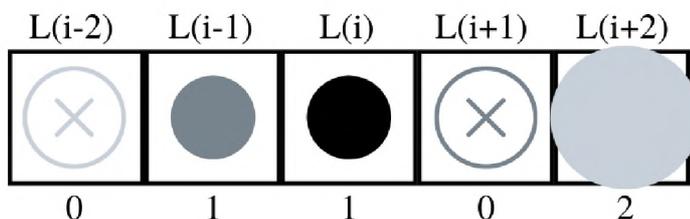
Figura 24: Ilustração da posição dos sítios após o sorteio para o início de uma migração.



Fonte: a autora.

Após o sorteio do sítio há um segundo sorteio, referente à escolha do sítio à direita ou à esquerda do sítio sorteado, para que haja então a verificação da ocupação (ou não ocupação) de cada sítio envolvido no processo. Analisemos o seguinte exemplo, onde temos a configuração de rede da Figura 25. Nela, da esquerda para a direita, temos: sítio vazio, ocupação por partícula pequena, ocupação por partícula pequena, sítio vazio e ocupação por partícula grande. É importante ressaltar aqui que, para fins didáticos, tomamos como 0 o sítio vazio, 1 o sítio ocupado por uma partícula pequena, e 2 aquele sítio ocupado por uma partícula grande.

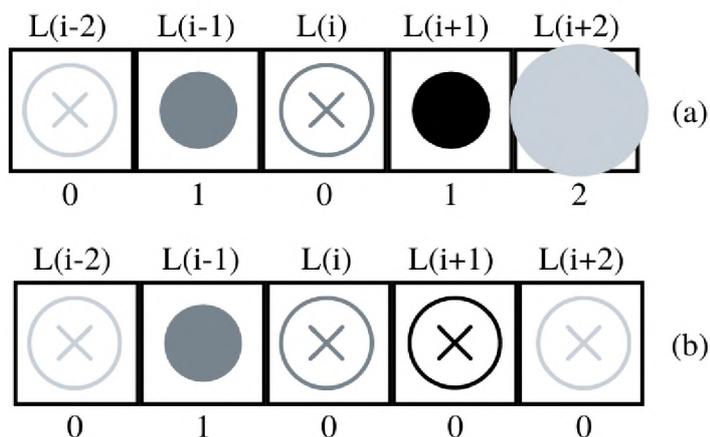
Figura 25: Configuração de uma rede cujo sítio sorteado (sítio central) é ocupado por uma partícula pequena.



Fonte: a autora.

Digamos que, no segundo sorteio, seja determinada a troca do sítio $L(i)$ com o seu vizinho da direita ($L(i+1)$), como mostra a Figura 26.a. Sendo assim, ficaríamos com dois sítios adjacentes ocupados por uma partícula grande e uma pequena, o que causaria a dessorção instantânea de ambos os sítios, resultando na configuração da Figura 26.b. Como o sítio do primeiro sorteio ($L(i)$) estava ocupado por uma partícula pequena, e o sítio à sua direita estava vazio, não haveria restrições para que essa troca fosse feita, não se fazendo necessária então a verificação prévia da ocupação do sítio $L(i+2)$.

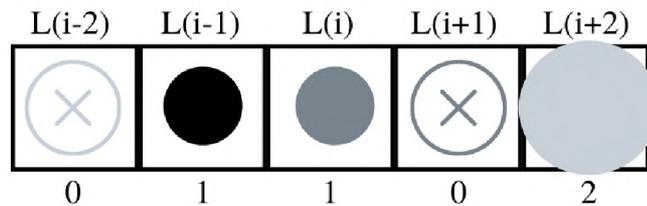
Figura 26: (a) Configuração da rede após a troca para a direita; (b) Configuração da rede após o processo de migração.



Fonte: a autora.

Por outro lado, poderíamos ter tido como resultado do segundo sorteio uma troca feita com o vizinho da esquerda ($L(i-1)$). Nesse caso, ficaríamos com a configuração de rede expressa na Figura 27, onde ambos os sítios estão ocupados por partículas pequenas, o que não ocasionaria mudança na configuração da rede.

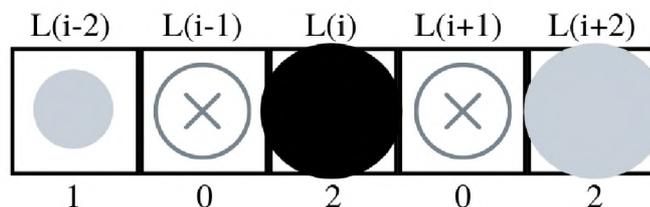
Figura 27: Configuração da rede após a troca do sítio $L(i)$ com o seu vizinho da esquerda.



Fonte: a autora.

No exemplo que vimos, por conta da configuração inicial da rede, não tivemos problemas com nenhuma das duas possíveis trocas (para direita ou esquerda). Mas o que aconteceria se tivéssemos uma situação não permitida pela dinâmica do modelo na configuração da rede após a troca? Analisemos a rede ilustrada pela Figura 28:

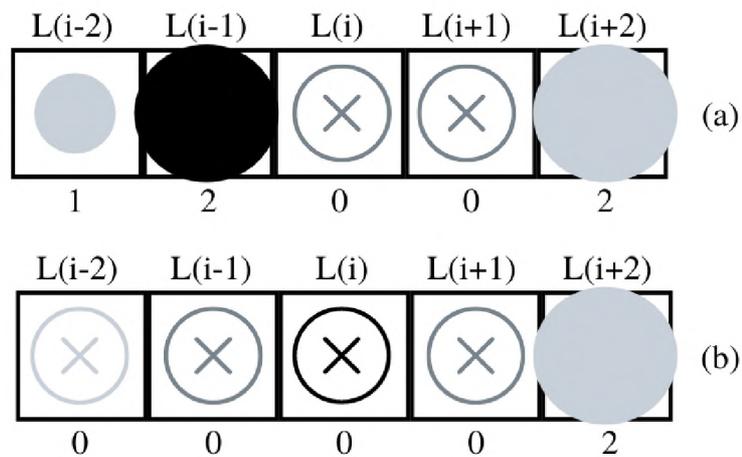
Figura 28: Segundo exemplo de configuração de rede antes de ocorrer a migração: sítio escolhido para ser sorteado $L(i)$ preenchido por uma partícula grande.



Fonte: a autora.

Como o sítio sorteado para fazer a troca é um sítio ocupado por uma partícula grande, devemos fazer a verificação não somente dos sítios mais próximos a ele, mas também dos seus segundos vizinhos. Caso tenha sido sorteada uma troca para a esquerda, como o seu primeiro vizinho está vazio e o seu segundo vizinho está ocupado por uma partícula pequena, ficaríamos com a configuração da Figura 29.a. Após a troca, teríamos então o par partícula-grande e pequena gerando a sua dessorção instantânea, resultando em uma configuração final da rede como a da Figura 29.b:

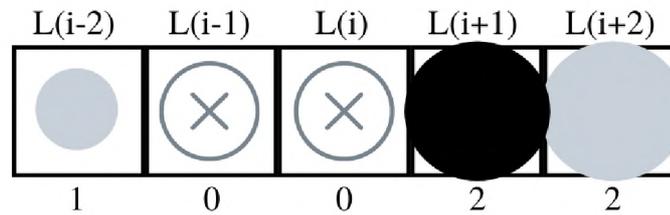
Figura 29: (a) Configuração da rede após a troca para a esquerda; (b) configuração da rede após o resultado da troca para a esquerda (dessorção espontânea ocasionada pela migração).



Fonte: a autora.

Como tínhamos como segundo vizinho um sítio preenchido por uma partícula pequena, a troca da partícula que ocupava o sítio L(i) pode ser feita com o seu vizinho da esquerda. Mas o que aconteceria caso o segundo sorteio decidisse que a troca deveria ser feita com o sítio à direita de L(i)? Com a configuração de rede da Figura 28, caso a troca ocorresse entre os sítios L(i) e L(i+1), ficaríamos com a configuração apresentada na Figura 30, que não é permitida (a dinâmica da rede não permite que dois sítios adjacentes estejam ambos ocupados por partículas grandes), pois $L(i+2)=2$. Logo, a troca não seria realizada e teríamos o começo de um novo sorteio de um sítio L(i).

Figura 30: Situação em que a troca é proibida, pois caso acontecesse, resultaria em dois sítios imediatamente vizinhos ocupados por partículas grandes.



Fonte: a autora.

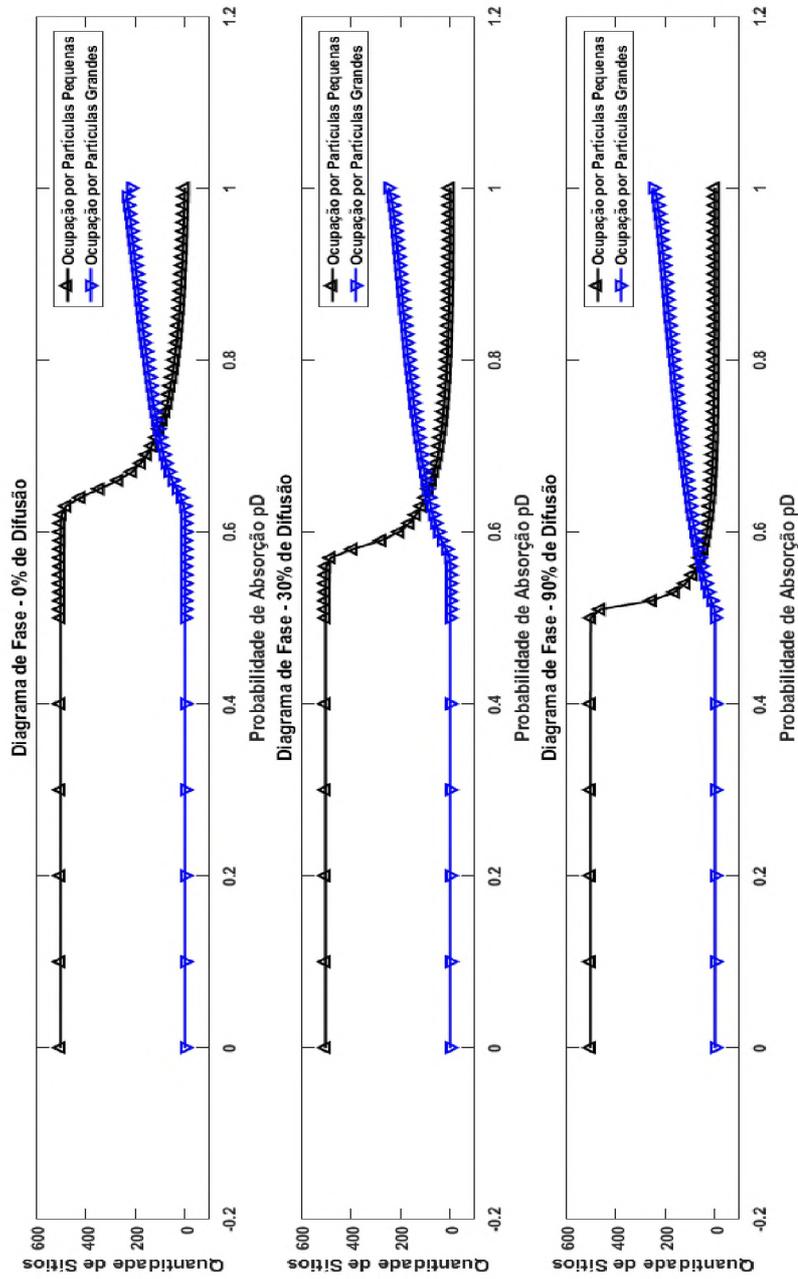
Sendo assim, podemos definir as seguintes regras e consequências para a difusão de partículas na rede:

- (i) depois de sorteada a posição do sítio $L(i)$ a ser difundido na rede, é feita uma outra escolha aleatória para decidir se a troca será feita com o seu sítio vizinho à esquerda ou à direita;
- (ii) caso seja escolhido o sítio vizinho à esquerda de $L(i)$, são analisadas as ocupações dos sítios $L(i)$, $L(i-1)$ e $L(i-2)$;
- (iii) caso seja escolhido o sítio vizinho à direita de $L(i)$, são analisadas as ocupações dos sítios $L(i)$, $L(i+1)$ e $L(i+2)$;
- (iv) as trocas obedecem às regras da dinâmica da rede;
- (v) depois de feita a troca, caso a ocupação dos sítios sorteados seja por ambas as partículas pequenas ou ambos sejam sítios vazios, a troca não muda a configuração da rede;
- (vi) caso a troca resulte em uma configuração de rede onde sítios adjacentes fiquem ocupados por uma partícula grande e uma pequena, há então a desorção espontânea de ambas as partículas, deixando ambos os sítios envolvidos vazios;
- (vii) caso tenhamos como resultado da troca uma configuração de rede onde dois sítios imediatamente vizinhos fiquem ocupados por partículas grandes, a troca não é feita e a configuração inicial da rede (antes do sorteio) é mantida até que um novo sorteio se inicie.

Implementada a dinâmica da difusão de partículas na rede, foram feitas simulações muito semelhantes às explicitadas no item a., com diferentes probabilidades de migração (p_m). A Figura 31 mostra um comparativo dos diagramas de fase de simulações com probabilidades de migração (p_m) em 0, 30%, e 90%.

É possível observar a partir do diagrama de fase da Figura 31 que à medida que a probabilidade de migração p_m tem o seu valor aumentado e o valor da probabilidade crítica p_c diminui, o que ocasiona o aumento da área ativa do sistema, pois um valor de p_m maior facilita a desorção de partículas na rede.

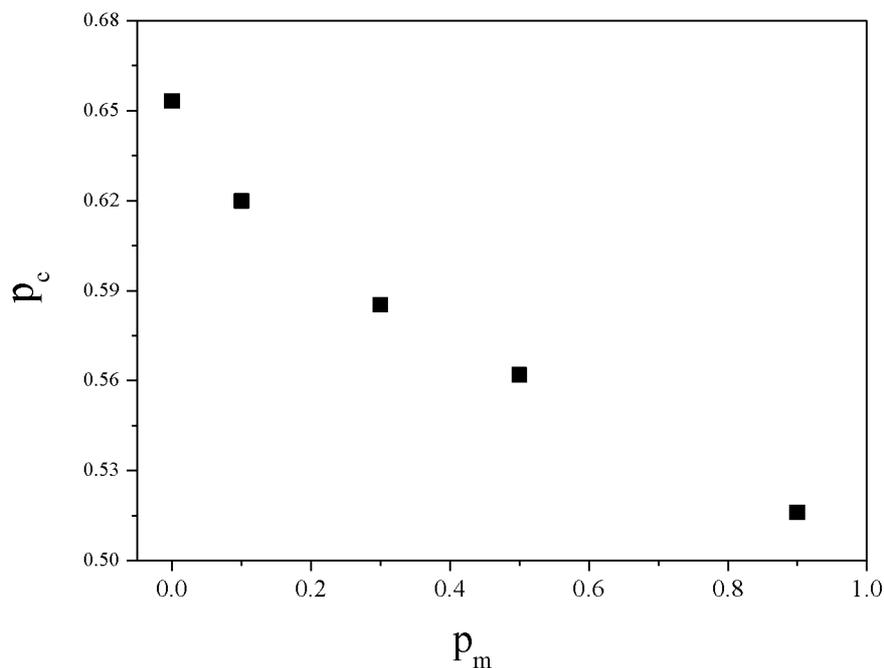
Figura 31: Diagramas de fase com diferentes probabilidades de migração.



Fonte: a autora.

A partir da evolução temporal da densidade de sítios vazios foi possível a obtenção da probabilidade crítica p_c para diferentes probabilidades de migração p_m . Na Figura 32 apresentamos a probabilidade crítica em função da probabilidade de migração. Com isto, temos que o valor da probabilidade crítica p_c varia em função da variação da probabilidade de migração p_m . Com isso, podemos observar que à medida que p_m aumenta, p_c diminui, o que indica que o sistema aumenta a sua fase ativa com o aumento da difusão de partículas na rede. Sendo assim, a migração ocasionaria um aumento na catálise da rede.

Figura 32: Relação entre a probabilidade crítica e a probabilidade de migração.



Fonte: a autora.

Um dos questionamentos do início desta seção foi respondido; de fato, a adição da difusão de partículas na rede ocasionou uma mudança na probabilidade crítica do modelo. Resta-nos saber agora se a mudança do valor da probabilidade crítica tem influência na categorização do modelo quanto à sua classe de universalidade, isto é, se os valores dos expoentes críticos dinâmicos também sofreriam variação uma vez que a migração fosse implementada.

Para responder ao segundo questionamento, olhemos primeiramente para os valores de probabilidade crítica obtidos, apresentados na Tabela 1.

Tabela 1: Variação da probabilidade crítica em função da probabilidade de difusão de partículas na rede.

| Probabilidade de Migração (p_m) | Probabilidade Crítica (p_c) |
|-------------------------------------|---------------------------------|
| 0.00 (0%) | 0.65325(5) |
| 0.30 (30%) | 0.58529(5) |
| 0.90 (90%) | 0.51606(5) |

Fonte: a autora.

Aqui, o procedimento para a obtenção dos expoentes críticos foi exatamente o mesmo feito na seção anterior: a regressão linear da evolução temporal da quantidade de sítios vazios da rede, para cada uma das 3 possibilidades de preenchimento inicial da rede (inicialmente vazia, completamente preenchida (com a exceção de um sítio) e uma combinação destas duas condições, a qual denominamos função F_2). Com isso, foram obtidos os valores descritos na Tabela 2 para os expoentes críticos do modelo.

Tabela 2: Variação dos valores dos expoentes críticos dinâmicos do modelo para diferentes probabilidades de difusão.

| Expoente | d =1 Percolação Direcionada * | Simulação | | |
|----------|-------------------------------------|---------------------------------|-----------------------------------|-----------------------------------|
| | | $p_m = 0$ $p_c = 0.65325(5)$ | $p_m = 0.3$ $p_c = 0.58529(5)$ | $p_m = 0.9$ $p_c = 0.51606(5)$ |
| δ | 0.15946 | 0.160(5) | 0.159(4) | 0.159(5) |
| θ | 0.31369 | 0.312(3) | 0.318(5) | 0.308(5) |
| z | 1.5807 | 1.595(5) | 1.578(5) | 1.575(5) |

* referência H. Hinrichsen, Adv. Phys. 49, 815 (2000)

Fonte: a autora.

Finalmente, conseguimos responder ao segundo questionamento do início desta seção, a partir dos resultados da Tabela 2. Podemos afirmar que, após a implementação da difusão de partículas na rede, os valores dos expoentes críticos dinâmicos continuaram compatíveis estatisticamente com os da percolação direcionada. Ainda que a probabilidade crítica do modelo tenha mudado à medida que fora também modificada a probabilidade de migração, os expoentes críticos dinâmicos não, o que demonstra a robustez do modelo.

4. CONCLUSÕES

Foram estudados dois modelos distintos (modelagem da influência de ruído na transferência de informação entre neurônios e o modelo de um processo catalítico com efeito de volume excluído) através da modelagem computacional de sistemas complexos.

No primeiro estudo, foi construído um autômato celular estocástico a fim de reproduzir o mecanismo de ativação e inativação de uma rede de neurônios, com interação neuronal com os seus primeiros vizinhos. Foi adicionada também uma rede paralela à rede neuronal com distribuições de neurotransmissores, com o intuito de prolongar ou diminuir o tempo de ativação dos neurônios através dos parâmetros r e r_μ . As regras de interação do modelo (passagem determinística do estado refratário para inativo e ativação e inativação catalítica dos neurônios) se mostraram importantes para a manutenção do sistema neuronal. Além disso, as regras também geraram estados oscilantes, que foram mapeados através de espectros de potência das suas séries temporais.

Foram observadas também dependências dos estados ativos e absorventes com as probabilidades p e c , de forma que valores baixos de c faziam com que o sistema evoluísse para estados absorventes de neurônios inativos e valores mais elevados de c levava o sistema a uma evolução para estados absorventes de neurônios ativos. Para valores mais altos de c , foram feitas ainda averiguações a respeito da adição de neurotransmissores que podem aumentar ou diminuir o tempo de ativação dos neurônios. Foram feitas simulações com intensidade de ação de neurotransmissores $r = 0.2$ e razão de neurotransmissores $r_\mu = 0.5$ e foi constatado que o estado absorvente de neurônios, nessas condições, nunca é alcançado. Além disso, as condições ocasionaram um aumento da região ativa neuronal.

Possíveis trabalhos futuros a partir deste modelo neuronal consistiriam em um estudo sistematizado da influência da intensidade da ação e da razão de neurotransmissores nos processos oscilantes de coexistência. Seria relevante também a investigação da análise das transições críticas do modelo, bem como a obtenção dos expoentes críticos que as caracterizam com a presença de variações da ação e razão de neurotransmissores no modelo.

Já no estudo do processo catalítico com efeito de volume excluído, fizemos a modelagem de uma superfície catalítica em uma dimensão, através de uma rede unidimensional de comprimento L . Inspiradas no modelo de *dollars e dimmers* (PARK et al, 1993) e em uma variação mais simples do modelo ZGB (ZIFF, GULARI, BARSHARD, 1986), a dinâmica do

modelo consistiu na adsorção, reação e dessorção de partículas grandes e pequenas na rede, obedecendo a regras específicas e probabilidades bem determinadas para cada tipo de partícula. Com isso, conseguimos obter a probabilidade crítica do modelo, em que ocorria a transição de fase, para cada um dos casos estudados. Assim, fizemos simulações do modelo na sua probabilidade crítica, a fim de encontrar os seus expoentes críticos estáticos e dinâmicos. Para o primeiro caso estudado, onde a difusão de partículas na rede foi desconsiderada, obtivemos a probabilidade crítica $p_c = 0.65325(5)$ e os expoentes críticos $\theta = 0.312(3)$, $\delta = 0.160(5)$ e $z = 1.595(5)$. A partir destes valores, concluímos que o sistema pertencia à classe de universalidade de percolação direcionada. Após a implementação da migração de partículas na rede ao modelo, obtivemos probabilidades críticas diferentes da do primeiro caso. Quando implementamos uma probabilidade de migração $p_m = 0.30$, a probabilidade crítica correspondente foi $p_c = 0.58529(5)$, e os expoentes críticos tinham o valor de $\theta = 0.318(5)$, $\delta = 0.159(4)$ e $z = 1.578(5)$. Já quando implementamos uma probabilidade de migração $p_m = 0.90$, obtivemos $p_c = 0.51606(5)$, e os expoentes críticos correspondentes $\theta = 0.308(5)$, $\delta = 0.159(5)$ e $z = 1.575(5)$.

Verificamos através dos valores obtidos para os expoentes críticos dinâmicos a partir de simulações dependentes do tempo na sua probabilidade crítica, com a implementação da difusão de partículas na rede, que os seus valores permaneciam em concordância com aqueles pertencentes à classe de percolação direcionada. Apesar disto, a implementação da migração entre partículas faz com que o sistema se diferencie pelo fato de possibilitar uma maior coexistência entre as partículas grandes e pequenas, representada por uma maior área da região ativa do sistema no seu diagrama de fase. É provável que os resultados de um modelo com difusão de partículas de acordo com uma distância de voo de Levy sejam significativamente diferentes dos obtidos neste trabalho, onde a difusão ocorria entre os primeiros vizinhos, sendo assim uma sugestão para futuras implementações e investigações.

REFERÊNCIAS

- BADAWY RAB, LOETSCHER T, MACDONELL RAL, Brodtmann A. Cortical excitability and neurology: insights into the pathophysiology. **Functional Neurology**. 2012;27(3):131- 145.
- BARGMANN CI. Chemosensation in *C. elegans*. 2006, **WormBook**, ed. **The C. Elegans Research Community**, WormBook, doi/10.1895/wormbook.1.123.1, <http://www.wormbook.org>.
- BEN-ABRAHAM, D. et al. Saturation transition in a monomer-monomer model of heterogeneous catalysis. **Journal of Physics A: General Physics**, v. 23, n. 19, p. 4297–4312, 1990
- BORST A, THEUNISSEN FE. 1999. Information theory and neural coding. **Nat. Neurosci.** 2: 947-957.
- CARVALHO, K. C de. Dinâmica de populações: um estudo a partir de autômatos celulares probabilísticos. 2005. Dissertação (Mestrado em Física) - Instituto de Física, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2005. doi:10.11606/D.43.2005.tde-08062015-174936. Acesso em: 2020-11-09.
- DA COSTA, E. C.; FIGUEIREDO, W. Catalysis with Competitive Reactions: Static and Dynamical Critical Behavior. **Brazilian Journal of Physics**, v. 33, n. 3, p. 487–500, 2003.
- DOMANY E., KINZEL W., 1984, “Equivalence of Cellular Automata to Ising Models and Directed Percolation”, *Physical Review Letters*, 53:311-314.
- GARDNER, M. (1970) Mathematical Games: The Fantastic Combinations of John Conway’s New Solitaire Game “Life”. **Scientific American**, v. 223, p. 120-123.
- GOODMAN MB. Mechanosensation. 2006, WormBook, ed. **The C. elegans Research Community**, WormBook, doi/10.1895/wormbook.1.62.1, <http://www.wormbook.org>.
- HILL R.W., WYSE G.A., Anderson M. *Animal physiology*, 3^oEd., **Sinauer associates**, 2013.
- HINRICHSEN, Hays. Non-equilibrium critical phenomena and phase transitions into absorbing states. **Advances in Physics**, vol. 49, no. 7, p. 815–958, 2000.
- HUA, D. Y.; ZHU, Y. J.; MA, Y. Q. Critical exponents of the continuous phase transition in Ziff-Gulari-Barshad model. **International Journal of Modern Physics B**, v. 18, n. 6, p. 859–866, 2004.
- HUBER R, MAKI H, ROSANOVA M, et al. **Human Cortical Excitability Increases with Time Awake**. **Cerebral Cortex**. 2013;23(2):332-338. doi:10.1093/cercor/bhs014.
- HUSE, D. A., **Phys. Rev.** B40 304 (1989).
- IAROSZ, K.; BONETTI, R. C.; BATISTA, A. M. Supressão de células cancerígenas em autômato celular. v. **Publicatio**, n. December, p. 81–87, 2010.
- JANSSEN, H. K., SCHAUB B., SCHIMITTMANN B. , **Z. Phys.** B73 539, (1989).

KANDEL E.R., BARRES, A.B., HUDSPETH A.J.. Nerve cells, neural circuitry and behavior. In: Kandel E, Schwartz JH, Jessel TM, Siegelbaum SA, Hudspeth AJ. **Principles of Neural Science**, 5^o Ed., Mc Graw Hill, 2013, pp.21-38.

LÜBECK, S. In: Directed Percolation. **Non-equilibrium Phase Transitions**, Bristol: Springer, 2008.

MARTINS, M. L. et al. Evidence for a new phase in the domany-kinzel cellular automaton. **Physical Review Letters**, v. 66, n. 15, p. 2045 - 2047, 1991.

MEAKIN, P.; SCALAPINO, D. J. Simple models for heterogeneous catalysis: Phase transition-like behavior in nonequilibrium systems. **The Journal of Chemical Physics**, v. 87, n. 1, p. 731–741, 1987.

MELOTTI, G. Aplicação de autômatos celulares em sistemas complexos: um estudo de caso em espalhamento de epidemias. Universidade Federal de Minas Gerais, 2009.

OLIVIERO A, PROFICE P, TONALI P.A., PILATO F, SATURNO E, DILEONI F, Ranieri F, Di Lazzaro V. Effects of aging on motor cortex excitability. **Neuroscience Research**. 2006; 55(1): 74-77.

OTTAVIANO, I. M. L. D. et al. AUTO-ORGANIZAÇÃO E CRIAÇÃO. **A Mente Humana**, v. 3, n. 2000, 2004.

PARK, H. et al. Excluded volume effects in heterogeneous catalysis: Reactions between “dollars” and “dimes”. **Journal of Physics A: General Physics**, v. 26, n. 9, p. 2071–2079, 1993.

SANTOS, Vanessa Sardinha Dos. "O que é neurônio?"; Brasil Escola. Disponível em <<https://brasilecola.uol.com.br/o-que-e/biologia/o-que-e-neuronio.htm>>. Acesso em 09 de novembro de 2020.

SCHWARTZ J.H., JAVITCH J.A. Neurotransmitters. In: Kandel E, Schwartz JH, Jessel TM, Siegelbaum SA, Hudspeth AJ. **Principles of Neural Science**, 5^o Ed., Mc Graw Hill, 2013, pp.289-305.

SILVA, H. S.; MARTINS, M. L. A cellular automata model for cell differentiation. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 322, p. 555–566, 2003.

WOLFRAM, S. Cellular automata as simple self-organizing systems. n. January 1983, 1982. Disponível em: <www.stephenwolfram.com/publications/articles>. Acesso em: 09 novembro 2020.

WOLFRAM, S. in: Tables of Cellular Automaton Properties. **Cellular automata as simple self-organizing systems**. World Scientific, 1986.

WOLFRAM, S. Cellular automata and complexity: collected papers, v. único, 1 ed. New York:: Addison-Wesley, 1994. 596p

ZIFF, Robert M.; GULARI, Erdagon and BARSHAD, Yoav. Kinetic Phase Transitions in an Irreversible Surface-Reaction Model. **Physical Review Letters**, vol. 56, no. 24, p. 2553–2556, 1986.

