



**UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ**  
**CENTRO DE CIÊNCIAS**  
**DEPARTAMENTO DE FÍSICA**  
**CURSO DE GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

**ISRAEL SILVA LIMEIRA LIMA**

**ESTUDO DA DIFUSÃO DE PARTÍCULAS CONFINADAS**

**FORTALEZA**

**2019**

ISRAEL SILVA LIMEIRA LIMA

ESTUDO DA DIFUSÃO DE PARTÍCULAS CONFINADAS

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Curso de Graduação em Física do Centro de Ciências da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do grau de bacharel em Física.

Orientador: Prof. Dr. Saulo Davi Soares e Reis

FORTALEZA

2019

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação  
Universidade Federal do Ceará  
Biblioteca Universitária  
Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

---

L698e Lima, Israel Silva Limeira.

Estudo da difusão de partículas confinadas / Israel Silva Limeira Lima. – 2019.  
36 f. : il. color.

Trabalho de Conclusão de Curso (graduação) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências,  
Curso de Física, Fortaleza, 2019.

Orientação: Prof. Dr. Saulo Davi Soares e Reis.

1. Random Walk. 2. Difusão. 3. Partículas confinadas. I. Título.

CDD 530

---

ISRAEL SILVA LIMEIRA LIMA

ESTUDO DA DIFUSÃO DE PARTÍCULAS CONFINADAS

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Curso de Graduação em Física do Centro de Ciências da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do grau de bacharel em Física.

Aprovada em: 04 de Dezembro de 2019

BANCA EXAMINADORA

---

Prof. Dr. Saulo Davi Soares e Reis (Orientador)  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

---

Prof. Dr. André Auto Moreira  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

---

Prof. Dr. Cláudio Lucas Nunes de Oliveira  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

## **AGRADECIMENTOS**

Agradeço primeiramente ao meu pai por ter me apoiado durante a minha graduação.

Agradeço também ao professor Saulo Davi Soares e Reis por sua orientação durante a realização deste trabalho.

Aos meus amigos da graduação Alyson Freitas, Victor Hugo, Leonardo Sátiro, João José Cunha Melo e Sousa Bentivi, Diego Menezes, Johnathas D'arf, João Henrique, Rômulo Sampaio, Débora Aguiar Gomes, Ewerton da Silva Costa, Higor Monteiro, Adaias de Souza, Brício Freitas, Symon Costa, Sérgio Tanaka, Vitor Júlio, Carlos Miguel, Carlos Germano, Isabel de Castro, Jéssica Gomes, Johnnildo Silva, Lara Domingos, Robert Bertoldo, Pedro Guilherme, Alehff Einstein, Gabriel Sousa, Antônio Alyson.

## RESUMO

Neste trabalho apresentamos um estudo teórico do modelo de *random walk* e sobre o processo de difusão de partículas confinadas. Tal modelo é aplicado em uma ampla área de pesquisas, e.g, economia financeira, biologia e física. Fazemos uma breve introdução do modelo desde a sua forma mais simplória (unidimensional e discreto) até ao movimento bidimensional e contínuo, onde concluímos que o modelo descreve um processo de difusão do ponto de vista microscópico. Após esta conclusão é feito um estudo sobre a equação de difusão. No final o modelo de *random walk* é utilizado para simular o movimento de partículas confinadas, descrevendo o processo de difusão. Nesta etapa do estudo, utilizamos diferentes distribuições da largura do passo, e analisamos a evolução de  $\langle r^2 \rangle$  para cada uma delas, onde calculamos o coeficiente de difusão e o expoente  $\alpha$ , o qual é utilizado na categorização do processo em super-difusivo, sub-difusivo ou um processo típico de difusão.

**Palavras-chave:** Random Walk. Difusão. Partículas confinadas.

## ABSTRACT

In this work we present a theoretical study of the random walk model and the confined particle diffusion process. Such a model is applied in a wide area of research, e.g., financial economics, biology and physics. We briefly introduce the model from its simplest form (one-dimensional and discrete) to two-dimensional and continuous motion, where we conclude that the model describes a diffusion process from a microscopic point of view. After this conclusion, we perform a study about the diffusion equation. Lastly the random walk model is used to simulate confined particles movement, describing the diffusion process. At this stage, we use different types of step length distributions to analyze the evolution of  $\langle r^2 \rangle$  for each one of them, where we calculate the diffusion coefficient and the  $\alpha$  exponent, in which is used to categorize the process in super-diffusive, sub-diffusive or a typical diffusion process.

**Keywords:** Random Walk. Diffusion. Confined particles

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Comparação entre a distribuição de probabilidade binomial (em vermelho) e os dados de 100.000 simulações de <i>random walk</i> (em azul), quando $N = 100$ e $L = 1$ . . . . .	15
Figura 2 – (a) $x$ versus número do passo de 1000 <i>random walks</i> em uma dimensão. Podemos visualizar o aumento da variância com o passo. (b) Evolução da variância em função do número do passo. Os pontos são os valores calculados da simulação e a linha é a Equação (2.14) .Foi utilizado o resultado de 1000 <i>random walks</i> para fazer a média. . . . .	16
Figura 3 – Comparação entre a solução analítica (em vermelho) e dados de 100.000 <i>random walks</i> , onde $N = 100$ . . . . .	18
Figura 4 – Evolução temporal da equação de difusão dentro de uma caixa circular em $t = 5, t = 10, t = 15, t = 20$ . . . . .	26
Figura 5 – Simulação da difusão de 2000 partículas com passo $l = 0.5$ , dentro de uma caixa circular de raio 10, inicialmente presas na origem. Mapeamento da posição das partículas (lado esquerdo) e o gráfico da densidade de partículas (lado direito) nos instantes $t=1, t=10, t=20, t=40, t=80, t=120, t=240, t=400$ (ordem da esquerda para a direita e de cima para baixo). . . . .	27
Figura 6 – Evolução da variância em função do número do passo. Os pontos são os valores calculados da simulação e a linha é a Equação (3.42) . . . . .	28
Figura 7 – Simulação de um <i>random walk</i> de 1000 passos com distribuições exponencial (a), log-normal ( $\sigma = 0.25, \mu = 0$ ) (b), potência ( $\beta = 1$ ) (c) e Standard-Cauchy (d). . . . .	29
Figura 8 – Histograma dos 1000 passos de uma simulação de <i>random walk</i> com distribuições exponencial ( $\beta = 1$ ) (a), log-normal ( $\sigma = 0.25, \mu = 0$ ) (b), potência ( $\beta = 1$ ) (c) e Standard-Cauchy (d). . . . .	30
Figura 9 – Evolução da variância em função do número do passo. Foi utilizado o resultado de 2000 <i>random walks</i> para fazer a média. . . . .	31
Figura 10 – Evolução da variância em função do número do passo utilizando uma distribuição exponencial. Os pontos são os valores calculados da simulação e a linha é a Equação (3.42), onde o coeficiente de difusão é dada pela Equação (4.7). . . . .	32

Figura 11 – Evolução da variância em função do número do passo utilizando passos de tamanho fixo. . . . .	33
Figura 12 – Evolução da variância em função do número do passo utilizando uma distribuição de potência. . . . .	34
Figura 13 – Evolução da variância em função do número do passo utilizando a distribuição Standard-Cauchy. . . . .	34

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Dados obtidos pela regressão linear no caso exponencial. . . . .	33
Tabela 2 – Dados obtidos pela regressão linear no caso de passo fixo. . . . .	33
Tabela 3 – Dados obtidos pela regressão linear para o caso de lei de potência. . . . .	34
Tabela 4 – Dados obtidos pela regressão linear no caso Standard-Cauchy. . . . .	35

## SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO . . . . .	11
2	PROBLEMAS DE <i>RANDOM WALK</i> UNIDIMENSIONAL . . . . .	13
2.1	O que é um <i>random walk</i> ? . . . . .	13
2.1.1	<i>Lançamento de moedas</i> . . . . .	13
2.1.2	<i>Random walk em uma dimensão</i> . . . . .	14
2.1.3	<i>Extensão para o contínuo</i> . . . . .	16
3	EQUAÇÃO DE DIFUSÃO . . . . .	19
3.1	Solução da equação de difusão em uma dimensão . . . . .	19
3.2	Solução da equação de difusão em duas dimensões . . . . .	22
3.3	Solução em coordenadas polares . . . . .	24
3.4	Cálculo de $\langle r^2 \rangle$ para a difusão de partículas confinadas em um disco . . . . .	27
4	<i>RANDOM WALK</i> DE PASSOS VARIADOS . . . . .	29
4.1	<i>Random walk</i> gerado por distribuições arbitrárias . . . . .	29
4.2	Difusão com passos variados . . . . .	31
5	CONCLUSÃO . . . . .	36
	REFERÊNCIAS . . . . .	37

## 1 INTRODUÇÃO

*Random walk* é um modelo que descreve vários processos que possuem algum tipo de variável aleatória, como por exemplo o movimento das partículas de um gás, onde a frequência de colisões é tão alta que determinar a sua posição exata após um intervalo de tempo é praticamente impossível, podendo assim considerar a sua trajetória como um processo aleatório. Este movimento imprevisível da partícula é chamado de movimento Browniano (FEYNMAN *et al.*, 1963). Este modelo emerge em diversos ramos de pesquisas, e.g., em economia modelando o preço das ações de uma empresa (COOTNER, 1964), em biologia descrevendo o movimento de forrageamento de macacos-aranha (RAMOS-FERNANDEZ *et al.*, 2003).

O termo *random walk* foi originalmente proposto por Karl Pearson em 1905 (PEARSON, 1905). Em uma carta para a revista *Nature*, ele propôs um modelo para descrever a infestação de mosquitos em uma floresta. A cada intervalo de tempo um mosquito desloca-se de uma distância fixa  $a$  em uma direção aleatória. Pearson queria saber como a concentração de mosquitos evoluía com o tempo. A carta foi respondida pelo Lorde Rayleigh que já havia resolvido uma forma mais geral do problema em 1880 em seus estudos sobre propagação do som em meios heterogêneos. Rayleigh mostrou que o valor médio do quadrado da distância viajada é proporcional ao número de passos,  $\langle R^2 \rangle \propto N$ , relação típica de um processo de difusão.

Em 1905 Albert Einstein publicou um artigo (EINSTEIN, 1956) sobre o movimento Browniano, onde ele modelou o movimento de partículas suspensas em um fluido como um movimento aleatório devido às colisões com as moléculas do fluido. Einstein conseguiu calcular o coeficiente de difusão em termos da viscosidade do fluido e do tamanho das partículas suspensas. Esta explicação para o movimento Browniano serviu como evidência de que átomos e moléculas existiam em uma época em que muitos cientistas ainda acreditavam que a matéria era contínua.

Neste trabalho temos como objetivo o estudo do modelo de *random walk* e a análise da difusão de partículas seguindo diferentes distribuições de probabilidade do tamanho do passo. No Capítulo 2 estudaremos o modelo de *random walk* na sua forma mais simples, sendo o movimento unidimensional. Utilizaremos o problema de lançamento de moedas sobre o qual estenderemos o problema para o limite do contínuo, onde mostraremos que a equação de difusão se aplica a todos *random walks* uniformes. Em seguida no Capítulo 3 faremos um estudo sobre a equação de difusão, onde obteremos a sua solução no caso unidimensional e bidimensional, logo em seguida em coordenadas polares. Neste último caso, o processo de difusão é limitada a ocorrer dentro de um disco fechado. Por fim no Capítulo 4 faremos a análise do processo de

difusão dentro de um disco, utilizando diferentes distribuições de probabilidade do tamanho do passo e então analisaremos a rapidez com que cada processo chega ao estado estacionário. Por fim no Capítulo 5 concluímos que a constante de difusão nos casos onde a distribuição de probabilidade possui o valor médio do quadrado do tamanho do passo finito, a constante de difusão ainda obedece a relação  $D \propto \langle l^2 \rangle$ , onde  $l$  é o tamanho do passo. Concluímos que partículas que se movimentam com distribuições que geram o voo de Lévy, quando confinadas deixam de descrever processos super-difusivos.

## 2 PROBLEMAS DE *RANDOM WALK* UNIDIMENSIONAL

Neste capítulo será mostrado algumas propriedades apresentadas no modelo de *random walk*. Especificamente a evolução temporal da variância da posição e de sua distribuição de probabilidade tanto na forma discreta quanto na contínua. Mostraremos, também, que quando o nosso sistema entra no regime do contínuo o modelo passa a descrever um processo de difusão.

### 2.1 O que é um *random walk*?

Um passeio em que cada passo tem uma direção aleatória é chamada de *random walk*. A forma mais simples de um *random walk* consiste em uma trajetória retilínea com passos de mesmo tamanho, existindo apenas dois sentidos para o deslocamento do viajante. Considerando que este viajante esteja usando uma moeda para decidir qual sentido ele andar, ou seja, caso o lançamento da moeda resulte em cara ele andar para a direita e coroa para a esquerda, podemos representar a posição final deste viajante pela diferença entre o número de caras e coroas resultante. Assim a distribuição da diferença de caras e coroas é igual a distribuição da posição final do viajante. Antes de discutirmos sobre o *random walk* precisamos falar primeiramente sobre a distribuição do lançamento de moedas.

#### 2.1.1 Lançamento de moedas

Em um lançamento de moeda há apenas dois resultados, cara ou coroa. Seja  $p$  a probabilidade de obtermos **cara** e  $q$  para obtermos **coroa** (posteriormente assumiremos que  $p = q = \frac{1}{2}$ ). Ao lançarmos a moeda  $N$  vezes obtemos uma sequência com  $n_1$  caras e  $n_2$  coroas, a probabilidade de uma dada sequência é a multiplicação da probabilidade individual de cada resultado

$$\underbrace{p \times p \cdots \times p}_{n_1} \underbrace{q \times q \cdots \times q}_{n_2} = p^{n_1} q^{n_2}. \quad (2.1)$$

O número de sequências distintas que possuem  $n_1$  caras e  $n_2$  coroas é dada pela permutação dos elementos de sua sequência

$$\frac{N!}{n_1! n_2!}. \quad (2.2)$$

Então, a probabilidade de obtermos  $n_1$  caras e  $n_2$  coroas em  $N$  lançamentos é

$$W_N(n_1) = \frac{N!}{n_1!n_2!} p^{n_1} q^{n_2}, \quad (2.3)$$

onde a probabilidade  $W_N$  só depende de  $n_1$ , tendo em vista que  $n_2 = N - n_1$ .

Para o problema de *random walk* é útil calcular a probabilidade da diferença de cara por coroas  $x = n_1 - n_2$ . Como  $x = 2n_1 - N$  então a probabilidade de obtermos uma dada diferença  $x$  é a mesma de obtermos  $n_1$  caras

$$P_N(x) = W_N(n_1). \quad (2.4)$$

Assim, o número de caras e coroas podem ser escrita em função da diferença  $x$  na forma

$$n_1 = \frac{1}{2}(N + x), \quad (2.5)$$

$$n_2 = \frac{1}{2}(N - x). \quad (2.6)$$

Como o resultado de um lançamento de moedas é equiprovável, então  $p = q = \frac{1}{2}$ . Fazendo essas substituições na Equação (2.3) obtemos

$$P_N(x) = \frac{N!}{[(N+x)/2]![(N-x)/2]!} \left(\frac{1}{2}\right)^N, \quad (2.7)$$

esta é a distribuição de probabilidade binomial para o lançamento de moedas.

### 2.1.2 *Random walk em uma dimensão*

Considerando que o viajante deu no total  $N$  passos de comprimento  $L$  dos quais  $n_1$  foram para a direita e  $n_2$  para a esquerda, a sua posição final é

$$x = (n_1 - n_2)L, \quad (2.8)$$

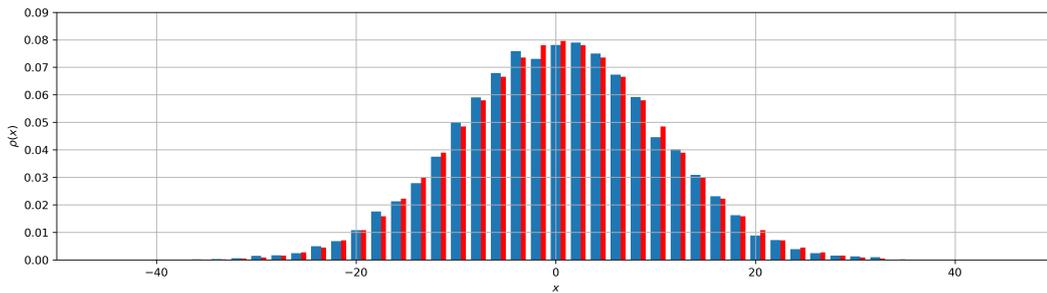
este sistema pode ser representado por

$$\begin{aligned} x_{N+1} &= \underbrace{l_1 + l_2 + \cdots + l_N}_{x_N} + l_{N+1} \\ x_{N+1} &= x_N + l_{N+1}, \end{aligned} \quad (2.9)$$

onde  $x_{N+1}$  é a posição do viajante após  $N + 1$  passos e  $l_i$  é o tamanho do  $i$ -ésimo passo.

O sistema é análogo ao de lançamento de moedas, logo podemos afirmar que a distribuição de probabilidade da posição final  $x$  para  $N$  passos é dada pela Equação (2.3), e como as probabilidades de dar um passo para a direita ou para a esquerda são iguais, a distribuição será a mesma dada pela Equação (2.7). Na Figura 1 podemos observar a similaridade da distribuição binomial com a distribuição da posição do *random walk*.

Figura 1 – Comparação entre a distribuição de probabilidade binomial (em vermelho) e os dados de 100.000 simulações de *random walk* (em azul), quando  $N = 100$  e  $L = 1$ .



Fonte: elaborado pelo autor (2019).

Podemos calcular o desvio padrão desse sistema utilizando a Equação (2.9)

$$\langle x_{N+1}^2 \rangle = \langle (x_N + l_{N+1})^2 \rangle = \langle x_N^2 \rangle + 2\langle x_N \rangle \langle l_{N+1} \rangle + \langle l_{N+1}^2 \rangle, \quad (2.10)$$

como  $l$  possui dois valores  $\{-L, L\}$  equiprováveis, então  $\langle l_{N+1} \rangle = 0$  mas  $l^2$  só possui um  $\{L^2\}$ , obviamente  $\langle l_{N+1}^2 \rangle = L^2$ , substituindo na equação anterior podemos reduzi-la para

$$\langle x_{N+1}^2 \rangle = \langle x_N^2 \rangle + L^2. \quad (2.11)$$

Isto mostra que a cada passo adicional a variância aumenta  $L^2$ . Podemos calcular facilmente  $\langle x_1^2 \rangle$

$$\langle x_1^2 \rangle = \frac{1}{2}(-L)^2 + \frac{1}{2}(L)^2 = L^2. \quad (2.12)$$

Como cada passo adicional adiciona  $L^2$  à variância, então  $\langle x_2^2 \rangle = 2L^2$ ,  $\langle x_3^2 \rangle = 3L^2$ ,  $\dots$ ,  $\langle x_N^2 \rangle = NL^2$ . Assim, podemos calcular o desvio padrão

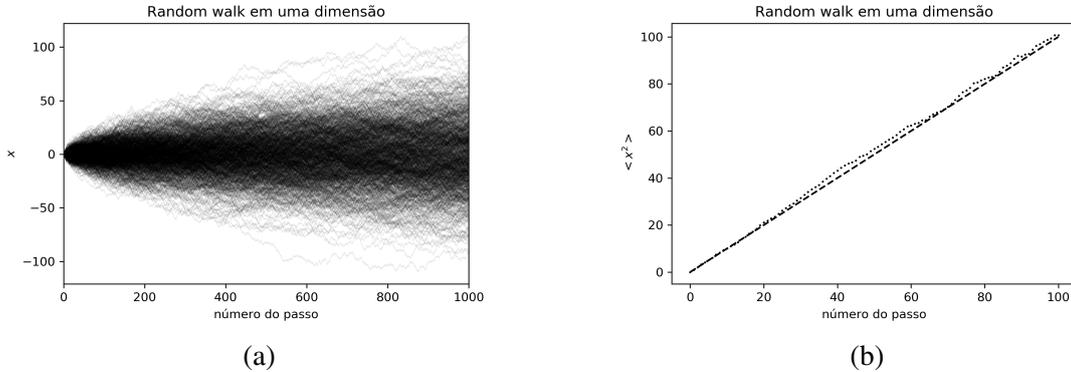
$$\sigma_N = \sqrt{\langle x_N^2 \rangle}, \quad (2.13)$$

de onde teremos

$$\sigma_1 = \sqrt{1}L, \sigma_2 = \sqrt{2}L, \dots, \sigma_N = \sqrt{N}L. \quad (2.14)$$

Na Figura 2 (b), podemos observar o aumento da variância com o número de passos.

Figura 2 – (a)  $x$  versus número do passo de 1000 *random walks* em uma dimensão. Podemos visualizar o aumento da variância com o passo. (b) Evolução da variância em função do número do passo. Os pontos são os valores calculados da simulação e a linha é a Equação (2.14). Foi utilizado o resultado de 1000 *random walks* para fazer a média.



Fonte: elaborado pelo autor (2019).

### 2.1.3 Extensão para o contínuo

Agora, de posse de resultados para o *random walk* discreto, podemos generalizar tais resultados para o caso do contínuo. Considerando um *random walk* em que a cada intervalo de tempo  $\Delta t$  a sua posição  $x$  muda uma distância  $l$ :

$$x(t + \Delta t) = x(t) + l(t), \quad (2.15)$$

onde  $l(t)$  segue uma distribuição de probabilidade  $\chi(l)$ , assumindo que  $l$  possui média nula e desvio padrão  $a$ , teremos

$$\langle l \rangle = 0, \quad (2.16)$$

$$\sqrt{\langle l^2 \rangle} = a, \quad (2.17)$$

e também que realizamos uma quantidade suficiente de *random walks* para podermos calcular a sua distribuição de probabilidade  $\rho(x', t)dt$  de encontrarmos o viajante em um intervalo  $[t, t + dt]$  em uma dada posição  $x'$ . Assim queremos agora saber como  $\rho(x', t)$  evolui com o tempo. Tendo passado um intervalo de tempo  $\Delta t$ , quanto será  $\rho$  em  $x$ ?

O incremento na nova densidade de probabilidade devido uma partícula viajar de  $x'$  para  $x$  é dada pela multiplicação da densidade probabilidade em  $x'$  no instante  $t$  com a probabilidade do passo ter o comprimento deste salto, ou seja,

$$d\rho(x, t + \Delta t) = \rho(x', t)\chi(x - x')|d(x - x')|. \quad (2.18)$$

O termo diferencial apresenta um módulo porque o termo representa a probabilidade, o qual não pode ser negativa. Mudando a variável para  $z = x - x'$  na equação anterior

$$d\rho(x, t + \Delta t) = \rho(x - z, t)\chi(z)|dz|, \quad -\infty < z < \infty. \quad (2.19)$$

Contudo, a partícula pode partir de outros pontos para chegar em  $x$ . Para calcular isso, basta integrar sobre todo o intervalo de  $z$ , logo a densidade de probabilidade da partícula estar em  $x$  no instante  $t + \Delta t$  é

$$\rho(x, t + \Delta t) = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x - z, t)\chi(z)dz. \quad (2.20)$$

Assim, não precisamos mais no módulo em  $dz$  porque agora ele está na equação apenas para representar qual variável esta sendo integrada.

Agora, expandindo  $\rho(x - z, t)$  em série de Taylor na Equação (2.20), teremos

$$\begin{aligned} \rho(x, t + \Delta t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \rho(x, t) - z \frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{z^2}{2!} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} - \dots \right] \chi(z) dz, \\ &= \rho(x, t) \int_{-\infty}^{\infty} \chi(z) dz + \\ &\quad + \int_{-\infty}^{\infty} \left[ -z \frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{z^2}{2!} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} - \dots \right] \chi(z) dz, \\ &= \rho(x, t) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n \rho}{\partial x^n} \int_{-\infty}^{\infty} z^n \chi(z) dz, \\ &= \rho(x, t) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} m_n \frac{\partial^n \rho}{\partial x^n}; \end{aligned} \quad (2.21)$$

onde  $m_n = \int_{-\infty}^{\infty} z^n \chi(z) dz$ . Trazendo  $\rho(x, t)$  para o outro lado e dividindo por  $\Delta t$  obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\rho(x, t + \Delta t) - \rho(x, t)}{\Delta t} &= \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n D_n \frac{\partial^n \rho}{\partial x^n}, \\ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\partial^n \rho}{\partial t^n} \frac{(\Delta t)^{n-1}}{n!} &= \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n D_n \frac{\partial^n \rho}{\partial x^n}, \end{aligned} \quad (2.22)$$

onde  $D_n = \frac{m_n}{n! \Delta t}$ . Esta equação é chamada de expansão Kramers-Moyall (KRAMERS, 1940).

Para ser resolvermos a Equação (2.22), devemos considerar  $\Delta t$  infinitesimal e que um salto típico da partícula é muito pequeno em comparação à extensão de  $\rho(x)$ , com isso apenas o primeiro termo do lado esquerdo e os dois primeiros do lado direito sobrevivem

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -D_1 \frac{\partial \rho}{\partial x} + D_2 \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}, \quad (2.23)$$

lembrando das Equações (2.16) e (2.17), temos,  $D_1 = \frac{m_1}{\Delta t} = 0$  e  $D_2 = \frac{m_2}{2\Delta t} = \frac{a^2}{2\Delta t}$  logo a equação se reduz à

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{a^2}{2\Delta t} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}. \quad (2.24)$$

Esta é a equação de difusão e ela é válida para *random walks* que possuem uma densidade de probabilidade extensa e que variam lentamente a cada passo. A solução analítica é dada por

$$\rho(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-x^2/4Dt}, \quad t > 0 \quad (2.25)$$

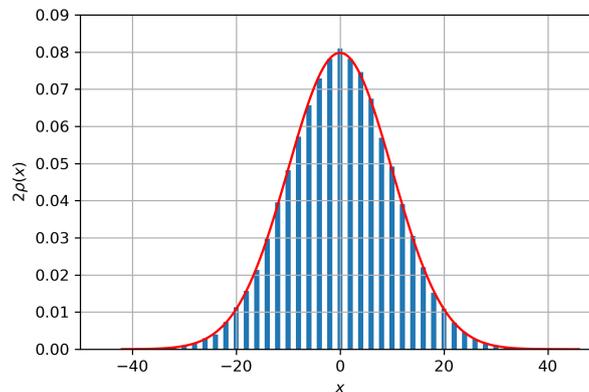
onde  $D = \frac{a^2}{2\Delta t}$ . Para o *random walk* em uma dimensão  $a^2 = \int_{-\infty}^{\infty} z^2 \chi(z) dz = \frac{1}{2}(-1)^2 + \frac{1}{2}(1)^2 = 1$  e  $t = N\Delta t$ . Sendo  $N$  o número total de passos, com essas substituições a solução analítica com  $N$  passos é

$$\rho(x,N) = \frac{1}{\sqrt{2N\pi}} e^{-x^2/2N}. \quad (2.26)$$

Lembrando que as posições finais do *random walk* só assumem valores pares ou ímpares de acordo com a paridade de  $N$ .

Note que  $\rho$  é contínua, logo ela existe tanto para posições pares quanto ímpares, por este motivo  $\rho$  deve ser multiplicado por 2 para que  $\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) dx = 2$  (junção da normalização quando  $N$  for ímpar ou par). Na Figura 3 podemos comparar a solução analítica com os dados obtidos de várias simulações de *random walks*.

Figura 3 – Comparação entre a solução analítica (em vermelho) e dados de 100.000 *random walks*, onde  $N = 100$ .



Fonte: elaborado pelo autor (2019).

### 3 EQUAÇÃO DE DIFUSÃO

No limite do contínuo a evolução temporal da distribuição de probabilidade de um *random walk* é descrita pela equação de difusão

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}, \quad (3.1)$$

achando a solução desta equação nós teremos uma expressão que descreve o estado de uma grande quantidade de *random walks* em qualquer instante, sendo útil para calcular diversas propriedades deste sistema. Este capítulo será dedicada para a solução da equação de difusão em coordenadas cartesianas e polares.

#### 3.1 Solução da equação de difusão em uma dimensão

Para resolver a equação de difusão vamos utilizar o método de separação de variáveis.

Logo,

$$\rho(x, t) = X(x) T(t). \quad (3.2)$$

Substituindo a Equação (3.2) na Equação (3.1), obtemos

$$X \frac{dT}{dt} = DT \frac{d^2 X}{dx^2}, \quad (3.3)$$

dividindo ambos os lados por  $\rho(x, t)$ , teremos

$$\frac{1}{DT} \frac{dT}{dt} = \frac{1}{X} \frac{d^2 X}{dx^2}. \quad (3.4)$$

Como o lado esquerdo é função apenas de  $t$  e o lado direito de  $x$  para quaisquer valores de  $t$  e  $x$ , essa igualdade só é válida quando ambas são constantes, logo

$$\frac{1}{DT_k} \frac{dT_k}{dt} = \frac{1}{X_k} \frac{d^2 X_k}{dx^2} = -k^2, \quad (3.5)$$

onde  $k$  deve ser um número real. Foi colocado o índice  $k$  em  $X$  e  $T$  para indicar que essas soluções estão associadas à essa constante arbitrária. A constante foi escolhida negativa porque caso contrário as soluções divergem.

Resolvendo primeiramente a parte temporal,  $T_k(t)$ , temos:

$$\begin{aligned}\frac{1}{DT_k} \frac{dT_k}{dt} &= -k^2, \\ \int^{T_k} \frac{1}{T'_k} dT'_k &= \int^t -Dk^2 dt', \\ \ln T_k &= -Dk^2 t + C', \\ T_k &= T_{0k} e^{-Dk^2 t}.\end{aligned}\tag{3.6}$$

Agora, resolvendo  $X_k(x)$ , supondo que ela tem a forma  $e^{px}$ , temos:

$$\begin{aligned}\frac{d^2 X_k}{dx^2} &= -k^2 X_k, \\ p^2 e^{px} &= -k^2 e^{px}, \\ p^2 &= -k^2, \\ p &= \pm ik.\end{aligned}\tag{3.7}$$

Assim, as soluções da equação diferencial são  $e^{ikx}$  e  $e^{-ikx}$ . Deste modo, a solução geral de  $X_k(x)$  é dada pela combinação linear delas, logo

$$X_k(x) = A_k e^{ikx} + B_k e^{-ikx}.\tag{3.8}$$

Substituindo as Equações (3.6) e (3.8) na Equação (3.2) obtemos

$$\begin{aligned}\rho_k(x, t) &= X_k(x) T_k(t), \\ &= T_{0k} e^{-Dk^2 t} (A_k e^{ikx} + B_k e^{-ikx}), \\ &= A_k e^{-Dk^2 t + ikx} + B_k e^{-Dk^2 t - ikx}.\end{aligned}\tag{3.9}$$

Onde a constante  $T_{0k}$  foi absorvida com as constantes  $A_k$  e  $B_k$ . A solução geral é dada pela combinação linear de todos  $\rho_k$ , assim,

$$\begin{aligned}\rho(x, t) &= \sum_{k=-\infty}^{\infty} \left( A_k e^{-Dk^2 t + ikx} + B_k e^{-Dk^2 t - ikx} \right), \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left( A(k) e^{-Dk^2 t + ikx} + B(k) e^{-Dk^2 t - ikx} \right) dk, \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} A(k) e^{-Dk^2 t + ikx} dk + \int_{-\infty}^{\infty} B(k) e^{-Dk^2 t - ikx} dk, \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} A(k) e^{-Dk^2 t + ikx} dk - \int_{-\infty}^{\infty} B(-k) e^{-Dk^2 t + ikx} dk, \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} (A(k) - B(-k)) e^{-Dk^2 t + ikx} dk.\end{aligned}\tag{3.10}$$

Definindo  $\phi(k) = A(k) - B(-k)$ , chegamos à solução geral para a equação de difusão

$$\rho(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k) e^{-Dk^2 t + ikx} dk.\tag{3.11}$$

A forma da função  $\phi(k)$  depende das condições iniciais do problema. Como estamos interessados na associação da equação de difusão com viajantes aleatórios que partem da origem, podemos utilizar a condição inicial  $\rho(x, 0) = \delta(x)$  e substituir na Equação (3.11)

$$\delta(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k) e^{ikx} dk. \quad (3.12)$$

Multiplicando ambos os lados por  $e^{-ik'x}$  e integrando em  $x$  sobre todo o espaço

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik'x} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k) e^{ikx} dk \right] dx &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik'x} \delta(x) dx, \\ \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k) \underbrace{\left[ \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(k-k')x} dx \right]}_{2\pi\delta(k-k')} dk &= 1, \\ 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k) \delta(k-k') dk &= 1, \\ \phi(k) &= \frac{1}{2\pi}. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Substituindo-a na Equação (3.11), encontramos que

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-Dk^2t + ikx} dk, \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-Dt(k - \frac{ix}{2Dt})^2} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} dk, \\ &= \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-Dt(k - \frac{ix}{2Dt})^2} dk. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Para resolver esta integral nós precisamos derivar esta equação em  $x$  e depois fazer integral por partes em que  $u = ie^{ikx}$ ,  $v = -\frac{1}{2Dt} e^{-Dk^2t}$ . Assim,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial x} &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-Dk^2t} (ike^{ikx}) dk, \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{(ie^{ikx})}_u \underbrace{(ke^{-Dk^2t})}_{dv} dk, \\ &= \left[ -\frac{i}{4\pi Dt} e^{ikx} e^{-Dk^2t} \right]_{-\infty}^{\infty} + \\ &\quad + \frac{1}{4\pi Dt} \int_{-\infty}^{\infty} (i^2 x e^{ikx}) e^{-Dk^2t} dk, \\ &= -\frac{x}{4\pi Dt} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-Dk^2t + ikx} dk}_{=2\pi\rho \text{ (Equação (3.14))}}, \\ &= -\frac{x}{4\pi Dt} (2\pi\rho), \\ \frac{\partial \rho}{\partial x} &= -\frac{1}{2Dt} x\rho. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Realizando, agora, uma separação de variáveis e então integrando, teremos:

$$\begin{aligned}\int^{\rho} \frac{1}{\rho'} \partial \rho' &= - \int^x \frac{x'}{2Dt} \partial x', \\ \ln \rho &= - \frac{x^2}{4Dt} + g(t), \\ \rho(x,t) &= e^{-\frac{x^2}{4Dt}} e^{g(t)}, \\ \rho(x,t) &= e^{-\frac{x^2}{4Dt}} f(t).\end{aligned}\tag{3.16}$$

Após a integração, surge uma função  $g$  dependente apenas de  $t$ . Para calcular  $f(t)$  devemos substituir na equação de difusão

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} &= D \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}, \\ e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \left( \frac{x^2}{4Dt^2} f(t) + f'(t) \right) &= e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \left( \frac{x^2}{4D^2t^2} - \frac{1}{2t} \right) D f(t), \\ \frac{x^2}{4Dt^2} f(t) + f'(t) &= \frac{x^2}{4Dt^2} f(t) - \frac{1}{2t} f(t), \\ \frac{1}{f} df &= -\frac{1}{2t} dt, \\ \int^f \frac{1}{f'} df' &= -\frac{1}{2} \int^t \frac{1}{t'} dt', \\ \ln f &= -\frac{1}{2} \ln t + C', \\ f &= C \frac{1}{\sqrt{t}}.\end{aligned}\tag{3.17}$$

Podemos achar a constante  $C$  utilizando a condição de normalização, assim,

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x,t) &= C \frac{1}{\sqrt{t}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} dx, \\ 1 &= \frac{C}{\sqrt{t}} \sqrt{4\pi Dt}, \\ C &= \frac{1}{\sqrt{4\pi D}}.\end{aligned}\tag{3.18}$$

Substituindo na Equação (3.16), a solução da equação de difusão com condição inicial  $\rho(x,0) = \delta(x)$  é

$$\rho(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}, \quad t > 0.\tag{3.19}$$

### 3.2 Solução da equação de difusão em duas dimensões

Podemos estender a solução da seção anterior para resolver a equação de difusão em duas dimensões utilizando o mesmo método. Assumindo que  $\rho(x,y,t) = X(x)Y(y)T(t)$ ,

substituindo na equação de difusão e dividindo por  $\rho$  obtemos

$$\frac{1}{DT} \frac{dT}{dt} = \frac{1}{X} \frac{d^2X}{dx^2} + \frac{1}{Y} \frac{d^2Y}{dy^2}, \quad (3.20)$$

desta vez vamos assumir que

$$\frac{1}{X_{k_1}} \frac{d^2X_{k_1}}{dx^2} = -k_1^2, \quad (3.21)$$

$$\frac{1}{Y_{k_2}} \frac{d^2Y_{k_2}}{dy^2} = -k_2^2, \quad (3.22)$$

$$\frac{1}{DT_{k_1k_2}} \frac{dT_{k_1k_2}}{dt} = -(k_1^2 + k_2^2). \quad (3.23)$$

Aplicando novamente o método utilizados nas Equações (3.6) – (3.10), teremos

$$\begin{aligned} \rho(x, y, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} (A_1(k_1) - B_1(-k_1)) e^{-Dk_1^2t + ik_1x} dk_1 \times \\ &\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} (A_2(k_2) - B_2(-k_2)) e^{-Dk_2^2t + ik_2y} dk_2, \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \phi_1(k_1) e^{-Dk_1^2t + ik_1x} dk_1 \int_{-\infty}^{\infty} \phi_2(k_2) e^{-Dk_2^2t + ik_2y} dk_2, \end{aligned} \quad (3.24)$$

supondo novamente que a condição inicial é  $\rho(x, y, 0) = \delta(x)\delta(y)$  e usando o mesmo método da Equação (3.13), temos que

$$\phi_1(k_1)\phi_2(k_2) = \frac{1}{4\pi^2}, \quad (3.25)$$

Como  $k_1$  e  $k_2$  são variáveis independentes, essa igualdade só é válida se ambas forem constantes, então podemos tirá-las da integral na Equação (3.24)

$$\begin{aligned} \rho(x, y, t) &= \phi_1\phi_2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-Dk_1^2t + ik_1x} dk_1 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-Dk_2^2t + ik_2y} dk_2, \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-Dk_1^2t + ik_1x} dk_1 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-Dk_2^2t + ik_2y} dk_2. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Para calcular esta integral basta comparar as duas Equações (3.14) e (3.19), assim

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-Dk^2t + ikx} dk &= \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}, \\ \int_{-\infty}^{\infty} e^{-Dk^2t + ikx} dk &= \sqrt{\frac{\pi}{Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}, \end{aligned} \quad (3.27)$$

que substituída na Equação (3.26) resulta em

$$\begin{aligned} \rho(x, y, t) &= \frac{1}{4\pi^2} \frac{\pi}{Dt} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} e^{-\frac{y^2}{4Dt}}, \\ &= \frac{1}{4\pi Dt} e^{-\frac{x^2 + y^2}{4Dt}}. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Pelo resultado apresentado pela Equação (3.28), notamos que a condição inicial utilizada possui simetria radial, tendo em vista que  $r^2 = x^2 + y^2$ .

### 3.3 Solução em coordenadas polares

Mudando o sistema de coordenadas para as polares,  $\rho$  passa a depender de  $r, \theta, t$ . Aplicando novamente o método da separação de variáveis para resolver a equação de difusão

$$\rho(r, \theta, t) = R(r)\Theta(\theta)T(t). \quad (3.29)$$

Substituindo na equação de difusão e dividindo todos por  $\rho$ ,

$$\frac{1}{r^2\Theta} \frac{d^2\Theta}{d\theta^2} + \frac{1}{Rr} \frac{d}{dr} \left( r \frac{dR}{dr} \right) = \underbrace{\frac{1}{DT} \frac{dT}{dt}}_{-k^2},$$

$$\boxed{\frac{1}{DT} \frac{dT}{dt} = -k^2;} \quad (3.30)$$

pelo mesmo motivo anterior escolhemos uma constante negativa, de modo que

$$\underbrace{\frac{1}{\Theta} \frac{d^2\Theta}{d\theta^2}}_{-m^2} + \frac{r}{R} \frac{d}{dr} \left( r \frac{dR}{dr} \right) + k^2 r^2 = 0,$$

$$\boxed{\frac{1}{\Theta} \frac{d^2\Theta}{d\theta^2} = -m^2;} \quad (3.31)$$

como  $\theta$  é uma coordenada angular, ou seja, a cada rotação de  $2\pi$  radianos ela retorna à posição original,  $\Theta$  deve ser uma função periódica. Então foi escolhido uma constante negativa porque ela resulta em soluções periódicas,

$$\boxed{r^2 \frac{d^2R}{dr^2} + r \frac{dR}{dr} + (k^2 r^2 - m^2)R = 0.} \quad (3.32)$$

Esta é a equação de Bessel cuja solução é dada por  $R(r) = J_m(kr)$  (ARFKEN *et al.*, 2013). As soluções das Equações (3.30) e (3.31) são, respectivamente,

$$T(t) = e^{-Dk^2 t}; \quad \Theta(\theta) = C_1 e^{im\theta} + C_2 e^{-im\theta}, \quad (3.33)$$

contudo, como o problema físico possui simetria radial,  $\rho$  não pode depender de  $\theta$ , logo  $m = 0$  e a Equação (3.32) é reduzida para

$$r^2 \frac{d^2R}{dr^2} + r \frac{dR}{dr} + k^2 r^2 R = 0, \quad (3.34)$$

cuja solução é  $R(r) = J_0(kr)$ .

A função  $R$  deve satisfazer as condições de contorno. Neste problema a difusão ocorre em uma caixa circular de raio  $L$ , com condição de contorno  $\frac{dR}{dr}|_{r=L} = J'_0(kL) = 0$ . Logo  $kL = \beta_{0i}$ , onde  $\beta_{0i}$  é a  $i$ -ésima raiz de  $J'_0$ . Assim, os valores de  $k$  que satisfazem a condição de contorno são  $k_i = \frac{\beta_{0i}}{L}, i = 1, 2, 3, \dots$ . Para o caso  $k = 0$ , a Equação (3.34) é reduzida para  $r^2 \frac{d^2 R}{dr^2} + r \frac{dR}{dr} = 0$ , onde  $R(r) = A_0 + B_0 \ln r$ . Entretanto, para satisfazer a condição de contorno  $B_0$  deve ser nulo, de modo que  $R(r) = A_0$ . Aqui, escolhemos a notação onde  $k = 0$  é representado por  $k_0$ . Deste modo, substituindo as funções  $R, \Theta$  e  $T$  na Equação (3.29), encontramos

$$\rho_i(r, \theta, t) = e^{-Dk_i^2 t} J_0(k_i r), \quad (3.35)$$

a solução geral é dada pela combinação linear de todas  $i$ -ésimas  $\rho_i$ , assim:

$$\begin{aligned} \rho(r, \theta, t) &= A_0 + \sum_{i=1}^{\infty} A_i e^{-Dk_i^2 t} J_0(k_i r), \\ &= A_0 + \sum_{i=1}^{\infty} A_i e^{-D\beta_{0i}^2 t / L^2} J_0(\beta_{0i} r / L). \end{aligned} \quad (3.36)$$

Para calcular a constante  $A_0$ , precisamos utilizar a condição inicial  $\rho(r, \theta, 0) = \frac{1}{2\pi r} \delta(r)$ , de modo que

$$\begin{aligned} \int_0^L \frac{1}{2\pi r} r \delta(r) dr &= A_0 \int_0^L r dr + \sum_{i=1}^{\infty} A_i \underbrace{\int_0^L r J_0(\beta_{0i} r / L) dr}_{=-LJ'_0(\beta_{0i})=0}, \\ \frac{1}{2\pi} &= A_0 \frac{L^2}{2}, \\ A_0 &= \frac{1}{\pi L^2}. \end{aligned} \quad (3.37)$$

Para calcular os coeficientes  $A_i$  iremos utilizar novamente a condição inicial, assim

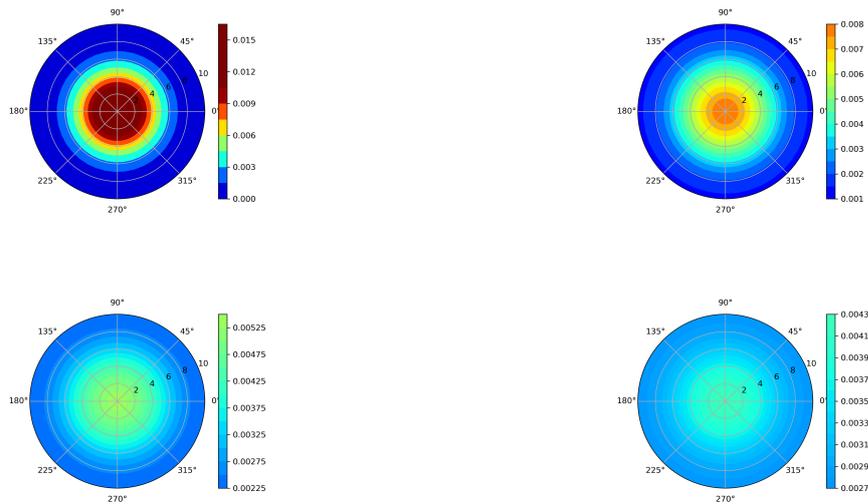
$$\begin{aligned} \int_0^L \frac{1}{2\pi r} r J_0(\beta_{0i} r / L) \delta(r) dr &= \frac{1}{\pi L^2} \int_0^L r J_0(\beta_{0i} r / L) dr + \\ &+ \sum_{i=1}^{\infty} A_i \underbrace{\int_0^L r J_0(\beta_{0i} r / L) J_0(\beta_{0i'} r / L) dr}_{\frac{L^2}{2} [J_0(\beta_{0i})]^2 \delta_{i,i'}}, \\ \frac{1}{2\pi} J_0(\theta) &= A_i \frac{L^2}{2} [J_0(\beta_{0i})]^2, \\ A_i &= \frac{1}{\pi L^2 [J_0(\beta_{0i})]^2}. \end{aligned} \quad (3.38)$$

Substituindo os coeficientes na Equação (3.36) obtemos a solução analítica

$$\rho(r, \theta, t) = \frac{1}{\pi L^2} + \frac{1}{\pi L^2} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{J_0(\beta_{0i} r / L)}{[J_0(\beta_{0i})]^2} e^{-D\beta_{0i}^2 t / L^2}. \quad (3.39)$$

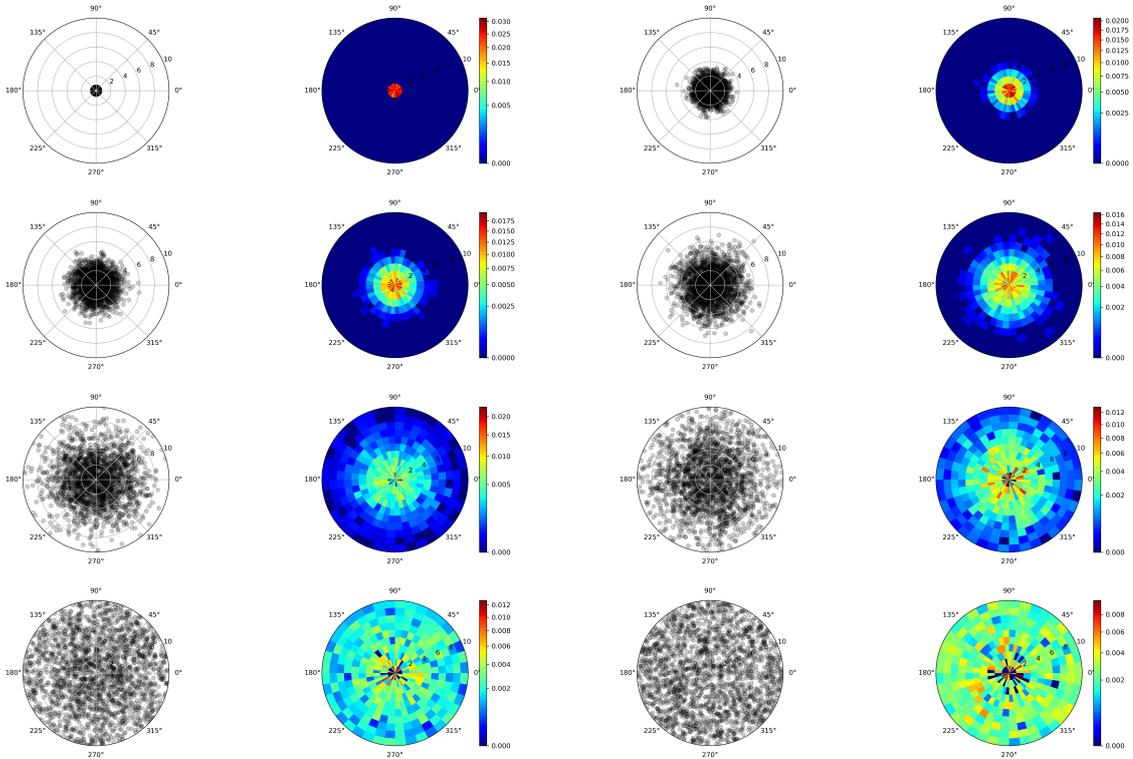
Na Figura 4 podemos ver a evolução temporal desta solução analítica. Além disto, foi realizado a simulação de 2000 *random walks* em uma caixa circular e feito o gráfico da densidade de partículas em diversos instantes do processo. A Figura 5 apresenta o processo de difusão dessa simulação. Observe que quando  $t = 400$  a densidade é praticamente homogênea em todo espaço.

Figura 4 – Evolução temporal da equação de difusão dentro de uma caixa circular em  $t = 5$ ,  $t = 10$ ,  $t = 15$ ,  $t = 20$ .



Fonte: elaborado pelo autor (2019).

Figura 5 – Simulação da difusão de 2000 partículas com passo  $l = 0.5$ , dentro de uma caixa circular de raio 10, inicialmente presas na origem. Mapeamento da posição das partículas (lado esquerdo) e o gráfico da densidade de partículas (lado direito) nos instantes  $t=1, t=10, t=20, t=40, t=80, t=120, t=240, t=400$  (ordem da esquerda para a direita e de cima para baixo).



Fonte: elaborado pelo autor (2019).

### 3.4 Cálculo de $\langle r^2 \rangle$ para a difusão de partículas confinadas em um disco

Podemos utilizar a Equação (3.38) para calcular a variância da posição das partículas  $\langle r^2 \rangle$ , assim

$$\begin{aligned}
 \langle r^2 \rangle &= \int_0^L \int_0^{2\pi} (r^2 \rho) r dr d\theta, \\
 &= \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^L r^3 \left( \frac{1}{\pi L^2} + \frac{1}{\pi L^2} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{J_0(\beta_{0i} r/L)}{[J_0(\beta_{0i})]^2} e^{-D\beta_{0i}^2 t/L^2} \right), \\
 &= 2\pi \left[ \frac{1}{\pi L^2} \int_0^L r^3 dr + \sum_{i=1}^{\infty} \frac{e^{-D\beta_{0i}^2 t/L^2}}{\pi L^2 [J_0(\beta_{0i})]^2} \int_0^L r^3 J_0(\beta_{0i} r/L) \right], \quad (3.40)
 \end{aligned}$$

usando a identidade

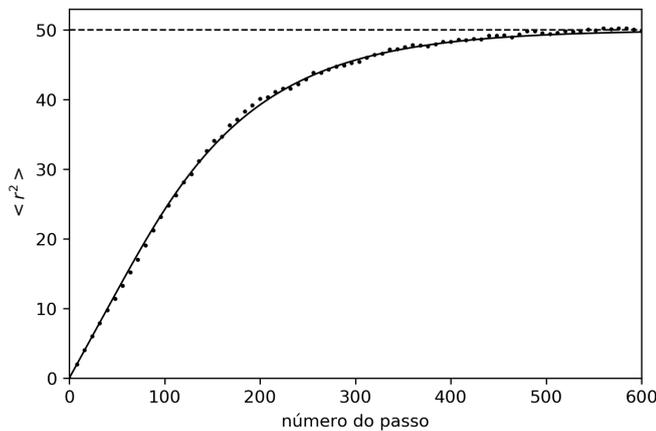
$$\int x^3 J_0(x) dx = x [2xJ_0(x) - (x^2 - 4)J_0(x)], \quad (3.41)$$

encontramos

$$\begin{aligned}
 \langle r^2 \rangle &= 2\pi \left[ \frac{1}{\pi L^2} \frac{L^4}{4} + \sum_{i=1}^{\infty} \frac{e^{-D\beta_{0i}^2 t/L^2}}{\pi L^2 [J_0(\beta_{0i})]^2} \frac{L^4}{\beta_{0i}^4} \int_0^{\beta_{0i}} x^3 J_0(x) dx \right], \\
 &= \frac{L^2}{2} + 2 \sum_{i=1}^{\infty} \frac{e^{-D\beta_{0i}^2 t/L^2}}{L^2 [J_0(\beta_{0i})]^2} \frac{L^4}{\beta_{0i}^4} (x [2xJ_0(x) - (x^2 - 4)J_0'(x)]) \Big|_0^{\beta_{0i}}, \\
 &= \frac{L^2}{2} + 2L^2 \sum_{i=1}^{\infty} \frac{e^{-D\beta_{0i}^2 t/L^2}}{\beta_{0i}^4 [J_0(\beta_{0i})]^2} 2\beta_{0i}^2 J_0(\beta_{0i}), \\
 &= \frac{L^2}{2} + 4L^2 \sum_{i=1}^{\infty} \frac{e^{-D\beta_{0i}^2 t/L^2}}{J_0(\beta_{0i})\beta_{0i}^2}. \tag{3.42}
 \end{aligned}$$

Na Figura 6 foi comparado a evolução de  $\langle r^2 \rangle$  da simulação apresentada na Figura 5 com o resultado expresso pela Equação (3.42). Para a solução analítica foi escolhido  $D = \frac{1}{16}$ . Observe que no começo a variância cresce linearmente como mostrado pela Equação (2.14). Contudo, como o movimento está restrito há uma região limitada, com o passar do tempo a densidade de partículas torna-se homogênea, como podemos ver pela Equação (3.39) no limite em que  $t \rightarrow \infty$ . Assim, o sistema deixará de evoluir com o tempo, portanto  $\langle r^2 \rangle$  deve convergir para  $\lim_{t \rightarrow \infty} \langle r^2 \rangle = \frac{L^2}{2}$ .

Figura 6 – Evolução da variância em função do número do passo. Os pontos são os valores calculados da simulação e a linha é a Equação (3.42)



Fonte: elaborado pelo autor (2019).

## 4 RANDOM WALK DE PASSOS VARIADOS

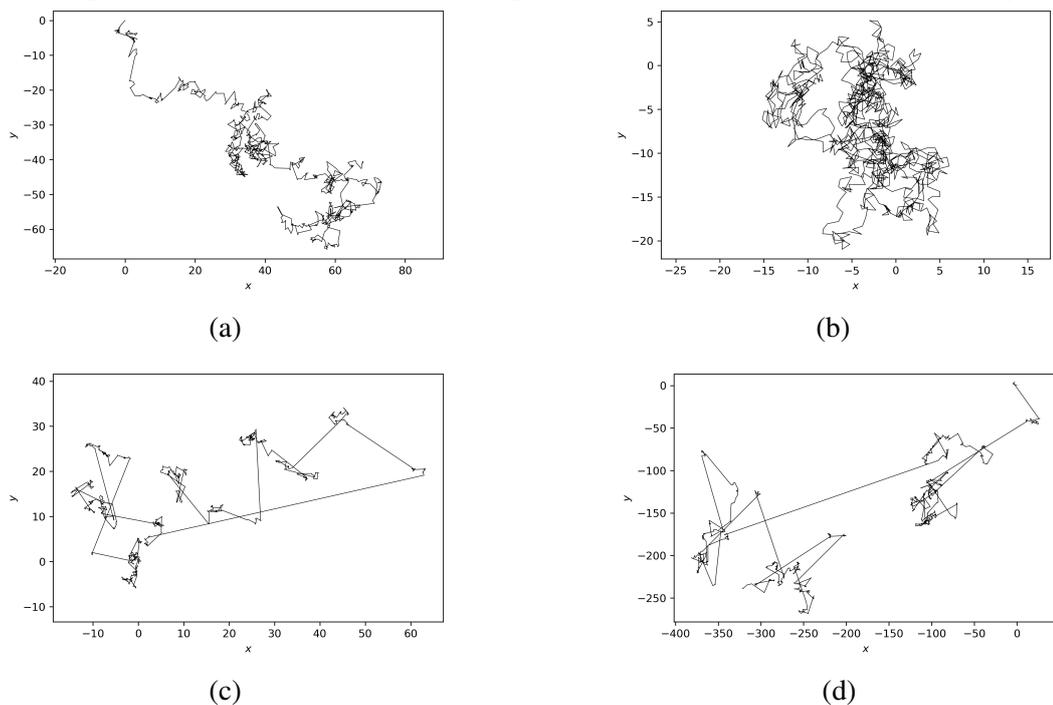
### 4.1 Random walk gerado por distribuições arbitrárias

Até agora consideramos que o tamanho do passo  $l$  de um *random walk* é fixo. Para tornar o modelo mais geral vamos considerar que  $l$  é uma variável aleatória seguindo uma distribuição de probabilidade  $\chi(l)$  com constante de normalização  $C$ . Algumas que serão analisadas são:

- distribuição exponencial:  $\chi(l) = Ce^{-\beta l}$ ;
- distribuição de potência:  $\chi(l) = Cl^{-1-\beta}$ ,  $0 < \beta < 2$ ;
- distribuição Standard-Cauchy:  $\chi(l) = C \frac{1}{1+l^2}$ ;
- distribuição log-normal:  $\chi(l) = C \frac{1}{l} e^{-\frac{(\ln l - \mu)^2}{2\sigma^2}}$ , onde  $\mu$  e  $\sigma$  são, respectivamente, a média e o desvio padrão de  $\ln \chi(l)$ .

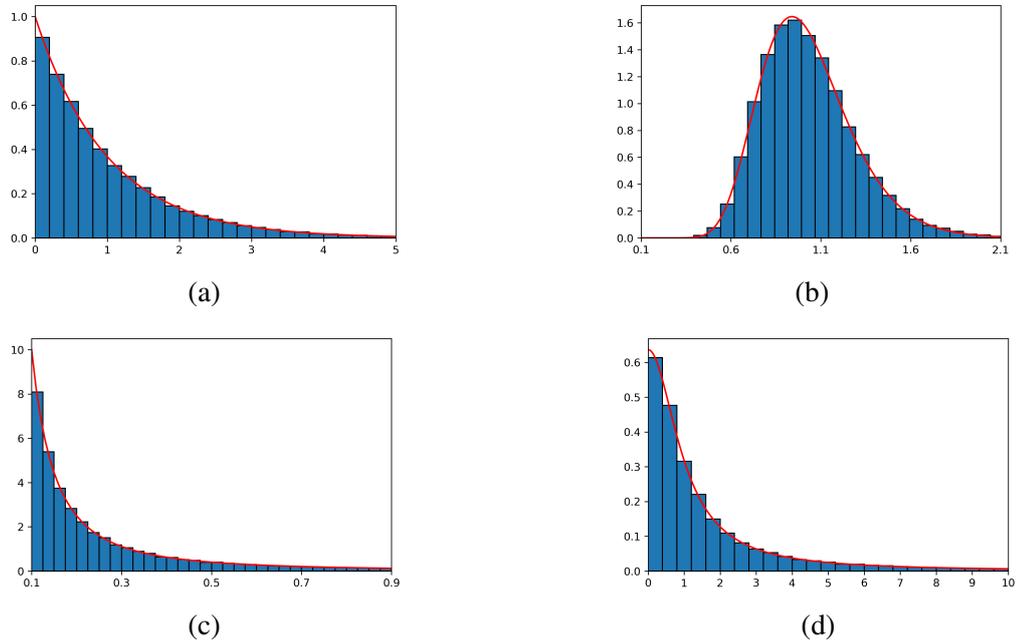
Na Figura 7 podemos ver exemplos de *random walks* seguindo essas distribuições. Na Figura 8 temos o histograma do tamanho de seus passos comparados com a distribuição. Como as distribuições de potência e log-normal divergem quando  $l = 0$  foi escolhido um valor mínimo  $l = 0.1$ .

Figura 7 – Simulação de um *random walk* de 1000 passos com distribuições exponencial (a), log-normal ( $\sigma = 0.25$ ,  $\mu = 0$ ) (b), potência ( $\beta = 1$ ) (c) e Standard-Cauchy (d).



Fonte: elaborado pelo autor (2019).

Figura 8 – Histograma dos 1000 passos de uma simulação de *random walk* com distribuições exponencial ( $\beta = 1$ ) (a), log-normal ( $\sigma = 0.25$ ,  $\mu = 0$ ) (b), potência ( $\beta = 1$ ) (c) e Standard-Cauchy (d).



Fonte: elaborado pelo autor (2019).

Até aqui o movimento de *random walk* de uma partícula foi distinguido pelo aumento linear da variância de sua posição,

$$\langle r^2(t) \rangle \propto t, \quad (4.1)$$

e a forma Gaussiana da sua função densidade de probabilidade (Equação (3.19)), satisfazendo a equação de difusão (Equação (3.1)).

Muitos sistemas exibem comportamentos que não seguem a dependência linear da Equação (4.1). Frequentemente, elas possuem um comportamento não-linear na forma

$$\langle r^2(t) \rangle \propto t^\alpha, \quad (4.2)$$

D passa a possuir dimensão de  $m^2/s^\alpha$ . Processos deste tipo são chamados de difusão anômala.

Processos de difusão com expoente  $0 < \alpha < 1$  são chamados de sub-difusivo, alguns exemplos destes procedimentos são, difusão em géis (KOSZTOŁOWICZ *et al.*, 2005) e movimento de lençóis freáticos (DENTZ *et al.*, 2004). Já para expoentes  $\alpha > 1$  o processo é chamado de super-difusivo e ele aparece durante a migração celular (DIETERICH *et al.*, 2008). Quando  $\alpha = 1$  temos o processo linear, típico de difusão tradicional.

Em processos super-difusivos o movimento de *random walk* é caracterizado por gigantescos saltos que ocorrem esporadicamente, como podemos observar na Figura 6 (c) e (d),

estes saltos são chamados de voos de Lévy (MANDELBROT *et al.*, 1983) e ocorrem quando a função densidade de probabilidade possui comportamento assintótico na forma

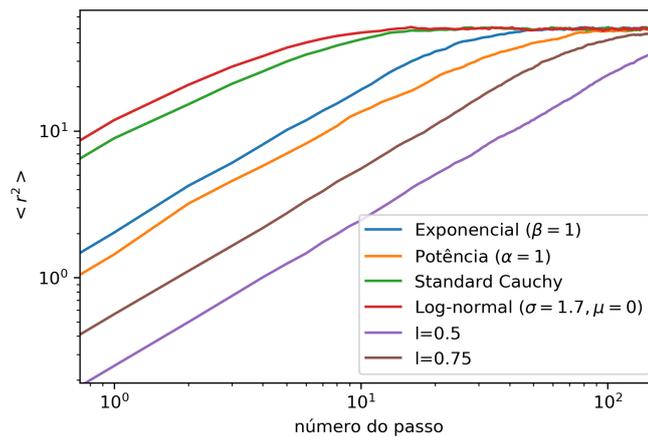
$$\chi(l) \simeq |l|^{-1-\alpha}, \quad 0 < \alpha < 2, \quad (4.3)$$

outra característica deste movimento é a divergência da variância da posição.

## 4.2 Difusão com passos variados

Veremos agora o processo de difusão quando as partículas se movimentam com diferentes distribuições  $\chi(l)$ . Aplicando este tipo de movimento de *random walk* para as partículas podemos observar na Figura 9 a evolução de  $\langle r^2 \rangle$  para cada tipo de distribuição.

Figura 9 – Evolução da variância em função do número do passo. Foi utilizado o resultado de 2000 *random walks* para fazer a média.



Fonte: elaborado pelo autor (2019).

Em um sistema unidimensional a constante de proporcionalidade da Equação (4.1) pode ser encontrada pela Equação (2.24) onde

$$D = \frac{\langle l^2 \rangle}{2\Delta t}. \quad (4.4)$$

Utilizando a mesma expansão no desenvolvimento da Equação (2.24) para o caso bidimensional a nova constante de difusão é

$$D = \frac{\langle l^2 \rangle}{4\Delta t}. \quad (4.5)$$

Analisaremos agora o caso da distribuição exponencial, podemos calcular o valor de

$\langle l^2 \rangle$ :

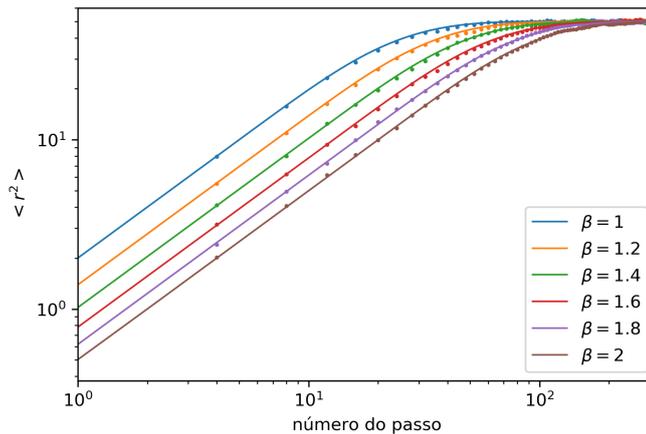
$$\begin{aligned}\langle l^2 \rangle &= \beta \int_0^{\infty} l^2 e^{-\beta l} dl, \\ \langle l^2 \rangle &= \frac{2}{\beta^2},\end{aligned}\quad (4.6)$$

sendo  $\Delta t = 1$  na nossa simulação, o coeficiente de difusão vale

$$D = \frac{1}{2\beta^2}. \quad (4.7)$$

Foram feitas simulações para diferentes valores de  $\beta$ . Na Figura 10 podemos ver a comparação dos dados obtidos pela simulação com a Equação (3.37) utilizando o coeficiente de difusão da Equação (4.7).

Figura 10 – Evolução da variância em função do número do passo utilizando uma distribuição exponencial. Os pontos são os valores calculados da simulação e a linha é a Equação (3.42), onde o coeficiente de difusão é dada pela Equação (4.7).



Fonte: elaborado pelo autor (2019).

Durante o comportamento linear de  $\langle r^2 \rangle$ , aplicamos o método da regressão linear para calcular o coeficiente angular  $\alpha$  da reta, sendo este o mesmo  $\alpha$  da Equação (4.2). Usando estes dados podemos calcular o valor do coeficiente de difusão utilizando a Equação (4.5) e o expoente  $\alpha$  da Equação (4.2).

Na Tabela 1 temos os valores obtidos pela regressão linear na distribuição exponencial, onde  $D_s$  e  $D_t$  são, respectivamente, os coeficientes de difusão da simulação e o valor teórico dada pela Equação (4.7).

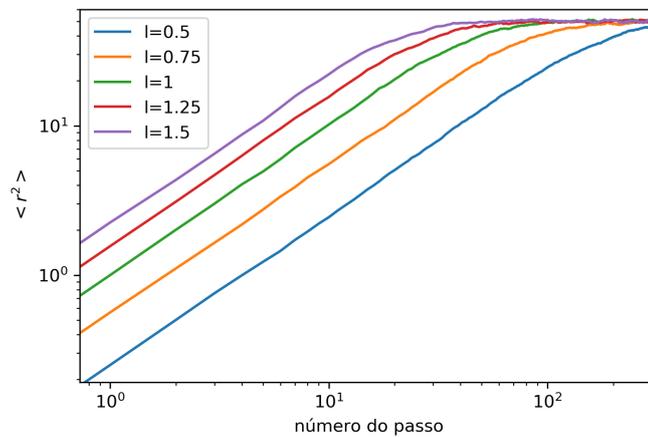
Fazendo o mesmo para passos de tamanho fixos, podemos calcular o coeficiente de difusão  $D_t = \frac{l^2}{4}$ . Na Figura 11 temos a evolução temporal de  $\langle r^2 \rangle$  da simulação. Na Tabela 2 temos os dados obtidos pela regressão linear.

Tabela 1 – Dados obtidos pela regressão linear no caso exponencial.

Exponencial			
$\beta$	$\alpha$	$D_s$	$D_t$
1	0.979	0.494	0.500
1.2	0.981	0.350	0.347
1.4	0.978	0.267	0.255
1.6	0.985	0.199	0.195
1.8	1.028	0.144	0.154
2	0.996	0.128	0.125

Fonte: elaborado pelo autor (2019).

Figura 11 – Evolução da variância em função do número do passo utilizando passos de tamanho fixo.



Fonte: elaborado pelo autor (2019).

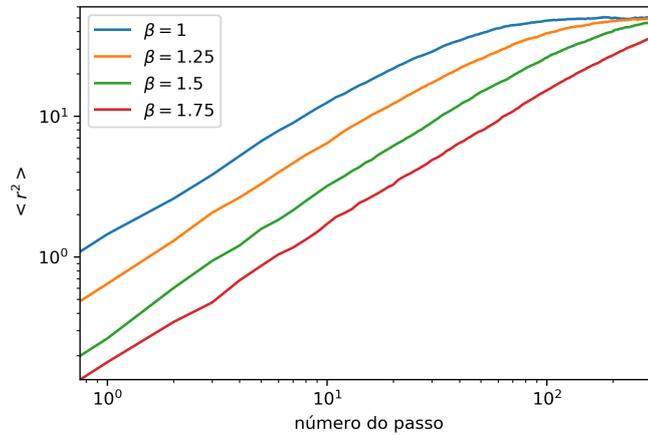
Tabela 2 – Dados obtidos pela regressão linear no caso de passo fixo.

Passo fixo			
$l$	$\alpha$	$D_s$	$D_t$
0.5	0.985	0.063	0.063
0.75	0.999	0.139	0.141
1	1.006	0.249	0.250
1.25	1.007	0.389	0.390
1.5	1.002	0.549	0.563

Fonte: elaborado pelo autor (2019).

Faremos a mesma análise para as distribuições de potência e Standard-Cauchy. Nas Figuras 12 e 13 temos a evolução temporal de  $\langle r^2 \rangle$  das simulações. Nas Tabelas 3 e 4 temos os dados obtidos pela regressão linear.  $D_t$  foi deixado em branco pois estes valores divergem.

Figura 12 – Evolução da variância em função do número do passo utilizando uma distribuição de potência.



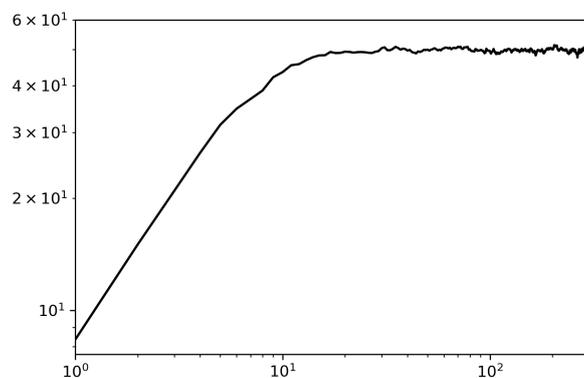
Fonte: elaborado pelo autor (2019).

Tabela 3 – Dados obtidos pela regressão linear para o caso de lei de potência.

$\beta$	Potência		
	$\alpha$	$D_s$	$D_t$
1	0.983	0.342	-
1.25	1.022	0.141	-
1.50	1.085	0.064	-
1.75	0.983	0.043	-

Fonte: elaborado pelo autor (2019).

Figura 13 – Evolução da variância em função do número do passo utilizando a distribuição Standard-Cauchy.



Fonte: elaborado pelo autor (2019).

Tabela 4 – Dados obtidos pela regressão linear no caso Standard-Cauchy.

Standard-Cauchy			
Medida	$\alpha$	$D_s$	$D_t$
1	0.801	2.046	-
2	0.788	2.068	-
3	0.784	2.087	-
4	0.794	2.019	-
5	0.793	1.983	-

Fonte: elaborado pelo autor (2019).

Distribuições de passo fixo, exponenciais e de potência possuem  $\alpha \approx 1$ . Portanto no começo da difusão estas distribuições descrevem um processo típico de difusão. Já a distribuição Standard-Cauchy possui  $\alpha < 1$ , logo descreve um processo sub-difusivo.

## 5 CONCLUSÃO

O objetivo deste trabalho foi de analisar o modelo de *random walk* e como ele se aplica ao processo de difusão de partículas confinadas. Vimos que a equação de difusão pode ser aplicada a tal modelo. Foi feito então um estudo sobre esta equação onde obtemos sua solução analítica no caso de difusão livre e para o caso de confinamento em um disco.

Simulações foram feitas do processo de difusão de partículas confinadas em um disco, onde foi aplicado o modelo de *random walk* para descrever o movimento destas partículas. Foram utilizadas as distribuições de potência, exponencial e Standard-Cauchy na realização destas simulações. Utilizando o método de regressão linear obteve-se o coeficiente de difusão e o expoente  $\alpha$  de cada uma delas. Concluimos que o coeficiente de difusão para distribuições, cujo valor  $\langle l^2 \rangle$  é finito, ainda obedece a relação  $D \propto \langle l^2 \rangle$ .

Por fim, a análise da difusão em um espaço limitado baseado nos valores de  $\langle r^2 \rangle$ , mostrou que processos super-difusivos gerados por distribuições de potência e Standard-Cauchy, quando confinadas deixam de descrever tal processo e passam a ser, respectivamente, um processo típico de difusão e sub-difusivo.

## REFERÊNCIAS

- ARFKEN, G.; WEBER, H.; HARRIS, F. **Mathematical Methods for Physicists: A Comprehensive Guide**. Elsevier Science, 2013. ISBN 9780123846549. Disponível em: <[https://books.google.com.br/books?id=qLFo\\\_Z-PoGIC](https://books.google.com.br/books?id=qLFo\_Z-PoGIC)>.
- COOTNER, P. **The random character of stock market prices**. M.I.T. Press, 1964. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=7XGvQgAACAAJ>>.
- DENTZ, M.; CORTIS, A.; SCHER, H.; BERKOWITZ, B. Time behavior of solute transport in heterogeneous media: transition from anomalous to normal transport. **Advances in Water Resources**, v. 27, n. 2, p. 155 – 173, 2004. ISSN 0309-1708. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0309170803001726>>.
- DIETERICH, P.; KLAGES, R.; PREUSS, R.; SCHWAB, A. Anomalous dynamics of cell migration. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, National Academy of Sciences, v. 105, n. 2, p. 459–463, 2008. ISSN 0027-8424. Disponível em: <<https://www.pnas.org/content/105/2/459>>.
- EINSTEIN, A. **Investigations on the Theory of the Brownian Movement**. Dover Publications, 1956. (Dover Books on Physics Series). ISBN 9780486603049. Disponível em: <[https://books.google.com.br/books?id=AOIVupH\\\_hboC](https://books.google.com.br/books?id=AOIVupH\_hboC)>.
- FEYNMAN, R.; LEIGHTON, R.; SANDS, M. **The Feynman Lectures on Physics**. Addison-Wesley, 1963. (The Feynman Lectures on Physics, v. 1). ISBN 9780201021165. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=UtJEAAAIAAJ>>.
- KOSZTOŁOWICZ, T.; DWORECKI, K.; ŃSKI, S. Mrówczy. How to measure subdiffusion parameters. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 94, p. 170602, May 2005. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.94.170602>>.
- KRAMERS, H. Brownian motion in a field of force and the diffusion model of chemical reactions. **Physica**, v. 7, n. 4, p. 284 – 304, 1940. ISSN 0031-8914. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0031891440900982>>.
- MANDELBROT, B.; FREEMAN, W.; COMPANY. **The Fractal Geometry of Nature**. Henry Holt and Company, 1983. (Einaudi paperbacks). ISBN 9780716711865. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=SWcPAQAAMAAJ>>.
- PEARSON, K. The problem of the random walk. **Nature**, v. 72, n. 1865, p. 294–294, 1905. ISSN 1476-4687. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/072294b0>>.
- RAMOS-FERNANDEZ, G.; MATEOS, J.; MIRAMONTES, O.; GERMINAL, C.; LARRALDE, H.; AYALA-OROZCO, B. Lévy walk patterns in the foraging movements of spider monkeys (*Atel Geoffroyi*). **Behavioral Ecology and Sociobiology**, v. 55, 02 2003.