



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

ANA THAIS DE VASCONCELOS FEITOSA

**ESTUDO DA DIFUSÃO DE PARTÍCULAS SOB INFLUÊNCIA DE UM CAMPO
LAPLACIANO**

FORTALEZA

2022

ANA THAIS DE VASCONCELOS FEITOSA

ESTUDO DA DIFUSÃO DE PARTÍCULAS SOB INFLUÊNCIA DE UM CAMPO
LAPLACIANO

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. Cláudio Lucas Nunes de Oliveira

FORTALEZA

2022

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)

- F336e Feitosa, Ana Thais de Vasconcelos.
Estudo da difusão de partículas sob influência de um campo laplaciano / Ana Thais de Vasconcelos Feitosa. – 2022.
48 f. : il. color.
- Trabalho de Conclusão de Curso (graduação) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Curso de Física, Fortaleza, 2022.
Orientação: Prof. Dr. Cláudio Lucas Nunes de Oliveira.
1. Random Walk. 2. Difusão. 3. Laplacian Random Walk. 4. Cadeias Poliméricas. I. Título.
CDD 530
-

ANA THAIS DE VASCONCELOS FEITOSA

ESTUDO DA DIFUSÃO DE PARTÍCULAS SOB INFLUÊNCIA DE UM CAMPO
LAPLACIANO

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: 10/02/2022

BANCA EXAMINADORA

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

Prof. Dr. Jeanlex Soares de Sousa
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Jorge Luiz Bezerra de Araújo
Universidade de Fortaleza (UNIFOR)

Dedicado à minha família, amigos e a todas as
pessoas que sempre me apoiaram.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente à minha mãe Ana Patrícia, à minha avó Ademilde e ao meu irmão Antony Samuel por todo apoio e incentivo demonstrado ao longo da minha vida.

Agradeço ao professor Cláudio Lucas Nunes de Oliveira pelo seu apoio, paciência, dedicação e ensinamentos passados ao longo destes meus anos de iniciação científica. Obrigada por toda ajuda e conselhos dados, no âmbito acadêmico e pessoal, em diversos momentos da minha graduação.

Agradeço a todos os professores do Departamento de Física da Universidade Federal do Ceará, em especial aos professores Saulo-Davi Soares e Reis, José Ramos Gonçalves e Jeanlex Soares de Sousa por compartilharem comigo não somente conhecimentos, mas também inúmeras lições de vida das quais nunca esquecerei.

Agradeço a todos os meus colegas do grupo de Física Biológica, em especial João e Wallace por toda ajuda dada durante a realização deste trabalho.

Agradeço a todos os amigos que fiz ao longo dessa jornada acadêmica, Júnior, Barbara, Brehmer, Igor, Cássio e Mateus por todos os bons momentos que compartilhamos juntos. Agradeço também aos meus amigos, Ribamar, Diêgo, André, Ian, Pedro, Lara, Glauber, Caio e Vasco por todas as conversas e momentos divertidos que vivemos. Por fim, gostaria de agradecer também aos meus amigos, Genivaldo, Bruno, João Pedro, William e Wagner por me ajudarem sempre que precisei.

Agradeço a todos os funcionários do Departamento de Física, em especial à Ana Lúcia por todos os momentos de descontração e por todos os cafés. Agradeço também à Gervina por todos os conselhos e todas as boas conversas que tivemos.

Agradeço às minhas duas amigas Tamires Azevedo e Bruna Andrade por todo apoio e ajuda ao longo desses 8 anos de amizade e que, mesmo que estejamos um pouco distantes, sempre terão um lugar especial no meu coração.

Agradeço ao CNPq pelo financiamento concedido através das bolsas de iniciação científica durante minha graduação.

RESUMO

Neste trabalho, nós estudamos o modelo de *Random Walk* tradicional e algumas de suas variações, realizando diversas simulações computacionais em duas e três dimensões. Nós calculamos o deslocamento quadrático médio a fim de analisar a dispersão das partículas, ou seja, o quanto elas se afastam da origem, e observamos sua característica linear ou não-linear com o tempo, e como esse comportamento depende das restrições adotadas no movimento das partículas. Aplicamos uma variação no modelo de *Random Walk* tradicional introduzindo a condição de que a partícula não pode ocupar uma região do espaço já ocupado por ela anteriormente, formando, assim, um *Self-Avoiding Walk*. E, com o intuito de obter um *Self-Avoiding Walk* sem “trapping” nas suas configurações estruturais, utilizamos um modelo, chamado *Laplacian Random Walk*, em que o movimento aleatório das partículas é acoplado a um campo laplaciano. A probabilidade de direção de movimento depende da solução da Equação de Laplace, fazendo com que a partícula reconheça possíveis armadilhas com antecedência, podendo, assim, evitá-las. Observamos que as partículas executando um *Self-Avoiding Walk* ou um *Laplacian Random Walk* se comportam de maneira superlinear e analisamos como isso afeta o deslocamento quadrático médio, o coeficiente de difusão e a dimensão fractal do sistema.

Palavras-chave: *Random Walk*; difusão; *Laplacian Random Walk*; cadeias poliméricas.

ABSTRACT

In this work, we study the traditional Random Walk model and some of its variations, performing several computer simulations in two and three dimensions. We calculate the mean squared displacement in order to analyze the dispersion of the particles, namely, how much they move away from the origin, and observe their linear or non-linear characteristic with time, and how such behavior depends on the restrictions adopted in the movement of the particles. We apply a variation on the traditional Random Walk model introducing the condition that the particle cannot occupy a region in the space already occupied by it, thus forming a Self-Avoiding Walk. And, in order to obtain a Self-Avoiding Walk without trapping in its structural configurations, we use the so-called model Laplacian Random Walk. Where the random movement of the particles is coupled to a Laplacian field. The probability of direction of motion depend on the solution of the Laplace Equation, causing the particle to recognize possible trappings in advance, thus being able to avoid them. We observe that particles performing a Self-Avoiding Walk or a Laplacian Random Walk behave in a superlinear way and we analyze how this affects the mean squared displacement, the diffusion coefficient and the fractal dimension of the system.

Keywords: Random Walk; diffusion; Laplacian Random Walk; polymer chains.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Representação dos possíveis passos de uma partícula em um <i>Random Walk</i> unidimensional.	16
Figura 2 – Trajetória de 5 partículas, representadas em cores distintas, descrevendo um <i>Random Walk</i> unidimensional após 150 passos com $u = w = \frac{1}{2}$	16
Figura 3 – Comportamento do deslocamento quadrático médio para um conjunto de 1.000 partículas em um <i>Random Walk</i> unidimensional após 10.000 passos.	21
Figura 4 – Comportamento da distribuição de passos em um conjunto de 1.000 partículas executando um <i>Random Walk</i> unidimensional. Quando o valor de N aumenta, a distribuição torna-se cada vez mais estreita em torno do valor médio.	22
Figura 5 – Evolução temporal da distribuição de probabilidade $P(x,t)$ para diferentes valores de tempo, ou seja, diferentes números de passos realizados por um conjunto de 3.000 partículas executando um <i>Random Walk</i> unidimensional. Com o passar o tempo, a distribuição evolui como uma gaussiana de largura variável.	24
Figura 6 – Trajetória de 4 partículas distintas realizando um <i>Random Walk</i> em uma rede bidimensional com diferentes passos.	28
Figura 7 – Comportamento do deslocamento quadrático médio para um conjunto de 2.000 partículas realizando um <i>Random Walk</i> em uma rede quadrada após 10.000 passos.	29
Figura 8 – Trajetória de 2 partículas distintas realizando um <i>Random Walk</i> em uma rede tridimensional em tempos distintos, ou seja, com diferentes números de passos.	30
Figura 9 – Comportamento linear do deslocamento quadrático médio para um conjunto de 2.000 partículas executando um <i>Random Walk</i> em uma rede tridimensional após 100.000 passos.	30
Figura 10 – Trajetória de duas realizações distintas realizando um <i>Self-Avoiding Walk</i> em uma rede quadrada, 50 x 50, com diferentes números de passos.	32
Figura 11 – Número de partículas que ainda está difundindo em relação ao tempo, t , em um <i>Self-Avoiding Walk</i> bidimensional. Podemos observar que em um conjunto de 100.000 partículas, quantas partículas não presas ainda estavam realizando os seus movimentos aleatórios no tempo $t \approx 540$	33

Figura 12 – Comportamento não-linear do deslocamento quadrático médio para um conjunto de 100.000 partículas executando um <i>Self-Avoiding Walk</i> em uma rede bidimensional com até 80 passos. O fit da regressão linear mostra um expoente superlinear $\gamma = 1,28$	34
Figura 13 – Trajetória de duas partículas distintas executando um <i>SAW</i> em uma rede cúbica de lado $L = 500$, após 6.304 passos em (a) e 19.875 passos em (b). As cores mais escuras da figura representam a maior proximidade com a origem, ficando mais claro à medida que a partícula se distancia do seu ponto inicial.	35
Figura 14 – Número de partículas que ainda está difundindo em relação ao tempo, t , em um <i>Self-Avoiding Walk</i> tridimensional. Podemos observar que em um conjunto de 10.000 partículas, quantas partículas não presas ainda estavam realizando os seus movimentos aleatórios no tempo $t \approx 38.000$	35
Figura 15 – Comportamento não-linear do deslocamento quadrático médio para um conjunto de 100.000 partículas executando um <i>Self-Avoiding Walk</i> em uma rede tridimensional com lado $L = 500$ em até 10.000 passos. O fit da regressão linear mostra o expoente superlinear $\gamma = 1,04$	36
Figura 16 – Trajetória realizada por 4 partículas distintas executando um <i>Laplacian Random Walk</i> em uma rede quadrada com $L = 500$. O aumento do parâmetro de controle η leva a trajetórias maiores e mais alongadas. A partícula realizou 145 passos em (a), 699 passos em (b), 1.487 passos em (c) e 2.450 passos em (d).	37
Figura 17 – Solução do campo laplaciano para as mesmas trajetórias apresentadas na Figura 16. O vermelho escuro representa os sítios visitados pela partícula, onde $\phi = 1$, enquanto azul escuro representa as bordas onde $\phi = 0$	40
Figura 18 – Número de partículas que em um conjunto de 1.000 partículas ainda está difundindo em relação ao tempo, t , em um <i>Laplacian Random Walk</i> com diferentes valores de η . Podemos observar que ao aumentar o valor de η as partículas não presas tendem a realizar mais passos.	42
Figura 19 – Painéis (a) e (c) apresentam as trajetórias de duas partículas executando um <i>Laplacian Random Walk</i> em uma rede quadrada com lado $L = 512$ e $\eta = 10$. Os painéis (b) e (d) representam as respectivas soluções do campo laplaciano para as trajetórias de (a) e (d).	43

Figura 20 – Comportamento do deslocamento quadrático médio de \mathcal{N} partículas em relação ao aumento do parâmetro de controle η	44
Figura 21 – Comportamento da constante de difusão, D , de um conjunto de \mathcal{N} partículas em relação ao aumento do parâmetro de controle η	44
Figura 22 – Comportamento do expoente de ponta-a-ponta, ν , de um conjunto de \mathcal{N} partículas em relação ao aumento do parâmetro de controle η	45
Figura 23 – Comportamento da dimensão fractal, d_f , em relação ao aumento do parâmetro de controle η	45

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Comparação entre o valor do parâmetro η e o número de partículas que, dentre um conjunto de 1.000 partículas, alcançaram a borda da rede quadrada de lado $L = 512$, executando um <i>Laplacian Random Walk</i> e a média do número de passos realizados por essas partículas. Podemos observar que à medida que aumentamos o valor de η as partículas tendem a realizar mais passos, e portanto se distanciam cada vez mais da origem, difundindo aleatoriamente até alcançar a borda da rede.	42
---	----

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	14
2	O MODELO DE RANDOM WALK TRADICIONAL	16
2.1	Random Walk em uma dimensão	16
2.1.1	<i>Distribuição de probabilidades</i>	17
2.1.2	<i>Distribuição Gaussiana</i>	22
2.1.3	<i>Difusão</i>	25
2.1.4	<i>Random Walk em d dimensões</i>	27
3	VARIAÇÕES DO MODELO DE RANDOM WALK TRADICIONAL .	32
3.1	Self-Avoiding Walk	32
3.2	Laplacian Random Walk	36
4	RESULTADOS E DISCUSSÕES	41
5	CONCLUSÃO	46
	REFERÊNCIAS	47

1 INTRODUÇÃO

Muitas áreas de pesquisa científica hoje em dia estão comprometidas em fazer com que o ser humano viva mais e melhor. Dentro desse contexto estão as pesquisas que buscam entender como cada agente biológico funciona tanto em condições ordinárias quanto em condições patológicas, o que pode levar a vários tipos de doenças. Proteínas, e outros tipos de moléculas biológicas, imersas em ambiente aquoso, estão em contínuo movimento. Vivo ou não, tudo está sujeito a flutuações térmicas. Mas como descrever o movimento desses agentes biológicos devido a essas flutuações térmicas? Perguntas deste tipo só podem ser respondidas levando em consideração o movimento aleatório onipresente em escala microscópica. Portanto compreender a dinâmica presente microscopicamente é fundamental para descrever e compreender o comportamento macroscópico presente em diversos fenômenos.

O movimento irregular de partículas imersas em um fluido foi observado inicialmente por Robert Brown (BROWN, 1828), que descreveu o movimento irregular e incessante de grãos de pólen suspensos em água. Esse movimento irregular e aleatório ficou conhecido posteriormente como movimento browniano e a primeira explicação formal deste fenômeno foi desenvolvida pelo físico Albert Einstein (EINSTEIN, 1956). Einstein descreveu a sua teoria do movimento de partículas suspensas em um fluido como um movimento aleatório ocasionado pelas colisões com as moléculas do fluido. Atualmente, o movimento browniano continua sendo uma ferramenta importante na descrição de fenômenos aleatórios, tais como os movimentos realizados pelas partículas durante um fenômeno de difusão. Uma maneira de descrever esse movimento aleatório microscópico executado por partículas, durante um evento macroscópico de difusão, é através da utilização do modelo de *Random Walk*.

Random Walk (RW) é um modelo estocástico utilizado na descrição de processos que possuam alguma variável que apresente um comportamento aleatório no decorrer do tempo. O modelo de *RW* possui uma fácil aplicabilidade, sendo facilmente modificado, alterando alguns de seus parâmetros, e implementado em d -dimensões. Por esse motivo, o modelo de *RW* é utilizado para explicar fenômenos em diversas áreas do conhecimento, como Física (KEMPE, 2003), Economia (COOTNER, 1964), Biologia (CODLING *et al.*, 2008), Química (KOMKOV; DANNON, 1991) e outros (WEISS; RUBIN, 1983).

Podemos utilizar uma variação do modelo de *RW* tradicional, conhecida como *Self-Avoiding Walk (SAW)* com o intuito de descrever o comportamento de cadeias poliméricas (GENNES; GENNES, 1979; GENNES; LEGER, 1982). Esta variação consiste em incluir uma

regra na dinâmica das partículas, nomeadamente, de impedir que elas ocupem o mesmo lugar no espaço mais de uma vez, restringindo os seus movimentos aleatórios. Neste contexto, os sítios visitados pela partícula representam os monômeros e a sua característica auto-evitante as interações de volume entre esses monômeros. Todavia, as trajetórias percorridas pelas partículas em um *SAW* tendem a ser curtas pois elas acabam ficando presas rapidamente. Uma forma de permitir trajetórias mais longas é utilizar outra variação do modelo de *RW* tradicional, conhecida como *Laplacian Random Walk (LRW)* (LYKLEMA *et al.*, 1986), em que o movimento da partícula é acoplado a um campo laplaciano. Este novo modelo apresenta a mesma característica auto-evitante presente no *SAW* mas com a diferença de que a probabilidade de movimento da partícula a cada instante de tempo dependerá do valor do campo escalar em cada sítio, obtido através da solução da Equação de Laplace. Tal modelo faz com que as partículas reconheçam possíveis armadilhas com antecedência, podendo assim evitá-las, o que pode ser usado para estudar, por exemplo, a formação de longas cadeias poliméricas.

Neste trabalho, nós estudamos as principais características do modelo de *Random Walk* tradicional, do *Self-Avoiding Walk* e o *Laplacian Random Walk*. No capítulo 2, apresentamos uma revisão do modelo de *RW* tradicional e analisamos a sua aplicação no caso mais simples, o caso unidimensional. Em seguida estendemos o modelo para o caso geral em d -dimensões. Mostramos como as partículas no modelo de *RW* se comportam com o decorrer do tempo e demonstramos a conexão entre o fenômeno macroscópico de difusão e o movimento aleatório realizado por partículas em um *Random Walk*. Em seguida, no capítulo 3, apresentamos as características das duas variações do modelo de *RW* tradicional, observando o comportamento difusivo das partículas em cada caso e evidenciamos as principais diferenças em relação ao modelo tradicional. No capítulo 4, fazemos uma análise do comportamento das partículas executando um *LRW*. Mostramos como o deslocamento quadrático médio se relaciona com o tempo à medida que o campo laplaciano aumenta a sua influência na probabilidade de escolha do caminho realizado pela partícula, e como essa relação também afeta a constante de difusão, D , e a dimensão fractal, d_f de um conjunto de \mathcal{N} partículas. E, por fim, no capítulo 5, concluímos que as modificações realizadas no modelo tradicional alteram a forma como as partículas tendem a se dispersar no meio, passando a não descreverem mais uma difusão regular, mas, sim, uma difusão anômala, apresentando uma característica superlinear com o tempo.

2 O MODELO DE RANDOM WALK TRADICIONAL

2.1 Random Walk em uma dimensão

O modelo de *Random Walk* (RW) mais simples envolve partículas capazes de dar passos de comprimento ℓ ao longo de uma trajetória retilínea, existindo apenas duas direções possíveis de deslocamento, como podemos observar na Figura 1. Neste modelo, a partícula começa na origem, $x = 0$, e o seu movimento, a cada instante de tempo, ocorre aleatoriamente para direita, com uma probabilidade u , ou para a esquerda, com probabilidade $w = 1 - u$. Todos os passos possuem as mesmas regras, fazendo com que as partículas executem um movimento aleatório.

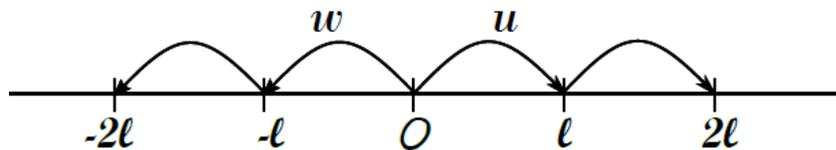


Figura 1 – Representação dos possíveis passos de uma partícula em um *Random Walk* unidimensional.

Na Figura 2 podemos observar o histórico do movimento de 5 partículas independentes e não interagentes movendo-se em um *Random Walk* unidimensional, onde cada passo ocorre com probabilidade de movimento igual em ambas as direções possíveis, ou seja, $u = w = \frac{1}{2}$.

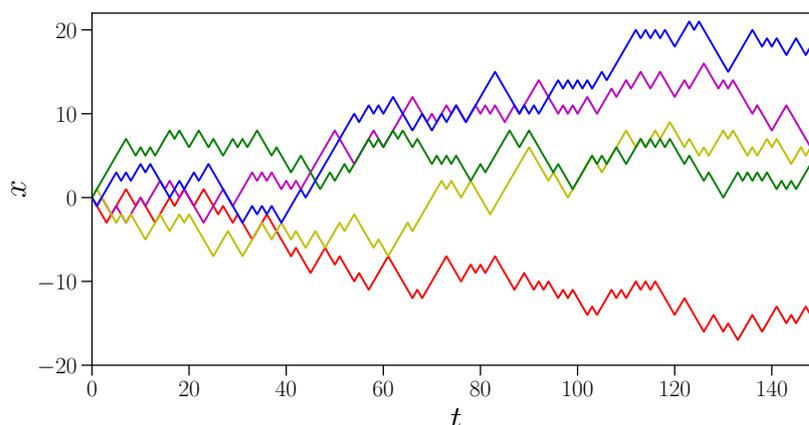


Figura 2 – Trajetória de 5 partículas, representadas em cores distintas, descrevendo um *Random Walk* unidimensional após 150 passos com $u = w = \frac{1}{2}$.

2.1.1 Distribuição de probabilidades

Supondo que uma partícula esteja na origem, sua posição x após N passos é dado pelo produto do seu deslocamento líquido m percorrido na direção do eixo positivo de x , pelo comprimento ℓ do passo, ou seja,

$$x = m\ell. \quad (2.1)$$

Considerando N_1 o número total de passos para a direita e N_2 o número total de passos para a esquerda, de forma que o número total de passos, N , é dado por

$$N = N_1 + N_2. \quad (2.2)$$

Então, m é compreendido entre $-N \leq m \leq N$, o deslocamento líquido percorrido para a direita é dado por,

$$m = N_1 - N_2, \quad (2.3)$$

como $N_2 = N - N_1$ podemos escrever,

$$m = 2N_1 - N. \quad (2.4)$$

Logo, sendo u a probabilidade da partícula dar um passo para a direita e w a probabilidade da partícula dar um passo para a esquerda, a probabilidade de uma determinada sequência de N passos de uma determinada partícula em um *Random Walk* unidimensional é dada por,

$$\left(u^{(1)}u^{(2)}\dots u^{(N_1)}\right)\left(w^{(1)}w^{(2)}\dots w^{(N_2)}\right) = u^{N_1}w^{N_2}. \quad (2.5)$$

O número de sequências com N_1 passos para a direita e N_2 passos para a esquerda é dada pelo fator combinatório,

$$\frac{N!}{N_1!N_2!}. \quad (2.6)$$

Portanto, em um total de N passos a probabilidade de termos N_1 passos para a direita e $N_2 = N - N_1$ passos para a esquerda é dada pela distribuição binomial,

$$\begin{aligned}
W_N(N_1) &= \frac{N!}{N_1!N_2!} u^{N_1} w^{N_2}, \\
&= \frac{N!}{N_1!(N-N_1)!} u^{N_1} w^{N-N_1}, \\
&= \binom{N}{N_1} u^{N_1} w^{N-N_1}.
\end{aligned} \tag{2.7}$$

A Equação 2.7 já encontra-se normalizada. Percebemos que,

$$\begin{aligned}
\sum_{N_1=0}^N W_N(N_1) &= \sum_{N_1=0}^N \binom{N}{N_1} u^{N_1} w^{N-N_1}, \\
&= (u+w)^N, \\
&= 1,
\end{aligned} \tag{2.8}$$

pois $u+w=1$.

A Equação 2.4 nos mostra que se a partícula realiza N_1 passos para a direita em um total de N passos, o deslocamento líquido m desde a origem é determinado. Assim, a probabilidade $P_N(m)$ de encontrar a partícula em uma determinada posição após N passos é igual a $W_N(N_1)$. Logo,

$$P_N(m) = W_N(N_1). \tag{2.9}$$

Utilizando as Equações 2.3 e 2.4, teremos,

$$\begin{aligned}
N_1 &= \frac{N+m}{2}, \\
N_2 &= \frac{N-m}{2}.
\end{aligned} \tag{2.10}$$

Substituindo as Equações 2.10 na Equação 2.7, temos que a probabilidade de encontrar a partícula em qualquer posição após N passos é,

$$P_N(m) = \frac{N!}{\left(\frac{N+m}{2}\right)! \left(\frac{N-m}{2}\right)!} u^{\frac{N+m}{2}} w^{\frac{N-m}{2}}, \tag{2.11}$$

ou, equivalentemente,

$$P_N(m) = \frac{N!}{\left(\frac{N+m}{2}\right)! \left(\frac{N-m}{2}\right)!} u^{\frac{N+m}{2}} (u-1)^{\frac{N-m}{2}}. \tag{2.12}$$

O valor médio de N_1 passos para a direita, por definição, é,

$$\begin{aligned}
\langle N_1 \rangle &= \sum_{N_1=0}^N \frac{N!}{N_1!(N-N_1)!} u^{N_1} w^{N-N_1}, \\
&= \sum_{N_1=0}^N \frac{N!}{N_1!(N-N_1)!} \left[u \frac{\partial}{\partial u} (u^{N_1}) \right] w^{N-N_1}, \\
&= u \frac{\partial}{\partial u} \left[\sum_{N_1=0}^N \frac{N!}{N_1!(N-N_1)!} u^{N_1} w^{N-N_1} \right], \\
&= u \frac{\partial}{\partial u} (u+w)^N, \\
&= uN(u+w)^{N-1},
\end{aligned} \tag{2.13}$$

assim,

$$\langle N_1 \rangle = Nu. \tag{2.14}$$

De forma semelhante, o número médio de N_2 passos para a esquerda é dado por,

$$\langle N_2 \rangle = N - \langle N_1 \rangle = Nw. \tag{2.15}$$

Assim, podemos calcular o deslocamento médio da partícula. Utilizando as Equações 2.1 e 2.3, vemos que o deslocamento médio da partícula é dado por,

$$\begin{aligned}
\langle x \rangle &= \langle m \rangle \ell, \\
&= \langle N_1 - N_2 \rangle \ell, \\
&= (u - w)N\ell.
\end{aligned} \tag{2.16}$$

Para o caso não tendencioso, $u = w = \frac{1}{2}$, encontramos,

$$\langle x \rangle = 0. \tag{2.17}$$

Este resultado nos mostra que, em média, partículas, obedecendo as regras de movimento de um *Random Walk* não tendencioso, tendem a se mover em torno do seu ponto de partida inicial. Entretanto $\langle x \rangle$ não nos informa sobre a dispersão das partículas, ou seja, o quão longe elas se distanciam da origem em um certo intervalo de tempo, assim, afim de compreender como essas partículas se comportam à medida que o número de passos aumenta podemos calcular o seu deslocamento quadrático médio $\langle x^2 \rangle$,

$$\begin{aligned}\langle x^2 \rangle &= \langle m^2 \rangle \ell^2, \\ &= (\langle N_1^2 \rangle + \langle N_2^2 \rangle - 2\langle N_1 N_2 \rangle) \ell^2.\end{aligned}\tag{2.18}$$

Calculando o valor médio de N_1^2 e N_2^2 ,

$$\begin{aligned}\langle N_1^2 \rangle &= \left(u \frac{\partial}{\partial u} \right)^2 [(u+w)^N] = uN + u^2(N-1), \\ \langle N_2^2 \rangle &= \left(w \frac{\partial}{\partial w} \right)^2 [(u+w)^N] = wN + w^2(N-1).\end{aligned}\tag{2.19}$$

Utilizando as Equações 2.19 e, novamente, admitindo $u = w = \frac{1}{2}$, temos,

$$\langle x^2 \rangle = N\ell^2.\tag{2.20}$$

Considerando que cada passo ocorra em um intervalo de tempo constante τ , o tempo total do movimento após N passos é dado por $t = N\tau$. Logo,

$$\langle x^2 \rangle = 2Dt,\tag{2.21}$$

onde $D = \frac{\ell^2}{2\tau}$ é a constante de difusão, que caracteriza a dispersão de partículas em um determinado meio a uma determinada temperatura. Em geral, a constante de difusão depende essencialmente do tamanho da partícula, da estrutura do meio e da temperatura (BERG, 2018).

Observando a Equação 2.21 podemos concluir que o deslocamento quadrático médio das partículas se comporta linearmente com o tempo, como podemos verificar no nosso resultado numérico mostrado na Figura 3.

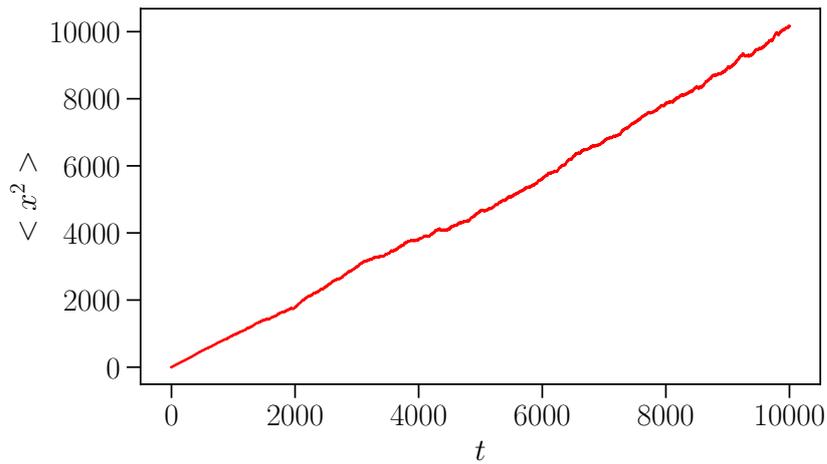


Figura 3 – Comportamento do deslocamento quadrático médio para um conjunto de 1.000 partículas em um *Random Walk* unidimensional após 10.000 passos.

Afim de evidenciar a dispersão dos valores de N_1 em torno do seu valor médio, podemos calcular a sua variância, logo, utilizando as Equações 2.19 temos,

$$\langle (\Delta N_1)^2 \rangle = \langle N_1^2 \rangle - \langle N_1 \rangle^2 = Nuw. \quad (2.22)$$

Sendo o desvio padrão calculado a partir da raiz quadrada da variância,

$$\sigma_{N1} = \sqrt{\langle (\Delta N_1)^2 \rangle} = \sqrt{Nuw}. \quad (2.23)$$

O desvio padrão relativo é então,

$$\frac{\Delta N_1^*}{\langle N_1 \rangle} = \sqrt{\frac{w}{u}} \frac{1}{\sqrt{N}}. \quad (2.24)$$

Podemos observar que as Equações 2.22 e 2.23 crescem com o valor de N , enquanto a Equação 2.23 decresce com o valor de \sqrt{N} , indicando que a distribuição binomial se torna muito fina centrada em torno do valor médio $\langle N_1 \rangle$, para N suficientemente grande (SALINAS, 1997), como podemos observar na Figura 4.

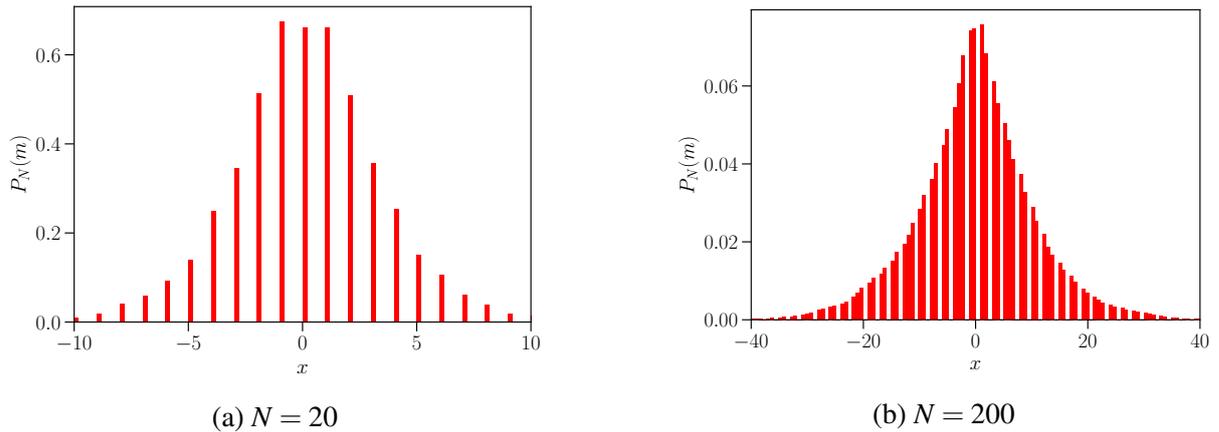


Figura 4 – Comportamento da distribuição de passos em um conjunto de 1.000 partículas executando um *Random Walk* unidimensional. Quando o valor de N aumenta, a distribuição torna-se cada vez mais estreita em torno do valor médio.

2.1.2 Distribuição Gaussiana

Podemos analisar o comportamento da distribuição binomial, Equação 2.7, a medida que o número de passos aumenta, ou seja, para tempos longos com $N \rightarrow \infty$. Neste caso temos que,

$$\begin{aligned} P_N(0) &= w^N \rightarrow 0, \\ P_N(N) &= u^N \rightarrow 0. \end{aligned} \tag{2.25}$$

Portanto, podemos afirmar que a distribuição de probabilidade, $P_N(N_1)$, apresenta um valor máximo para $N_1 = \bar{N} = rN$, com $0 < r < 1$ (SALINAS, 1997). Para analisarmos esse valor máximo, é mais conveniente trabalhar com o $\ln P_N(N_1)$ que varia mais lentamente que o próprio $P_N(N_1)$. Já que a função logaritmo é monotônica crescente, deve apresentar o mesmo máximo da função $P_N(N_1)$. Assim,

$$f(N_1) = \ln P_N(N_1) = \ln N! - \ln N_1! - \ln(N - N_1)! + N_1 \ln u + (N - N_1) \ln w. \tag{2.26}$$

Próximo ao ponto máximo, tanto N_1 como $N - N_1$ apresentam a mesma ordem de N , ou seja, tornam-se tão grandes quanto N , e, assim, com o intuito de eliminar os fatoriais podemos utilizar a aproximação de Stirling (SIQUEIRA; BEUST, 2008), da forma,

$$\ln N! \approx N \ln N - N. \tag{2.27}$$

Logo,

$$f(N_1) = N \ln N - N_1 \ln N_1 - (N - N_1) \ln(N - N_1) + N_1 \ln u + (N - N_1) \ln w. \quad (2.28)$$

Podemos escrever,

$$\frac{\partial f}{\partial N_1} = -\ln N_1 + \ln(N - N_1) + \ln u - \ln w = 0, \quad (2.29)$$

no limite em que $N \rightarrow \infty$, o valor para o qual $f(N_1)$ é máxima é n_1 , então,

$$-\ln n_1 + \ln(N - n_1) + \ln u - \ln w = 0, \quad (2.30)$$

portanto,

$$n_1 = Nu = \langle N_1 \rangle. \quad (2.31)$$

Logo, o valor mais provável coincide com o valor médio considerando N suficientemente grande. Também podemos analisar o valor da derivada segunda de $f(N_1)$,

$$\frac{\partial^2 f}{\partial N_1^2} = \frac{-1}{N_1} - \frac{1}{N - N_1}. \quad (2.32)$$

Expandindo a Equação 2.32 em série de Taylor até segunda ordem em torno do seu ponto máximo,

$$f(N_1) = f(n_1) + (N_1 - n_1) \left. \frac{\partial f}{\partial N_1} \right|_{N_1=n_1} + \frac{1}{2} (N_1 - n_1)^2 \left. \frac{\partial^2 f}{\partial N_1^2} \right|_{N_1=n_1},$$

então,

$$\ln P_N(N_1) = \ln P_N(n_1) - \frac{1}{2Nuw} (N_1 - n_1)^2. \quad (2.33)$$

Aplicando a função exponencial em ambos os lados da Equação 2.33,

$$P_N(N_1) = P_0 \exp\left(\frac{-1}{2Nuw} (N_1 - n_1)^2\right). \quad (2.34)$$

Considerando o caso não tendencioso, $u = w = \frac{1}{2}$, e as Equações 2.10, 2.17 e 2.21 temos,

$$P(x, t) = P_0 \exp\left(\frac{-x^2}{4Dt}\right). \quad (2.35)$$

O valor da constante P_0 pode ser obtido através da condição de normalização (SALINAS, 1997),

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P_0 \exp \left[-\frac{x^2}{2(\Delta N_1^*)^2} \right] dx = 1, \quad (2.36)$$

então temos,

$$P(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp \left(\frac{-x^2}{4Dt} \right). \quad (2.37)$$

A Equação 2.37 apresenta a forma de uma distribuição gaussiana centrada na origem com desvio padrão $\sigma = \sqrt{2Dt}$. A principal característica de uma distribuição gaussiana está na dependência de sua largura relativa com o seu desvio padrão e, portanto, com o tempo, da mesma forma que a distribuição binomial, como podemos observar na Equação 2.23 .

No tempo $t = 0$, $P(x, t)$ descreve um caso limite da distribuição gaussiana quando $\sigma \rightarrow 0$, e pode ser escrita como $P(x, 0) = \delta(x)$, onde $\delta(x)$ é a função delta de Dirac e isso significa que no tempo $t = 0$ a partícula com certeza encontra-se na origem e com o passar do tempo a probabilidade de encontrá-la distante da origem também aumenta (SJÖGREN, 2015). Na Figura 5 podemos observar essa relação, quanto maior o número de passos realizados pela partícula, maior a probabilidade de encontrar a partícula em um ponto distante do seu ponto inicial.

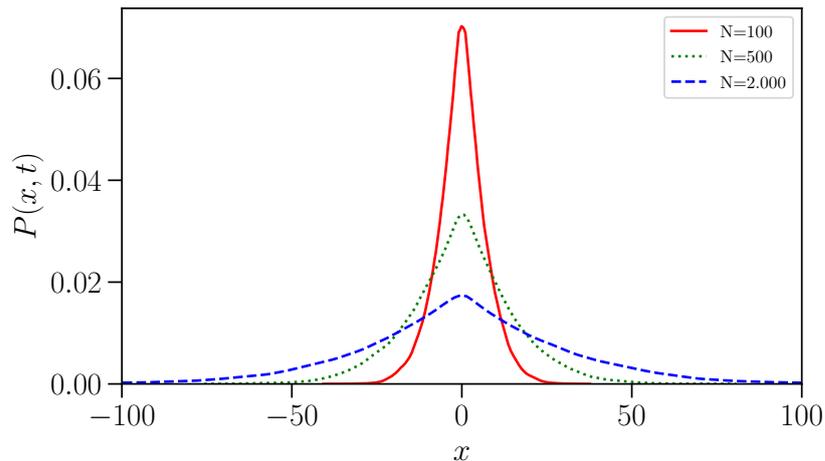


Figura 5 – Evolução temporal da distribuição de probabilidade $P(x, t)$ para diferentes valores de tempo, ou seja, diferentes números de passos realizados por um conjunto de 3.000 partículas executando um *Random Walk* unidimensional. Com o passar do tempo, a distribuição evolui como uma gaussiana de largura variável.

Os valores médios encontrados nas Equações 2.17 e 2.21 para a distribuição binomial, podem ser obtidos novamente utilizando uma abordagem gaussiana,

$$\begin{aligned}\langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} xP(x,t)dx = 0, \\ \langle x^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} x^2P(x,t)dx = 2Dt.\end{aligned}\tag{2.38}$$

2.1.3 Difusão

Para evidenciar a conexão entre o modelo microscópico de partículas executando um *Random Walk* com o fenômeno macroscópico da difusão, podemos supor que o tempo necessário para uma partícula realizar um passo seja τ , então a Equação 2.11 é a probabilidade da partícula ser encontrada na posição $x = m\ell$ no tempo $t = N\tau$. Somente uma partícula que esteja na posição $x = (m+1)\ell$ ou $x = (m-1)\ell$ no tempo $t = N\tau$ pode atingir a posição $x = m\ell$ no passo seguinte, ou seja, em $t = (N+1)\tau$. Então, podemos escrever a relação de recorrência,

$$P_{N+1}(m) = uP_N(m-1) + wP_N(m+1).\tag{2.39}$$

A Equação 2.39 representa um Processo Markoviano, cujos os detalhes da dinâmica do sistema físico são substituídos por leis probabilísticas, onde a probabilidade num dado instante de tempo depende apenas dos valores das probabilidades no instante de tempo anterior (SILVA; LIMA, 2007; SALINAS, 1997).

Considerando que N é suficientemente grande, podemos substituir a função discreta $P_N(m)$ por uma função contínua $\eta(N\tau, m\ell) = \eta(t, x)$. Então, reescrevendo a Equação 2.39 temos,

$$\begin{aligned}P_{N+1}(m) &= \eta((N+1)\tau, m\ell), \\ &= \eta(N\tau + \tau m\ell), \\ &= \eta(t + \tau, x),\end{aligned}\tag{2.40}$$

$$\begin{aligned}P_N(m-1) &= \eta(N\tau, (m-1)\ell), \\ &= \eta(N\tau, m\ell - \ell), \\ &= \eta(t, x - \ell).\end{aligned}\tag{2.41}$$

$$\begin{aligned}
P_N(m+1) &= \eta(N\tau, (m-1)\ell), \\
&= \eta(N\tau, m\ell + 1), \\
&= \eta(t, x + \ell),
\end{aligned} \tag{2.42}$$

substituindo os resultados encontrados na Equação 2.39,

$$\eta(t + \tau, x) = u(\eta(t, x - \ell)) + w(\eta(t, x + \ell)). \tag{2.43}$$

Realizando uma expansão em série de Taylor até segunda ordem, em ambos os lados da Equação 2.43,

$$\eta + \tau \frac{\partial \eta}{\partial t} + \frac{1}{2} \tau^2 \frac{\partial^2 \eta}{\partial t^2} = (u+w)\eta + \ell(w-u) \frac{\partial \eta}{\partial x} + (u+w) \frac{\ell^2}{2} \frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2}, \tag{2.44}$$

admitindo que a probabilidade total satisfaz $u + w = 1$ e dividindo a equação por τ , a Equação 2.44 se reduz para uma equação generalizada que descreve o movimento aleatório das partículas executando um *Random Walk*,

$$\frac{\tau}{2} \frac{\partial^2 \eta}{\partial t^2} + \frac{\partial \eta}{\partial t} = \frac{\ell}{\tau} (w-u) \frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{\ell^2}{2\tau} \frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2}. \tag{2.45}$$

Podemos observar a conexão direta entre o modelo de *Random Walk* e fenômeno da difusão, considerando um meio isotrópico, onde $u = w = \frac{1}{2}$, a Equação 2.45 pode ser reescrita como,

$$\frac{\tau}{2} \frac{\partial^2 \eta}{\partial t^2} + \frac{\partial \eta}{\partial t} = \frac{\ell^2}{2\tau} \frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2},$$

definindo $D = \frac{\ell^2}{2\tau}$, temos,

$$\frac{\tau}{2} \frac{\partial^2 \eta}{\partial t^2} + \frac{\partial \eta}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2}. \tag{2.46}$$

A Equação 2.46 representa uma equação de difusão generalizada, onde $\eta(x, t)$ é a concentração de partículas por unidade de comprimento em torno de x em um instante de tempo arbitrário e D é a constante de difusão.

Se considerarmos que a velocidade de propagação das partículas é constante, ou seja, a velocidade da concentração de partículas por unidade de comprimento é constante, então no limite $\frac{\tau}{2} \frac{\partial^2 \eta}{\partial t^2} \ll \frac{\partial \eta}{\partial t}$ obtemos a equação de difusão,

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2}. \quad (2.47)$$

A Equação 2.47 é a forma padrão da equação de difusão, na qual Einstein baseou a sua explicação do Movimento Browniano (EINSTEIN, 1956). Através de substituição direta, podemos ver que a Equação 2.37 é solução da equação de difusão. Dessa forma, o fenômeno macroscópico de difusão pode ser compreendido a partir de um processo microscópico de partículas executando um movimento aleatório, em um limite de espaço e tempo contínuos (SILVA; LIMA, 2007).

Um processo macroscópico de difusão pode ainda ser classificado a partir do comportamento microscópico das partículas com o passar do tempo, ou seja, como as partículas se dispersam até que o sistema atinja o seu estado de equilíbrio. De forma geral, a classificação do tipo de difusão se dá através do valor do índice γ presente na relação entre o deslocamento quadrático médio das partículas e o tempo (VLAHOS *et al.*, 2008), como mostrado na Equação 2.48,

$$\langle r^2 \rangle \sim t^\gamma, \quad (2.48)$$

quando $\gamma = 1$ a difusão é classificada como normal e quando $\gamma \neq 1$ a difusão é classificada como anômala.

Processos que apresentam uma difusão anômala podem ainda ser classificados como processos subdifusivos, quando $\gamma < 1$, e processos superdifusivos, quando $\gamma > 1$. Observando a Equação 2.21 e a Equação 2.52, podemos concluir que, partículas realizando um *Random Walk* tradicional se comportam de forma a descrever um processo de difusão normal.

2.1.4 *Random Walk em d dimensões*

Podemos estender o modelo de *Random Walk* unidimensional para dimensões superiores. Supondo que uma partícula realiza sua trajetória aleatória em uma rede d -dimensional com comprimento de passo ℓ , podemos representar cada passo da partícula pelo vetor unitário, \vec{e}_i , que aponta para o próximo vizinho da rede a ser visitado pela partícula.

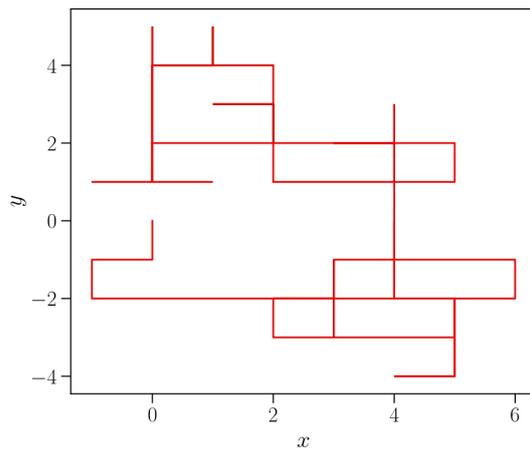
Após n passos o deslocamento total da partícula é,

$$\vec{r}(n) = \ell \sum_{i=1}^n \vec{e}_i. \quad (2.49)$$

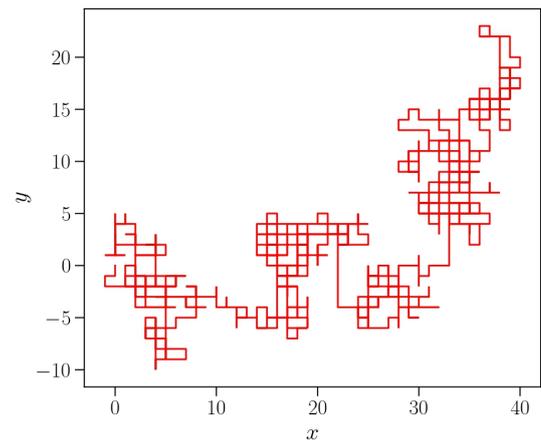
Se a partícula possui probabilidades iguais de se movimentar em todas as direções do espaço, então, $\langle \vec{e}_i \rangle = 0$ e, conseqüentemente o se deslocamento médio é,

$$\langle \vec{r}(n) \rangle = 0. \quad (2.50)$$

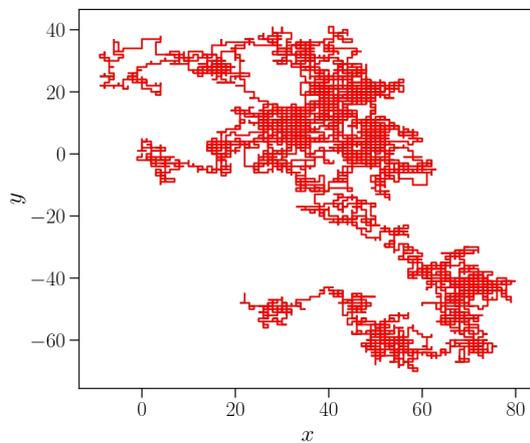
Portanto, podemos concluir que, assim como no caso unidimensional não tendencioso, em média, as partículas tendem a se mover em torno da origem. Na Figura 6, mostramos a evolução da trajetória de 4 partículas executando um *RW* em uma rede quadrada.



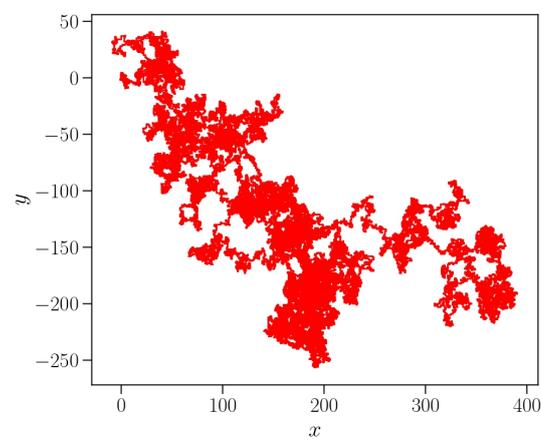
(a) 10^2 passos



(b) 10^3 passos



(c) 10^4 passos



(d) 10^5 passos

Figura 6 – Trajetória de 4 partículas distintas realizando um *Random Walk* em uma rede bidimensional com diferentes passos.

Afim de compreender como as partículas se comportam à medida que o número de passos aumenta, podemos calcular o seu deslocamento quadrático médio $\langle r^2(n) \rangle$,

$$\langle r^2(n) \rangle = \left\langle \left(\ell \sum_{i=1}^n \vec{e}_i \right)^2 \right\rangle, \quad (2.51)$$

como $\langle \vec{e}_i \cdot \vec{e}_j \rangle = \delta_{ij}$, onde $\delta_{ij} = 1$ se $i = j$ e $\delta_{ij} = 0$ se $i \neq j$. Assumindo o caso não tendencioso e considerando que cada passo gasta um tempo τ , de modo que o tempo total após n passos é $t = n\tau$, então,

$$\langle r^2(n) \rangle = (2d)Dt, \quad (2.52)$$

onde,

$$D = \frac{\ell^2}{(2d)\tau}, \quad (2.53)$$

é a constante de difusão para um sistema d -dimensional.

A Equação 2.52 nos mostra que o deslocamento quadrático médio das partículas em um *Random Walk* d -dimensional apresenta um comportamento linear com o tempo. Na Figura 7 mostramos esse comportamento obtido numericamente em uma rede quadrada. Portanto, a contribuição de dimensões extras não muda o comportamento linear, apenas altera a tangente da curva de $\langle r^2 \rangle$.

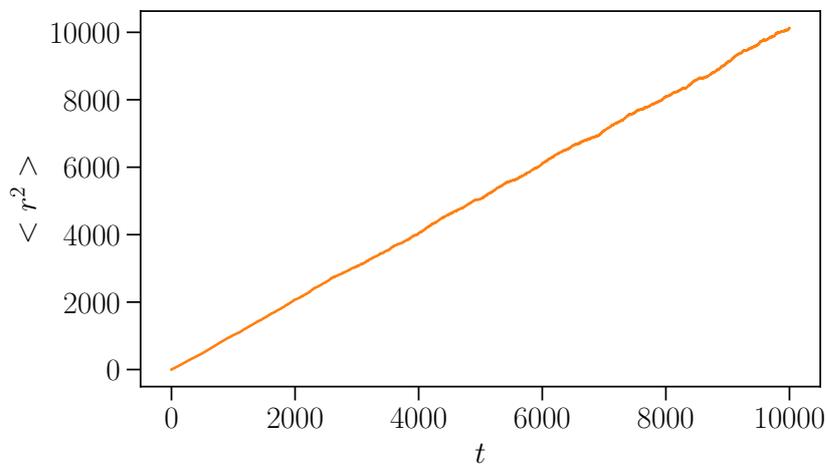


Figura 7 – Comportamento do deslocamento quadrático médio para um conjunto de 2.000 partículas realizando um *Random Walk* em uma rede quadrada após 10.000 passos.

Podemos observar na Figura 8 a trajetória de duas partículas realizando um *Random Walk* em uma rede cúbica, onde as seis direções possíveis apresentam a mesma probabilidade. Na Figura 9 podemos observar que a Equação 2.52 continua válida para o caso de um conjunto de partículas executando um *Random Walk* em 3 dimensões.

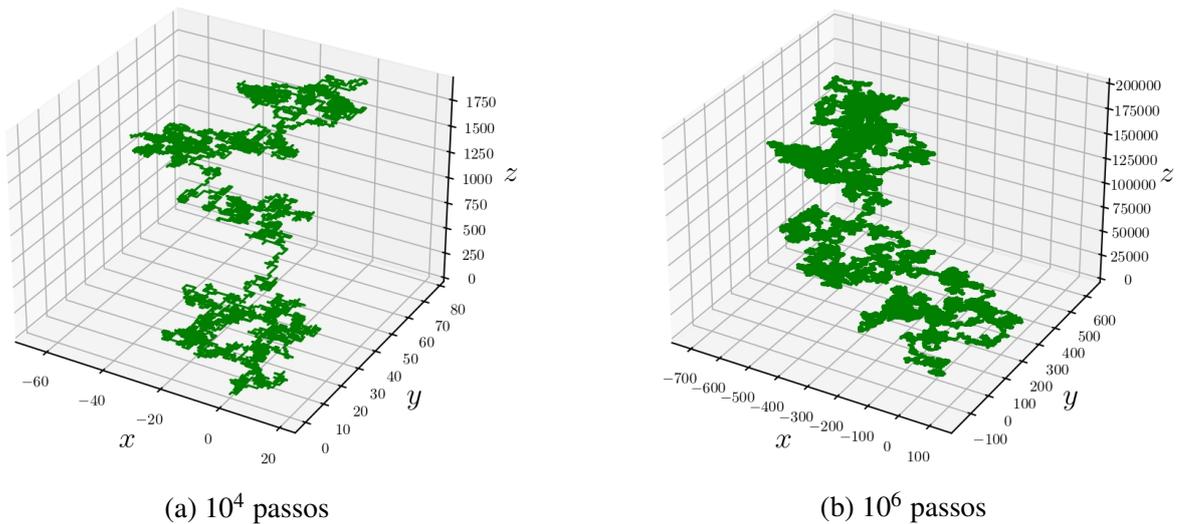


Figura 8 – Trajetória de 2 partículas distintas realizando um *Random Walk* em uma rede tridimensional em tempos distintos, ou seja, com diferentes números de passos.

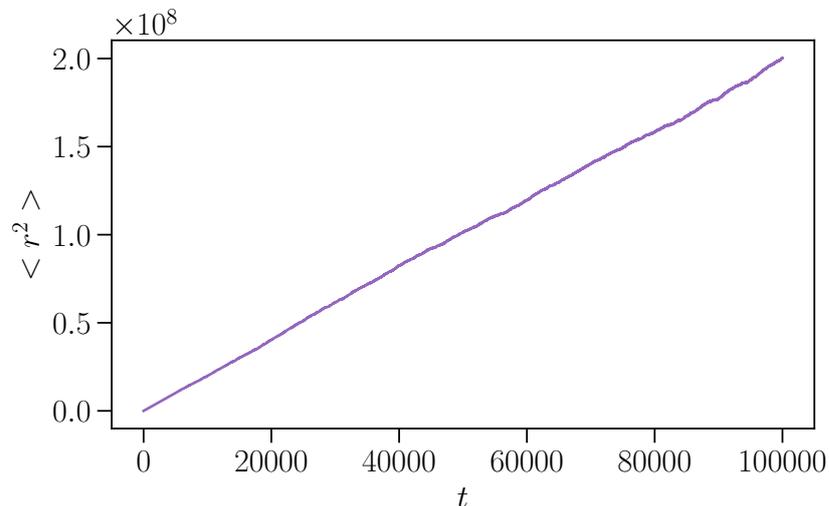


Figura 9 – Comportamento linear do deslocamento quadrático médio para um conjunto de 2.000 partículas executando um *Random Walk* em uma rede tridimensional após 100.000 passos.

A dimensão fractal é um parâmetro geométrico que nos diz como objetos estão imersos no espaço, apresentando um grau estatístico de complexidade e podendo assumir valores fracionários. O conceito de geometria fractal foi criado por Benoît Mandelbrot (MANDELBROT

et al., 1975) com o intuito de descrever sistemas na natureza que não podem ser descritos pela geometria euclidiana. A dimensão fractal de um *Random Walk* está relacionada com o seu deslocamento quadrático médio a partir da lei de potência (BEN-AVRAHAM; HAVLIN, 2000),

$$\langle r^2 \rangle \sim t^{\frac{2}{d_f}}. \quad (2.54)$$

Observando os critérios presentes na Equação 2.48 para que a dispersão das partículas executando um *Random Walk* seja classificada como um processo de difusão normal, $d_f = 2$. Portanto, se $d_f \neq 2$, a difusão é dita anômala.

3 VARIAÇÕES DO MODELO DE RANDOM WALK TRADICIONAL

3.1 Self-Avoiding Walk

O modelo de *RW* também pode ser utilizado para descrever o comportamento de cadeias poliméricas (GENNES; GENNES, 1979). Entretanto, devido ao volume ocupado pelos monômeros que formam a cadeia, é preciso restringir seus movimentos aleatórios de forma a impedir que a partícula retorne a uma região do espaço já ocupada. Essa modificação do modelo de *RW* é conhecida como *Self-Avoiding Walk (SAW)*, onde os sítios visitados pela partícula representam monômeros e sua característica auto-evitante é responsável pelas interações de volume entre os monômeros (RUDNICK; GASPARI, 2004).

Em um *Self-Avoiding Walk* a partícula não pode ocupar o mesmo sítio mais de uma vez e a probabilidade a cada instante de tempo depende apenas dos sítios não ocupados pela partícula anteriormente. No caso de uma partícula realizando um *SAW* em uma dimensão, podemos perceber que a partícula seguirá apenas em um direção, sendo esta direção escolhida no passo inicial. Para duas ou três dimensões, entretanto, a partícula continuará a realizar os seus movimentos aleatórios até que ela chegue numa situação onde o número de sítios vizinhos não ocupados seja igual a zero, ou seja, até que a partícula fique presa numa região do espaço. Em $d \geq 4$ a probabilidade da partícula ficar presa é insignificante e o caminho executado é semelhante a um *RW* tradicional (BEN-AVRAHAM; HAVLIN, 2000). Na Figura 10 podemos observar a trajetória de duas partículas executando um *Self-Avoiding Walk* em uma rede quadrada, 50 x 50.

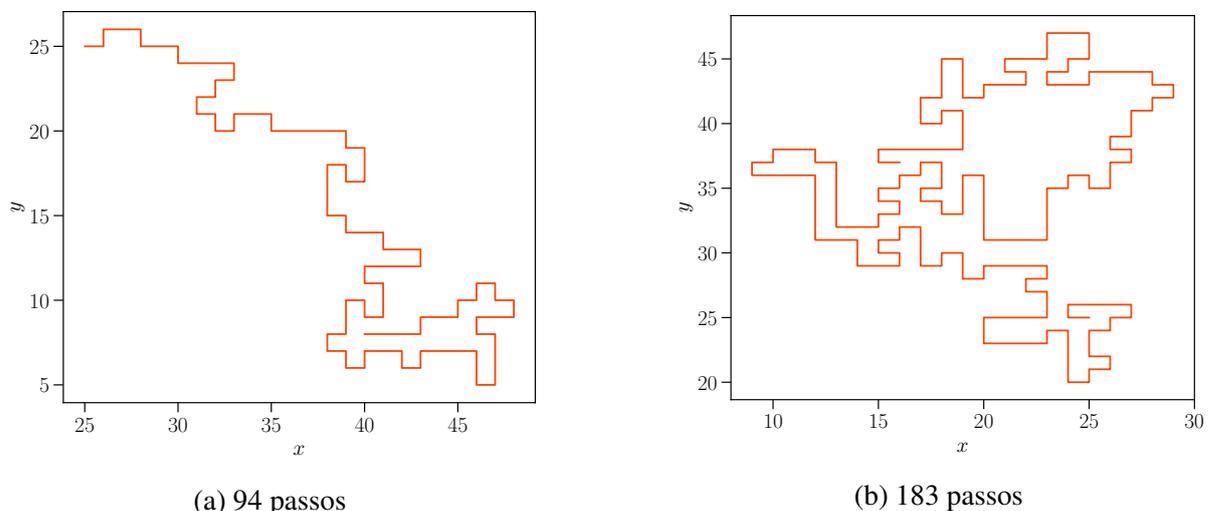


Figura 10 – Trajetória de duas realizações distintas realizando um *Self-Avoiding Walk* em uma rede quadrada, 50 x 50, com diferentes números de passos.

Diferentemente do modelo de *Random Walk* tradicional, no *SAW* as partículas realizam os seus movimentos aleatórios até que fiquem presas, ou seja, o número total de realizações distintas podem ter valores de passos diferentes. Na Figura 11 podemos observar a relação da quantidade de partículas que ainda está difundindo em relação ao tempo, t , em um conjunto de \mathcal{N} partículas. Devido a essa restrição, em um *SAW* em duas dimensões o número de partículas que realizam grandes trajetórias é pequeno, como podemos observar na Figura 11, pois as chances da partícula ficar presa em duas dimensões é alta.

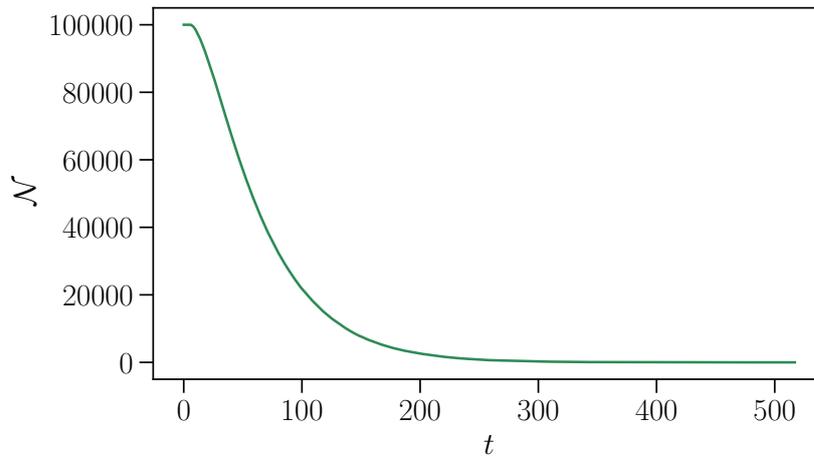


Figura 11 – Número de partículas que ainda está difundindo em relação ao tempo, t , em um *Self-Avoiding Walk* bidimensional. Podemos observar que em um conjunto de 100.000 partículas, quantas partículas não presas ainda estavam realizando os seus movimentos aleatórios no tempo $t \approx 540$.

Diferentemente de um *RW*, o deslocamento quadrático médio em um *SAW* tem uma relação não-linear com o tempo, como podemos observar na Figura 12. O que pode ser escrito da seguinte forma,

$$\langle r^2(n) \rangle = Dt^{2\nu}, \quad (3.1)$$

onde ν é o expoente de ponta-a-ponta da trajetória da partícula (BEN-AVRAHAM; HAVLIN, 2000; VICSEK, 1992). Por não apresentar um comportamento linear com o tempo, o comportamento difusivo de partículas executando um *SAW* é anômalo, segundo a Equação 2.48. Realizando um fit linear nos resultados numéricos utilizados para a obtenção da Figura 12, encontramos $\nu = 0,64$, ou seja, $\gamma = 1,28$. Portanto o *Self-Avoiding Walk* descreve um processo superdifusivo.

A dimensão fractal de um SAW é dada por,

$$d_f = \frac{1}{\nu}. \quad (3.2)$$

Geralmente, SAWs apresentam trajetórias mais alongadas do que RW tradicionais e, por disso, $d_{saw} \leq d_w$ (BEN-AVRAHAM; HAVLIN, 2000).

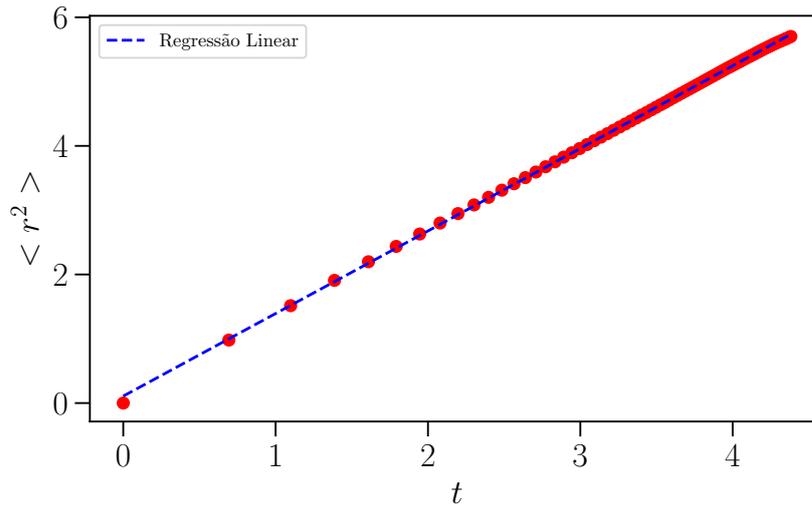
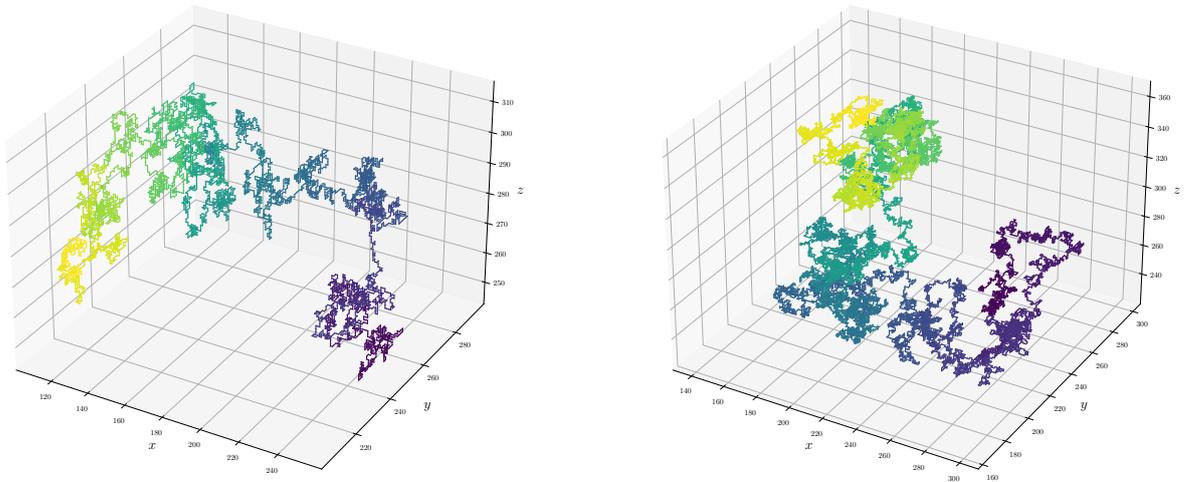


Figura 12 – Comportamento não-linear do deslocamento quadrático médio para um conjunto de 100.000 partículas executando um *Self-Avoiding Walk* em uma rede bidimensional com até 80 passos. O fit da regressão linear mostra um expoente superlinear $\gamma = 1,28$.

Na Figura 13 podemos observar a trajetória de duas partículas distintas executando um *Self-Avoiding Walk* em um rede cúbica com lado $L = 500$. Fica evidente que a trajetória de uma partícula executando um SAW em 3 dimensão é maior do que em 2 dimensões, uma vez que a partícula possui mais graus de liberdade, as chances dela ficar presa é um pouco menor.

Na Figura 14 podemos observar que as partículas, em um conjunto de \mathcal{N} partículas, demoram mais para ficarem presas, ou seja, as partículas em um SAW tridimensional tendem a executar mais passos em comparação ao modelo bidimensional, como mostrado na Figura 11.



(a) 6.304 passos

(b) 19.875 passos

Figura 13 – Trajetória de duas partículas distintas executando um *SAW* em uma rede cúbica de lado $L = 500$, após 6.304 passos em (a) e 19.875 passos em (b). As cores mais escuras da figura representam a maior proximidade com a origem, ficando mais claro à medida que a partícula se distancia do seu ponto inicial.

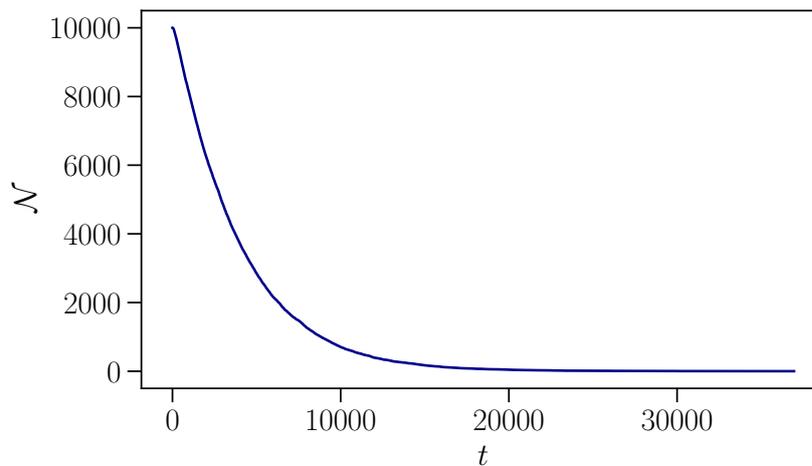


Figura 14 – Número de partículas que ainda está difundindo em relação ao tempo, t , em um *Self-Avoiding Walk* tridimensional. Podemos observar que em um conjunto de 10.000 partículas, quantas partículas não presas ainda estavam realizando os seus movimentos aleatórios no tempo $t \approx 38.000$.

Na Figura 15 podemos observar o comportamento não-linear com o tempo do deslocamento quadrático médio de um conjunto de partículas executando um *Self-Avoiding Walk* em 3 dimensões. Novamente, realizando um fit linear nos dados, encontramos $\nu = 0,52$ e $\gamma = 1,04$, portanto o movimento difusivo microscópico das partículas em um *SAW* em 3 dimensões apresenta uma difusão anômala descrevendo um processo superdifusivo com $\gamma > 1$.

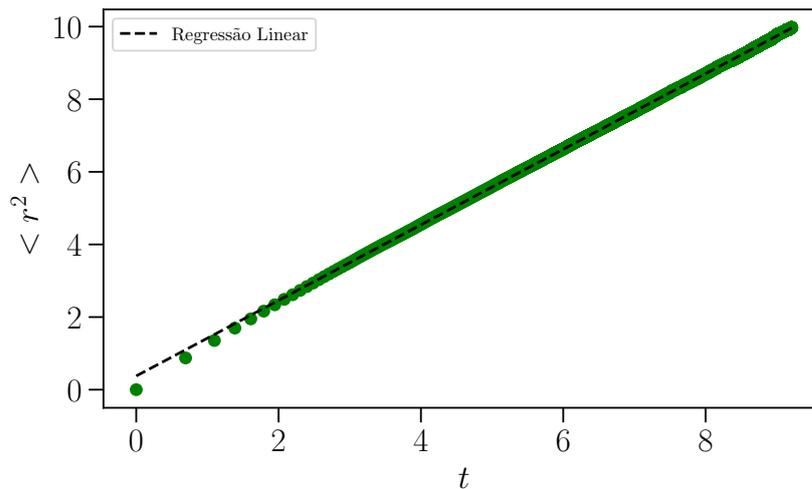


Figura 15 – Comportamento não-linear do deslocamento quadrático médio para um conjunto de 100.000 partículas executando um *Self-Avoiding Walk* em uma rede tridimensional com lado $L = 500$ em até 10.000 passos. O fit da regressão linear mostra o expoente superlinear $\gamma = 1,04$.

Os resultados numéricos do expoente γ obtido em 2D ($\gamma = 1,28$) e 3D ($\gamma = 1,04$) através de um fit linear nos dados utilizados para a realização das Figuras 12 e 15, nos mostram que partículas executando um SAW tendem a apresentar um comportamento difusivo normal, com $\gamma = 1$, à medida que aumentamos os seus graus de liberdade, ou seja, o número de dimensões do sistema.

3.2 Laplacian Random Walk

Como visto na seção anterior, a trajetória percorrida por uma partícula em um SAW em duas dimensões tende a ser mais curta do que em um RW tradicional, pois a partícula eventualmente fica presa rapidamente. Dessa forma, a fim de obter um SAW sem *trapping* nas suas configurações estruturais e, assim, obter um modelo que simule cadeias poliméricas mais extensas, podemos acoplar o movimento da partícula a um campo laplaciano, fazendo com que a partícula reconheça possíveis armadilhas com antecedência, podendo, assim evitá-las. Nesse modelo, chamado de *Laplacian Random Walk (LRW)*, a probabilidade da partícula seguir para um de seus sítios vizinhos é proporcional ao campo escalar local ϕ cujo valor é mínimo nas bordas e máximo nos sítios ocupados anteriormente pela partícula (LYKLEMA *et al.*, 1986).

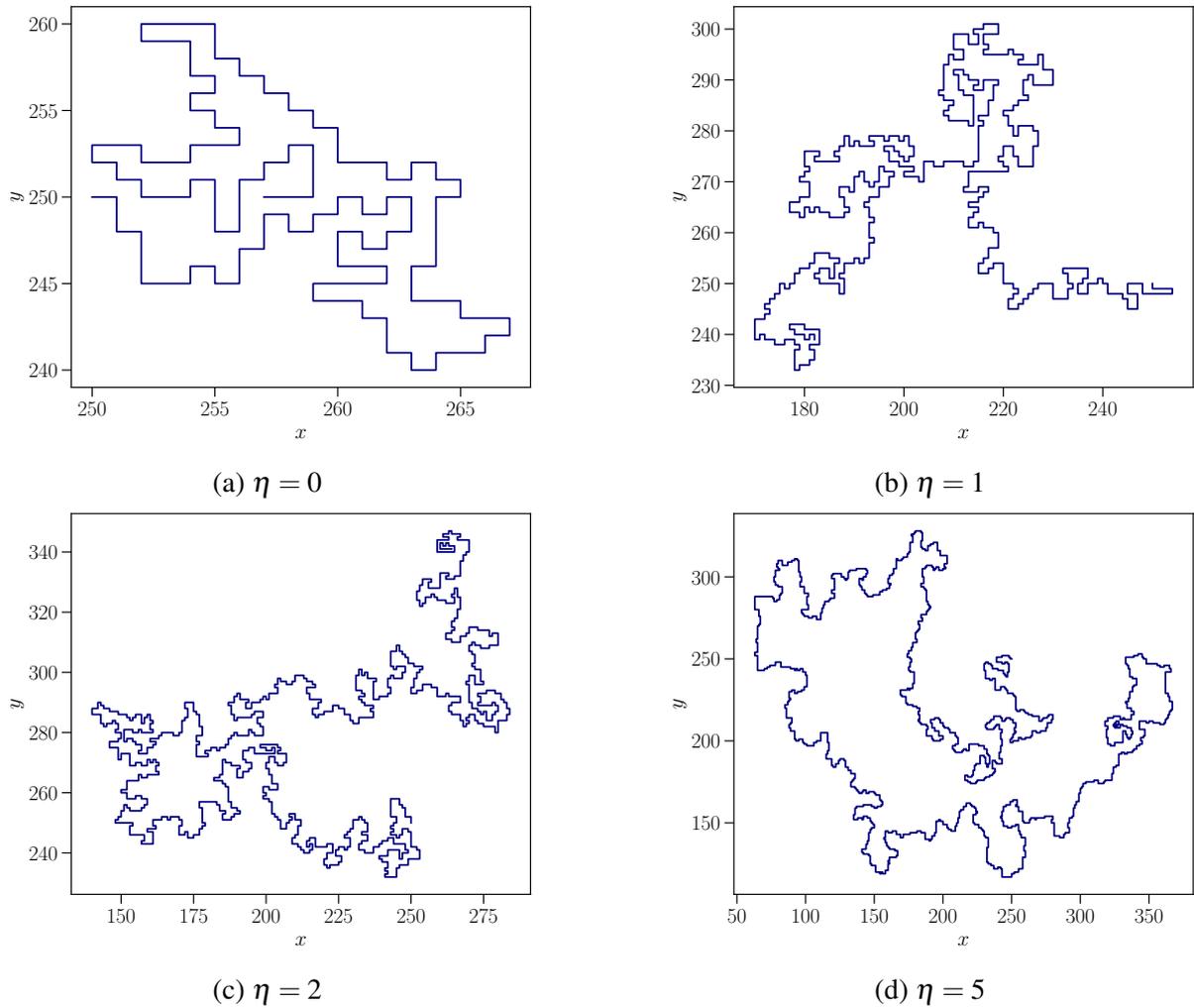


Figura 16 – Trajetória realizada por 4 partículas distintas executando um *Laplacian Random Walk* em uma rede quadrada com $L = 500$. O aumento do parâmetro de controle η leva a trajetórias maiores e mais alongadas. A partícula realizou 145 passos em (a), 699 passos em (b), 1.487 passos em (c) e 2.450 passos em (d).

Partículas em um *Laplacian Random Walk* apresentam as mesmas características de um SAW mas com a diferença de que a probabilidade de movimento da partícula na rede, a cada passo de tempo, é definida da seguinte forma,

$$p_i = \frac{(1 - \phi_i)^\eta}{\sum_j^n (1 - \phi_j)^\eta}, \quad (3.3)$$

onde η é um parâmetro de controle e ϕ_i é o valor de um campo laplaciano no sítio i , onde j representa os vizinhos mais próximos de i . ϕ é a solução da equação de Laplace,

$$\nabla^2 \phi = 0, \quad (3.4)$$

onde $\phi = 0$ nos contornos da rede quadrada e $\phi = 1$ nos sítios internos visitados pela partícula. Quando a correção no campo, devido a uma nova configuração na trajetória da partícula, é infinitamente mais rápida do que a velocidade da partícula a equação de Laplace pode então ser

resolvida, em cada intervalo de tempo, entre um passo e outro da partícula. A principal vantagem do *LRW* é que ele pode ser aplicado para qualquer dimensão desde que siga as regras descritas anteriormente (VICSEK, 1992). O parâmetro de controle η controla o quanto o valor do campo em cada sítio influência no peso das probabilidades entre as direções permitidas. Pela equação 3.3 podemos observar que se η for nulo, recuperaremos um *SAW* tradicional com probabilidades iguais para cada sítio disponível, para $\eta > 0$ o movimento da partícula é auto-evitante e apresenta uma dimensão fractal menor do que e um *SAW* (VICSEK, 1992).

Para encontrar o valor de ϕ em cada instante de tempo, ou seja, a cada passo da partícula, aplicamos o método de diferenças finitas na Equação 3.4 (SADIKU, 2000). Para realizar a discretização da Equação 3.4, podemos, reescrevê-la como,

$$\nabla^2 \phi = \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 0. \quad (3.5)$$

Considerando um ponto qualquer (x_0, y_0) em uma rede quadrada, e que $\phi(x_0 + \Delta x, y_0)$ representa o campo no sítio vizinho da direita e $\phi(x_0 - \Delta x, y_0)$ o campo no vizinho da esquerda, no eixo x . Podemos realizar uma expansão em série de Taylor,

$$\phi(x_0 + \Delta x) = \phi(x_0) + \Delta x \phi'(x_0) + \frac{1}{2!} (\Delta x)^2 \phi''(x_0) + \frac{1}{3!} (\Delta x)^3 \phi'''(x_0) + \dots \quad (3.6)$$

e,

$$\phi(x_0 - \Delta x) = \phi(x_0) - \Delta x \phi'(x_0) + \frac{1}{2!} (\Delta x)^2 \phi''(x_0) - \frac{1}{3!} (\Delta x)^3 \phi'''(x_0) + \dots \quad (3.7)$$

somando as Equações 3.6 e 3.7, obtemos,

$$\phi(x_0 + \Delta x) + \phi(x_0 - \Delta x) = 2\phi(x_0) + (\Delta x)^2 \phi''(x_0) + O(\Delta x)^4, \quad (3.8)$$

onde $O(\Delta x)^4$ representa o erro de truncamento. Supondo que $O(\Delta x)^4$ seja desprezível temos,

$$\phi''(x_0) \approx \frac{\phi(x_0 + \Delta x, y_0) - 2\phi(x_0) + \phi(x_0 - \Delta x, y_0)}{\Delta x^2}. \quad (3.9)$$

De forma análoga, no eixo y ,

$$\phi''(y_0) \approx \frac{\phi(x_0, y_0 + \Delta y) - 2\phi(x_0, y_0) + \phi(x_0, y_0 - \Delta y)}{\Delta y^2}. \quad (3.10)$$

Podemos reescrever as Equações 3.9 e 3.10,

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \Big|_{x=x_0} &= \frac{\phi_{i+1,j} + 2\phi_{i,j} + \phi_{i-1,j}}{\Delta x^2}, \\ \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \Big|_{y=y_0} &= \frac{\phi_{i,j+1} + 2\phi_{i,j} + \phi_{i,j-1}}{\Delta y^2}.\end{aligned}\tag{3.11}$$

Fazendo $\Delta x = \Delta y = \ell = 1$, onde ℓ é o comprimento do passo, ou o incremento da malha (SADIKU, 2000), e substituindo as Equações 3.11 na Equação 3.5, reescrevemos a aproximação por diferenças finitas da Equação de Laplace, dada por,

$$\phi_{i,j} = \frac{1}{4} (\phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} + \phi_{i,j+1} + \phi_{i,j-1}).\tag{3.12}$$

Na Figura 17 nós mostramos a solução do campo para as trajetórias da Figura 16, onde vermelho escuro representa os valores do campo $\phi = 1$ e azul escuro representa $\phi = 0$.

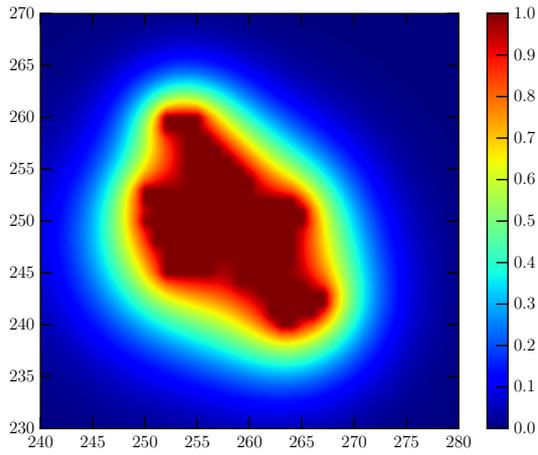
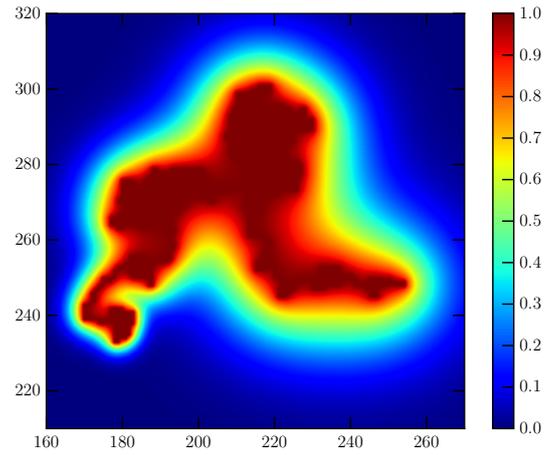
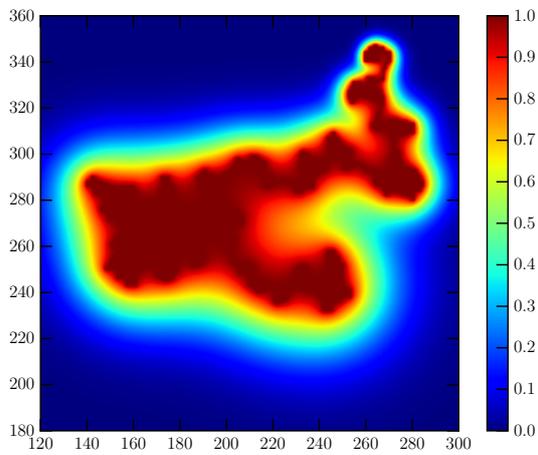
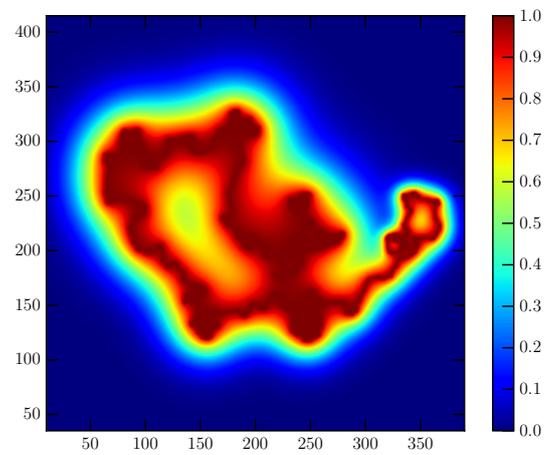
(a) $\eta = 0$ (b) $\eta = 1$ (c) $\eta = 2$ (d) $\eta = 5$

Figura 17 – Solução do campo laplaciano para as mesmas trajetórias apresentadas na Figura 16. O vermelho escuro representa os sítios visitados pela partícula, onde $\phi = 1$, enquanto azul escuro representa as bordas onde $\phi = 0$.

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Nesse trabalho, nós analisamos as principais características presentes no modelo de *Random Walk* tradicional em uma, duas e três dimensões. Nós observamos que o comportamento do deslocamento quadrático médio apresenta uma relação linear com o tempo, $\langle r^2 \rangle \sim t^\gamma$, descrevendo então um processo de difusão normal com o expoente $\gamma = 1$ e dimensão fractal $d_f = 2$.

Posteriormente, nós aplicamos uma variação do modelo de *RW* tradicional conhecida como *Self-Avoiding Walk* onde a partícula não tem permissão de ocupar o mesmo sítio mais de uma vez, realizando seus movimentos aleatórios entre os sítios vizinhos disponíveis. Observamos que diferentemente de um *RW* tradicional, em um *SAW* o deslocamento quadrático médio não apresenta uma relação linear com tempo, descrevendo então um processo de difusão anômala com $\gamma \neq 1$ e dimensão fractal $d_f \neq 2$. Calculamos o valor de γ para o caso de um *SAW* em duas e três dimensões e em ambos os casos encontramos $\gamma > 1$, logo, partículas executando um *SAW* apresentam um processo superdifusivo.

Observamos também que a maioria das partículas executando *SAW*, acaba ficando presa já nos passos iniciais, apresentando trajetórias curtas principalmente no caso bidimensional. E com o intuito de estudar um modelo que apresente trajetórias mais alongadas nós consideramos outra variação do modelo de *Random Walk*, chamada *Laplacian Random Walk*, onde o movimento aleatório da partícula é acoplado a um campo laplaciano, permitindo que a partícula possa evitar *trappings*. Em um *LRW* a probabilidade da partícula seguir para um de seus sítios vizinhos disponíveis depende da solução da Equação de Laplace a cada passo. Simulando partículas executando um *LRW* em uma rede quadrada, nós observamos que as partículas realizam mais passos e, conseqüentemente, apresentam uma trajetória mais alongada em comparação com o *SAW*, à medida que o parâmetro, η , que controla o quanto o valor do campo em cada sítio disponível influencia no peso das probabilidades de movimento da partícula, aumenta, como mostrado na Equação 3.3.

Agora, neste capítulo, faremos uma análise do comportamento das partículas realizando um *LRW* em uma rede bidimensional com lado $L = 512$, à medida que o parâmetro η aumenta. O caso $\eta = 0$ recupera um *SAW* com probabilidades iguais para cada sítio disponível. À medida que η aumenta, a influência do valor do campo em cada sítio também aumenta fazendo com que a partícula realize mais passos. Na Figura 18 podemos observar que em um conjunto de \mathcal{N} partículas, as partículas não presas tendem a realizar mais passos à medida que o parâmetro

de controle, η , aumenta.

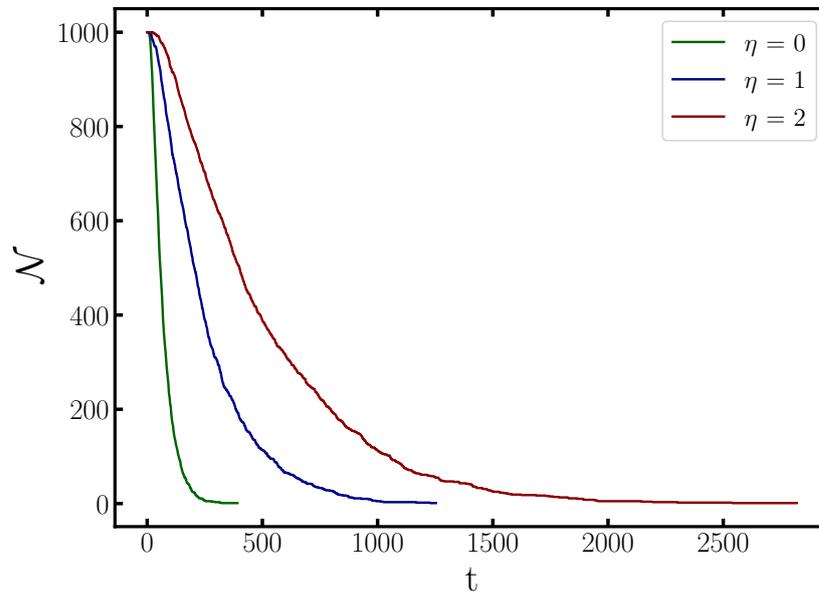


Figura 18 – Número de partículas que em um conjunto de 1.000 partículas ainda está difundindo em relação ao tempo, t , em um *Laplacian Random Walk* com diferentes valores de η . Podemos observar que ao aumentar o valor de η as partículas não presas tendem a realizar mais passos.

Uma consequência direta do aumento do número de passos realizados pelas partículas é que elas tendem a se distanciar cada vez mais da origem, aumentando a chance de alcançarem a borda da rede quadrada. A Tabela 1 mostra o número de partículas que em um conjunto de 1.000 partículas alcançaram a borda da rede e número médio de passos realizados por elas.

η	Nº de partículas que alcançaram a borda	Nº médio de passos realizados
0	0	69,702
0,5	0	132,263
1	0	254,691
2	4	508,858
5	77	850,102
10	261	1.114,398

Tabela 1 – Comparação entre o valor do parâmetro η e o número de partículas que, dentre um conjunto de 1.000 partículas, alcançaram a borda da rede quadrada de lado $L = 512$, executando um *Laplacian Random Walk* e a média do número de passos realizados por essas partículas. Podemos observar que à medida que aumentamos o valor de η as partículas tendem a realizar mais passos, e portanto se distanciam cada vez mais da origem, difundindo aleatoriamente até alcançar a borda da rede.

Na Figura 19 mostramos a trajetória de duas partículas executando um *Laplacian Random Walk* com $\eta = 10$ e a solução do campo referente à cada trajetória. Podemos observar

que em (a) a partícula está confinada e em (c) a partícula difunde até alcançar a borda da rede.

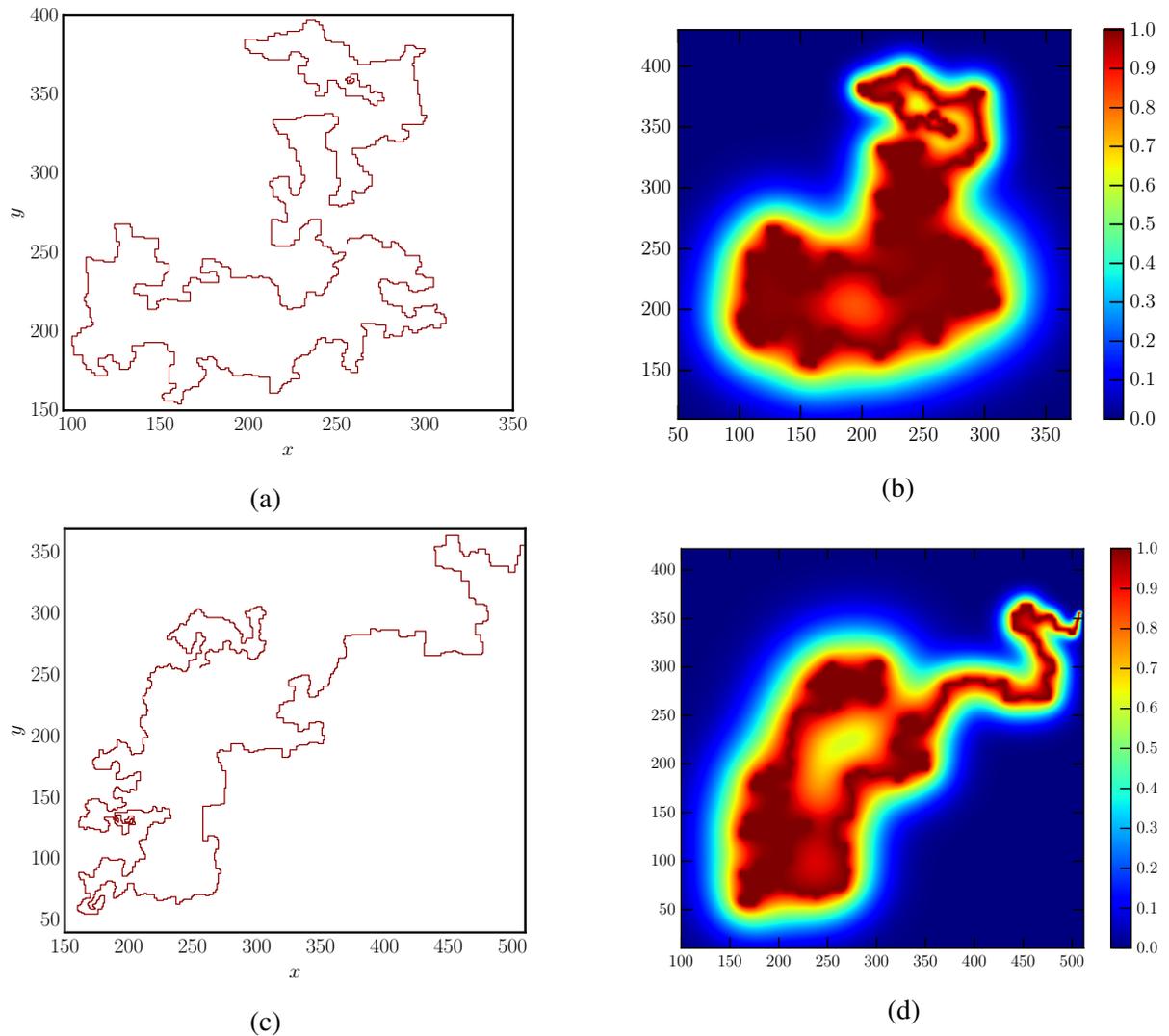


Figura 19 – Painéis (a) e (c) apresentam as trajetórias de duas partículas executando um *Laplacian Random Walk* em uma rede quadrada com lado $L = 512$ e $\eta = 10$. Os painéis (b) e (d) representam as respectivas soluções do campo laplaciano para as trajetórias de (a) e (d).

A Figura 20 mostra que o comportamento do deslocamento quadrático médio de \mathcal{N} partículas em um *LRW* apresenta uma relação não-linear com o tempo, assim como no *SAW*. Podemos observar também que à medida que o valor de η aumenta, o deslocamento quadrático médio também aumenta, evidenciando o fato de que as partículas tendem a se distanciar mais ainda da origem. Nossos resultados também sugerem um “*crossover*” quando o valor de η é alto, ou seja, o deslocamento quadrático médio aparentemente muda o expoente, indicando uma mudança do seu comportamento difusivo. Contudo, neste trabalho não estudamos o caráter deste comportamento, podendo, então, ser abordado melhor em uma futura continuação do trabalho.

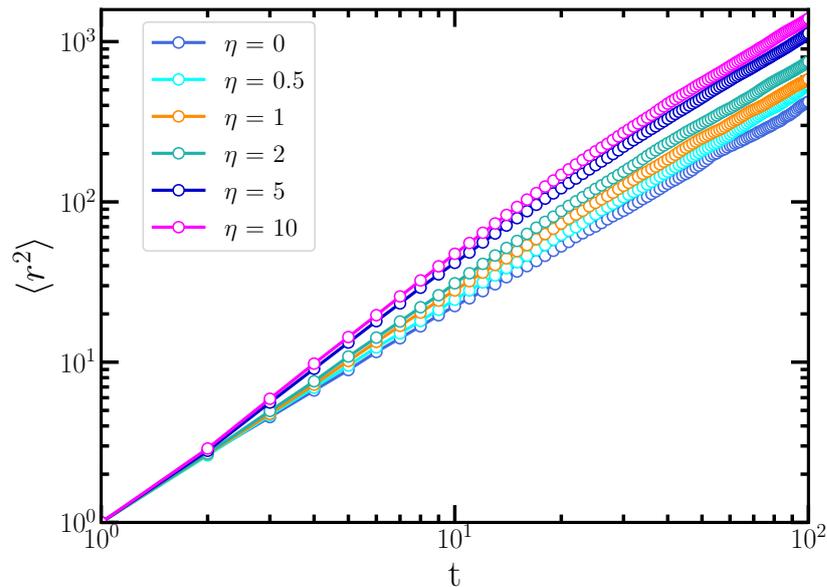


Figura 20 – Comportamento do deslocamento quadrático médio de \mathcal{N} partículas em relação ao aumento do parâmetro de controle η .

Uma consequência direta do aumento do deslocamento quadrático médio das partículas em relação a η , é o aumento do valor da constante de difusão do sistema, como mostramos na Figura 21.

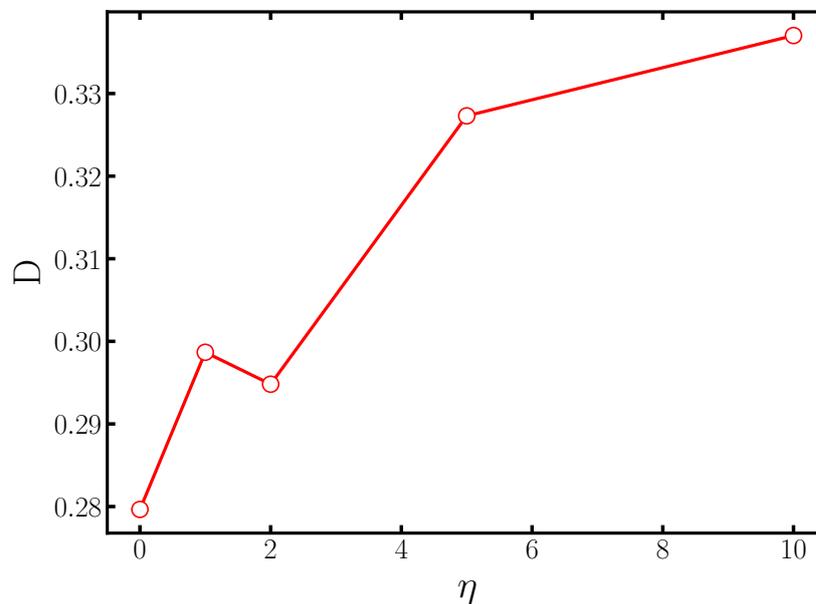


Figura 21 – Comportamento da constante de difusão, D , de um conjunto de \mathcal{N} partículas em relação ao aumento do parâmetro de controle η .

Facilmente podemos perceber que como as partículas tendem a realizar trajetórias maiores à medida que η aumenta, o seu expoente de ponta-a-ponta da trajetória também deve aumentar, como mostrado na Figura 22.

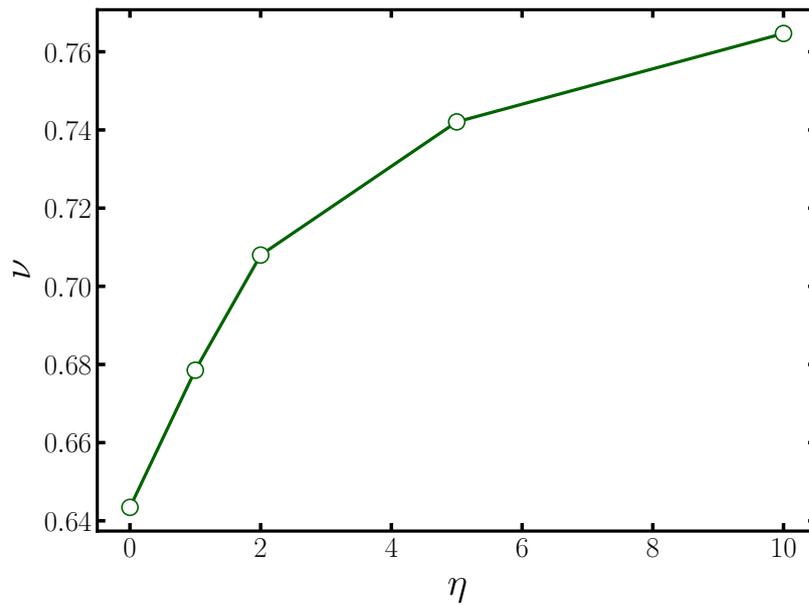


Figura 22 – Comportamento do expoente de ponta-a-ponta, ν , de um conjunto de \mathcal{N} partículas em relação ao aumento do parâmetro de controle η .

E como à medida que aumentamos o valor de η , a trajetória realizada pela partícula tende a ser mais linear, diminuindo sua dimensão fractal, como mostrado na Figura 23.

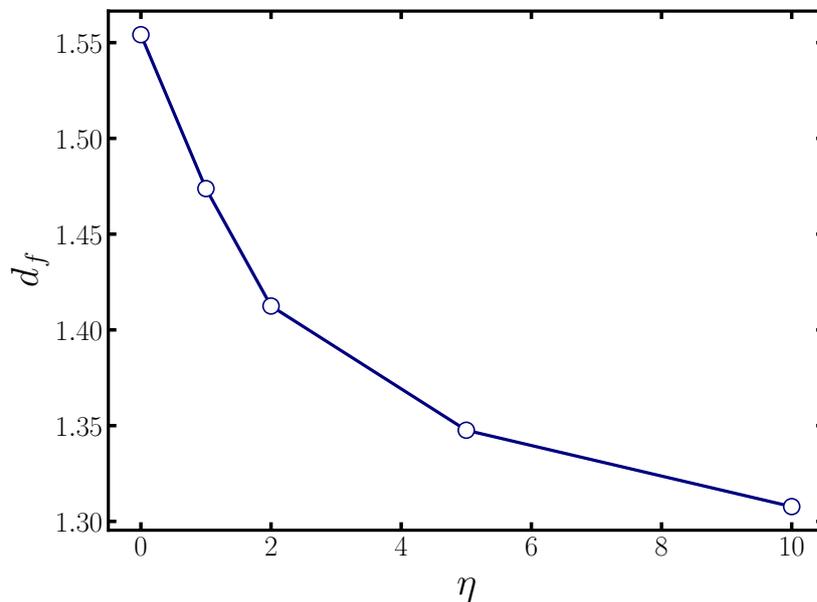


Figura 23 – Comportamento da dimensão fractal, d_f , em relação ao aumento do parâmetro de controle η .

Observando as Figuras 22 e 23 podemos concluir que a dispersão das partículas executando um *Laplacian Random Walk* apresenta uma difusão anômala superdifusiva com $\gamma > 1$, e como neste caso $\gamma = 2\nu$, o sistema se torna cada vez mais superdifusivo à medida que aumentamos o valor de η .

5 CONCLUSÃO

Estudando o modelo de *Random Walk* e suas modificações podemos observar, através de simulações computacionais, as diferenças presentes nos modelos de *RW* tradicional, *SAW* e *LRW*. De forma geral, o deslocamento quadrático médio de partículas aleatórias cresce como uma lei de potência com o tempo, $\langle r^2 \rangle \sim t^\gamma$, onde o expoente γ depende das restrições no movimento das partículas que podem deixar as trajetórias mais alongadas ou mais compactas. Nossas simulações para o caso tradicional (*RW*) mostraram que o valor de γ é igual a 1, ou seja, que o deslocamento quadrático médio de \mathcal{N} partículas se comporta de forma linear com o tempo e que a dimensão fractal, d_f , apresenta valores que concordam com os valores esperados na literatura para uma difusão regular. Nas variações do modelo de *RW* estudadas neste trabalho, podemos observar a característica superlinear do deslocamento quadrático médio de \mathcal{N} partículas com o tempo e o valor $d_f \neq 2$, confirmando que *SAW* e *LRW* levam a uma difusão anômala. Também podemos observar as diferenças entre os valores da constante de difusão em duas dimensões nos três casos. Para os modelos de *RW* tradicional $D \approx 0,25$ e para os modelos de *SAW* e *LRW* a constante de difusão é $D > 0,25$. Por fim, para o caso de um *LRW* em uma rede quadrada, nossas simulações mostraram que quanto maior o valor de η maior é a constante de difusão das partículas, uma consequência disso é que as partículas chegam a grandes distâncias em relação à origem e a configuração das trajetórias das partículas tende a ser mais linear, diminuindo a sua dimensão fractal. Portanto, podemos concluir que obtivemos resultados satisfatórios em relação aos resultados encontrados na literatura.

REFERÊNCIAS

- BEN-AVRAHAM, D.; HAVLIN, S. **Diffusion and reactions in fractals and disordered systems**. [S.l.]: Cambridge university press, 2000.
- BERG, H. C. **Random walks in biology**. [S.l.]: Princeton University Press, 2018.
- BROWN, R. Xxvii. a brief account of microscopical observations made in the months of june, july and august 1827, on the particles contained in the pollen of plants; and on the general existence of active molecules in organic and inorganic bodies. **The philosophical magazine**, Taylor & Francis, v. 4, n. 21, 1828.
- CODLING, E. A.; PLANK, M. J.; BENHAMOU, S. Random walk models in biology. **Journal of the Royal society interface**, The Royal Society London, v. 5, n. 25, 2008.
- COOTNER, P. H. **The Random Character of Stock Market Prices**. Paul H. Cootner. [S.l.]: MITP, 1964.
- EINSTEIN, A. **Investigations on the Theory of the Brownian Movement**. [S.l.]: Courier Corporation, 1956.
- GENNES, P. D.; LEGER, L. Dynamics of entangled polymer chains. **Annual Review of Physical Chemistry**, Annual Reviews 4139 El Camino Way, PO Box 10139, Palo Alto, CA 94303-0139, USA, v. 33, n. 1, 1982.
- GENNES, P.-G. D.; GENNES, P.-G. **Scaling concepts in polymer physics**. [S.l.]: Cornell university press, 1979.
- KEMPE, J. Quantum random walks: an introductory overview. **Contemporary Physics**, Taylor & Francis, v. 44, n. 4, 2003.
- KOMKOV, V.; DANNON, V. Random walk simulation of chemical reactions represented by nonlinear reaction-diffusion equations. **ZAMM-Journal of Applied Mathematics and Mechanics/Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik**, Wiley Online Library, v. 71, n. 3, 1991.
- LYKLEMA, J.; EVERTSZ, C.; PIETRONERO, L. The laplacian random walk. **EPL (Europhysics Letters)**, IOP Publishing, v. 2, n. 2, 1986.
- MANDELBROT, B. B.; MANDELBROT, B. B.; MANDELBROT, B. B.; MANDELBROT, B. B. **Les objets fractals: forme, hasard et dimension**. [S.l.]: Flammarion Paris, 1975. v. 17.
- RUDNICK, J.; GASPARI, G. **Elements of the random walk: an introduction for advanced students and researchers**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2004.
- SADIKU, M. N. **Numerical techniques in electromagnetics**. [S.l.]: CRC press, 2000.
- SALINAS, S. R. **Introdução a física estatística vol. 09**. [S.l.]: Edusp, 1997.
- SILVA, J. M. d.; LIMA, J. Quatro abordagens para o movimento browniano. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, SciELO Brasil, v. 29, 2007.
- SIQUEIRA, D. A. de; BEUST, A. C. A fórmula de stirling para $n!$ e algumas aplicações. **Disciplinarum Sciential Naturais e Tecnológicas**, v. 9, n. 1, 2008.

SJÖGREN, L. Lecture notes on stochastic processes. **University of Gothenburg, Sweden**, 2015.

VICSEK, T. s. **Fractal growth phenomena**. [S.l.]: World scientific, 1992.

VLAHOS, L.; ISLIKER, H.; KOMINIS, Y.; HIZANIDIS, K. Normal and anomalous diffusion: A tutorial. **arXiv preprint arXiv:0805.0419**, 2008.

WEISS, G. H.; RUBIN, R. J. Random walks: theory and selected applications. **Advances in Chemical Physics**, v. 52, 1983.