

Estudo da Difusão de Caminhantes Aleatórios
em um Meio com Barreiras

Aluno: Guilherme Dellagustin - Matrícula: 00129617

Orientador: Leonardo Gregory Brunnet

Instituto de Física

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Resumo

Estudamos o problema da difusão com barreiras através de caminhantes aleatórios. Verificamos que na presença de barreiras estáticas distribuídas homogeneamente no espaço não ocorre difusão anômala, ou seja, para tempos longos o desvio quadrático médio dos caminhantes mantém uma dependência linear com o tempo. Duas formas de interações dos caminhantes com as barreiras são usadas, com e sem retardo. Em ambos os casos os resultados são interpretados como difusão normal com uma constante de difusão modificada. No caso sem retardo a constante é corrigida levando-se em conta a fração de área livre; no caso com retardo, deve-se corrigi-la usando a fração de área livre e a fração de tempo livre.

Abstract

The problem of diffusion with barriers is studied using random walkers. It is verified that in the presence of static homogeneously distributed barriers in space there is no anomalous diffusion, that is for long times the random walkers mean square deviation grows linearly with time. Two forms of random walkers interactions with barriers are used, with and without delay. In both cases the output is interpreted as normal diffusion with a modified diffusion constant. In the case without delay the constant is corrected considering the free area fraction; in the case with delay, the constant must be corrected using the free area fraction and the free time fraction.

Sumário

1	Introdução	1
2	Difusão	3
3	Caminhantes Aleatórios	5
3.1	Caminhante sobre uma grade	6
3.2	Passo fixo e direção aleatória	7
4	Método	10
4.1	Modelo	11
4.2	Colisões sem Retardo	12

4.3	Colisões com Retardo	13
4.4	Distribuição das Barreiras	14
4.5	Medidas	15
5	Resultados	16
6	Conclusões	24

Capítulo 1

Introdução

O problema da difusão está presente na natureza em diversas áreas, em muitos casos na forma de partículas que sofrem ação de forças estocásticas. Como exemplo, temos a dispersão de moléculas em superfícies [1], formação de galáxias [2] e difusão de substâncias químicas em sistemas biológicos [3]. Muitas vezes em sistemas difusivos é comum encontrar situações onde a difusão é influenciada devido a presença de barreiras no meio.

Um exemplo deste tipo de dinâmica é o problema de agregação da *Dictyostelium discoideum*, uma ameba unicelular que em condições de escassez de alimento se junta às amebas vizinhas, formando um ser pluricelular para procurar recursos [4]. Essa agregação se dá através da difusão de um transmissor químico emitido pelas amebas, onde as mesmas seguem na direção do gradiente da concentração deste transmissor para se unirem. Neste caso, as amebas além de fonte servem também como barreiras para a difusão do trans-

missor. Em casos semelhantes há indícios de alterações no comportamento da difusão [5].

O objetivo deste estudo é investigar como uma distribuição homogênea de barreiras idênticas e estáticas no espaço influencia a difusão. Usaremos caminhantes aleatórios em um plano para simular difusão, sendo que estes caminhantes interagem com barreiras circulares, tendo dois modos de interação, com retardo e sem retardo. Esperamos observar um comportamento semelhante à difusão sem barreiras mas com uma alteração na constante de difusão, e entender como a discretização do problema (relação entre o raio das barreiras e o passo do caminhante) modifica o resultado.

Capítulo 2

Difusão

Difusão é um processo que descreve a mecânica de sistemas onde o fluxo de alguma propriedade, como energia térmica ou concentração, ocorre de pontos de maior valor para pontos de menor valor. Exemplos desses sistemas são a concentração de compostos em um gás ou fluido, ou o fluxo de calor em algum material. A equação que rege a difusão no espaço e no tempo é:

$$\frac{\partial f(\vec{r}, t)}{\partial t} = D \nabla^2 f(\vec{r}, t), \quad (2.1)$$

onde D é uma constante que depende da natureza do problema, a qual chamaremos de *constante de difusão* e f é a função que representa a propriedade do sistema mencionada acima, como por exemplo a concentração de algum elemento em um gás. Como nosso estudo aborda a difusão através de caminhantes aleatórios bidimensionais, será interessante saber a resposta deste sistema para uma condição inicial do tipo $f(r, \theta, t = 0) = \delta(r)$. Neste

caso [7]:

$$f(r, \theta, t) = \frac{1}{4\pi Dt} e^{-\frac{r^2}{4Dt}} . \quad (2.2)$$

Nota-se que f é uma distribuição normal em duas dimensões com $\sigma^2 = 2Dt$ (Equação 2.3),

$$f(r, \theta) = \frac{1}{2\pi\sigma^2} e^{-\frac{r^2}{2\sigma^2}} . \quad (2.3)$$

Será interessante obter o valor de $\langle r^2 \rangle$, pois este varia linearmente com t e pode ser usado para identificar um comportamento difusivo,

$$\langle r^2 \rangle = \langle x^2 + y^2 \rangle = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle . \quad (2.4)$$

Por simetria, $\langle x^2 \rangle = \langle y^2 \rangle$ então,

$$\langle r^2 \rangle = 2\langle x^2 \rangle = 2\langle y^2 \rangle \quad (2.5)$$

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx dy \frac{x^2}{2\pi\sigma^2} e^{-\frac{x^2+y^2}{2\sigma^2}} \quad (2.6)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{x^2}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dy \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{y^2}{2\sigma^2}} . \quad (2.7)$$

$$(2.8)$$

A integral em y é de uma função normalizada, e a integral em x é $\langle x^2 \rangle$ para o caso unidimensional,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{y^2}{2\sigma^2}} = 1 \quad (2.9)$$

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{x^2}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} = \sigma^2 \quad (2.10)$$

$$\langle r^2 \rangle = 2\langle x^2 \rangle = 2\sigma^2 \quad (2.11)$$

$$\langle r^2 \rangle = 4Dt . \quad (2.12)$$

Chamamos este comportamento de $\langle r^2 \rangle$ linear com t de difusão normal. Dependências com ordem maior em t , como por exemplo t^2 , chamamos de super difusão e ordens menores, como $t^{\frac{1}{2}}$, chamamos de sub-difusão.

Capítulo 3

Caminhantes Aleatórios

Caminhantes aleatórios são uma formalização matemática de uma trajetória onde os sucessivos passos tem, genericamente, tamanho e direção sorteados ao acaso [8, 10], um exemplo característico é o de uma partícula executando *movimento browniano*. Para este estudo será interessante a simulação de caminhantes, uma vez que, como será mostrado mais adiante, a densidade de probabilidade de se encontrar um caminhante, em algum ponto do espaço, evolui no tempo conforme a equação da difusão. Neste capítulo mostraremos que simular um número suficiente de caminhantes aleatórios equivale a simular a própria difusão.

3.1 Caminhante sobre uma grade

Imagine um caminhante aleatório que pode ocupar apenas os vértices de uma grade, cujas arestas são perpendiculares e os vértices são separados de seus vizinhos por uma distância l . Este caminhante tem chance $\frac{1}{4}$ de ir para qualquer um dos sítios vizinhos a cada passo. Escolhendo um sistema de coordenadas tal que algum dos vértices da grade encontra-se na origem, o caminhante pode ocupar apenas pontos tais como $(x = ml, y = nl)$, onde n e m são números inteiros. Sendo assim, a probabilidade de se encontrar um caminhante no sítio m, n no passo $i + 1$ é [9]:

$$P_{m,n,i+1} = \frac{1}{4}P_{m-1,n,i} + \frac{1}{4}P_{m+1,n,i} + \frac{1}{4}P_{m,n-1,i} + \frac{1}{4}P_{m,n+1,i} . \quad (3.1)$$

Subtraindo $P_{m,n,i}$ aos dois lados da equação:

$$\begin{aligned} P_{m,n,i+1} - P_{m,n,i} &= +\frac{1}{4}P_{m-1,n,i} + \frac{1}{4}P_{m+1,n,i} \\ &+ \frac{1}{4}P_{m,n-1,i} + \frac{1}{4}P_{m,n+1,i} \\ &- P_{m,n,i} \end{aligned} \quad (3.2)$$

$$\begin{aligned} P_{m,n,i+1} - P_{m,n,i} &= +\frac{1}{4}(P_{m-1,n,i} + P_{m+1,n,i} \\ &+ P_{m,n-1,i} + P_{m,n+1,i} - 4P_{m,n,i}) . \end{aligned} \quad (3.3)$$

Agora, se considerarmos que os passos estão separados por um pequeno espaço de tempo τ , e que a distância l entre os sítios é também pequena, multiplicamos a equação por $\frac{1}{l^2\tau}$, e passamos ela para o contínuo:

$$\frac{P(x, y, t + \tau) - P(x, y, t)}{l^2\tau} = +\frac{1}{4l^2\tau}[P(x - l, y, t) + P(x + l, y, t)$$

$$\begin{aligned}
& +P(x, y - l, t) + P(x, y + l, t) \\
& -4P(x, t)] \quad (3.4)
\end{aligned}$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D\nabla^2 P \quad (3.5)$$

$$D = \frac{l^2}{4\tau} . \quad (3.6)$$

Na equação 3.5 é possível identificar a equação da difusão, como havia sido mencionando anteriormente.

3.2 Passo fixo e direção aleatória

Neste estudo usamos caminhantes em um espaço contínuo, porém com passo de tamanho fixo l e direção aleatória θ . Este caso é bastante conhecido. Sabe-se que ele também equivale à equação da difusão, e que a probabilidade de encontrar o caminhante entre uma distância r e $r + \delta r$, com um número grande de passos é [11]:

$$P_r(r)\delta r = \frac{2}{N_p l^2} e^{-\frac{r^2}{N_p l^2}} r \delta r , \quad (3.7)$$

onde N_p é o número de passos dados pelo caminhante. Chamamos $P_r(r)$ de densidade de probabilidade radial do caminhante. Dada a simetria polar do problema, a probabilidade de encontrarmos um caminhante, que sai da origem, em um ponto qualquer do plano ($P(r, \theta)$) é dado por:

$$P(r, \theta) = \frac{P_r(r)}{2\pi r} \quad (3.8)$$

$$P(r, \theta) = \frac{1}{\pi N_p l^2} e^{-\frac{r^2}{N_p l^2}} \quad (3.9)$$

Chamamos $P(r, \theta)$ de densidade de probabilidade espacial do caminhante. Considerando que o intervalo de tempo entre cada passo é τ e comparando as equações 3.9 e 2.2 vemos que 3.9 é a resposta da difusão bidimensional para uma δ com $D = \frac{l^2}{4\tau}$, mesmo valor encontrado para o caso do caminhante em uma grade.

É fácil mostrar que o desvio quadrático médio ($\langle r^2 \rangle$) varia linearmente com o número de passos [6], usando um número do plano complexo para representar a posição do caminhante:

$$z = \sum_{j=1}^{N_p} l e^{i\theta_j} \quad (3.10)$$

$$\begin{aligned} |z|^2 &= \sum_{j=1}^{N_p} l e^{i\theta_j} \sum_{k=1}^{N_p} l e^{-i\theta_k} \\ &= \sum_{j=1}^{N_p} \sum_{k=1}^{N_p} l^2 e^{i(\theta_j - \theta_k)} \end{aligned} \quad (3.11)$$

$$= l^2 N_p + \sum_{j,k=1|k \neq j}^{N_p} l^2 e^{i(\theta_j - \theta_k)}$$

$$\langle |z|^2 \rangle = l^2 N_p + \left\langle \sum_{j,k=1|k \neq j}^{N_p} l^2 e^{i(\theta_j - \theta_k)} \right\rangle \quad (3.12)$$

$$\langle |z|^2 \rangle = l^2 N_p \quad (3.13)$$

$$\langle r^2 \rangle = \langle |z|^2 \rangle = l^2 N_p = l^2 \frac{t}{\tau} \quad (3.14)$$

$$\langle r^2 \rangle = 4 \frac{l^2}{4\tau} t = 4Dt. \quad (3.15)$$

Mesmo resultado que o encontrado para difusão bidimensional com condição inicial usando a distribuição δ de Dirac (Equação 2.12).

Capítulo 4

Método

O objetivo deste estudo é verificar como a densidade de obstáculos, em particular barreiras circulares distribuídas com igual probabilidade ao longo do espaço, influenciam a evolução da difusão de caminhantes. Para isso exploramos uma condição inicial do tipo δ (delta de Dirac) que, para um sistema sem barreiras, evoluiria no tempo conforme a equação 2.2. Dada a homogeneidade espacial na distribuição de barreiras espera-se que para tempos longos se mantenha a distribuição gaussiana dos caminhantes e que observemos uma variação na taxa temporal com que o processo ocorre, ou seja, na constante de difusão.

4.1 Modelo

Para modelar o problema usamos caminhantes bidimensionais de passo com tamanho fixo l e direção aleatória θ em um plano. Os caminhantes foram distribuídos ao acaso no espaço não ocupado pelas barreiras. Ao caminharante foi permitido andar por qualquer posição do plano sem nunca ocupar o espaço interior a uma barreira. Não há qualquer interação entre os caminhantes. Para emular um sistema infinito optamos por usar uma replicação espacial periódica para as barreiras, ou seja, as barreiras são sorteadas em um espaço limitado por um quadrado base de dimensões $d \times d$, com $d = 100l$, e este é copiado com periodicidade espacial d . Ao sortearmos a posição inicial de cada caminharante no espaço, refinamos a estatística do problema, pois assim é como se cada caminharante estivesse frente a um posicionamento diferente de barreiras.

Como mencionando anteriormente, se a difusão for normal, o desvio quadrático médio com relação à posição inicial de um número grande de caminhantes, $\langle |\vec{r} - \vec{r}_0|^2 \rangle$, deve manter uma dependência linear com o número de passos. Isso se deve ao fato de que, considerando-se um grande número de passos, o espaço é estatisticamente homogêneo. Usamos então $\langle |\vec{r} - \vec{r}_0|^2 \rangle$ para observar a variação da evolução do sistema frente à colocação das barreiras.

Sobre a interação dos caminhantes com as barreiras, consideramos uma colisão quando a nova posição sorteada para um caminharante ocorre dentro de uma barreira. Isto acaba permitindo, na prática, que caminhantes atravessem barreiras, mas limitamos o valor do raio das barreiras a um mínimo para que

esse efeito seja controlável (Figura 4.1).

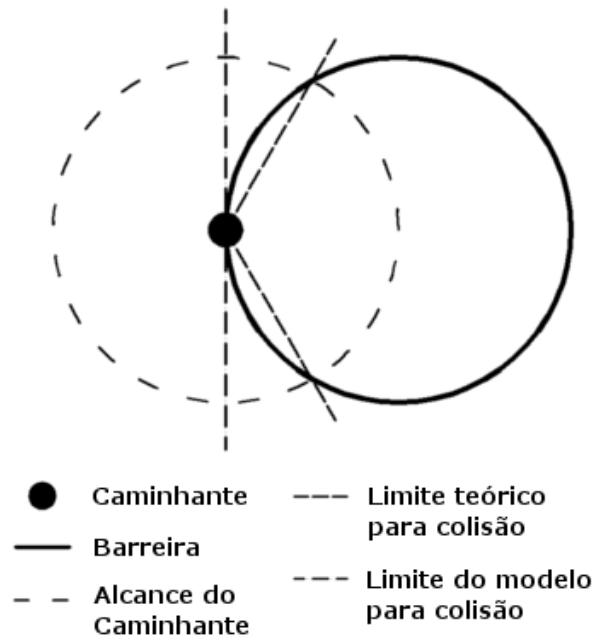


Figura 4.1: Diferença entre uma colisão 'real' e uma colisão no modelo.

A mecânica do problema foi explorada dividindo o modelo de duas formas: uma delas representa uma colisão sem retardo, a outra representa uma situação onde o caminhante perde tempo ao interagir com a barreira, uma colisão com retardo.

4.2 Colisões sem Retardo

Neste modo, colisões sem retardo, não é permitido aos caminhanes ficarem parados durante uma iteração (Fig. 4.2), ou seja, a sua nova posição é

sorteada tantas vezes quantas sejam necessárias para que ele ocupe uma posição válida diferente da atual. O papel das barreiras nesse caso não é diminuir a velocidade do caminhante mas sim bloquear o seu caminho, obrigando-o a contornar as mesmas. Iremos nos referir a este método como *Método 1* ou *M1*.

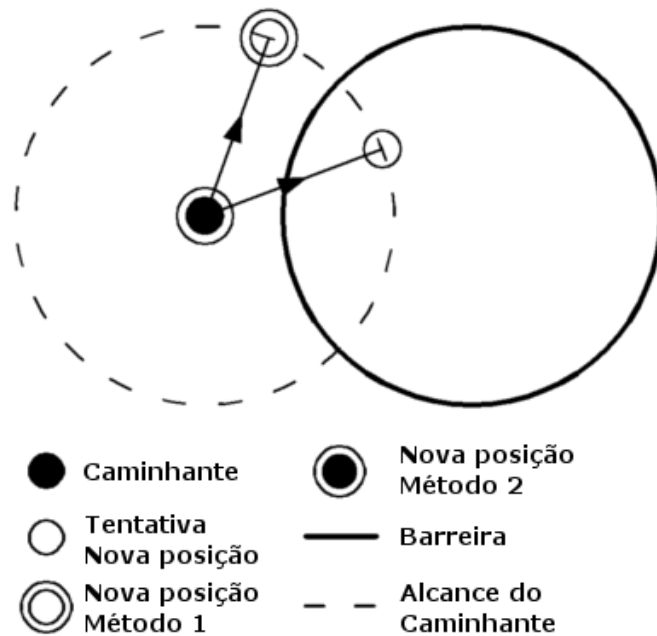


Figura 4.2: Representação da interação dos caminhantes com as barreiras nos métodos utilizados.

4.3 Colisões com Retardo

No caso de colisões com retardo os caminhantes permanecem uma iteração parados caso haja uma colisão com uma barreira (Fig. 4.2). Neste caso as

barreiras atrasam o caminhante tanto fazendo-os contorná-las quanto por diminuírem sua velocidade média. Iremos nos referir a este método como *Método 2* ou *M2*.

4.4 Distribuição das Barreiras

Quanto a distribuição de barreiras no espaço, não é permitido que haja área comum entre duas ou mais barreiras e também não é permitido que nenhuma barreira seja interceptada pelo lado do quadrado base a ser replicado. Essas restrições existem apenas para simplificar a simulação e a primeira (não superposição) pode ser aplicada a qualquer problema onde haja exclusão de área entre as barreiras. Para fazer a distribuição sorteamos o ponto central de cada barreira, verificando se a mesma respeita as condições impostas, até que todas as barreiras estejam acomodadas no espaço. Chamamos a fração do espaço não ocupado pelas barreiras de fração de área livre (F_{al}).

O problema de acomodamento das barreiras no espaço é também conhecido como *random packing* ou *empacotamento aleatório* [12]. Com o método que utilizamos foi possível atingir uma fração de área ocupada ($1 - F_{al}$) pouco maior que $\frac{1}{2}$, embora seja sabido que com métodos mais sofisticados seja possível atingir valores maiores de ocupação.

4.5 Medidas

Como mencionado anteriormente, usamos $\langle |\vec{r} - \vec{r}_0|^2 \rangle$ para medir como a disposição das barreiras irá afetar a evolução do processo. Por simplicidade nos referimos a $|\vec{r} - \vec{r}_0|$ como r e, conseqüentemente, a $\langle |\vec{r} - \vec{r}_0|^2 \rangle$ como $\langle r^2 \rangle$, uma vez que nos interessa a dispersão dos caminhantes relativa a seu ponto de partida. O valor de $\langle r^2 \rangle$ foi observado ao longo de simulações e o valor de $\langle r^2 \rangle$ ao final de diversas simulações com parâmetros variados, como número de barreiras (N_b), raio das barreiras (R_b), e conseqüentemente a fração de área livre do espaço (F_{al}), onde:

$$F_{al} = 1 - \frac{N_b \pi R_b^2}{d^2}. \quad (4.1)$$

As densidades espacial (ρ) e radial (ρ_r) de caminhantes foram observadas, em conjunto com a evolução temporal de $\langle r^2 \rangle$, para verificar a hipótese de que a forma como o sistema evolui no tempo se manteria inalterada, alterando-se apenas a constante de difusão. As densidades (ρ e ρ_r) quando normalizadas pelo número de caminhantes tendem a se aproximar das densidades de probabilidade P e P_r respectivamente, para um número de caminhantes elevado.

Nas medidas realizadas limitamos o valor mínimo de F_{al} em $\frac{1}{2}$, pois, como mencionando anteriormente, é uma tarefa difícil atingir valores maiores que $\frac{1}{2}$ no problema de *random packing*.

Capítulo 5

Resultados

Foi possível constatar que, para a simulação proposta, manteve-se o comportamento de um sistema difusivo normal. Nas figuras 5.1 e 5.2 podemos observar que, mesmo com a adição de barreiras na simulação, $\langle r^2 \rangle$ mantém uma dependência linear com t sendo $\Delta t = 1$ equivalente a uma iteração na simulação.

Nas figuras mencionadas, também é possível notar que, em todos os casos com barreiras, $\langle r^2 \rangle$ cresce com t a uma taxa menor que no caso livre de barreiras. Nessas simulações a área livre foi mantida constante, enquanto os métodos e a quantidade de barreiras foram variados. Nota-se uma diferença na inclinação para simulações com 400 e 1600 barreiras. Essa diferença é mais acentuada para o caso $M1$. Mostrou-se também que, como esperado, o caso de colisões com retardo ($M2$) evolui mais lentamente que $M1$.

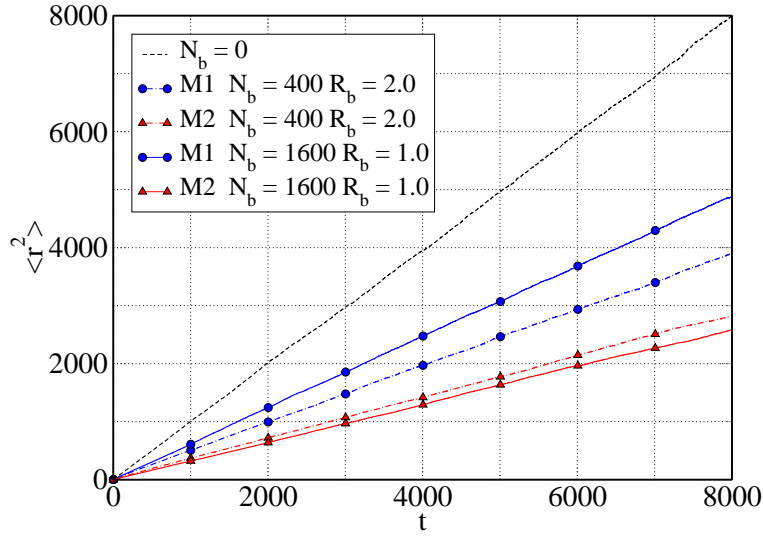


Figura 5.1: Evolução do desvio quadrático médio de 8000 caminhantes aleatórios sem barreiras ($N_b = 0$) e com barreiras ($N_b = 400, 1600$). Dois tipos de colisões são considerados ($M1$ e $M2$). Para os casos com barreiras $A_l = 0.502655$.

As densidade radial (Fig. 5.3) e espacial (Fig. 5.4) de caminhantes mostram para um caso com barreiras a mesma forma que a esperada para o caso sem barreiras, apenas com um certo atraso. Aqui é importante lembrar que as densidades foram calculadas a partir de r , que é um valor relativo a posição inicial de cada caminhante, ou seja, como se todos os caminhantes tivessem a mesma posição inicial.

A figura que mostra a variação de $\langle r^2 \rangle$, ao final de uma simulação, com a fração de área livre (F_{al}) indica uma dependência linear (Fig. 5.5) para o caso $M1$, mas este resultado deve ser interpretado com cautela. Já foi mostrado que para uma mesma fração de área livre existe uma variação na dependência de $\langle r^2 \rangle$ com t para simulações com raios de barreira diferentes.

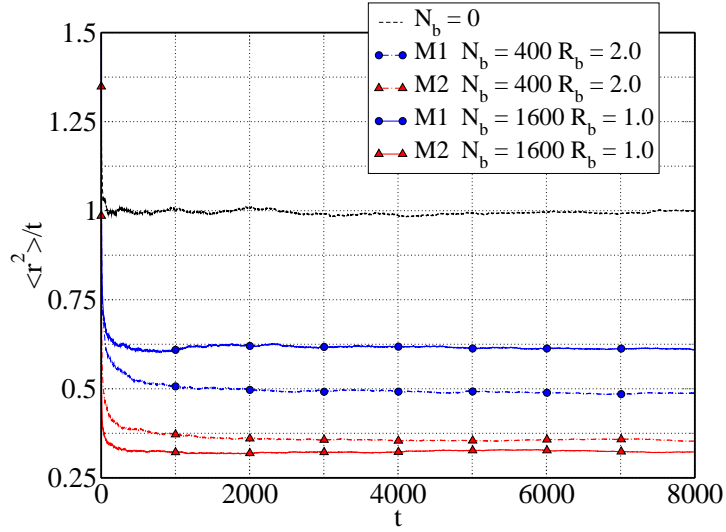


Figura 5.2: Indicação de que $\langle r^2 \rangle / t$ é constante ao longo da simulação, após algumas iterações. $N_c = 8000$, $N_i = 8000$, onde N_c é o número de caminhantes, e N_i é o número de iterações.

Para o caso $M2$ é coerente que $\langle r^2 \rangle$ se aproxime mais rapidamente de 0 que $M1$ conforme F_{al} decresce, uma vez que a diminuição da fração de área livre aumenta a chance de colisões com barreiras e consequentemente um atraso no processo de colisões com retardo. Ao fazermos a correção de $\langle r^2 \rangle$ com o inverso da fração de tempo livre (Fig. 5.6), que é a fração média do número de passos dos caminhantes pelo número total de iterações, verificamos que esse valor passa a ter também dependência linear com F_{al} .

Para verificar como o raio das barreiras influencia na difusão dos caminhantes, realizamos diversas simulações nas quais a fração de área livre foi fixa em $\frac{1}{2}$ e o número de barreiras era sorteado, tendo como restrições apenas o metade do passo do caminhante ($\frac{1}{2}l$) como o raio mínimo das barreiras e a sua periodicidade, essa última limita o raio máximo das barreiras. Tendo

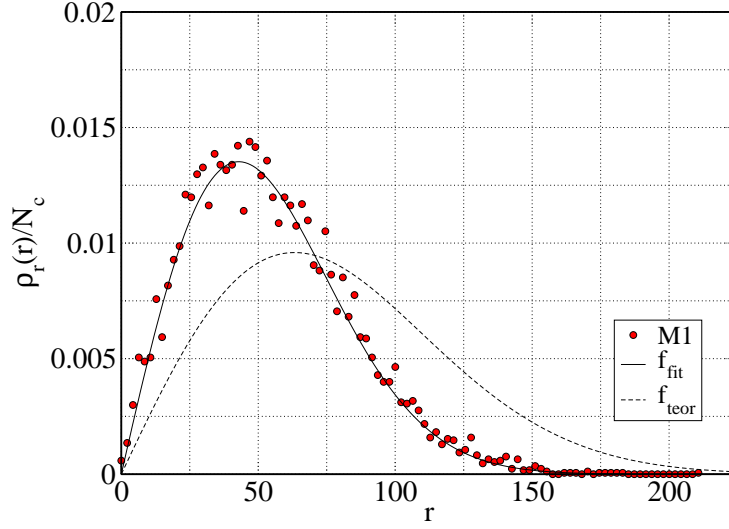


Figura 5.3: Densidade radial de caminhantes (ρ_r) para o caso M1. $f_{fit}(r) = 2\pi a e^{-\frac{r^2}{2b^2}}$, $a = 8.27 \times 10^{-5}$, $b = 42.91$. f_{teor} é a previsão teórica para a difusão sem barreiras (Equação 3.7 com $N_p = N_i$). $N_b = 400$, $R_b = 2.0$, $N_c = 8000$, $N_i = 8000$, onde N_b é o número de barreiras e R_b é o raio das barreiras.

a fração de área livre (F_{al}) constante, sorteamos o número de barreiras (N_b) para obter diferentes valores para o raio das barreiras (R_b) em cada simulação, conforme a equação 4.1. O resultado (Fig. 5.7) mostra que para o caso M1, $\langle r^2 \rangle / t$ converge rapidamente para metade do valor esperado para o caso sem barreiras, com o aumento do raio, o que concorda com o resultado anterior relacionando $\langle r^2 \rangle / t$ com F_{al} . Para o caso M2 a convergência é mais lenta, devido ao retardo das colisões.

Não foram explorados casos em que $R_b < \frac{1}{2}l$, mas conhecida a dinâmica da simulação é possível prever o comportamento para esse caso e confrontar com as tendências indicadas na figura 5.7. No caso M1 esperamos que $\langle r^2 \rangle / t$

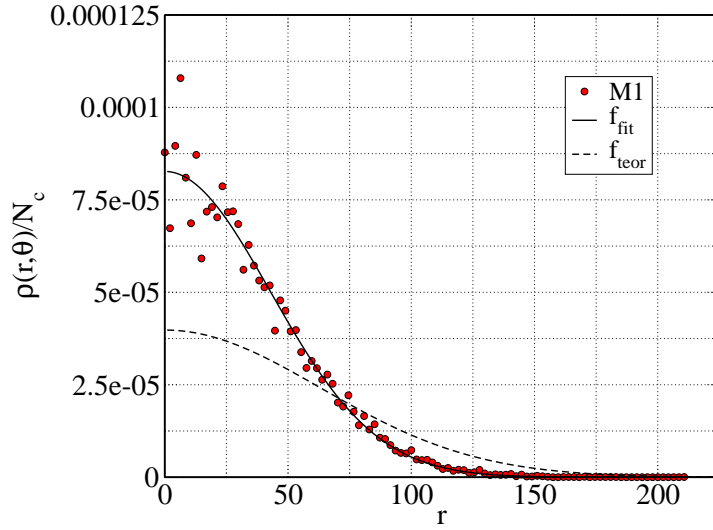


Figura 5.4: Densidade espacial de caminhantes (ρ), média em θ , e normalizada pelo número de caminhantes (N_c), para o caso M1. $f_{fit}(r) = ae^{-\frac{r^2}{2b^2}}$, $a = 8.27 \times 10^{-5}$, $b = 42.91$. f_{teor} é a previsão teórica para a difusão sem barreiras (Equação 3.9 com $N_p = N_i$). $N_b = 400$, $R_b = 2.0$, $N_c = 8000$, $N_i = 8000$.

tenha o mesmo valor que o caso sem barreiras para $R_b \rightarrow 0$, visto que é permitido ao caminhante atravessar barreiras, e caso ele caia dentro de uma barreira, simplesmente terá sua posição sorteada novamente até que a mesma seja válida. Para o caso *M2* espera-se que $\langle r^2 \rangle / t$ volte a ter o valor do produto de F_{al} com $\langle r^2 \rangle / t$ para o caso sem barreiras, pois com $l \gg R_b$ a chance de haver uma colisão passa a ser igual a F_{al} , ou seja, a fração de tempo livre é igual a fração de área livre.

O número de colisões, para o conjunto de simulações citado anteriormente (Fig. 5.8), não tem relevância para o caso *M1*, mas no caso *M2* o número de colisões por caminhante por iteração é a fração de tempo com retardo (F_{tr}),

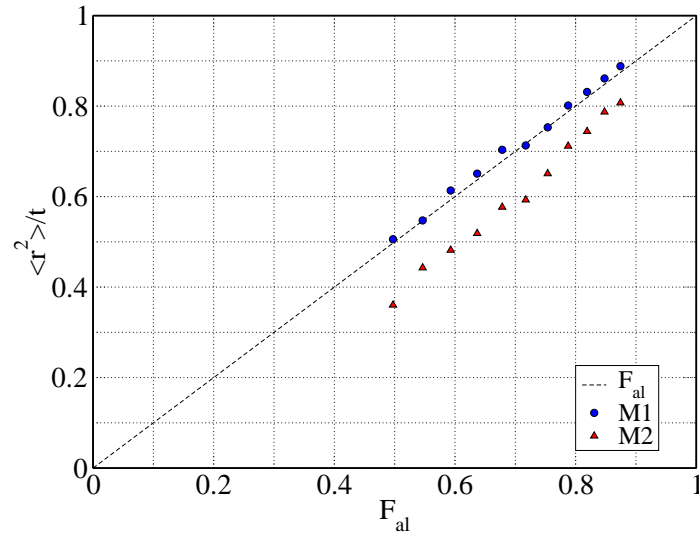


Figura 5.5: Desvio quadrático médio de um conjunto de caminhantes após 8000 iterações como função da área livre (A_l) para os casos $M1$ e $M2$. $N_b = 400$, $R_b = 1.0$ a 2.0 , $N_c = 8000$.

e a fração de tempo livre é $1 - F_{tr}$.

O intervalo de $\frac{1}{2}l$ a l foi incluído apenas para verificar como o sistema se comportava em condições em que há uma chance considerável de o caminhante atravessar uma barreira.

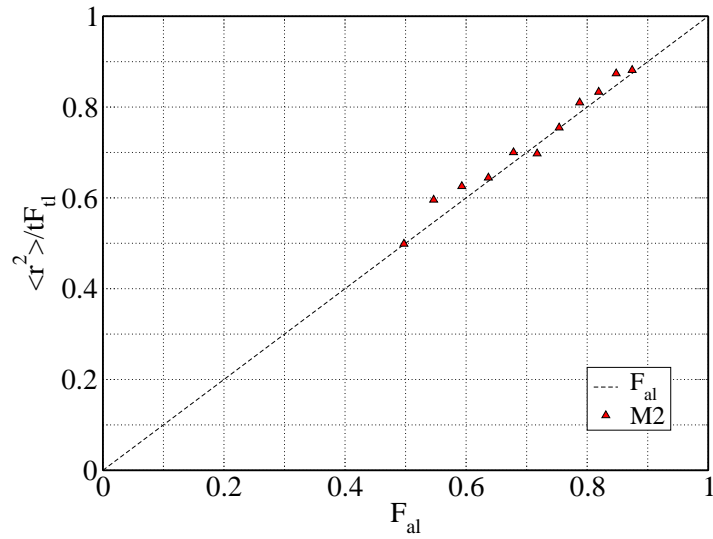


Figura 5.6: Desvio quadrático médio por caminhante após 8000 iterações como função da área livre (A_l) para os caso M2, corrigido pela fração de tempo livre (F_{ul}). $N_b = 400$, $R_b = 1.0$ a 2.0 , $N_c = 8000$, $N_i = 8000$.

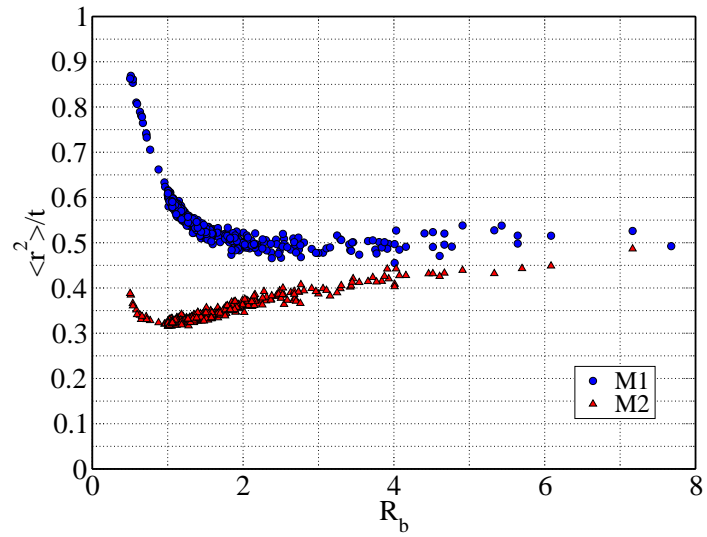


Figura 5.7: Desvio quadrático médio dos caminhantes pelo tempo ($\langle r^2 \rangle / t$) versus raio das barreiras (R_b). $A_l = \frac{1}{2}$, $N_c = 8000$, $N_i = 8000$.

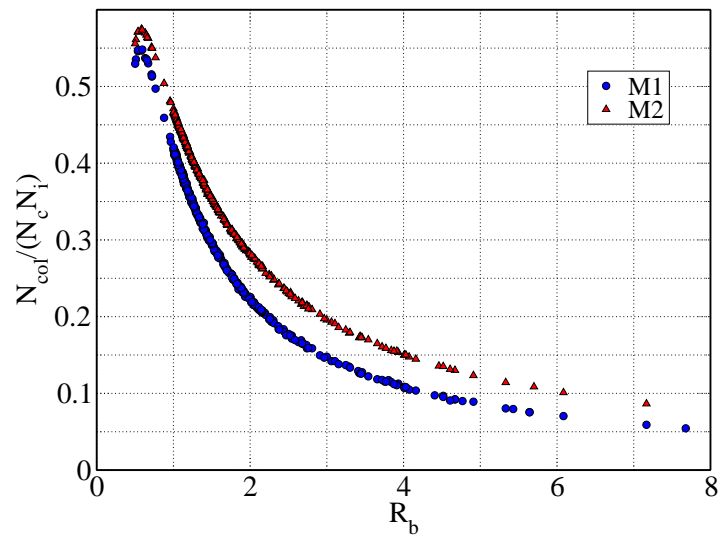


Figura 5.8: Número de colisões (N_{col}) por caminhante por iteração *versus* número de barreiras, após 8000 iterações. $A_l = \frac{1}{2}$, $N_c = 8000$.

Capítulo 6

Conclusões

Neste estudo investigamos a influência de obstáculos (barreiras circulares) sobre a dispersão de caminhantes aleatórios, com o objetivo de estudar o comportamento de uma difusão qualquer nas mesmas condições. Isto se deve ao fato de que a evolução da densidade de caminhantes no espaço apresenta comportamento difusivo.

Para tal, distribuimos homogeneamente as barreiras em um plano, repetindo-as periodicamente em quadrados de lado d , onde d é 100 vezes o tamanho do passo dos caminhantes. Estes tiveram suas posições iniciais distribuídas também homogeneamente no espaço, com a única restrição de não coincidirem com espaços ocupados pelas barreiras. Definimos dois modos de operação, sem retardo ($M1$), onde os caminhantes apenas evitam ocupar o mesmo espaço que as barreiras, e com retardo ($M2$), onde os caminhantes deixam de dar um passo durante as iterações em que tentam ocupar um

espaço já ocupado por uma barreira.

A distribuição de barreiras dá ao problema novas condições de contorno, mas verificamos que a resposta do sistema, pode ser interpretada, em uma aproximação, como a resposta ao problema sem barreiras, apenas com uma diferença na constante de difusão (D). Essa alteração na prática faz com que o sistema evolua mais lenta ou rapidamente. No caso, observamos apenas uma evolução mais lenta, e como era esperado, ainda mais lenta para o caso com retardo. Para ambos os casos constatamos que a discretização do problema começa a ficar comprometida quando o raio das barreiras (R_b) é menor que o dobro do tamanho do passo dos caminhantes (l). Este fato é mais visível para o caso $M1$, pois no caso $M2$ podemos considerar a relação R_b/l como um regulador para a chance de haver colisões e conseqüentemente, para o retardo. Para o caso $M1$ é possível afirmar que a constante de difusão D é alterada com um fator que corresponde a área livre do sistema, e o caso $M2$ apresenta o mesmo comportamento quando corrigido por uma fator de $\frac{1}{F_{tl}}$, onde F_{tl} é a fração de tempo em que houve movimento dos caminhantes.

O fator de área livre em nossas simulações foi limitado a um mínimo de $\frac{1}{2}$ por deficiência na rotina que distribuía as barreiras. Poderíamos melhorar esse valor refinando essa rotina ou estudando meios com barreiras distribuídas ordenadamente. Outros avanços interessante seriam, a possibilidade de regular o retardo no caso $M2$ de uma forma que não alterasse a discretização do sistema e uma detecção de colisões que não permitisse aos caminhantes atravessarem barreiras.

Referências Bibliográficas

- [1] T. Mitsui, M. K. Rose, E. Fomin, D. F. Ogletree, and M. Salmeron, PRL 94, 036101 (2005).
- [2] Barkana R (Barkana, R.), MONTHLY NOTICES OF THE ROYAL ASTRONOMICAL SOCIETY, 376 (2007) 1784.
- [3] Self-propelled particle model for cell-sorting phenomena, J. M. Belmonte, G. L. Thomas, L. G. Brunnet, R.M.C. Almeida, H. Chaté, Phys. Rev. Letters 100, 248702 (2008).
- [4] cAMP diffusion in *Dictyostelium discoideum*: A Green's function method, Daniel S. Calovi, Leonardo G. Brunnet, and Rita M. C. de Almeida, Phys. Rev. E 82, 011909 (2010).
- [5] Dietrich Stauffer, Christian Schulze, Dieter W. Heermann J Biol Phys 33 (2007) 305–312.
- [6] Weisstein, Eric W. "Random Walk–2-Dimensional." From *MathWorld*–A Wolfram Web Resource. <http://mathworld.wolfram.com/RandomWalk2-Dimensional.html>

- [7] Wikipedia: The Free Encyclopedia. Wikimedia Foundation Inc. Encyclopedia on-line. Disponível em http://en.wikipedia.org/wiki/Heat_equation#Fundamental_solutions. Internet. Acessado em 10 de Agosto de 2010.
- [8] Wikipedia: The Free Encyclopedia. Wikimedia Foundation Inc. Encyclopedia on-line. Disponível em http://en.wikipedia.org/wiki/Random_walk. Internet. Acessado em 16 de Novembro de 2010.
- [9] S. R. A. Salinas, Introdução a Física Estatística, 1 Ed. Editora da Universidade de São Paulo, 1997.
- [10] K. Pearson, Nature 72, 294-294 (27 July 1905).
- [11] Rayleigh, Nature 72, 342 (10 August 1905).
- [12] H. Solomon, Proc. Fifth Berkeley Symp. on Math. Statist. and Prob., Vol. 3 (Univ. of Calif. Press, 1967)