

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO NORTE
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA TEÓRICA E EXPERIMENTAL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

COMPETIÇÃO ENTRE CAMINHANTES ALEATÓRIOS

Samuel Rodrigues Gomes Júnior

NATAL
Fevereiro de 1996

Dissertação de Mestrado apresentada ao Departamento de Física Teórica e Experimental da Universidade Federal do Rio Grande do Norte como requisito parcial à obtenção do grau de **Mestre em Física**.

Orientador: Prof. Dr. Liacir dos Santos Lucena

À Ana Anita de Medeiros Silva, minha avó.

AGRADECIMENTOS

Ao *Prof. Liacir dos Santos Lucena*, pelo empenho em assegurar minha sólida formação profissional, que demonstrou principalmente quando das dificuldades enfrentadas.

Ao *Prof. Luciano Rodrigues da Silva*, pela atenção dispensada e pelo grande incentivo.

Ao *Prof. Heindrick J. Hillhorst*, pelo estímulo dado ao estudo das caminhadas aleatórias e pela simpatia.

A *todos os Professores do DFTE*, que com seus exemplos contribuíram valiosamente para a minha formação profissional.

A *todos os colegas de curso*, por me proporcionarem um alegre ambiente de trabalho e pela convivência, sempre valiosa.

A *todos os funcionários do DFTE*.

Ao CNPq, pelo apoio financeiro.

Investigamos a competição entre vários caminhantes aleatórios usando um modelo que introduzimos, no qual caminhantes diferenciados disputam a ocupação de cada sítio numa rede. A regra estabelecida diz que o sítio adquire as propriedades (cores) do primeiro visitante e as mantém de forma irreversível, mesmo que receba visitas posteriores de outros caminhantes. O sistema evolui para um estado final, no qual todos os sítios da rede estão coloridos. Estudamos dois casos particulares do modelo: 2 caminhantes aleatórios numa rede unidimensional e N caminhantes aleatórios numa rede bidimensional. Para o caso de uma dimensão obtivemos a distribuição de probabilidades de um sítio ser vermelho ou azul, no estado final. Observamos a variação do número de interfaces com a separação inicial dos caminhantes, para a qual obtivemos uma variação logarítmica. Investigamos também o tempo de cobertura e obtivemos uma relação de escala para o mesmo. Para o caso bidimensional investigamos o comportamento do número de interfaces em relação a N e obtivemos a dimensão fractal deste conjunto. Encontramos uma relação de escala para o tempo de cobertura em função do tamanho da rede e do número de caminhantes.

We investigate the competition among many random walkers using a model we have introduced in which different walkers dispute the occupation on each lattice site. The rule we choose says that a site acquires the properties (colors) of the first visitor and keep it in an irreversible way, that means later visits of other walkers will not change these colors. The system evolves to a final state in which all the lattice sites are colored. We study two particular cases of the model: 2 random walkers on an one-dimensional lattice and N random walkers on a two-dimensional lattice. In the one-dimensional case we got the probability distribution of a site to be colored red, or blue, when the final state is reached. We observed how the number of interfaces changes with the initial separation between the walkers and obtained a logarithmic variation. We investigated also the covering time and obtained a scaling law for it. In the two-dimensional case we investigated the behavior of the number of interfaces as a function of N and we got its fractal dimension. We found a scaling law for the covering time as a function of the number of walkers and lattice size.

1. Introdução	1
1.1 Caminhadas Aleatórias - Uma Breve Evolução Histórica	3
1.2 Nosso Modelo	7
1.3 Esta Tese	7
1.4 Referências	10
2. Caminhadas Aleatórias em Redes	12
2.1 A Caminhada Aleatória Simples	13
2.2 Caminhada Aleatória Discreta numa Rede	16
2.3 O Método Monte Carlo para Caminhadas Aleatórias	19
2.4 Leis de Escala para Caminhadas Aleatórias	22
2.5 Referências	25
3. Competição entre Caminhantes Aleatórios em uma Dimensão	26
3.1 O Modelo	27
3.2 Probabilidade de um Sítio Vermelho	29
3.2.1 Probabilidade de um Caminhante	29
3.2.2 Probabilidade de dois Caminhantes	31
3.3 As Interfaces Vermelho-Azul	35
3.4 Tempo de Cobertura da Rede	39
3.5 Referências	41
4. Competição entre Caminhantes Aleatórios numa Rede Bidimensional	42
4.1 O Modelo	43
4.2 Tempo de Cobertura da Rede	47
4.3 As Interfaces Vermelho-Azul	51
4.4 Referências	56
5. Conclusões	57
Apêndice	60

O estudo de modelos envolvendo o tema clássico das caminhadas aleatórias e dos processos estocásticos foi preocupação constante da Ciência desde meados do século passado, contribuindo para importantes desenvolvimentos em diversas áreas da Física^[1-12], Química^[7,8,9,20], Biologia^[1,2,12,20] e outras Ciências. Muitos desses modelos foram abordados e tratados por grandes expoentes da Física, tais como Maxwell, Rayleigh, Einstein, Kolmogorov, Feynman, Chandrasekhar, entre outros^[25].

Na verdade a caminhada aleatória serve bastante bem como meio de abordagem de muitos problemas onde uma componente estocástica existe, servindo para a construção de modelos simples, que são ferramentas valiosas para o estudo aprofundado desses problemas.

Nos últimos anos, o interesse sobre o assunto ressurgiu com inesperada intensidade devido a novas descobertas e o desenvolvimento de novas técnicas e idéias, entre as quais destacamos:

- (i) O advento dos modernos computadores digitais com enorme capacidade de cálculo. Essas máquinas permitem a simulação de sistemas com um grande número de graus de liberdade, através de técnicas como dinâmica molecular, método Monte Carlo, autômatos celulares e outras.

(ii) A entrada em cena da Física dos Sistemas Complexos. Cresce o interesse no estudo em polímeros^[2,5,7,8,11,20], meios materiais porosos^[2], modelos de crescimento^[5], dinâmica de superfícies^[21], etc. Estes sistemas geralmente apresentam algum ingrediente aleatório, representado por alguma desordem ou ruído.

(iii) O estudo de sistemas fora do equilíbrio, os quais podem ser tratados por modelos dinâmicos baseados em caminhantes aleatórios^[1,13].

(iv) O estudo de sistemas cooperativos^[20] estimulou a aplicação das técnicas e modelos da Física à Biologia, fazendo com que um considerável impulso fosse dado à Física dos sistemas biológicos, nos últimos tempos. Caminhadas aleatórias no DNA^[23] e nos intervalos de batidas do coração^[24] foram evidenciadas recentemente corroborando a relevância e atualidade desses modelos.

Sistemas mais complexos exigem a introdução de muitos caminhantes aleatórios para sua representação. Trabalhos recentes chamaram a atenção para a riqueza fenomenológica desses modelos com muitos caminhantes, mesmo em problemas simples com caminhantes indistinguíveis. Larralde et al.^[3,4] estudaram a evolução temporal do território coberto por N caminhantes idênticos, determinando a existência de 3 regimes de crescimento bastante diferenciados e uma transição do tipo lisa-rugosa.

Mais interessantes, entretanto, são os problemas com caminhantes diferenciados, onde é possível investigar a competição entre os mesmos e as complexas interfaces entre as regiões “colonizadas” por esses viajantes aleatórios. É este o propósito desta tese. Abordamos este problema em 1 e 2 dimensões e obtemos informações sobre a evolução do sistema, sobre o comportamento fractal das interfaces e ainda sobre leis de escala que governam a dinâmica.

1.1 Caminhadas Aleatórias - Uma Breve Evolução Histórica

Em 1828, o biólogo inglês Robert Brown publicou um artigo sobre o movimento rápido e irregular de grãos de pólen suspensos em água. Este fenômeno ficou conhecido como movimento Browniano. Contudo, não foi ele quem descobriu o fenômeno, e sim Bywater que chegou à seguinte conclusão em 1819: “Não somente substâncias orgânicas, mas também as substâncias inorgânicas, consistem de partículas animadas e irritáveis.”

A descoberta do movimento Browniano levou muitos cientistas a acreditar que as partículas eram vivas, apesar do próprio Brown não ter chegado a tal conclusão, e sim imaginado que a origem da agitação estava nas “moléculas ativas” por si só, e não no fluido ao seu redor. A descoberta de Brown despertou grande interesse na comunidade científica da época.

Em 1863, E. C. Wigner interpretou o movimento Browniano em termos da teoria cinética molecular e pouco depois Gouy confirmou esse ponto de vista através de cuidadosas experiências.

O ano de 1905 foi marcado pela apresentação feita por Einstein da sua teoria do movimento Browniano e da sua teoria da relatividade^[13]. Tanto na derivação da equação de difusão, quanto na relação de Einstein, que relaciona a constante de difusão com a temperatura, fica clara a natureza aleatória do movimento Browniano. Baseados na aleatoriedade do fenômeno, posteriormente foram desenvolvidas teorias dinâmicas por Smoluchowski, Langevin, Ornstein, Uhlenbeck e outros^[1,25].

É no ano de 1905 que a caminhada aleatória (ilustração na figura 1.1) aparece explicitamente na literatura pela primeira vez, introduzida por Karl Pearson^[14] em artigo publicado na revista *Philosophical Magazine*. “Um homem começando de um ponto 0 caminha l jardas numa linha reta: ele então gira de um ângulo qualquer e caminha outras l jardas. Ele repete o processo N vezes. Eu pergunto qual a probabilidade de que após esses N deslocamentos ele esteja a uma distância entre r e $r + dr$ do seu ponto de partida 0”. Lorde Rayleigh prontamente respondeu^[15]:

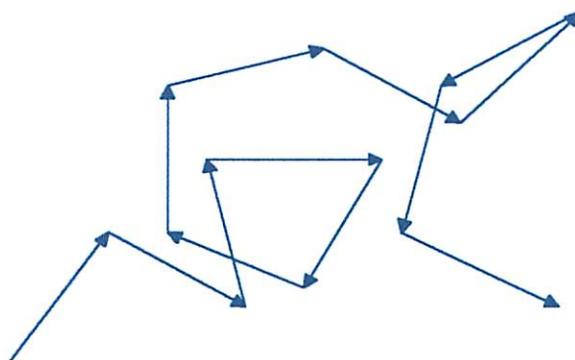


Figura 1.1. Caminhada Aleatória

“O problema, proposto pelo Prof. Karl Pearson neste número de *Philosophical Magazine*, é o mesmo que o da composição de N vibrações isoperiódicas de amplitude unitária e fases distribuídas ao acaso, considerado em *Phil. Mag.*, X, p. 73, 1880; XLVII, p. 246, 1889. Se N é muito grande a probabilidade é

$$\frac{2}{N} e^{-\frac{r^2}{N}} r dr \dots \quad (1.1)$$

Na verdade Rayleigh já havia resolvido o problema da caminhada aleatória muitas vezes quando da publicação da segunda edição do seu livro **Teoria do Som**^[16]. Desde então o problema das caminhadas aleatórias e sua aplicação a sistemas naturais constituem uma

área de extensa pesquisa em Física. Uma generalização direta da definição de Pearson é a caminhada que se dá num espaço de d dimensões, na qual o resultado acima ainda é válido.

Outro importante resultado para as caminhadas aleatórias em redes periódicas é o teorema de Polya^[17]: *Uma partícula efetua caminhada aleatória numa rede com condições de contorno periódicas. Para redes em uma ou duas dimensões ela retornará a qualquer sítio pelo qual tenha passado anteriormente com probabilidade 1, enquanto que em três ou mais dimensões a partícula tem probabilidade não-nula de escapar e não mais retornar ao sítio.*

No decorrer deste século muitas outras aplicações das caminhadas aleatórias a sistemas naturais foram feitas. A análise teórica detalhada das mesmas foi realizada por E. W. Montroll numa série de trabalhos sobre caminhadas aleatórias em redes^[18,19]. Numa importante aplicação ele tratou o problema da relaxação dielétrica como uma caminhada aleatória de defeitos na rede.

Recentemente vários modelos foram desenvolvidos para explicar a formação e o crescimento de sistemas físicos e biológicos. Crescimento de rochas dendríticas, algas e colônias de corais são alguns dos fenômenos descritos por um modelo simples de caminhada aleatória chamado DLA (Diffusion Limited Agregation). No DLA começamos com uma semente (partícula fixa em um ponto qualquer, digamos a origem). Uma outra partícula começa a mover-se aleatoriamente até que, num dado instante, ela toca a semente e permanece congelada nessa posição. Uma outra partícula então é lançada em movimento aleatório e quando toca uma das duas partículas fixas fica congelada na posição em que se

encontra. Da continuidade deste processo surge um agregado de forma auto-organizada e muito semelhante a uma rocha dendrítica.

Muito recentemente^[20,23] uma nova e curiosa aplicação para as caminhadas aleatórias foi estabelecida. O código genético dos seres vivos - o DNA (ácido desoxirribonucléico) - é composto pela combinação de quatro diferentes moléculas, que se ligam duas a duas e formam uma grande cadeia polimérica. Definindo cada par de moléculas como um passo para a direita ou para a esquerda eles verificaram que a distribuição das moléculas ao longo da cadeia, às vezes, é semelhante à distribuição gaussiana para caminhadas aleatórias e, às vezes, é completamente estranha. As moléculas que constituem o DNA são distribuídas como os passos de uma caminhada aleatória.

Os problemas de caminhadas aleatórias têm sido sistematicamente aplicados em Física e Matemática. Uma proeminente classe de problemas correlacionados às caminhadas aleatórias simples é aquela onde os caminhantes não interagem entre si. É sabido que nos modelos com caminhantes não interagentes pode-se facilmente obter um comportamento complexo e não-trivial. Por exemplo, Larralde et al.^[1-2] consideraram N caminhantes aleatórios não-interagentes partindo simultaneamente da origem numa rede d -dimensional. Eles investigaram qual era o número de sítios visitados num tempo t (ou seja, t passos de cada caminhante) por no mínimo um dos caminhantes.

O modelo aqui apresentado trata de um conjunto de N caminhantes aleatórios não interagentes. Os caminhantes são divididos em dois grupos, ou duas “espécies”; os caminhantes “azuis” e os caminhantes “vermelhos”. Em $t = 0$ os N caminhantes se encontram na origem e começam então a mover-se simultaneamente numa rede quadrada ou em uma dimensão, com condições de contorno periódicas. Vamos agora estipular que cada sítio, inicialmente incolor, adquire irreversivelmente a cor vermelha, ou azul, do caminhante que primeiro o visita, ou seja, visitas posteriores de quaisquer outros caminhantes não mudarão a cor do sítio. O sistema evolui então para um estado final de equilíbrio, no qual todos os sítios estão coloridos de azul ou vermelho. Nosso objetivo é estudar as propriedades estatísticas do estado final; a distribuição de cores pela rede, e como o sistema vai para este estado, inclusive o tempo que o mesmo leva para atingir esse estado.

Neste primeiro capítulo apresentamos uma breve introdução ao que são caminhadas aleatórias, qual o seu emprego na explicação de fenômenos naturais e definimos de forma sucinta o modelo que estudamos. Falamos agora especificamente do que tratam os demais capítulos.

No capítulo 2 fazemos uma revisão da teoria de probabilidades aplicada às caminhadas aleatórias. Analisamos o caso da caminhada aleatória unidimensional, para

familiarizar o leitor com os conceitos inerentes ao tema. A teoria das funções de Green é brevemente desenvolvida para o problema das caminhadas aleatórias com tempo discreto em redes. O método de Monte Carlo é introduzido através de uma sucinta introdução histórica e da sua aplicação a uma caminhada aleatória simples. Por último relembramos os conceitos de escala, a obtenção de leis de escala e expoentes que definem a classe de universalidade de um modelo.

No capítulo 3 definimos precisamente o nosso modelo e o tratamos no caso unidimensional. Calculamos analiticamente a probabilidade de que, existindo dois caminhantes, um vermelho e um azul, numa rede unidimensional com condições de contorno periódicas, um sítio x da rede esteja colorido vermelho ou azul quando o estado final é atingido. Através de simulações Monte Carlo medimos o tempo de cobertura da rede e o número de interfaces. Após a cobertura completa da rede pelos caminhantes a mesma fica dividida em aglomerados de sítios das duas espécies, e esses aglomerados fazem fronteira entre si formando várias interfaces. Determinamos a distribuição de tamanhos dos aglomerados e a dimensão fractal das interfaces. Demonstramos que, para dois caminhantes inicialmente diametralmente separados, o número médio de interfaces é maior que 2, e que esse número cresce logaritmicamente com o inverso da separação inicial. Verificamos que a distribuição de probabilidades de primeiras visitas apesar de muito próxima de linear, não exhibe rigorosamente este comportamento. Obtemos leis de escala para o tempo de cobertura e o número de interfaces.

No capítulo 4 focalizamos a versão bidimensional do modelo onde estudamos a cobertura da rede por N caminhantes de duas espécies diferentes. Da mesma forma como

procedemos no capítulo 3 obtivemos expoentes característicos, e ainda estudamos a variação das grandezas anteriormente citadas com o número de caminhantes N . Observamos uma mudança nos expoentes quando temos mais de 2^5 caminhantes, o que pode realmente representar um *crossover*.

No capítulo 5 apresentamos as conclusões do nosso trabalho e abordamos possíveis aplicações do nosso modelo a sistemas naturais. Listamos algumas possíveis extensões do nosso trabalho, incluindo generalizações do modelo.

No apêndice descrevemos e analisamos os programas de computador em linguagem C++ usados nas simulações. Os programas são bastante comentados para aqueles que se interessem em algoritmos.

-
- [1] J. L. Lebowitz e E. W. Montroll
Nonequilibrium Phenomena II - from Stochastics to Hydrodynamics
(North-Holland, New York, 1984)
- [2] E. Guyon et al., Disorder and Mixing (Kluwer Academic Publishers, 1988)
- [3] H. Larralde, P. Trunfio, S. Havlin, H. E. Stanley e G. H. Weiss
Nature **355** (1992) 423.
- [4] H. Larralde, P. Trunfio, S. Havlin, H. E. Stanley e G. H. Weiss
Phys. Rev. A **45** (1992) 7128.
- [5] L. S. Lucena, J. M. Araújo, D. M. Tavares, L. R. da Silva e C. Tsallis
Phys. Rev. Lett. **72** (1994) 230.
- [6] K. R. Coutinho, M. D. Coutinho-Filho, M. A. F. Gomes e A. M. Nemirovsky
Phys. Rev. Lett. **72** (1994) 3745.
- [7] P.-G. de Gennes, Scaling Concept in Polymer Physics
(Cornell University Press, London, 1979)
- [8] M. Doi e S. F. Edwards, The Theory of Polymer Dynamics
(Oxford University Press, New York, 1989)
- [9] E. P. Raposo, S. M. de Oliveira, A. M. Nemirovsky e M. D. Coutinho-Filho
Am. J. Phys. **59** (1991) 633.
- [10] L. Pietronero, Phys. Rev. Lett. **55** (1985) 2025.
- [11] L. Peliti, Phys. Rep. **103** (1984) 225.
- [12] J. J. Collins e C. J. De Luca, Phys Rev. Lett. **73** (1994) 764.
- [13] A. Einstein, Ann. Physik **17** (1905) 549.
- [14] Karl Pearson, Phil. Mag. **72** (1905) 294.
- [15] Lord Rayleigh, Phil. Mag. **72** (1905) 318.
- [16] Lord Rayleigh: Theory of Sound, 2^a ed. (Cambridge, 1894).

- [17] G. Polya, *Math. Ann.* **84** (1921) 149.
- [18] E. W. Montroll, *Commun. Pure Appl. Math.* **5** (1952) 415.
- [19] E. W. Montroll & G. H. Weiss, *J. Math. Physics* **6** (1965) 167-215.
- [20] A. Bunde & S. Havlin (Editores), *Fractals in Science* (Springer-Verlag, 1994).
- [21] A.-L. Barabási e H. E. Stanley, *Fractal Concepts in Surface Growth* (Cambridge University Press, 1995).
- [22] M. F. Shlesinger e G. H. Weiss, *The Wonderful World of Stochastics* (North-Holland, New York, 1985).
- [23] C.-K. Peng, S. V. Budyrev, A. L. Goldberger, S. Havlin, F. Sciortino, M. Simons e H. E. Stanley, *Nature* **356** (1992) 168.
- [24] C.-K. Peng, J. Miatus, J. Hansdorff, S. Havlin e H. E. Stanley *Phys. Rev. Lett.* **70** (1993) 1343.
- [25] N. Wax, *Selected Papers on Noise and Stochastic Processes* (Dover, 1954).

2

Caminhadas Aleatórias em Redes

O estudo das caminhadas aleatórias tem vasta possibilidade de aplicação em Física e outras áreas da ciência. Alguns dos exemplos interessantes incluem a difusão de macromoléculas em solventes inertes^[3,4,5], o crescimento de polímeros em meios desordenados^[3], difusão anômala de partículas^[2] e o problema do movimento Browniano^[1]. Para o bom entendimento desses fenômenos devemos formular modelos microscópicos onde seja razoável a introdução de aleatoriedade.

Para introduzir o leitor claramente às idéias e resultados mais importantes sobre o problema da caminhada aleatória faremos a seguir uma revisão de alguns tópicos que são fundamentais para o preciso entendimento dos resultados desta tese. Sendo mais específico, definimos o conceito de caminhada aleatória através da análise do caso unidimensional^[9]. Faremos uma breve introdução ao método da função de Green aplicado ao problema das caminhadas aleatórias discretas em redes de dimensão d ^[6,7]. O método Monte Carlo^[8] é apresentado de forma sintética, dando ênfase ao procedimento usado extensivamente nesta tese. Por último apresentamos algumas noções sobre conceitos de escala^[4,5] e de como podemos usá-los na obtenção de soluções para sistemas dos quais temos poucas informações, além de citar alguns resultados desse tipo para um caminhante aleatório.

2.1

A Caminhada Aleatória Simples

Para simplificar a nossa análise vamos tratar o caso da caminhada aleatória em uma dimensão. Suponha que uma partícula, partindo da origem, dá passos de comprimento fixo l aleatoriamente para a direita ou para a esquerda. Após um total de t passos a partícula estará localizada na posição $x = ml$, onde m é um número inteiro entre t e $-t$. Estamos interessados na probabilidade $P_t(m)$ de encontrar a partícula na posição $x = ml$ após t passos.

O número de passos t é a soma do número de passos para a direita t_1 com o número de passos para a esquerda t_2 , ou seja

$$t = t_1 + t_2 \quad (2.1)$$

O número de passos do qual a partícula se deslocou em relação à origem é dados por

$$m = t_1 - t_2 \quad (2.2)$$

Fica evidente da relação acima que quando t é par m necessariamente também é par, e quando t é ímpar m também tem que ser ímpar.

Existe porém várias maneiras de arranjar os t passos de tal forma que t_1 sejam para a direita e t_2 para a esquerda. Na verdade, descobrir o número de maneiras de arranjar os passos t_1 e t_2 obedecendo (2.1) é descobrir de quantas maneiras distintas podem ser arranjados $t_1 + t_2$ objetos, sendo que a permutação de qualquer dois dos t_1 (t_2) objetos é irrelevante. Observando esse fato fica fácil verificar que o número de caminhos compostos por $t_1 + t_2$ passos é

$$\frac{t!}{t_1!t_2!} \quad (2.3)$$

Faremos agora uma hipótese fundamental: cada passo dado pela partícula é um evento completamente independente de todos os passos dados anteriormente. Podemos então caracterizar a caminhada pelas seguintes probabilidades:

$$p = \text{probabilidade de um passo para a direita}$$

$$q = 1 - p = \text{probabilidade de um passo para a esquerda}$$

Assim, a probabilidade da partícula deslocar-se m passos é a probabilidade de ocorrência de uma seqüência de t_1 passos para a direita e t_2 passos para a esquerda, que é simplesmente o produto das probabilidades de cada passo, dada por

$$p^{t_1} q^{t_2} \quad (2.4)$$

Conseqüentemente a probabilidade $P_t(m)$ de encontrar a partícula numa posição m após t passos é

$$P_t(m) = \frac{t!}{t_1! t_2!} p^{t_1} q^{t_2} \quad (2.5)$$

No caso da caminhada com passos equiprováveis $p = q = 1/2$, e substituindo t_1 e t_2 de acordo com (2.1) e (2.2) temos

$$P_t(m) = \frac{t!}{\left(\frac{t+m}{2}\right)! \left(\frac{t-m}{2}\right)!} \left(\frac{1}{2}\right)^t \quad (2.6)$$

O resultado acima é conhecido como distribuição binomial, e concorda com aquele obtido por Rayleigh quando $t \rightarrow \infty$, ou seja, a distribuição gaussiana. Mesmo para valores de t não tão grandes (2.6) é bem aproximada por (1.1), como visto na figura 2.1.

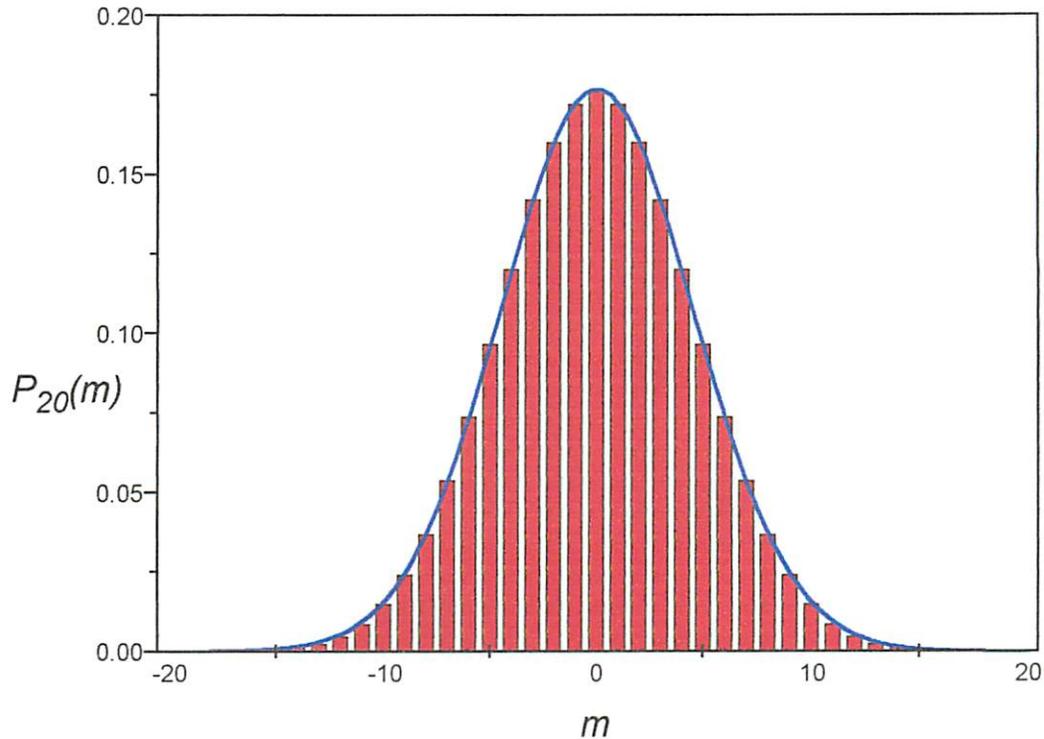


Figura 2.1 Valor da probabilidade do caminhante ter-se deslocado de m em relação à origem após 20 passos. A curva azul representa a equação (1.1).

O problema da caminhada aleatória unidimensional pode ser generalizado para caminhadas num espaço d -dimensional, para tanto devemos trocar x^2 por $\sum_{i=1}^d x_i^2$. Como os passos da caminhada são eventos estatisticamente não correlacionados, podemos concluir que as projeções dessa caminhada nos eixos cartesianos são caminhadas aleatórias em uma dimensão de t/d passos, em média. Sendo essas caminhadas completamente independentes umas das outras, a probabilidade de encontrar o caminhante num ponto $x \equiv (x_1, x_2, \dots, x_d)$ depois de t passos é simplesmente o produto das probabilidades das d caminhadas a uma dimensão estarem em x_1, x_2, \dots, x_d , após t/d passos cada, isto é

$$P_t(\mathbf{x}) = P_{t/d}(x_1) P_{t/d}(x_2) \cdots P_{t/d}(x_d) \quad (2.7)$$

A expressão acima vale tanto para o caso contínuo, como para o discreto.

2.2 Caminhada Aleatória Discreta numa Rede

Continuando nossa revisão vamos estudar caminhadas aleatórias discretas em redes com condições de contorno periódicas, de tal forma que exista um inteiro L tal que os sítios da rede $s = (s_1, s_2, \dots, s_d)$ satisfaçam a condição

$$(s_1 + j_1 L, s_2 + j_2 L, \dots, s_d + j_d L) = (s_1, s_2, \dots, s_d) \quad (2.8)$$

onde os j 's são inteiros.

Existem então L^d sítios distintos nessa rede hipercúbica d -dimensional. Seja $P_t(s)$ a probabilidade de que um caminhante aleatório esteja no sítio s após ter caminhado t passos. De acordo com as condições de contorno impostas

$$P_t(s_1 + j_1 L, s_2 + j_2 L, \dots, s_d + j_d L) = P_t(s). \quad (2.9)$$

O conjunto $\{P_t(s)\}$ satisfaz a relação de recorrência

$$P_{t+1}(s) = \sum_{s'} p(s-s') P_t(s'), \quad (2.10)$$

se $p(s)$ representa a probabilidade de um passo qualquer resultar num deslocamento vetorial s do caminhante aleatório. Expandindo $p(s)$ numa série de Fourier temos

$$\lambda(2\pi r / L) = \sum_s p(s) \exp(2\pi i r \cdot s / L), \quad (2.11)$$

que é denominada de função de estrutura da caminhada e inclui a topologia da rede no estudo do problema. Para o caso da rede hipercúbica d -dimensional

$$\lambda(2\pi r / L) = \frac{1}{d} \sum_{i=1}^d \cos(2\pi r_i / L). \quad (2.12)$$

Quando os caminhantes são conservados, ou seja, não são criados nem destruídos durante a caminhada, valem os seguintes vínculos:

$$\sum_s P(s) = 1 \text{ e } \lambda(0) = 1. \quad (2.13)$$

As propriedades de uma caminhada aleatória podem ser efetivamente descritas através da função geratriz da caminhada aleatória ($|z| \leq 1$)

$$P(s, z) = \sum_{t=0}^{\infty} z^t P_t(s). \quad (2.14)$$

Considerando apenas caminhadas que partem da origem, restringimo-nos à condição inicial

$$P_0(s) = \delta_{s,0}. \quad (2.15)$$

Multiplicando (2.10) por z^t , somando sobre todos os t e aplicando (2.15), obtemos a equação da função de Green para $P(s, z)$

$$P(s, z) - z \sum_{s'} P(s - s') P(s', z) = \delta_{s,0}. \quad (2.16)$$

A equação (2.16) pode ser resolvida para $P(s, z)$ através da função

$$u(z, 2\pi r / L) = \sum_s P(s, z) \exp(2\pi i r \cdot s / L). \quad (2.17)$$

Se multiplicarmos (2.16) por $\exp(2\pi i s \cdot r / L)$, somarmos sobre s e usarmos as equações (2.17) e (2.11) obteremos

$$u(z, 2\pi r / L) = \{1 - z\lambda(2\pi r / L)\}^{-1}. \quad (2.18)$$

Visto que $P(s, z)$ é a inversa de Fourier de $u(z, 2\pi r / L)$, temos então

$$P(s, z) = \frac{1}{L^d} \sum_r \frac{\exp(-2\pi i r \cdot s / L)}{1 - z\lambda(2\pi r / L)}. \quad (2.19)$$

No limite de $L \rightarrow \infty$, o caso de uma rede infinita, obtemos

$$P(s, z) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{-\pi}^{\pi} \dots \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\exp(-is \cdot \vartheta)}{1 - z\lambda(\vartheta)} d^d \vartheta, \quad (2.20)$$

onde $\vartheta = 2\pi r / L$. Fica claro então, usando (2.20) e (2.14) que

$$P_t(s) = \frac{1}{(2\pi)^s} \int_{-\pi}^{\pi} \dots \int_{-\pi}^{\pi} [\lambda(\vartheta)]^t e^{-is \cdot \vartheta} d^d \vartheta. \quad (2.21)$$

Como impusemos que os caminhantes são conservados, valem também os vínculos

$$\sum_s P_t(s) = 1 \quad \text{e} \quad \sum_s P(s, z) = (1 - z)^{-1}. \quad (2.22)$$

Na realidade estamos especificamente interessados nas propriedades do tempo de primeira visita, e para isso vamos definir $F_t(s)$ como sendo a probabilidade de que um caminhante aleatório visite o sítio s pela primeira vez no passo t . A função geratriz de $F_t(s)$ é

dada por:

$$F(s, z) = \sum_{t=1}^{\infty} z^t F_t(s). \quad (2.23)$$

Vamos agora relacionar $F_t(s)$ com $P_t(s)$. Se o caminhante aleatório está no sítio s após t passos, podemos presumir que ele visitou o sítio pela primeira vez num passo j e depois de $n - j$ passos retornou ao sítio s . Vemos assim que a probabilidade do caminhante estar em s , de acordo com as condições iniciais, é dada por

$$P_t(s) = \delta_{t,0} \delta_{s,0} + \sum_{j=1}^t F_j(s) P_{t-j}(0). \quad (2.24)$$

Fica claro, ao multiplicarmos por z^t e somarmos sobre t , que as funções geratrizes obedecem a equação

$$F(s, z) = [P(s, z) - \delta_{s,0}] / P(0, z). \quad (2.25)$$

A probabilidade do caminhante visitar um sítio s em qualquer tempo, de acordo com (2.23), é dada por $F(s, 1)$. Para redes finitas de qualquer dimensão a probabilidade de alcançar um sítio qualquer da rede é um. Quando a rede é infinita a probabilidade do caminhante retornar à origem é $1 - [F(0, 1)]^{-1}$. Em uma e duas dimensões $F(0, 1) = \infty$, ou seja, o caminhante sempre retorna à origem. Em dimensões superiores a probabilidade de retorno é menor que um e o caminhante pode não retornar à origem.

2.3 O Método Monte Carlo para Caminhadas Aleatórias

A técnica de Monte Carlo é um método numérico utilizado para estimar a solução de um determinado problema usando uma seqüência de valores de uma variável aleatória. Essas variáveis podem ser usadas tanto na simulação computacional do comportamento físico do sistema estudado, como na substituição do sistema original por um sistema estocástico que tenha a mesma solução. O curioso nome, originário de um arquivo secreto do projeto Manhattan, surgiu do fato que o método usava os mesmos princípios fundamentais dos jogos realizados no famoso cassino de Monte Carlo. O método alcançou êxito em aplicações às ciências físicas e biológicas. No campo da Física podemos mencionar sua importância em

Física nuclear, no cálculo da profundidade de penetração de partículas num meio blindado ou no fenômeno similar do efeito cascata produzido por raios cósmicos primários na atmosfera. Outra área de aplicação bastante ampla é a Mecânica Estatística onde o método fornece soluções aproximadas para problemas outrora intratáveis, como o estudo das propriedades dos polímeros e o comportamento termodinâmico de sistemas de muitas partículas interagentes, possibilitando identificar a existência, ou não, de transições de fase.

Os métodos de Monte Carlo dependem essencialmente da escolha de um conjunto de valores de uma variável, de tal forma que, ao selecionarmos um grande número de elementos desse conjunto, os seus valores não guardem nenhuma relação entre si. Dizemos então dessa variável que ela é aleatória. Como exemplo, no estudo da distribuição de velocidades das moléculas de um gás ideal é razoável supor que a velocidade de uma molécula é completamente descorrelacionada da velocidade das demais e então é obtida a distribuição de velocidades de Maxwell-Boltzmann. O básico para aplicarmos uma técnica de Monte Carlo é a garantia de que estamos usando variáveis aleatórias uniformemente distribuídas. De acordo com a definição, nenhuma fórmula matemática é capaz de fornecer tal seqüência de números, pois se assim fosse todos os elementos da seqüência estariam predeterminados. Existem na natureza processos que parecem exibir um comportamento aleatório, como por exemplo a distribuição dos tempos que os raios cósmicos levam para alcançar a terra. Apesar de algumas situações exigirem números verdadeiramente aleatórios, um sorteio de loteria ou um bingo, por exemplo, a maioria das aplicações Monte Carlo requer uma seqüência de números que possua todas as propriedades dos números aleatórios. Certas fórmulas determinísticas geram grandes seqüências de números que não se repetem e a correlação entre eles é

consideravelmente pequena. Podemos utilizar como uma excelente aproximação de números aleatórios. Esses números são conhecidos como números pseudo-aleatórios, que para efeitos práticos, chamaremos simplesmente de números aleatórios.

O estudo da caminhada aleatória através do Método Monte Carlo se dá de maneira bastante direta. Criamos um *ensemble* de caminhadas com as mesmas condições iniciais e com a condição de que os parâmetros que determinam o seu término sejam os mesmos. Sendo cada amostra do ensemble equiprovável em relação a todas as outras, os valores médios das grandezas de interesse são obtidos por meio da média aritmética de cada grandeza. Como exemplo vamos analisar uma caminhada aleatória numa rede quadrada.

Para calcular o desvio quadrático médio de um caminhante em relação à origem após t passos vamos fazer uma série de simulações computacionais. Em cada uma delas o caminhante parte do ponto médio de uma rede quadrada $L \times L$. A cada passo que o caminhante dá o computador fornece um número aleatório x entre 0 e 1 que define a direção a ser tomada pelo caminhante (por exemplo, cima se $0 \leq x < 0.25$, baixo se $0.25 \leq x < 0.5$, direita se $0.5 \leq x < 0.75$ e esquerda se $0.75 \leq x < 1$). Em intervalos regulares de t o valor da distância do caminhante ao ponto de origem é guardado até que a caminhada cesse. Este procedimento é repetido com todas as amostras do ensemble. Sobre o conjunto de valores do deslocamento da origem, para cada t , é calculada a média e obtemos então pontos no diagrama deslocamento quadrático médio versus número de passos (tempo). A curva que melhor se ajusta a esses pontos é a que melhor descreve o comportamento desse deslocamento em função de t . Quanto maior for o valor de t e o número de amostras do ensemble mais precisamente será determinado o comportamento da grandeza estudada.

2.4 Leis de Escala para Caminhadas Aleatórias

A dedução das propriedades fundamentais da caminhada aleatória não é uma tarefa exatamente difícil, isso porque o seu comportamento é dominado pelo número de passos t , quando t é muito grande. Vejamos um exemplo bastante elucidativo disto.

Suponha uma única molécula que escapa de um vidro de perfume que foi aberto no canto de uma sala. Ela inicia então um processo de difusão através do recinto, chocando-se com as moléculas do ar que ocupa a sala e após um tempo t , proporcional ao número de choques sofridos pela molécula, ela se afasta em média de uma distância R do vidro de perfume. Se analisarmos como R varia com t , veremos que a seguinte relação sempre é obedecida:

$$R = Dt^{1/2}. \quad (2.26)$$

A constante D muda de acordo com a substância que se difunde, mas a relação entre R e t se mantém sempre a mesma, ou seja, o expoente $1/2$ não depende de detalhes como a forma das moléculas ou a distância média percorrida entre uma colisão e outra. A este comportamento damos o nome de universal. Um outro exemplo fará mais claro este conceito.

A probabilidade $P(R, t)$ de que um caminhante aleatório esteja na posição R após t passos de comprimento l no espaço tridimensional é dada por

$$P(R, t) = \left(\frac{3}{2\pi l^2}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{3R^2}{2l^2}\right). \quad (2.27)$$

Se fizermos agora com que cada λ passos da caminhada sejam tomados como um único, teremos uma caminhada aleatória de \tilde{t} passos, dados por

$$\tilde{t} = \frac{t}{\lambda}. \quad (2.28)$$

Calculando agora $P(R, \tilde{t})$ obtemos

$$P(R, \tilde{t}) = \left(\frac{3}{2\pi\lambda\tilde{t}l^2} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{3R^2}{2\lambda\tilde{t}l^2} \right), \quad (2.29)$$

que é a mesma distribuição dada por (2.27) mediante a substituição de (2.28). A essência disso é que a distribuição gaussiana que governa a caminhada aleatória não se altera devido à estrutura local dos seus passos.

A transformação que impusemos na caminhada aleatória em (2.28) preserva características fundamentais como o tamanho médio e a distribuição desse tamanho em função do número de passos. Explicitamente, os parâmetros mudam da antiga para a nova caminhada de acordo com

$$t \rightarrow t/\lambda \quad \text{e} \quad l \rightarrow l\sqrt{\lambda}. \quad (2.30)$$

Se soubermos como as quantidades físicas de um modelo baseado numa caminhada aleatória mudam sob esta transformação, podemos concluir algo a respeito da dependência dessas quantidades físicas nos parâmetros t e l . Vejamos agora mais um exemplo de aplicação deste tipo de raciocínio.

O deslocamento médio R do caminhante em relação à origem tem dimensão de comprimento e deve ser uma função do número de passos, de acordo com a relação:

$$R = f(l)l. \quad (2.31)$$

Sendo o valor de R uma grandeza que deve ser invariante sob a transformação (2.30), ou seja,

$$f(l)l = f\left(\frac{l}{\sqrt{\lambda}}\right)\sqrt{\lambda}l. \quad (2.32)$$

De acordo com (2.26), só teremos (2.32) satisfeita quando

$$f(l)l = a\sqrt{l}l, \quad (2.33)$$

onde a é uma constante numérica que depende do tamanho do passo.

O argumento usado na dedução de (2.33) é conhecido como argumento de escala e foi historicamente a base da teoria do grupo da renormalização. As relações obtidas através desse tipo de argumento são as leis de escala.

-
- [1] J. L. Lebowitz e E. W. Montroll
Nonequilibrium Phenomena II - from Stochastics to hydrodynamics
(North-Holland, New York, 1984)
 - [2] E. Guyon et al., Disorder and Mixing (Kluwer Academic Publishers, 1988)
 - [3] L. S. Lucena, J. M. Araújo, D. M. Tavares, L. R. da Silva e C. Tsallis
Phys. Rev. Lett. **72** (1994) 230.
 - [4] P.-G. de Gennes, Scaling Concepts in Polymer Physics
(Cornell University Press, London, 1979)
 - [5] M. Doi e S. F. Edwards, The Theory of Polymer Dynamics
(Oxford University Press, New York, 1989)
 - [6] E. W. Montroll & G. H. Weiss, J.Math. Physics **6** (1965) 307.
 - [7] E. W. Montroll & G. H. Weiss, J.Math. Physics **6** (1965) 167.
 - [8] P. K. MacKeown e D. J. Newman, Computational Techniques in Physics
(Adam Hilger, 1987)
 - [9] F. Reif, Fundamentals of Statistical and Thermal Physics (McGraw-Hill, 1988).

3

Competição entre Caminhantes Aleatórios em uma dimensão

No capítulo anterior fizemos uma revisão sucinta das técnicas utilizadas nesta tese para tratar o problema da ocupação de uma rede por caminhantes aleatórios. Vamos agora utilizá-las no modelo introduzido neste capítulo e na sua versão bidimensional, estudada no capítulo 4.

O interesse em caminhadas aleatórias não-triviais tornou-se maior à medida que muitos sistemas bastante complexos puderam ser abordados deste ponto de vista. Recentemente foram introduzidos vários modelos considerando muitos caminhantes interagindo entre si de diversas maneiras, por exemplo, caminhantes com memória. O modelo de crescimento cinético generalizado e as caminhadas aleatórias aniquilantes são exemplos de interação que ressaltam toda essa complexidade.

Embora os modelos onde existe interação entre os caminhantes apresentem maior riqueza no comportamento complexo, as caminhadas aleatórias simples, ou puras, também mostram um comportamento bastante incomum quando investigamos determinadas quantidades, ou seja, são intuitivamente muito úteis na caracterização do modelo^[1,6]. Neste capítulo tratamos de um modelo difusivo unidimensional onde estudamos a competição por território entre os caminhantes e o modo como os mesmos introduzem uma nova estrutura na rede, à medida que a vão cobrindo.

Trataremos agora de um modelo particular unidimensional de partículas difusivas não-interagentes. Aqui, ao invés da interação, é a natureza da quantidade que buscamos que torna o modelo não-trivial. Consideremos uma rede unidimensional com condições de contorno periódicas: um anel, de L sítios identificados pelo índice $n = 1, 2, \dots, L$. Sobre o anel colocamos dois caminhantes aleatórios distintos (Figura 3.1(a)). Por distintos entendemos que alguma característica intrínseca aos mesmos difere entre eles, e esta característica representaremos aqui como a cor do caminhante. Um caminhante “vermelho” parte do sítio $n = 0$, no tempo $t = 0$, e caminha em direção aos seus primeiros vizinhos escolhendo uma das 2 direções possíveis com igual probabilidade. Passos idênticos devem ocorrer em $t = 1, 2, \dots$. Simultaneamente um caminhante “azul” parte do sítio $n = a$ e caminha aleatoriamente da mesma maneira, independentemente do vermelho. Tomaremos o cuidado de que a seja ímpar, de tal modo que eles nunca possam chegar ao mesmo sítio simultaneamente.

Definimos agora que, cada sítio, inicialmente incolor, adquire de forma irreversível a cor do caminhante pelo qual é primeiro visitado, seja azul ou vermelho. Quaisquer visitas posteriores de outros caminhantes ao sítio não alteram essa cor. Com a continuidade das caminhadas a coloração do anel evolui para um estado final de equilíbrio, no qual todos os sítios da rede estão coloridos de azul ou vermelho. Estudaremos a seguir as propriedades estatísticas desse estado final e o modo como o sistema se comporta quando evoluindo para o mesmo (Figura 3.1(b)).

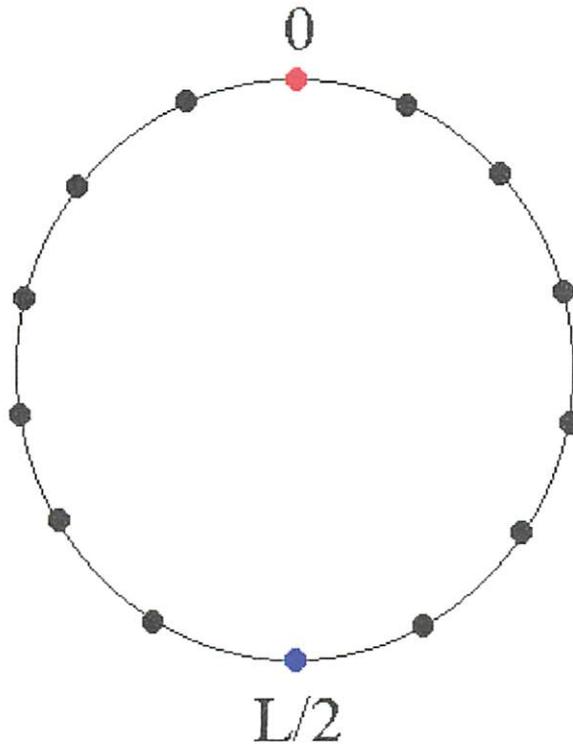


Figura 3.1(a). Topologia da rede unidimensional com condições de contorno periódicas. Condição inicial com $a = L/2$.



Figura 3.1(b). Exemplo de estado final de coloração da rede para um valor arbitrário da separação inicial.

3.2

Probabilidade de um sítio vermelho

3.2.1

Probabilidade de um caminhante

Vamos agora relembrar duas quantidades bastante úteis, \hat{F} e \hat{G} , relacionadas com uma única caminhada aleatória sobre um anel. Seja $G(m, t)$ a probabilidade de que o deslocamento (positivo ou negativo) de um caminhante aleatório depois de t passos seja igual a m . Sua função geratriz é dada por

$$\hat{G}(m, z) = \sum_{t=0}^{\infty} z^t G(m, t) \quad (3.1)$$

e pode ser calculada de maneira elementar resultando em

$$\hat{G}(m, z) = \frac{1}{L} \sum_q \frac{e^{-iqm}}{1 - z \cos q} \quad (3.2)$$

onde o número de onda q assume os valores $q = 2\pi k / L$ com $k = 0, 1, \dots, L-1$. Numa rede periódica um deslocamento m é indistinguível de deslocamentos que diferem dele por um múltiplo de L , e (3.2) tem a correspondente propriedade de periodicidade. Definamos então $F(m, t)$ como a probabilidade de que um caminhante partindo de algum sítio n_0 no passo $t = 0$ fará sua primeira visita ao sítio $n_0 + m$ no passo t . Analogamente a (3.1)

$$\hat{F}(m, z) = \sum_{t=0}^{\infty} z^t F(m, t) \quad (3.3)$$

e mais uma vez é simples mostrar que

$$\hat{F}(m, z) = \frac{\hat{G}(m, z)}{\hat{G}(0, z)} \quad (3.4)$$

Montroll^[2] nos fornece uma expressão alternativa para (3.2)

$$\hat{G}(m, z) = (1 - z^2)^{-1/2} \frac{u^m + u^{L-m}}{1 - u^L} \quad (3.5)$$

válida para $m = 0, 1, \dots, L$, onde u é uma variável auxiliar dada por

$$u = z^{-1} \left[1 - (1 - z^2)^{1/2} \right]. \quad (3.6)$$

Das equações (3.4) e (3.5) segue que

$$\hat{F}(m, z) = \frac{u^m + u^{L-m}}{1 + u^L} \quad m = 0, 1, \dots, L. \quad (3.7)$$

Para grandes tempos t e grandes tamanhos da rede L é razoável esperar que t varie com L^2 e $1 - z$ com t^{-1} . Definimos o limite de escala como

$$\begin{cases} t & = & \tau L^2 \\ 1 - z & = & \zeta L^{-2} \\ m & = & \mu L \\ L & \rightarrow & \infty \end{cases} \quad (3.8)$$

Com a substituição de (3.8) em (3.6) e (3.7) a μ , ζ e τ fixos obtemos

$$\hat{F}(m, z) \approx \frac{\cosh \left[\sqrt{\frac{1}{2}} \zeta (1 - 2\mu) \right]}{\cosh \sqrt{\frac{1}{2}} \zeta} \quad (3.9)$$

onde $0 \leq \mu \leq 1$ e o símbolo \approx denota a igualdade no limite de escala. A equação (3.9) pode ser transformada de volta para t via

$$F(m, t) = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{dz}{z^{l+1}} \hat{F}(m, z) \quad (3.10)$$

onde a integral é calculada no sentido anti-horário em torno da origem. Após substituirmos (3.9) em (3.10) nós deformamos o contorno de integração de tal maneira que $F(m, t)$ torne-se a soma da contribuição dos pólos de $1/\cosh\sqrt{\frac{1}{2}}\zeta$, que estão localizados em $\zeta = \frac{1}{2}(2l-1)^2\pi^2$ para $l=1,2,3,\dots$. O resultado final, que pode ser obtido por diversas outras maneiras, é

$$F(\mu L, \tau L^2) \approx \frac{2\pi}{L^2} \sum_{l=1}^{\infty} (2l-1) \text{sen}[(2l-1)\mu\pi] e^{-\frac{1}{2}\pi^2(2l-1)^2\tau} \quad (3.11)$$

válido assintoticamente para $L \rightarrow \infty$ com $0 \leq \mu \leq 1$ e $\tau \geq 0$, ambos fixos.

3.2.2

Probabilidade de Dois Caminhantes

Consideramos agora um sitio n , escolhido convenientemente de tal modo que $0 \leq n \leq \frac{1}{2}L$. A probabilidade $P(n, L)$ que este sitio seja visitado pelo caminhante vermelho antes de ser visitado pelo azul é dada pela expressão

$$P(n, L) = \sum_{t=0}^{\infty} F(n, t) \sum_{t'=t+1}^{\infty} F\left(\frac{1}{2}L - n, t'\right). \quad (3.12)$$

Aqui $F(n, t)$ representa a probabilidade de que o caminhante vermelho, partindo da origem, visite primeiro o sítio n no tempo t , e a soma mais interna representa a probabilidade de que o caminhante azul, partindo do sítio $L/2$, visite primeiro o sítio n num tempo posterior a t .

No limite de escala podemos substituir as somas em (3.12) por integrais e, substituindo a expressão assintótica explícita (3.11), vemos que $P(n, L)$ é uma função $p(v)$ somente de $v = n/L$. Resolvendo as integrais temporais encontramos

$$P(n, L) \approx p(v) = \frac{16}{\pi^2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\text{sen}[(2k-1)(\frac{1}{2}-v)\pi]}{2k-1} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(2l-1) \text{sen}[(2l-1)v\pi]}{(2l-1)^2 + (2k-1)^2}, \quad (3.13)$$

válida para $0 \leq v \leq \frac{1}{2}$. Embora não seja imediatamente óbvio, esta expressão possui a propriedade de simetria

$$p(\frac{1}{2}-v) = 1 - p(v). \quad (3.14)$$

A soma em l pode ser simplificada mais ainda com a ajuda da relação

$$\sum_{l=1}^{\infty} \frac{(2l-1) \text{sen}[(2l-1)x]}{(2l-1)^2 + a^2} = \frac{\pi}{4} \frac{\cosh a(x - \frac{\pi}{2})}{\cosh \frac{a\pi}{2}}, \quad (0 < x < \pi) \quad (3.15)$$

que é metade da soma das Equações (1.445.1) e (1.445.4) de Gradshteyn e Ryzhik^[3].

Empregando (3.15) em (3.13) e usando (3.14) chegamos ao resultado final para a probabilidade de um sítio ser vermelho no limite de escala,

$$p(v) = 1 - \frac{4}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\cosh[(2k-1)v\pi]}{\cosh \frac{(2k-1)\pi}{2}} \frac{\text{sen}[(2k-1)v\pi]}{2k-1}, \quad (3.16)$$

válido para $0 \leq \nu \leq \frac{1}{2}$. A expressão para $p(\nu)$ no intervalo $\frac{1}{2} \leq \nu \leq 1$ é facilmente obtida de (3.16) e da propriedade de simetria $p(1 - \nu) = p(\nu)$. A figura 3.2 representa $p(\nu)$ para valores de $k = 1$ até 100 (as parcelas relativas a $k > 100$ não contribuem significativamente para a forma de $p(\nu)$). A curva é muito próxima de uma reta, mas é definitivamente não-linear.

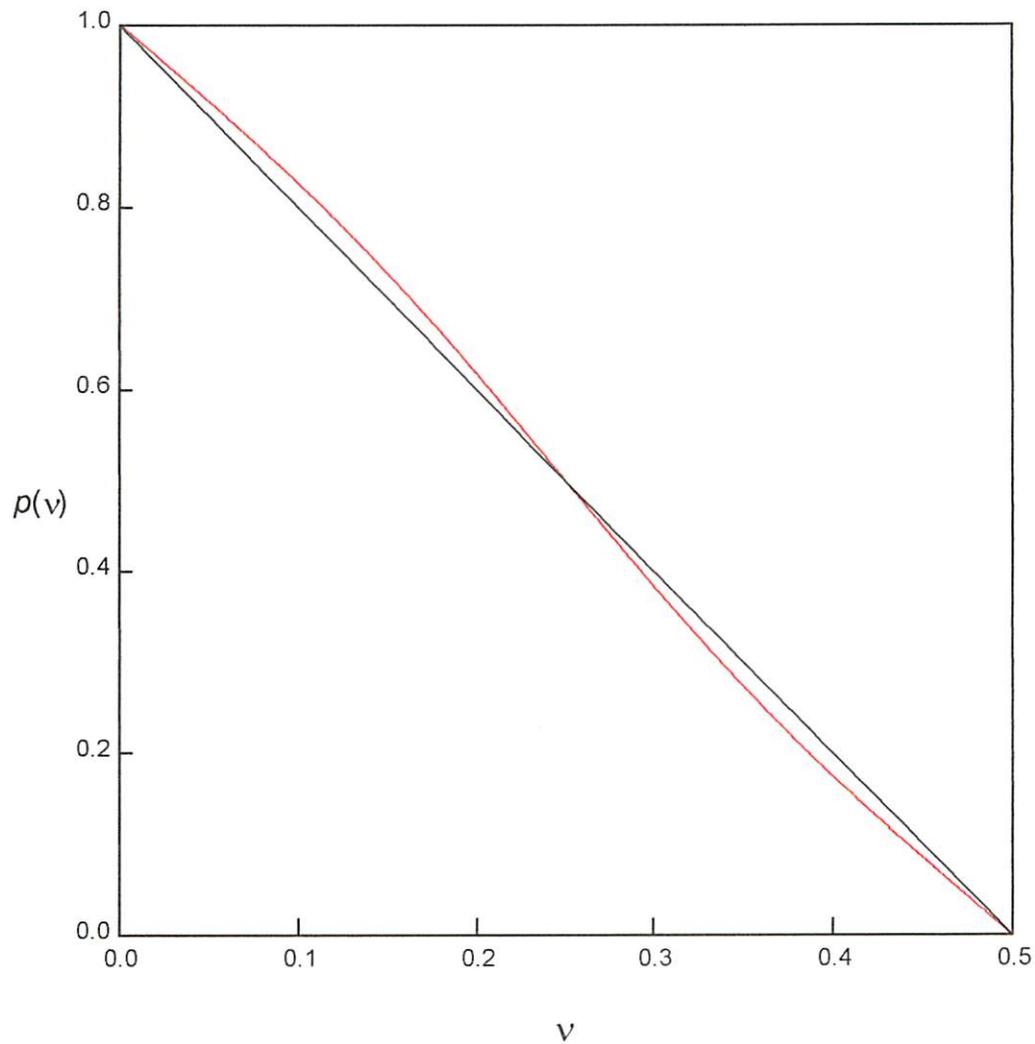


Figura 3.2. Probabilidade $p(v)$ de que um sítio n seja vermelho no estado final de coloração de uma rede periódica de comprimento L , como função da variável $v = n/L$. Para comparação a linha reta $1 - 2v$ é mostrada.

Cada par de sítios vizinhos onde um é vermelho e o outro é azul constitui o que chamaremos de uma “interface” vermelho-azul. O símbolo l_{RB} denota o número total de interfaces. Refletindo um pouco é fácil concluir que, em cada realização (de dois caminhantes colorindo a rede), l_{RB} é no mínimo igual a dois e sempre é par. No limite $L \rightarrow \infty$ esse número pode ser arbitrariamente grande (desde que os caminhantes azul e vermelho não interajam e suas trajetórias possam se cruzar arbitrariamente). O nosso interesse se concentra nesse número total de interfaces, L_{RB} . Escolheremos agora um estado inicial mais geral do que o da seção anterior fazendo com que o caminhante vermelho parta sempre da origem $n = 0$, e permitindo que o caminhante azul parta de um sítio qualquer $n = a$. Temos que L_{RB} é uma função de a e L .

Também neste caso seria possível expressar L_{RB} em termos de várias probabilidades de tempo de primeira visita $F(m, t)$ e funções de Green $G(m, t)$. Entretanto a expressão é um tanto complexa e nós preferimos não tratar o problema analiticamente. Ao invés disso, obtivemos o número médio de interfaces $\langle L_{RB} \rangle$ a partir de simulações computacionais, para sistemas com tamanhos $L = 100, 200, \dots, 1000$ e para $L/a = 2, 4, 10, 20, 50$, utilizando um ensemble de 500 amostras. Aqui devemos fazer uma ressalva. Na seção 3.1 estabelecemos que a necessariamente é ímpar, evitando assim que os caminhantes alcancem simultaneamente o mesmo sítio causando uma indefinição da coloração adquirida pelo sítio; mas isso é um requisito teórico. Na simulação computacional cada caminhante dá um passo de cada vez, impossibilitando assim a ambigüidade anterior, e o tempo total é computado

como sendo a razão entre o número total de passos dados pelos caminhantes e a quantidade de caminhantes, dois neste caso.

Os resultados são mostrados nas Figuras 3.3 e 3.4. Na Figura 3.4 verificamos que o número médio de interfaces é quase que exclusivamente determinado pela razão L/a e é independente de L . As exceções a essa tendência ocorrem para elevados valores de L/a e valores relativamente baixos de L , isto é, para dois caminhantes começando a uma distância de apenas alguns sítios da rede, e nesse caso algum desvio do comportamento de escala é natural.

Na Figura 3.3 mostramos o número médio de interfaces em função de L/a para os três maiores tamanhos de rede considerados. Para L/a grande este número parece muito claramente obedecer à seguinte relação de escala:

$$\langle L_{RB} \rangle(a, L) \cong (1.17 \pm 0.03) \log \frac{L}{a} + (1.50 \pm 0.05). \quad (3.16)$$

Para o caso particular $L/a = 2$, que é o caso em que os dois caminhantes começam em sítios diametralmente opostos, as simulações indicam $\langle L_{RB} \rangle = 2.5$, um valor um pouco acima da lei de escala (3.16).

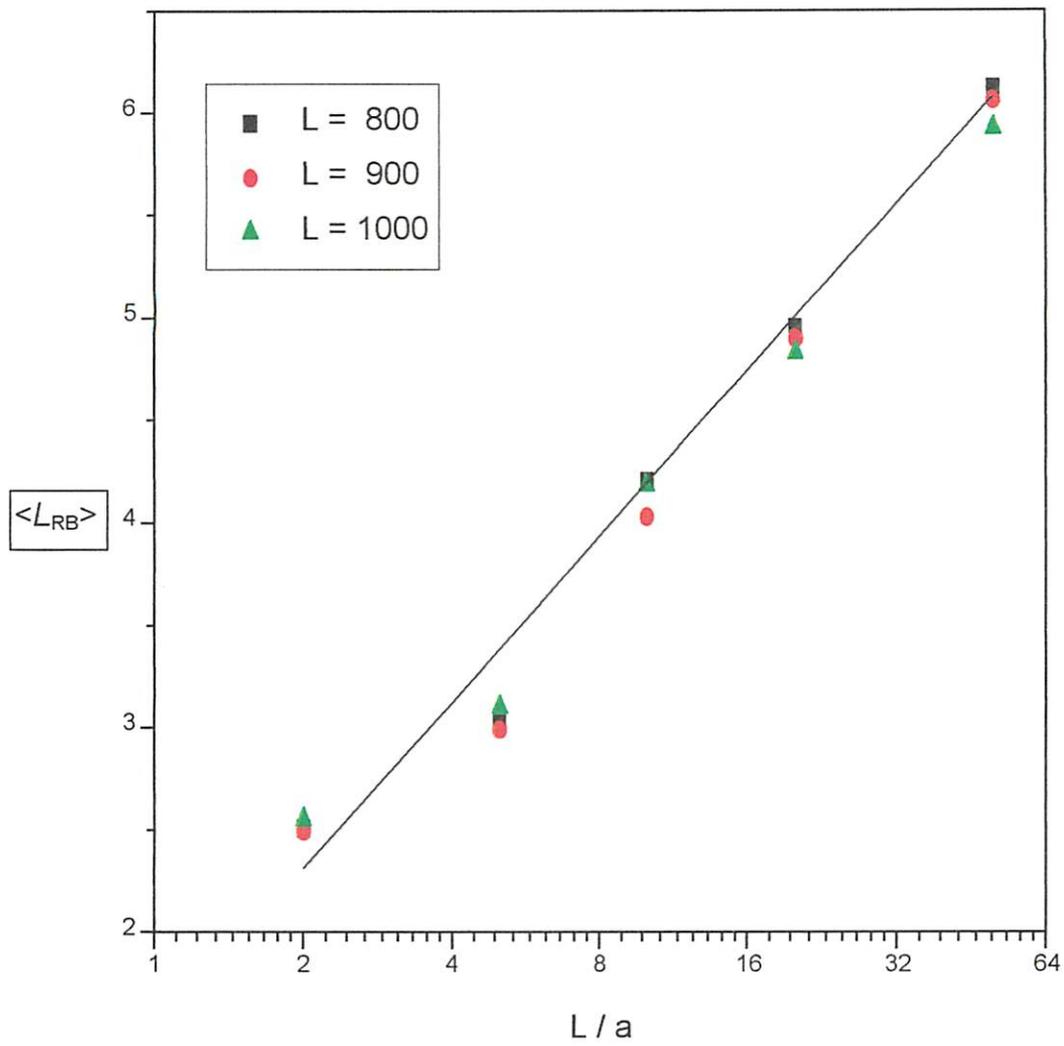


Figura 3.3. Número médio de interfaces azul-vermelho $\langle L_{RB} \rangle$ no estado final de coloração de um anel como função da razão L/a entre o tamanho do anel e a separação inicial dos caminhantes.

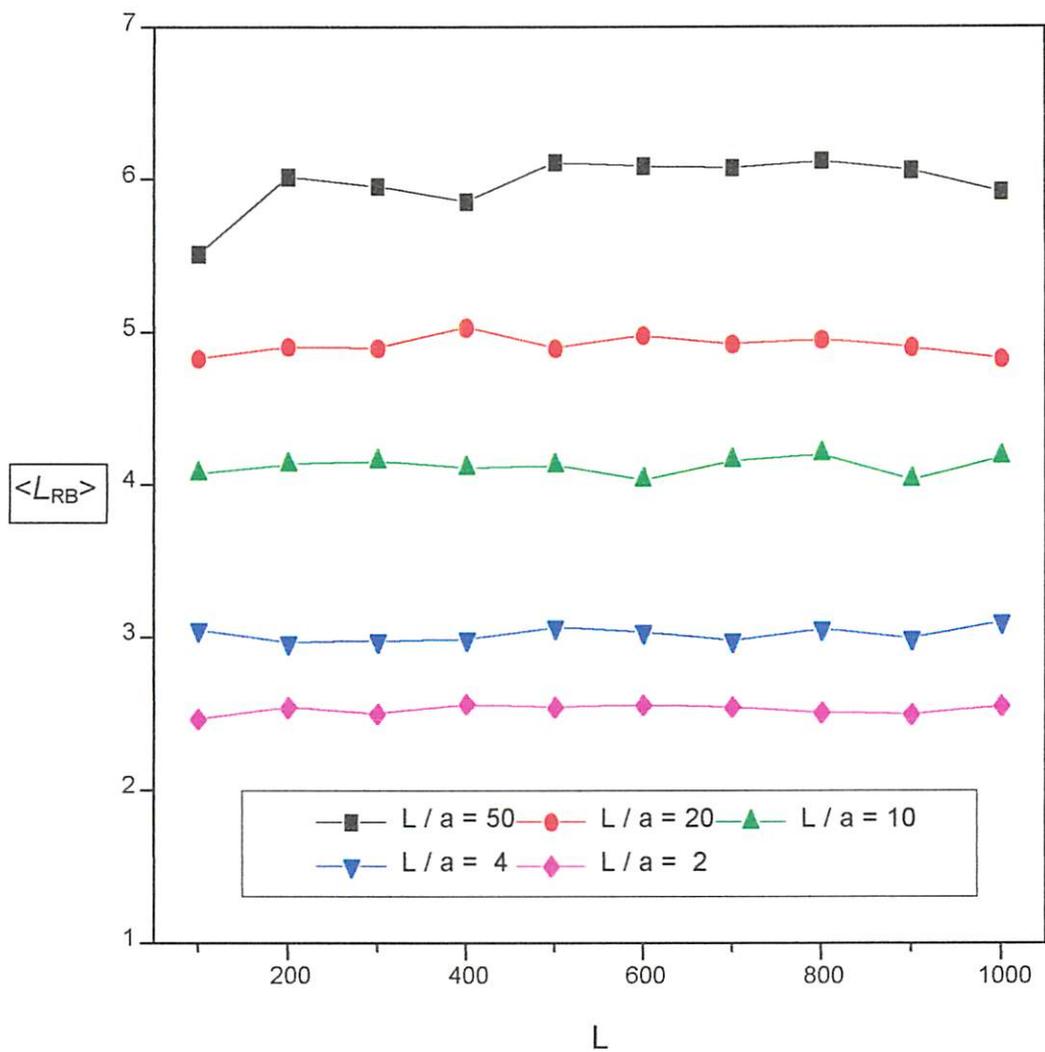


Figura 3.4. Número médio de interfaces azul-vermelho $\langle L_{RB} \rangle$ como função do tamanho da rede L . Vários valores da separação inicial são mostrados.

Uma informação importante sobre a dinâmica do processo de ocupação de redes por caminhantes é o tempo de cobertura, ou seja, o tempo necessário para todos os sítios serem visitados.

Seja τ_L o tempo médio necessário para que um único caminhante consiga visitar (colorir) todos os sítios de uma rede de L sítios. Vários autores⁴⁻⁵¹ consideraram o problema de determinar τ_L em redes de dimensão finita. É do nosso interesse o resultado exato

$$\tau_L = \frac{1}{2}L(L-1) \quad (3.17)$$

válido para uma rede unidimensional periódica de L sítios. As simulações descritas na seção 3.3 dão como subproduto o tempo médio $\tau_L^{(2)}$ necessário para que todos os sítios da rede sejam visitados pelo menos uma vez por um dos dois caminhantes.

A Figura 3.5 mostra o tempo de cobertura $\tau_L^{(2)}$ como função do comprimento da rede. Ele parece, com grande precisão estatística, ser independente da razão L/a e dado por

$$\tau_L^{(2)} \cong \frac{1}{4}L^2 \quad \text{quando } L \rightarrow \infty. \quad (3.18)$$

Embora fortemente amparada na evidência da Figura 3.5, esta relação tem no momento o status de conjectura. Suspeitamos que ela possa ser demonstrada analiticamente.

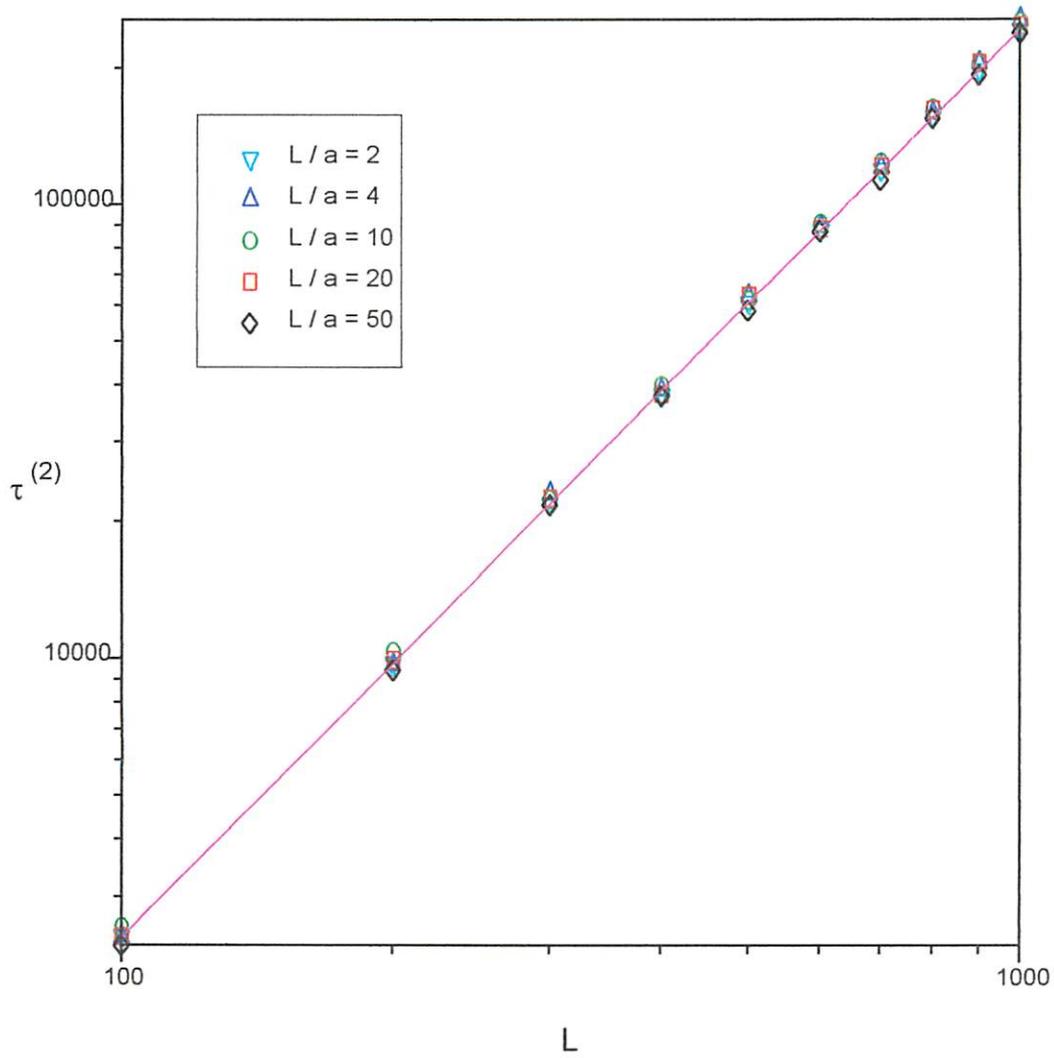


Figura 3.5. Tempo médio $\tau_L^{(2)}$ necessário para uma rede em forma de anel de comprimento L ser coberta pelos dois caminhantes aleatórios inicialmente separados de a .

-
- [1] H. Larralde, P. Trunfio, S. Havlin, H. E. Stanley and G. H. Weiss,
Nature **355** (1992) 423.
- [2] E. W. Montroll, Proc. Symp. Appl. Math. Am. Math. Soc. **16** (1964) 193.
- [3] L. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *Tables of Integrals, Series and Products*,
Academic Press, New York, 1965.
- [4] A. M. Nemirovsky, H. O. Martín and M. D. Coutinho-Filho,
Phys. Rev. A **41** (1990) 761.
- [5] C. S. O. Yokoi, A. Hernández-Machado and L. Ramírez-Piscina,
Phys. Lett. A **145** (1990) 82.
- [6] H. Larralde, P. Trunfio, S. Havlin, H. E. Stanley e G. H. Weiss
Phys. Rev. A **45** (1992) 7128.

4 Competição entre Caminhantes

Aleatórios numa Rede Bidimensional

Uma das mais importantes propriedades das caminhadas aleatórias em redes é o número de sítios distintos visitados numa caminhada de t passos. Essa importância advém do fato de que um grande número de modelos está diretamente relacionado com o tempo da primeira visita de um sítio pelo caminhante. Esses modelos descrevem fenômenos tais como os processos de relaxação, reações limitadas por difusão e dinâmica de populações em Ecologia.

O número de sítios distintos visitados por N caminhantes aleatórios não é uma quantidade trivialmente relacionada com o caso de um caminhante, como demonstrado por Larralde et al.^[1,2] recentemente. O tempo necessário para que os N caminhantes possam visitar todos os sítios de uma rede finita também é uma quantidade relevante, tendo relação com os processos citados acima.

Neste capítulo estamos interessados em estudar as propriedades do tempo de cobertura da rede quando introduzimos uma importante modificação no conjunto de N caminhantes, os quais são divididos em dois grupos distintos, caracterizados por uma cor. Esta alteração tem implicação direta na propagação de populações, visto tratar-se do caso de duas populações se difundindo ao longo de um território desocupado. Também as reações do tipo $A + B \rightarrow B$ podem ser generalizadas^[3,4]. De acordo com o modelo a ser introduzido na

próxima seção, os sítios da rede são povoados com a substância A e partículas das substâncias B e C , inertes entre si, começam a se difundir e reagir com A formando $A + B \rightarrow B$ ou $A + C \rightarrow C$. Existem também situações em Biologia^[5] onde podemos interpretar que um grupo de células, ou sítios da rede, é atacado por dois tipos de micróbios que se difundem, os caminhantes azuis e vermelhos, e causam danos irreversíveis a essas células. A distribuição espacial das células danificadas é um dado relevante na escolha correta de uma terapia adequada à eliminação de tais células.

Neste capítulo tratamos da ocupação de uma rede quadrada por N caminhantes aleatórios distribuídos em dois grupos distintos. Através de um algoritmo de evolução simples, como definido na seção 3.1, todos os caminhantes se movem simultaneamente e percorrem a rede até que a mesma esteja completamente coberta (“colorida”). Esse estado final é formado de aglomerados coloridos que preenchem completamente a rede. Nas seções posteriores discutimos o modelo e o procedimento utilizado na obtenção dos resultados para o tempo de cobertura e para o número de interfaces, que é uma medida da rugosidade das ilhas coloridas, como definido a seguir. Leis de escala são obtidas para estas quantidades.

4.1

O Modelo

Numa rede quadrada de L^2 sítios e com condições periódicas de contorno (um toro) N caminhantes aleatórios ocupam simultaneamente um sítio qualquer. Estes caminhantes estão divididos em dois grupos distintos; metade dos caminhantes é caracterizada pela cor azul e a outra metade pela cor vermelha. Consideramos o tempo discreto. Em $t = 0$ todos os

caminhantes partem simultaneamente do sítio onde estão e caminham equiprovavelmente para um dos primeiros vizinhos, sendo a escolha de um caminhante completamente independente da feita por qualquer um dos outros.

Vamos estabelecer agora que todos os sítios da rede são inicialmente incolores, e quando um sítio é visitado por um caminhante, pela primeira vez, adquire a cor do mesmo de forma irreversível, ou seja, nenhuma visita posterior de qualquer outro caminhante irá alterar o estado de coloração do sítio. Como temos sempre um número finito de sítios na rede, e os caminhantes nunca param de caminhar, o sistema evolui para um estado final onde cada sítio da rede possui uma cor, seja ela azul ou vermelho. A figura 4.1 mostra alguns instantâneos da evolução temporal do modelo até atingir o estado final. No quadro superior esquerdo $t = L$ e a frente de crescimento ainda conserva uma forma lisa. No quadro superior direito $t = L^2/10$ e o aglomerado se mostra já bastante rugoso. No canto inferior esquerdo $t = 2L^2/3$, começam a se formar grandes ilhas vermelhas (azuis). No canto inferior direito toda a rede foi coberta e a estrutura de interfaces foi completada.

Um detalhe deve ser observado: o fato dos caminhantes se moverem simultaneamente cria uma indecisão com respeito à cor no caso de dois ou mais caminhantes de cores diferentes chegarem ao mesmo sítio no mesmo passo. Neste caso, que cor deveria o sítio adquirir? Para contornar essa situação vamos impor aos caminhantes uma regra simples. Quando da decisão de caminhar para um dos primeiros vizinhos a direção que o caminhante vai seguir será sorteada numa determinada ordem, ou seja, se rotulamos os caminhantes como $1, 2, \dots, N$, podemos ter o sorteio da direção que tomará o caminhante 2, depois o

sorteio da direção que tomará o caminhante 11 e assim por diante até que todos os sorteios tenham sido efetuados. A cada passo uma nova ordem de sorteios é escolhida, aleatoriamente. Quando acontecer uma situação de indecisão, o sítio adquirirá a cor do caminhante que teve sua direção sorteada antes dos demais que ocupam o sítio. Esta regra garante que todos os sítios são equiprovavelmente coloridos, e é particularmente vantajosa do ponto de vista computacional, pois equivale a várias caminhadas aleatórias com passo seqüencial normalizado pelo número de caminhantes.

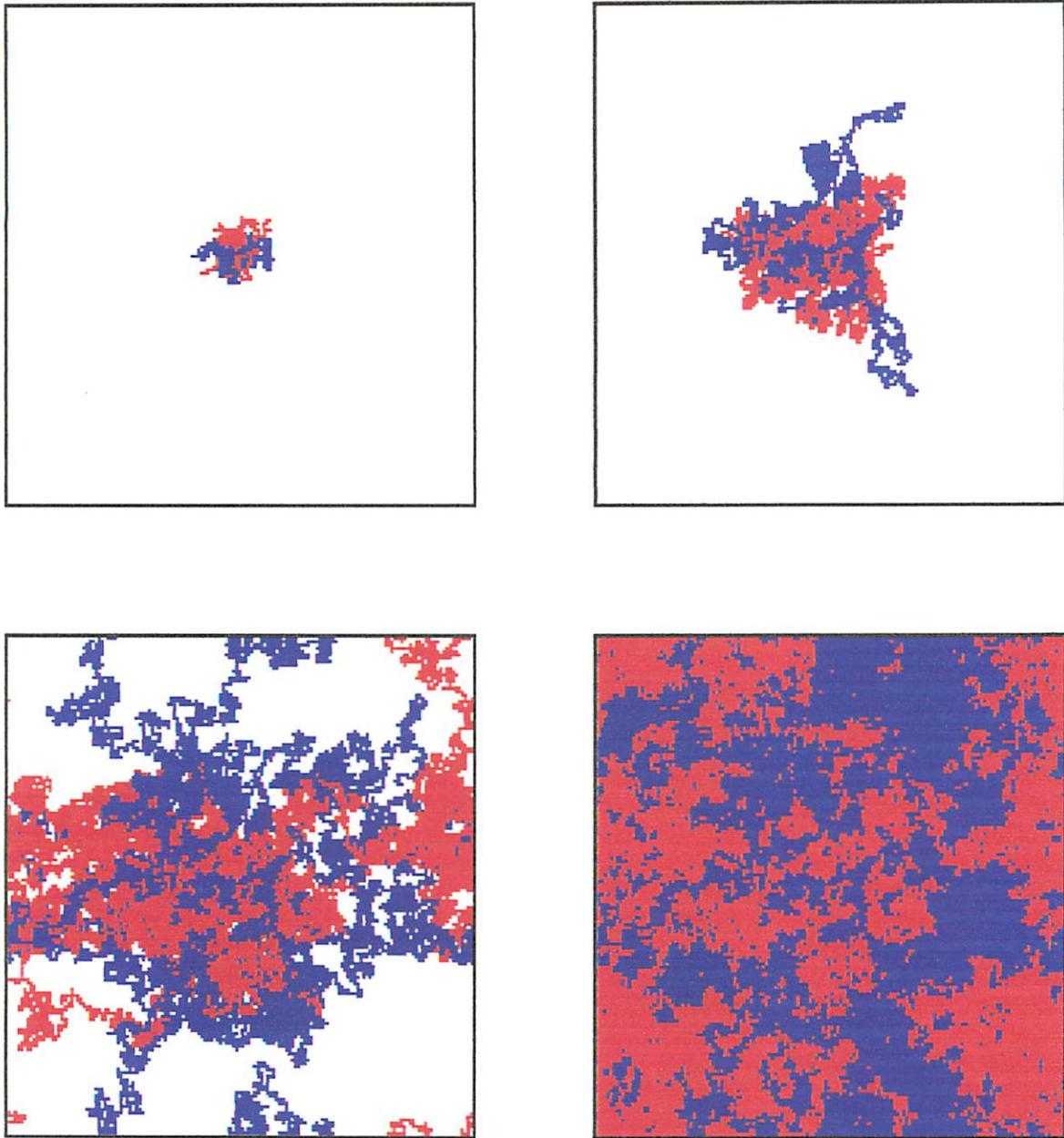


Figura 4.1. A evolução temporal da cobertura de uma rede quadrada com $L = 150$ e $N = 8$ é mostrada acima. O estado final é atingido quando toda a rede está colorida.

Como feito na seção 3.4 vamos analisar o comportamento de escala do tempo de cobertura, que é o tempo médio necessário para que todos os sítios da rede tenham sido visitados pelo menos uma vez por algum dos caminhantes. Nesta seção não é levada em conta a distinção entre os caminhantes.

Uma vez que os caminhantes movem-se simultaneamente sobre a rede, espera-se que o tempo de cobertura decresça com o aumento do número de caminhantes N . Também é claro que este mesmo tempo aumenta com o tamanho L . Neste estudo fizemos $N = 2^i$ com $i = 1, 2, \dots, 10$. Para cada valor do par (i, L) foram utilizadas 1000 amostras da evolução da cobertura da rede até o estado final, todas com condições iniciais idênticas.

A figura 4.2 apresenta os resultados obtidos para o tempo de cobertura $\tau^{(N)}$ em função do número de caminhantes N de todos os tamanhos L da rede numa escala logarítmica. Uma análise superficial deste gráfico sugere que todas as curvas podem colapsar numa única, uma vez que todas possuem a mesma forma. Por tentativas encontramos que dividindo $\tau^{(N)}$ por $L^{2.35}$ ocorre o tal colapso, mostrado na figura 4.3. Neste gráfico observamos que para valores de N não tão grandes, vale a relação de escala

$$\frac{\tau^{(N)}}{L^{2.35}} \sim \frac{1}{N}. \quad (4.1)$$

O resultado acima constata que o tempo de cobertura independe da posição inicial dos caminhantes. Suponha que os caminhantes são distribuídos de forma uniforme sobre a rede. Sendo eles completamente independentes uns dos outros e o afastamento médio da posição

inicial varia com $t^{1/2}$, é razoável imaginar que cada caminhante vai cobrir em média L^2/N sítios, ou seja, o tempo de cobertura varia então com $1/N$. O extremo oposto dessa situação é quando todos os caminhantes partem do mesmo ponto. Nesse caso demora um certo tempo até que os caminhantes estejam distribuídos de forma uniforme e não seria esperado o mesmo comportamento para o tempo de cobertura. Ocorre que esse tempo depende do número de caminhantes^{11,21}, crescendo com o mesmo, de tal modo que para $N/L^2 \ll 1$ os caminhantes rapidamente se distribuem uniformemente por sobre a rede. Quando essa condição não é obedecida vemos na figura 4.3 que $\tau^{(N)}$ decresce mais rapidamente que em (4.1). Nessas condições o tempo que os caminhantes levam para se distribuir de modo uniforme é grande o suficiente para que uma fração considerável dos sítios da rede tenha sido visitada, o que inevitavelmente afeta a relação de escala. Acreditamos que isto se deve a um efeito do tamanho finito da rede, pois o efeito é mais pronunciado quanto menor for o tamanho característico L .

O expoente 2.35 pelo qual o tempo de cobertura varia com o tamanho da rede foi obtido através do ajuste numérico das curvas da figura 4.3 e nós esperamos que seja o mesmo para todas as redes bidimensionais.

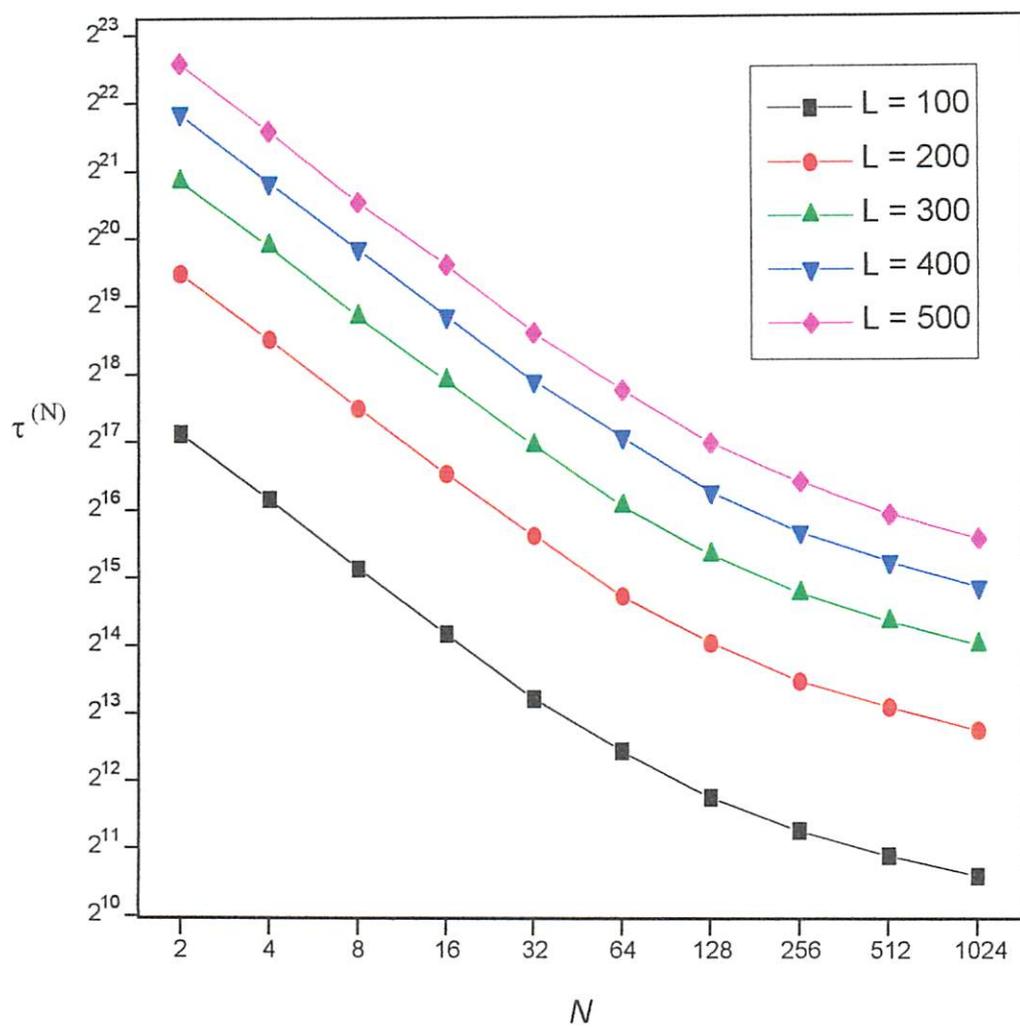


Figura 4.2. Tempo médio $\tau^{(N)}$ gasto por N caminhantes para cobrir uma rede quadrada.

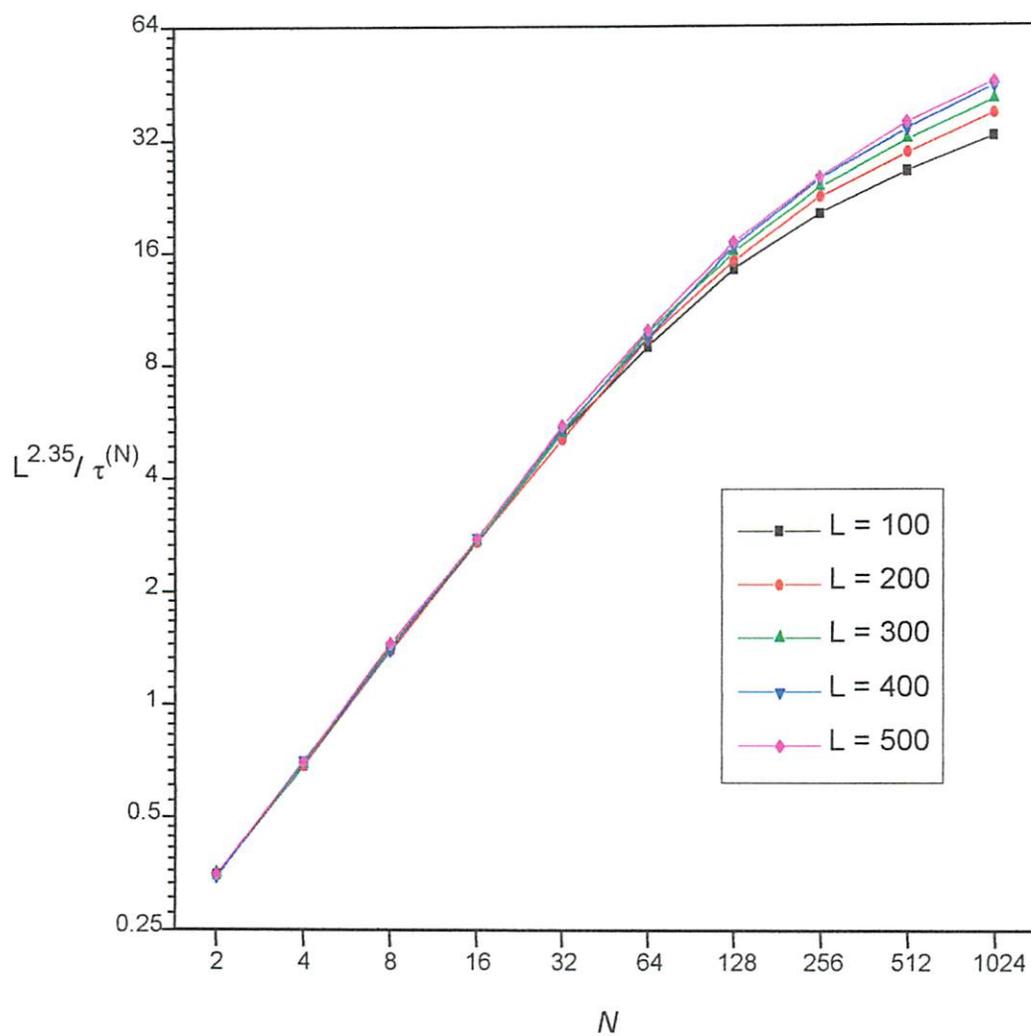


Figura 4.3. O inverso do tempo de cobertura normalizado por $L^{2.35}$ versus o número de caminhantes. Todas as curvas colapsam numa única para N pequeno e L grande.

Após atingido o estado final de coloração da rede cada sítio está vermelho ou azul. A cada par distinto de sítios primeiros vizinhos coloridos diferentemente dizemos que corresponde uma interface azul-vermelho. Novamente usamos o símbolo L_{RB} para denotar o valor médio do número de interfaces.

A figura 4.4 mostra dois exemplos de coloração final da rede. Em 4.4(a) 2 caminhantes cobriram a rede e em 4.4(b) 1024 caminhantes executaram a cobertura. Olhando para as duas figuras o leitor constatará que existe uma sutil diferença no número de interfaces devida ao grande número de pequenas ilhas de uma ou outra espécie, o que proporciona substancial incremento em L_{RB} . Os resultados obtidos para o número de interfaces como função do número de caminhantes são mostrados na figura 4.5 e apontam na direção de que o número médio de interfaces não depende de N . A inclinação média das curvas é muito pequena, e vai decrescendo monotonamente à medida que L aumenta. Obtivemos as seguintes relações para o menor e o maior tamanho da rede, respectivamente:

$$L_{RB} \sim N^{(0.066 \pm 0.002)} \text{ e } L_{RB} \sim N^{(0.047 \pm 0.001)} \quad (4.2)$$

A relação de escala para L_{RB} foi obtida para todos os valores de N como se pode ver na figura 4.6. Essa relação entre o número médio de interfaces e o tamanho característico da rede se dá através da dimensão fractal d_f na forma

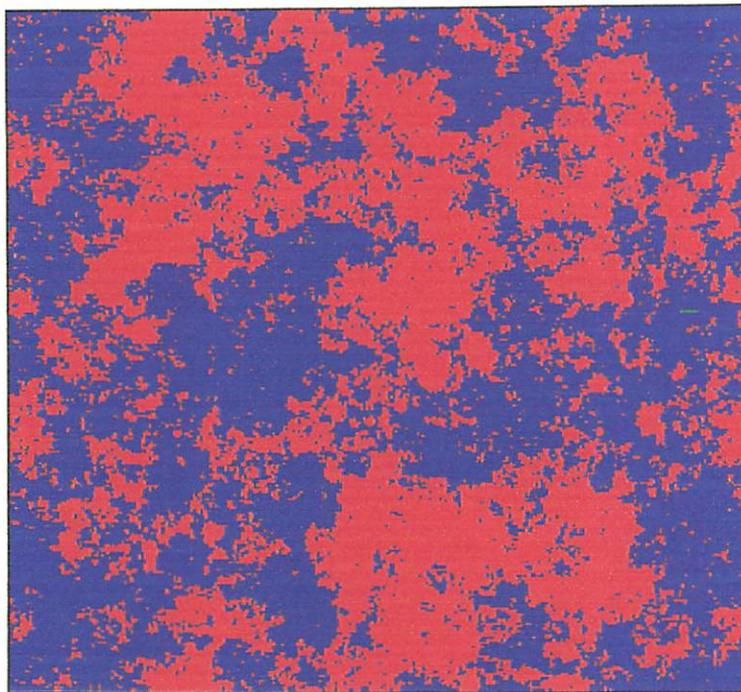
$$L_{RB} \sim L^{d_f}. \quad (4.3)$$

A inclinação de cada uma das duas retas mostradas na figura 4.6 fornece a dimensão fractal, calculada pelo método das caixas^[6], para $N = 2$ e $N = 1024$. A tabela abaixo mostra os valores de d_f obtidos para os diferentes valores de N .

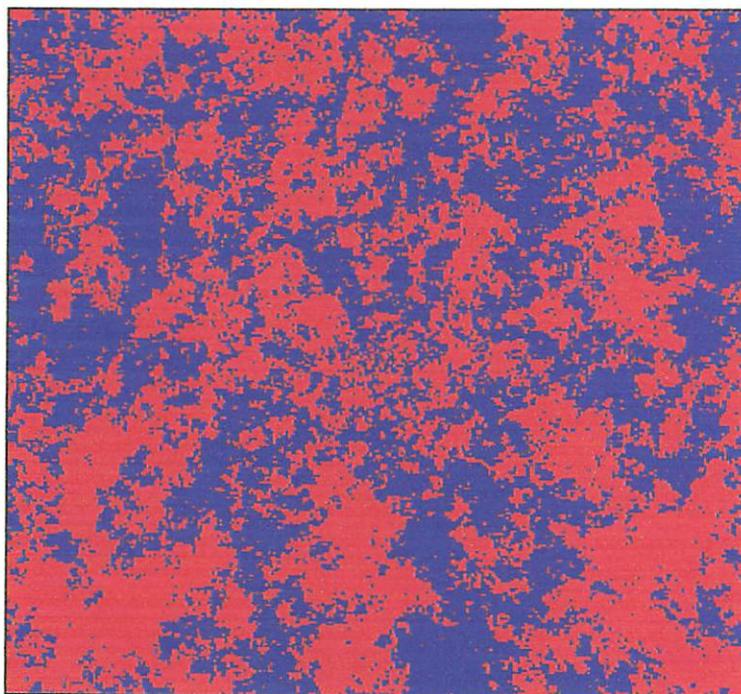
N	$d_f(N)$
2	1.809±0.006
4	1.811±0.010
8	1.801±0.005
16	1.795±0.004
32	1.789±0.008
64	1.779±0.003
128	1.777±0.006
256	1.772±0.008
512	1.768±0.005
1024	1.761±0.004

Tabela 4.1. Valor da dimensão fractal versus o número de caminhantes

Esta variação de d_f é compatível com a figura 4.4, na qual se percebe intuitivamente que o número de caminhantes altera a fractalidade do número de interfaces. Os dados da tabela 4.1 são inadequados para que se possa determinar a natureza da mudança na dimensão fractal, se devida a uma mudança de expoente a partir de um determinado valor de N , ou se L_{RB} é uma quantidade multifractal^[7]. A análise dessa variação para $N = 1,2,3,\dots$, e maiores valores de L poderá prover informação suficiente para esclarecer essa questão.



(a)



(b)

Figura 4.4. Estado final de coloração de uma rede com $L = 300$. (a) Rede coberta por 2 caminhantes e (b) rede coberta por 1024 caminhantes.

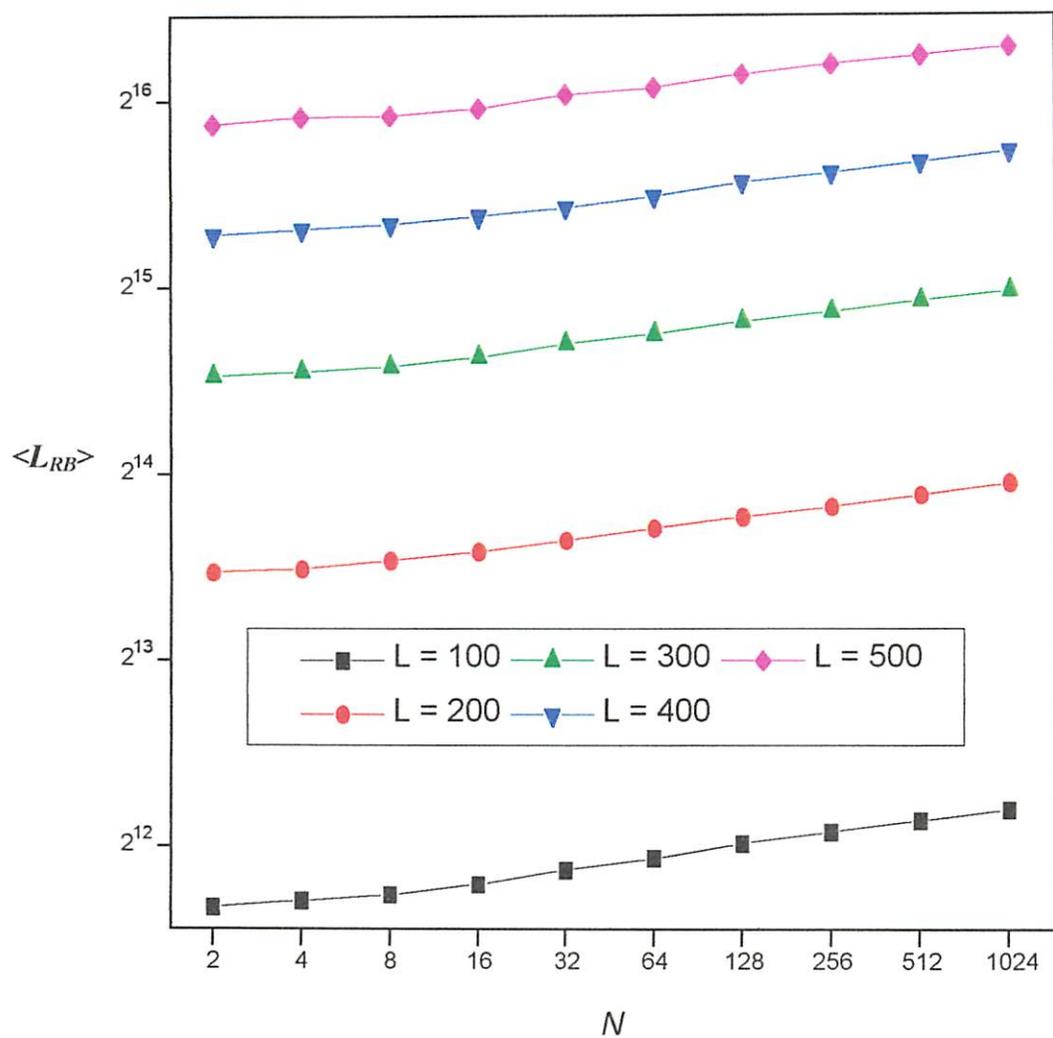


Figura 4.5. Número médio de interfaces $\langle L_{RB} \rangle$ versus o número de caminhantes N em escala logarítmica, para vários tamanhos L .

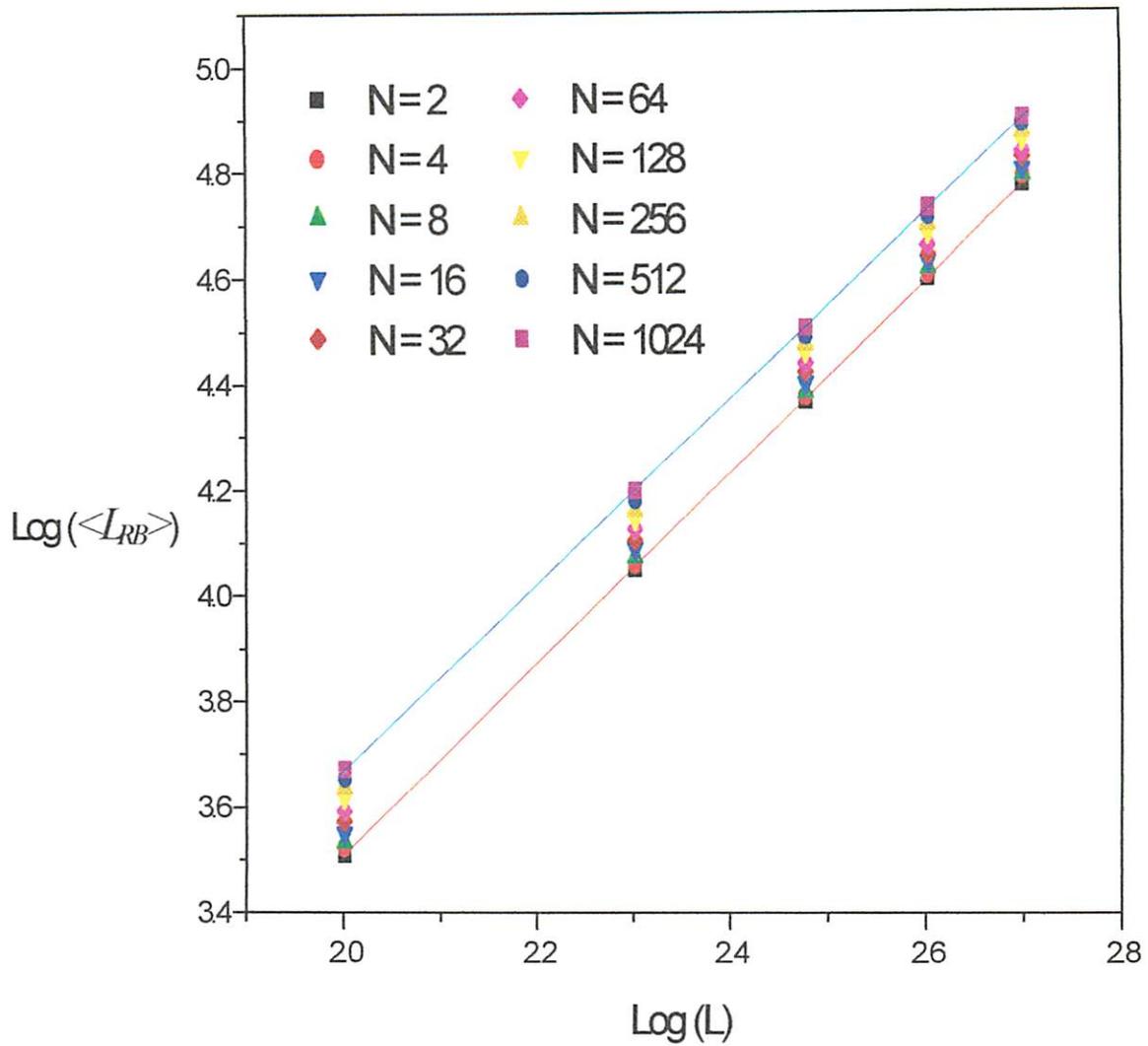


Figura 4.6. Logaritmo do número médio de interfaces contra o logaritmo do tamanho da rede. A inclinação da reta em vermelho fornece d_f para $N=2$ e a inclinação da linha azul dá d_f para $N=1024$.

-
- [1] H. Larralde, P. Trunfio, S. Havlin, H. E. Stanley e G. H. Weiss
Nature **355** (1992) 423.
 - [2] H. Larralde, P. Trunfio, S. Havlin, H. E. Stanley e G. H. Weiss
Phys. Rev. A **45** (1992) 7128.
 - [3] M. V. Smoluchowski, Z. Phys. Chem. **29** (1917) 129.
 - [4] S. A. Rice, Diffusion-Controlled Reactions (Elsevier, Amsterdam, 1985).
 - [5] L. Edelstein-Keshet, Mathematical Model in Biology
(Random House, New York, 1988).
 - [6]
 - [7]

Neste trabalho estudamos efeitos da competição entre caminhantes aleatórios através do modelo de dominação que introduzimos. Investigamos o caso unidimensional com 2 caminhantes e o caso bidimensional (rede quadrada) com N caminhantes.

No caso unidimensional obtivemos analiticamente a distribuição de probabilidades de um sítio ser vermelho (azul), no estado final de coloração da rede, e vimos que a mesma não exibe um comportamento linear rigoroso. Obtivemos também uma relação de escala para o tempo de cobertura e vimos que, para grandes tamanhos de rede, este tempo cai pela metade em relação ao tempo de cobertura de 1 caminhante, o que evidencia a irrelevância do tempo em que os 2 caminhantes passam por sobre sítios já visitados. Calculamos o número de interfaces formadas no estado final como função da separação inicial entre os caminhantes e encontramos um crescimento logarítmico.

No caso bidimensional determinamos o tempo de cobertura da rede quadrada por N caminhantes. Obtivemos uma relação de escala para esse tempo, válida para valores pequenos de N , em função do número de sítios da rede, a qual mostra que os efeitos de sobreposição das caminhadas são novamente irrelevantes, ou seja, cada caminhante é responsável pela cobertura de L^2/N sítios. No limite de N grande este comportamento não é observado. Investigamos ainda a dependência do número de interfaces com o número de caminhantes e encontramos uma tendência que indica que as duas grandezas são fracamente

correlacionadas. A variação do número de interfaces em função do tamanho da rede nos forneceu uma tabela de valores da dimensão fractal das interfaces em função do número de caminhantes. Os dados obtidos apontam claramente para a variação do expoente, não ficando muito claro ainda se essa variação é contínua (sugerindo a existência de multifractalidade no modelo), ou se essa dimensão fractal muda bruscamente, caracterizando um *crossover*.

Uma comparação do nosso trabalho com o de Larralde et al. publicado na revista Nature e que despertou muita atenção dos pesquisadores da área (agradecemos ao Dr. M. Schlesinger por nos ter informado a respeito) se faz necessária.

Larralde e colaboradores apenas analisam como o território coberto por N caminhantes indistinguíveis varia com o tempo e qual a forma da fronteira. Não há a formação do mosaico de diferentes territórios, nem interfaces entre diferentes domínios, nem uma estrutura fractal, para $t = \infty$, no mapa de sítios visitados. Em resumo nosso trabalho ataca questões bem mais complexas.

Este modelo tem amplas possibilidades de aplicação a diversos problemas da Física e da Biologia. Pretendemos, no futuro próximo, explorar algumas variações do mesmo e tentar esclarecer algumas questões que permanecem, tais como:

(i) A variação da quantidade de caminhantes de uma cor em relação aos da outra, fornecendo informação sobre a distribuição do tamanho das ilhas de cada cor e área ocupada por cada cor.

(ii) A introdução de algum tipo de interação ou correlação entre os caminhantes, o que modelaria a dinâmica de populações em Ecologia e em Ciências Sociais.

(iii) O Estudo da mudança da lei de difusão entre os diferentes caminhantes. Observar a mudança na distribuição de sítios vermelhos (azuis) e no tamanho das ilhas.

(iv) A análise do caso tridimensional. Verificar se a independência do tempo de cobertura em relação à distribuição inicial dos caminhantes persiste para valores de N pequenos em relação ao tamanho da rede.

A investigação dessas extensões do nosso modelo poderá fornecer um valioso conhecimento da dinâmica de populações de uma maneira global e também do entendimento de sistemas complexos onde exista algum tipo de competição entre seus constituintes.

Apêndice

O algoritmo usado para as simulações descritas nesta tese é mostrado a seguir. Diferentemente da maioria dos trabalhos computacionais em Física, feitos com programas FORTRAN, os nossos programas foram escritos em linguagem de programação C++ devido a nossa necessidade de uma observação visual da evolução do sistema antes de serem realizadas as simulações das quais obtivemos nossos valores médios.

Logo abaixo temos o programa para o problema da cobertura de uma rede unidimensional por dois caminhantes aleatórios distintos:

```
#include <iostream.h>
#include <iomanip.h>
#include <fstream.h>
#include <stdlib.h>
#include <math.h>
#define SP 10

class random_walker
{
public:
    random_walker(void);
    void move_walker(int *, int *); // função que movimenta o caminhantes
    int interfaces(void); // função que conta o número de interfaces
    void anima_walker(void); // execução de todas as realizações
    void results(void); // saída dos resultados para um arquivo
    void start_walkers(void); // reinicializa alguns valores a cada realização
    void header(void); // cabeçalho do arquivo de saída
private:
    int samples, blue_walkers, walkers, side, inc, max_side;
    int x[1024], color[1024];
    long area, red, blue, cover_time;
    char line[1000]; // rede unidimensional de até 1000 sítios
};
```

```

};

random_walker::random_walker(void)
{
    ifstream in_data("file_in.dat");           // abrir arquivo de entrada de dados
    in_data >> random_walker::side;           // tamanho inicial da rede
    in_data >> random_walker::max_side;       // tamanho final da rede
    in_data >> random_walker::inc;            // incremento no tamanho da rede
    in_data >> random_walker::walkers;        // número de caminhantes aleatórios
    in_data >> random_walker::blue_walkers;   // número de caminhantes azuis
    in_data >> random_walker::samples;        // número de realizações para estes parâmetros
    in_data.close();                           // fechar arquivo de entrada de dados
}

void random_walker::move_walker(int *x, int *color)
{
    int i;

    if ( line[*x] == 0 )
    {
        line[*x] = *color;                    // se o sítio está vazio adquire a cor do caminhante
        if (*color == 1) blue++;              // se o caminhante é azul, mais um sitio azul
        else red++;                            // senão, mais um sítio vermelho
        area++;                                // mais um sítio colorido
    }
    cover_time++;
    i = random(32000);
    if ( i < 16000 )
    {
        (*x)++;                               // passo para a direita
        if (*x == side) *x -= side;           // contorno periódico
    }
    else
    {
        (*x)--;                               // passo para a esquerda
        if (*x == -1) *x += side;            // contorno periódico
    }
}

int random_walker::interfaces(void)
{
    int i, interface;

    interface = 0;
    for (i=0; i<side-1; i++)
    {
        if (line[i] != line[i+1]) interface++; // se vizinhos são diferentes existe interface
    }
}

```

```

    }
    if (line[0] != line[side-1]) interface++;    // contorno periódico
    return(interface);
}

void random_walker::results(void)
{
    int inter;

    inter = interfaces();
    ofstream out_data("file_out.dat", ios::app);
    out_data << setw(SP) << side;                // tamanho da rede
    out_data << setw(SP) << (float)red*100/side;    // percentual de sitios vermelhos
    out_data << setw(SP) << (float)blue*100/side;    // percentual de sitios azuis
    out_data << setw(SP) << (float)cover_time/walkers; // tempo de cobertura (passos)
    out_data << setw(SP) << inter << endl;        // número de interfaces
}

void random_walker::start_walkers(void)
{
    int i, pos;

    for (i=0; i<side; i++) line[i] = 0;        // descolorir a rede

    for (i=0; i<blue_walkers; i++)
    {
        x[i] = 1;                                // reposicionar caminhantes azuis
        color[i] = 1;                            //
    }
    pos = side/50;
    for (i=blue_walkers; i<walkers; i++)
    {
        x[i] = pos;                            // reposicionar caminhantes vermelhos
        color[i] = 2;                            //
    }

    area = 0;                                    // reinicializar os valores obtidos a cada
    red = 0;                                    // realização
    blue = 0;                                    //
    cover_time = 0;                            //
}

void random_walker::header(void)
{
    ofstream out_data("file_out.dat", ios::app);
    out_data << samples << " amostras. " << walkers << " caminhantes." << endl;
    out_data << setw(SP) << "side";
}

```

```

out_data << setw(SP) << "red";
out_data << setw(SP) << "blue";
out_data << setw(SP) << "covertime";
out_data << setw(SP) << "interface" << endl;
}

void random_walker::anima_walker(void)
{
int i, j;

while(side <= max_side)           // variação do tamanho da rede
{
for (i=0; i<samples; i++)        // contagem das realizações
{
start_walkers( );
while(area < side)              // mover o caminhantes até a cobertura da rede
{
j = random(walkers);
move_walker(&x[j], &color[j]);
}
results( );                      // colocar resultados em file_out.dat
}
side += inc;
}
}

void main(void)
{
random_walker test;
randomize();                      // inicializa gerador de números aleatórios
test.header();
test.anima_walker();
}

```

Este é o programa usado nas simulações da cobertura de uma rede quadrada por N caminhantes aleatórios de duas diferentes espécies. Os comentários do programa anterior são válidos aqui quando as estruturas de programação são semelhantes:

```
#include <iostream.h>
#include <iomanip.h>
#include <fstream.h>
#include <stdlib.h>
#include <math.h>
#define SP 15

class random_walker
{
public:
    random_walker(void);
    void move_walker(int *, int *, int *);
    void anima_walker(void);
    void start_walkers(void);
    long interfaces(void);
    void results(void);
    void header(void);
private:
    int samples, blue_walkers, walkers, side, inc, max_side;
    int x[1024], y[1024], color[1024];
    long area, blue, red, cover_time;
};

char huge plane[500][500]; // rede quadrada de até 500 por 500

random_walker::random_walker(void)
{
    ifstream in_data("file_in.dat");
    in_data >> random_walker::side;
    in_data >> random_walker::max_side;
    in_data >> random_walker::inc;
    in_data >> random_walker::walkers;
    in_data >> random_walker::blue_walkers;
    in_data >> random_walker::samples;
    in_data.close();
}
```

```

void random_walker::move_walker(int *x, int *y, int *color)
{
    int j;

    if ( plane[*x][*y] == 0 )
        {
            plane[*x][*y] = *color;
            if (*color == 1) blue++;
            else red++;
            area++;
        }
    cover_time++;
    j = random(32000);
    if (j < 8000 )
        {
            (*x)++; // passo para a direita
            if (*x==side) *x -= side;
        }
    else if (j < 16000 )
        {
            (*x)--; // passo para a esquerda
            if (*x== -1) *x += side;
        }
    else if (j < 24000 )
        {
            (*y)++; // passo para baixo
            if (*y==side) *y -= side;
        }
    else
        {
            (*y)--; // passo para cima
            if (*y== -1) *y += side;
        }
    }

long random_walker::interfaces(void)
{
    int i, j;
    long interface;

    interface = 0;
    for (i=0; i<side; i++) // varredura na horizontal
        { // se vizinhos são diferentes, existe interface
            for (j=0; j<side-1; j++)
                {
                    if (plane[i][j] != plane[i][j+1]) interface++;
                }
        }
}

```

```

        if (plane[i][0] != plane[i][side-1]) interface++;
    }
    for (j=0; j<side; j++)                // varredura na vertical
    {                                       // se vizinhos são diferentes, existe interface
        for (i=0; i<side-1; i++)
        {
            if (plane[i][j] != plane[i+1][j]) interface++; // contorno periódico
        }
        if (plane[0][j] != plane[side-1][j]) interface++;
    }
    return(interface);
}

```

```

void random_walker::results(void)
{
    long inter;

    inter = interfaces();
    ofstream out_data("file_out.dat", ios::app);
    out_data << setw(SP) << side;
    out_data << setw(SP) << (float)red*100/((long)side*side);
    out_data << setw(SP) << (float)blue*100/((long)side*side);
    out_data << setw(SP) << (float)cover_time/walkers;
    out_data << setw(SP) << inter << endl;
}

```

```

void random_walker::start_walkers(void)
{
    int i, j;

    for (i=0; i<side; i++)
    {
        for (j=0; j<side; j++) plane[i][j] = 0;
    }

    for (i=0; i<blue_walkers; i++)
    {
        x[i] = side/2;
        y[i] = side/2;
        color[i] = 1;
    }
    for (i=blue_walkers; i<walkers; i++)
    {
        x[i] = side/2;
        y[i] = side/2;
        color[i] = 2;
    }
}

```

```

area = 0;
red = 0;
blue = 0;
cover_time = 0;
}

```

```

void random_walker::header(void)
{
ofstream out_data("file_out.dat", ios::app);
out_data << samples << " amostras. " << walkers << " caminhantes." << endl;
out_data << setw(SP) << "side";
out_data << setw(SP) << "red";
out_data << setw(SP) << "blue";
out_data << setw(SP) << "covertime";
out_data << setw(SP) << "interface" << endl;
}

```

```

void random_walker::anima_walker(void)
{
int i, j;

while(side <= max_side)
{
for (i=0; i<samples; i++)
{
start_walkers( );
while(area < (long)side*side)
{
j = random(walkers);
move_walker(&x[j], &y[j], &color[j]);
}
results( );
}
side += inc;
}
}

```

```

void main(void)
{
random_walker test;
randomize();
test.header();
test.anima_walker();
}

```