



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO NORTE
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA TERRA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
BACHARELADO EM FÍSICA

Anderson Mateus de Sousa Nogueira

**Abordando a difusão através da aproximação em
passeios aleatórios**

Natal - RN

Novembro de 2023

Anderson Mateus de Sousa Nogueira

Abordando a difusão através da aproximação em passeios aleatórios

Monografia de Graduação apresentada ao Departamento de Física do Centro de Ciências Exatas e da Terra da Universidade Federal do Rio Grande do Norte como requisito parcial para a obtenção do grau de bacharel em Física.

Orientador:

Prof. Dr. Gilberto Corso

Universidade Federal do Rio Grande do Norte - UFRN

Departamento de Física - DF

Natal - RN

Novembro de 2023

Universidade Federal do Rio Grande do Norte - UFRN
Sistema de Bibliotecas - SISBI
Catalogação de Publicação na Fonte. UFRN - Biblioteca Central Zila Mamede

Nogueira, Anderson Mateus de Sousa.

Abordando a difusão através da aproximação em passeios aleatórios / Anderson Mateus de Sousa Nogueira. - 2023.
47 f. : il.

Monografia (graduação) - Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Centro de Ciências Exatas e da Terra, Curso de Bacharelado em Física. Natal, RN, 2023.

Orientação: Prof. Dr. Gilberto Corso.

1. Movimento browniano - Monografia. 2. Lei de Fick - Monografia. 3. Caminhada aleatória - Monografia. I. Corso, Gilberto. II. Título.

RN/UF/BCZM

CDU 530.162

Trabalho de Conclusão de Curso de bacharelado em Física intitulado *Abordando a difusão através da aproximação em passeios aleatórios* apresentado por Anderson Mateus de Sousa Nogueira e aceito pelo Departamento de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Norte, sendo aprovado por todos os membros da banca examinadora abaixo especificada:

Prof. Dr. Gilberto Corso

Universidade Federal do Rio Grande do Norte - UFRN
Departamento de Biofísica e Farmacologia - DBF

Prof. Dr. João Medeiros de Araujo

Universidade Federal do Rio Grande do Norte - UFRN
Departamento de Física - DF

Dr. Carlos Alexandre Nascimento da Costa

Universidade Federal do Rio Grande do Norte - UFRN
Departamento de Física - DF

Natal - RN

Novembro de 2023

Agradecimentos

Gostaria de dedicar meus profundos agradecimentos ao meu orientador Gilberto Corso por ter aceitado me orientar em um momento em que eu estava vulnerável e pelos seus ótimos feedbacks que me deixaram bastante motivado, melhoraram minha autoestima e reviveram minha vontade de continuar na área da física.

Gostaria também de agradecer a todos os amigos que fiz durante o curso, mas em especial a Artur Januário por ter me acompanhado desde o começo, Gabriel Wendell por ter me ajudado em muitos momentos durante o curso e também ao meu amigo Paulo Lucas que me motivou a não desistir em muitos momentos, principalmente nessa reta final da graduação.

Por fim, também gostaria de agradecer à minha família por sua paciência e fé em mim.

*"[...] if devotion to truth is the hallmark of
morality, then there is no greater, nobler,
more heroic form of devotion than the act of
a man who assumes the responsibility of
thinking"*

- Ayn Rand

Resumo

Este trabalho inicia-se com uma introdução teórica a conceitos básicos de processos estocásticos. Partimos para explorar as propriedades dos passeios aleatórios discretos, estabelecendo a base para a compreensão de sua transição para o movimento browniano e suas conexões com o fenômeno da difusão. Serão destacadas diversas propriedades básicas que surgem nos modelos mais simples, dada sua importância para analisarmos tanto os comportamentos emergentes quanto as aplicabilidades de tais modelos.

Por fim, ilustraremos como é possível utilizar esse tipo de modelagem para aproximar fenômenos difusivos. Um comportamento que surge naturalmente a partir desses modelos.

Palavras-chave: Movimento Browniano, lei de Fick, caminhada aleatória, random walk, difusão.

Abstract

This work begins with a theoretical introduction to basic concepts of stochastic processes. We set out to explore the properties of discrete random walks, establishing the basis for understanding their transition to Brownian motion and their connections with the phenomenon of diffusion. Several basic properties that arise in the simplest models will be highlighted, given their importance for analyzing both the emerging behaviors and the applicability of such models.

Finally, we will illustrate how it is possible to use this type of modeling to approximate diffusive phenomena. A behavior that arises naturally from these models.

Keywords: Brownian Motion, Fick's law, Random Walk, Diffusion.

Lista de Figuras

2.1	"Markovkate 01.svg", por Joxemai4, trabalho próprio, licenciado sob a Creative Commons Attribution-Share Alike 3.0 Unported e a GNU Free Documentation License, Wikimedia Commons, acessado em [25/10/2023]. Disponível em: https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Markovkate_01.svg	7
2.2	Gráfico da binomial para 10 jogadas com probabilidade $P(+)=P(-)=0.5$. O eixo vertical indica a probabilidade do resultado da soma ser igual ao valor no eixo horizontal. Fonte: Elaboração própria (2023).	8
2.3	Gráfico da distribuição normal ou distribuição gaussiana para valores de $\mu=0$ e $\sigma=1$. Fonte: Elaboração própria (2023).	9
3.1	Simulação computacional de um passeio aleatório unidimensional para 50 passos e probabilidades de movimento iguais em ambas as direções. Observamos o comportamento errático do caminho em todos os passos. Fonte: Elaboração própria (2023).	12
3.2	Simulação computacional de vários passeios aleatórios unidimensionais em 100 passos. O comportamento difusivo do conjunto de caminhos fica evidente. Fonte: Elaboração própria (2023).	12
3.3	Simulação computacional de três passeios aleatórios 2-dimensionais. Em cores distintas estão realizações diferentes do passeio aleatório. Fonte: Elaboração própria (2023).	16
3.4	Simulação computacional de dois passeios aleatórios 3-dimensionais. Em cores distintas estão realizações diferentes do passeio aleatório. Fonte: Elaboração própria (2023).	16

4.1	Comparação de dois passeios aleatórios sob diferentes níveis de granularidade. O segundo passeio aleatório foi realizado com 1600 passos, mas reescalado em 1/4 espacialmente e 1/16 temporalmente para demonstrar a convergência para um movimento browniano. Fonte: Elaboração própria (2023).	19
5.1	Comparação entre a solução analítica da lei de Fick e uma simulação em passeios aleatório para uma difusão livre. Fonte: Elaboração própria (2023).	27
5.2	Distribuição inicial de partículas em um cano unidimensional. Fonte: Elaboração própria (2023).	28
5.3	Simulação da evolução temporal da difusão usando a lei de Fick em um cano onde a concentração inicial é linear. Fonte: Elaboração própria (2023).	28
5.4	Simulação em passeios aleatórios da evolução temporal da difusão em um cano onde a concentração inicial é linear. Fonte: Elaboração própria (2023).	29
6.1	Comparação entre o crescimento dos deslocamentos quadráticos médios para diferentes regimes de difusão. Fonte: Elaboração própria (2023).	31
6.2	Gráfico comparativo das funções α estáveis de Lévy para diferentes valores do parâmetro α . Para $\alpha = 2$, que é o limite, a curva coincide com a distribuição gaussiana. Fonte: Elaboração própria (2023).	32
6.3	Simulação computacional da trajetória de um voo de Lévy. Podemos observar o comportamento de "saltos" repentinos seguidos de pequenas regiões de explicação. Fonte: Elaboração própria (2023).	33

Sumário

Agradecimentos	i
Resumo	iii
Abstract	iv
Lista de Figuras	v
1 Uma breve história dos passeios aleatórios	1
2 Fundamentação Teórica	3
2.1 Experimento aleatório e espaço de probabilidade	3
2.2 Média, Variância e Covariância	4
2.2.1 Média	4
2.2.2 Variância	5
2.2.3 Covariância	5
2.3 Conceitos básicos de processos estocásticos	5
2.4 Propriedade de Markov	6
2.5 Distribuição binomial	7
2.6 Teorema do Limite Central	9
3 Introdução ao Passeio aleatório	11
3.1 Definindo um passeio aleatório discreto simples	11
3.2 Propriedades de passeios aleatórios discretos	12
3.2.1 Média e variância	12
3.2.2 Distribuição	14
3.3 Passeio aleatório em múltiplas dimensões	15

4	Movimento Browniano	17
4.1	Motivação histórica	17
4.2	Convergência do passeio aleatório para o movimento Browniano	17
4.3	Propriedades do processo de Wiener	19
4.3.1	Continuidade e não-diferenciabilidade	19
4.3.2	Incrementos independentes, estacionários e a propriedade de Markov	19
4.3.3	Média, variância e covariância	20
4.3.4	Distribuição Normal	21
4.3.5	Isotropia do Movimento	22
4.3.6	Comportamento sob transformações de escala	22
5	Leis de Fick e simulações	24
5.1	Processo de difusão	24
5.2	Primeira Lei de Fick	24
5.3	Segunda Lei de Fick	25
5.4	Passeios Aleatórios como Modelo de Difusão	26
5.4.1	Exemplo: Difusão em um cano unidimensional	27
6	Difusão anômala em passeios aleatórios	30
6.1	Regimes de difusão	30
6.2	Superdifusão	31
6.3	Subdifusão	33
7	Considerações finais	35

Capítulo 1

Uma breve história dos passeios aleatórios

Podemos traçar a origem da noção moderna de passeios aleatórios a partir de um problema proposto por Pearson em 1905. O problema descrevia um homem caminhando aleatoriamente em linhas retas, mudando de direção de forma aleatória após cada segmento que anda. Ele buscou a probabilidade de que, após um número n de passos, o homem estivesse a uma distância específica do ponto de partida.

Lord Rayleigh, quase simultaneamente, explorou um problema semelhante relacionado a vibrações isoperiódicas com fases distribuídas aleatoriamente. Conseguindo estabelecer uma relação entre o seu estudo e os passeios aleatórios.

As primeiras soluções obtidas para o problema trabalhavam com o limite onde n é grande. O problema da caminhada aleatória também ficou conhecido como "o andar do bêbado" como uma forma de ilustrar o comportamento desse tipo de sistema. Posteriormente, os modelos foram generalizados para movimentos em duas e três dimensões, sendo chamado de passeio aleatório para este último caso, e estendido para outras aplicações, como a dinâmica molecular e a teoria da difusão.

O conceito de passeios aleatórios encontrou aplicações em vários campos, como a física, biologia, economia e ciência da computação. Se tornou fundamental no estudo de processos estocásticos como movimento Browniano, teoria da difusão, e teoria dos polímeros. Em especial foi fundamental na formulação da teoria moderna do movimento Browniano por Einstein e Smoluchowski, que o idealizaram como um problema de "passeios aleatórios". Essa teoria foi importante para validar a estrutura atômica da matéria

[1].

Capítulo 2

Fundamentação Teórica

2.1 Experimento aleatório e espaço de probabilidade

Um experimento aleatório é aquele cujo o resultado não pode ser determinado com certeza, mesmo que seja repetido nas exatas mesmas condições as quais temos controle. Quando realizamos uma medida em um processo aleatório, o resultado será um resultado representado por uma variável aleatória, digamos X_i , referente à i -ésima medida. Uma variável aleatória, como o nome diz, terá como resultado de uma medida um valor escolhido aleatoriamente dentro de um conjunto de possíveis valores. A distribuição estatística desses valores, bem como outras propriedades, podem ser conhecidas. Para modelar processos probabilísticos, definimos uma estrutura matemática chamada espaço de probabilidade. O objetivo do espaço de probabilidade é definir todos os eventos possíveis, agrupá-los e atribuir uma probabilidade a cada grupo. O espaço de probabilidade é composto por 3 componentes: o Espaço Amostral, a σ -álgebra e a Função de Probabilidade.

O **espaço amostral** Ω consiste em um conjunto que contém todos os resultados possíveis do experimento aleatório. Por exemplo, se estamos lidando com um lançamento de moedas, o nosso espaço amostral pode ser $\Omega = \{\text{Cara}, \text{Coroa}\}$. Se estamos lidando com uma sequência infinita de lançamentos, um elemento $\omega \in \Omega$ é uma sequência infinita $\omega = (X_1, X_2, \dots)$ onde cada lançamento $X_i \in \{\text{Cara}, \text{Coroa}\}$. A **σ -álgebra** \mathcal{F} é uma coleção de subconjuntos do espaço amostral. A σ -álgebra oferece uma descrição matemática de como os elementos de Ω devem ser agrupados em eventos de forma que possam ser atribuídas probabilidades a cada um. Ela deve satisfazer três propriedades:

1. $\Omega \in \mathcal{F}$.
2. Se $A \in \mathcal{F}$ então $A^c \in \mathcal{F}$, onde A^c é o complemento de A .
3. Se A_1, A_2, \dots são uma sequência de eventos em \mathcal{F} , então a união desses eventos também está em \mathcal{F} .

É interessante ressaltar que, a depender do objeto de estudo, a nem todo subconjunto de Ω pode ser atribuída uma probabilidade. Isso implica casos onde podemos atribuir uma probabilidade a um conjunto inteiro, mas não a certos subconjuntos desse conjunto. Tais conjuntos são chamados conjuntos não mensuráveis pois não podemos atribuir uma medida [2]. Neste caso, tais subconjuntos não são elementos de \mathcal{F} .

A **função de probabilidade** P é responsável por atribuir uma probabilidade a cada evento em \mathcal{F} , respeitando as seguintes propriedades:

1. $0 \leq P(A) \leq 1$,
2. $P(\Omega) = 1$,
3. Sejam A_1, A_2, \dots eventos disjuntos, ou seja, que não possuem elementos em comum, então $P(A_1 \cup A_2 \cup \dots) = P(A_1) + P(A_2) + \dots$

Juntos, Ω , \mathcal{F} e P formam um espaço de probabilidade e são essenciais para descrever e analisar qualquer experimento aleatório de uma perspectiva matemática [3].

2.2 Média, Variância e Covariância

No estudo de modelos probabilísticos, existem ferramentas que são fundamentais para entender como resumir e caracterizar a informação contida nas variáveis aleatórias. A média, variância e covariância estão entre as ferramentas mais usadas para esse fim.

2.2.1 Média

A média ou valor esperado de uma variável aleatória X , denotado por $E(X)$ é um valor atribuído à sua distribuição que indica a média ponderada de todos os possíveis valores que a variável aleatória pode assumir. Para variáveis discretas, seja X uma variável

aleatória discreta que pode assumir valores x_1, x_2, \dots e com probabilidade para cada valor dadas por $P(X = x_i)$, a média dessa variável aleatória é:

$$\mu = E(X) = \sum_i x_i P(X = x_i) , \quad (2.1)$$

Para variáveis contínuas o processo se torna uma integral, onde $P(x)$ é uma função de distribuição contínua [3, 4]

$$\mu = E(X) = \int_{-\infty}^{\infty} xP(x) . \quad (2.2)$$

2.2.2 Variância

A variância de uma variável aleatória é uma medida de dispersão que indica o quanto os valores se desviam da média. Podemos utilizar o conceito de média para definir o calculo da variância:

$$\text{Var}(X) = E[(X - \mu)^2] . \quad (2.3)$$

A partir disso, definimos o desvio padrão $\sigma = \sqrt{\text{Var}(X)}$ [3, 4].

2.2.3 Covariância

A covariância é uma medida do grau de variação conjunta entre duas variáveis aleatórias. Sejam X e Y duas variáveis aleatórias, definimos a covariância como

$$\text{Cov}(X, Y) = E[(X - \mu_x)(Y - \mu_y)] . \quad (2.4)$$

Se duas variáveis aleatórias estão correlacionadas, a covariância será um valor positivo se ambas tendem a aumentar juntas, se elas variam de maneira oposta, ou será um valor nulo se não há correlação entre a variação de ambas. [5]

2.3 Conceitos básicos de processos estocásticos

Um processo estocástico é constituído por uma família de funções ou variáveis aleatórias $X(t)$ que são indexadas por algum objeto de interesse no experimento, geral-

mente pelo tempo $t \in T$. A depender do objeto de estudo, t pode ser um parâmetro discreto ou contínuo [6].

Cada função $X(t)$ representa apenas um dos possíveis resultados de um experimento, o que nos leva a trabalhar com uma família ou *ensemble* de funções que abordam todos os possíveis resultados de interesse [4, 5]. Quando trabalhamos com processos estocásticos, utilizamos uma extensão da ideia de espaço de probabilidade onde os conceitos são adaptados para tratar de processos estocásticos.

A principal adição é a ideia de *filtragem*. Uma filtragem \mathcal{F}_t é a σ -álgebra formada a partir de toda a informação que temos até o tempo t . Em outras palavras, o conjunto de todas as coleções de eventos mensuráveis que podem ser "categorizadas" a partir de informações obtidas até o tempo t . Uma vez que estaremos trabalhando com passeios aleatórios e movimento Browniano, que possuem a propriedade de Markov, a única informação que precisa estar contida na filtragem \mathcal{F}_t é a última posição registrada, ou seja, a posição no tempo t .

Neste trabalho veremos de maneira introdutória algumas propriedades de processos estocásticos como passeios aleatórios e movimento Browniano.

2.4 Propriedade de Markov

A propriedade de Markov se refere à propriedade de alguns processos estocásticos de não possuírem *memória* dos seus estados anteriores e que a evolução do processo dependerá somente do estado atual. Um dos melhores exemplos de modelo com essa propriedade são as Cadeias de Markov ou *Markov Chains*.

Considere que o sistema em um tempo n se encontra no estado $X_n = i$. Então a probabilidade dele transitar para o estado j no tempo $n + 1$ é dada por:

$$P(X_{n+1} = j | X_n = i, X_{n-1} = i_{n-1}, \dots, X_0 = i_0) = P_{ij} , \quad (2.5)$$

onde podemos perceber que a probabilidade depende somente do estado atual i e do estado que estamos analisando a probabilidade j . Chamamos P_{ij} de matriz de transição, onde os elementos obedecem algumas propriedades básicas da probabilidade [3, p. 419]:

$$P_{ij} \geq 0 , \quad (2.6)$$

$$\sum_{j=0} P_{ij} = 1, \quad (2.7)$$

onde i é um elemento do espaço de estados. Observe na Figura 2.1 um diagrama de transição de estados em uma cadeia de Markov. A soma da probabilidade de transição entre estados é igual a 1. Pode ser o caso de ser permitido um estado transicionar para si mesmo.

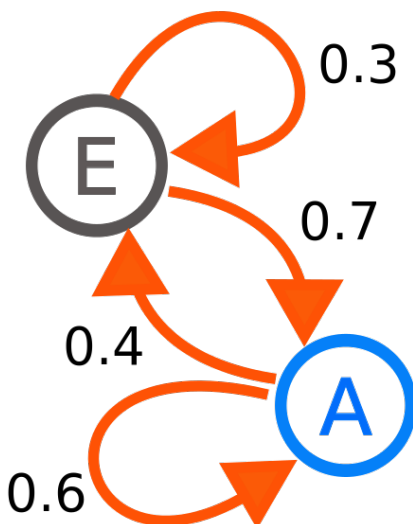


Figura 2.1: "Markovkate 01.svg", por Joxemai4, trabalho próprio, licenciado sob a Creative Commons Attribution-Share Alike 3.0 Unported e a GNU Free Documentation License, Wikimedia Commons, acessado em [25/10/2023]. Disponível em: https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Markovkate_01.svg

2.5 Distribuição binomial

A distribuição binomial é um método para atribuir probabilidades para a soma do resultado de variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas (i.i.d.) que essencialmente possuem somente dois resultados possíveis. Seja $\Omega = \{(+), (-)\}$, então a soma das variáveis aleatórias $X_1 + \dots + X_n$ resultará em um mesmo resultado $C(n, N(+)) = C(n, N(-))$ vezes. Onde $C(i, j)$ é a quantidade de *combinações* de j elementos vindos de um conjunto de n elementos. $N(+)$ e $N(-)$ são a quantidade de variáveis aleatórias com medição igual a $(+)$ e $(-)$ respectivamente. Logo, $N(+)+N(-)=n$. Uma combinação é dada por:

$$C(i, j) = \binom{i}{j} = \binom{i}{i-j} = \frac{i!}{j!(i-j)!}. \quad (2.8)$$

Uma vez que as variáveis são i.i.d., a probabilidade de uma sequência específica de resultados acontecer é igual à conjunção das probabilidades, dada por $\prod_{k=0}^n P(X_k) = P(+)^{N(+)}P(-)^{N(-)}$.

Porém, como estamos lidando com $C(i, j)$ sequências com soma idêntica, devemos multiplicar essa probabilidade pela quantidade de sequências possíveis com o mesmo resultado, o que nos leva à expressão da distribuição binomial:

$$P(N(+); n, P(+)) = \binom{n}{N(+)} P(+)^{N(+)} (1 - P(+))^{n - N(+)} , \quad (2.9)$$

$$(2.10)$$

onde isso representa a probabilidade de uma sequência possuir $N(+)$ valores (+) e $1 - N(+)$ valores (-) [5]. Também podemos representar essa distribuição em função da diferença entre $N(+)$ e $N(-)$. Seja $I = N(+)$ - $N(-)$:

$$P(I; n, P(+)) = \binom{n}{(I+n)/2} P(+)^{(I+n)/2} (1 - P(+))^{(n-I)/2} . \quad (2.11)$$

$$(2.12)$$

Se construirmos um gráfico dessa distribuição em função de I , obtemos o resultado da Figura 2.2.

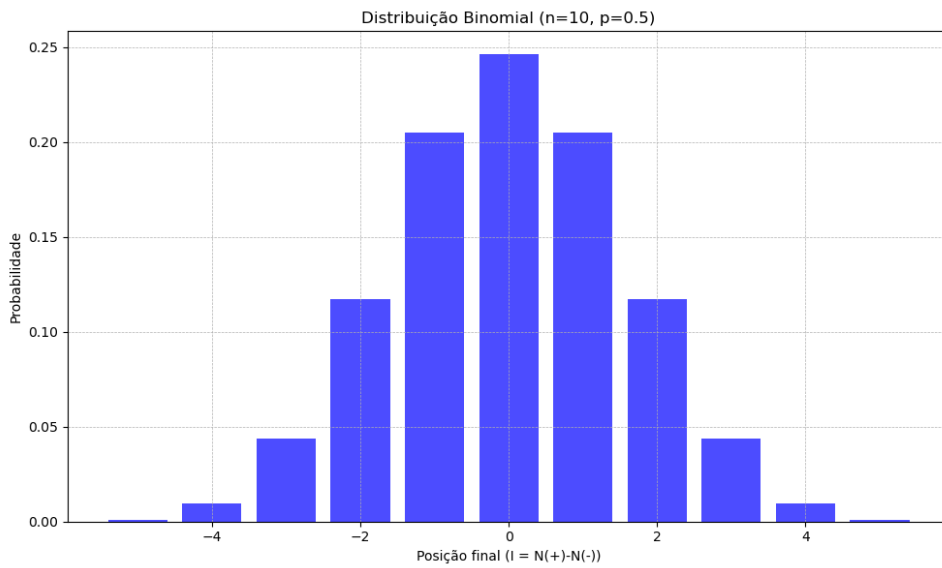


Figura 2.2: Gráfico da binomial para 10 jogadas com probabilidade $P(+)=P(-)=0.5$. O eixo vertical indica a probabilidade do resultado da soma ser igual ao valor no eixo horizontal. Fonte: Elaboração própria (2023).

2.6 Teorema do Limite Central

O Teorema do Limite Central é uma poderosa ferramenta para lidar com a distribuição da soma de muitas variáveis aleatórias. Ele estabelece que, sejam X_1, X_2, \dots variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas (i.i.d), com média μ e variância σ^2 finitas, então seja

$$Z_n = \sum_i^n X_i, \quad (2.13)$$

a soma acumulada até o n -ésimo termo, então esta expressão converge para uma distribuição normal quando n é muito grande:

$$\frac{Z_n - n\mu}{\sigma\sqrt{n}} \xrightarrow{d} \mathcal{N}(0, 1). \quad (2.14)$$

Aqui, $\mathcal{N}(0, 1)$ é a distribuição normal com média $\mu = 0$ e variância $\sigma^2 = 1$, e sua função de densidade de probabilidade é dada por:

$$\mathcal{N}(x; \mu, \sigma^2) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(x - \mu)^2}{2\sigma^2}\right]. \quad (2.15)$$

Observe na Figura 2.3 um gráfico da distribuição.

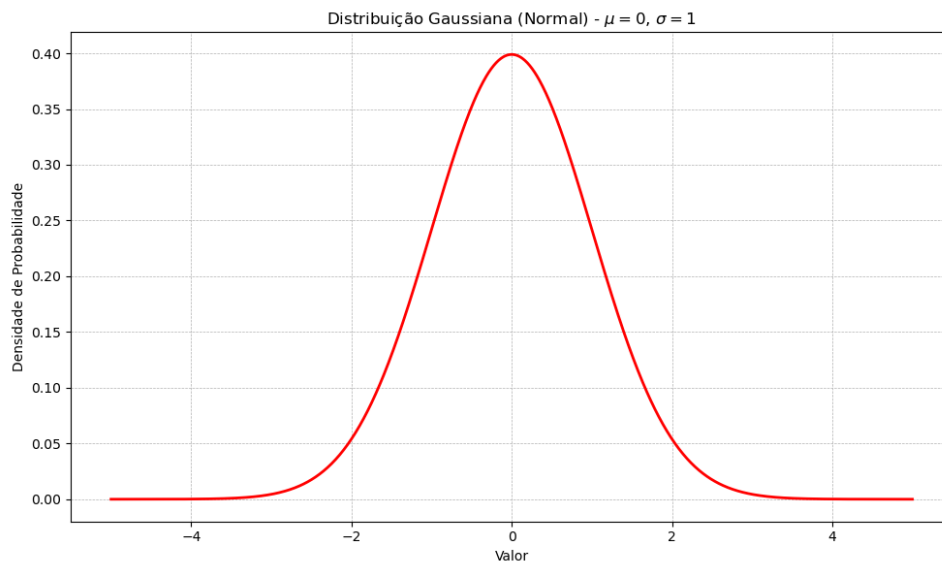


Figura 2.3: Gráfico da distribuição normal ou distribuição gaussiana para valores de $\mu = 0$ e $\sigma = 1$. Fonte: Elaboração própria (2023).

Este teorema é fundamental porque estabelece que, independentemente da forma da distribuição original das variáveis aleatórias, a distribuição da média amostral nor-

malizada convergirá para uma distribuição normal à medida que o tamanho da amostra aumenta. Isso dá base para muitos métodos estatísticos e inferenciais [3].

Capítulo 3

Introdução ao Passeio aleatório

3.1 Definindo um passeio aleatório discreto simples

Um Passeio Aleatório ou *Random Walk* é um objeto matemático que descreve uma trajetória composta por sucessivos incrementos em direções aleatórias. Podemos construir um passeio aleatório simples através de algumas regras básicas. Considere uma sequência de variáveis aleatórias $X(t)$ com valor real, onde t é um parâmetro que representa o tempo. Suponha que $X(t)$ representa a posição de uma partícula em um movimento unidimensional e que os movimentos dessa partícula estão definidos pelas seguintes regras [7]:

1. À medida que n é acrescido em uma unidade, a partícula pode se mover para a direita ou para a esquerda em passos de tamanho δ .
2. A qualquer momento, a probabilidade de dar um passo para a esquerda ou direita é fixa, dada pelo par $(P(+), P(-))$ respectivamente. Não há dependência entre os passos anteriores e os passos futuros, sendo assim, possui a propriedade de Markov.
3. Cada partícula move-se de forma independente de todas as outras partículas, não há interação entre elas.

Podemos resumir o movimento pela relação $X(t) = X(t - 1) \pm \delta$, onde o fator aleatório é a soma ou subtração do fator δ e verificar o tipo de comportamento que emerge ao longo do tempo. Na figura 3.1 podemos observar uma realização de um passeio aleatório sob estas regras.

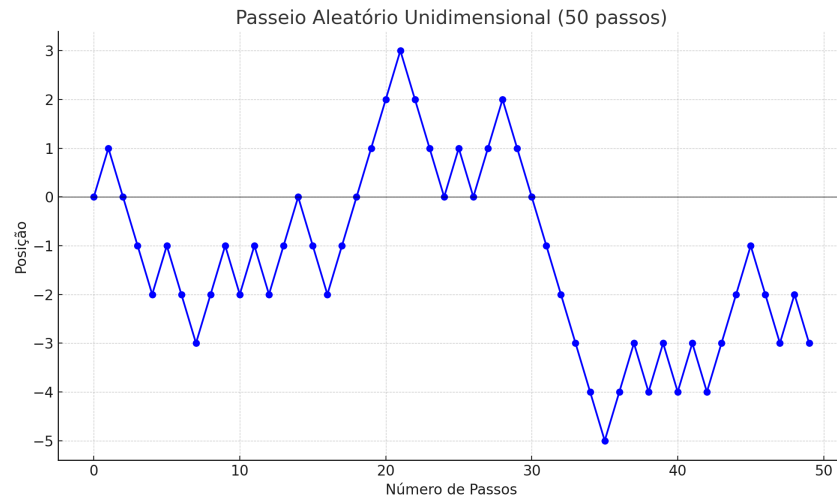


Figura 3.1: Simulação computacional de um passeio aleatório unidimensional para 50 passos e probabilidades de movimento iguais em ambas as direções. Observamos o comportamento errático do caminho em todos os passos. Fonte: Elaboração própria (2023).

3.2 Propriedades de passeios aleatórios discretos

3.2.1 Média e variância

Utilizando a definição anterior, se fizermos múltiplos experimentos e os compararmos em um mesmo gráfico, observaremos um resultado como o da Figura 3.2:

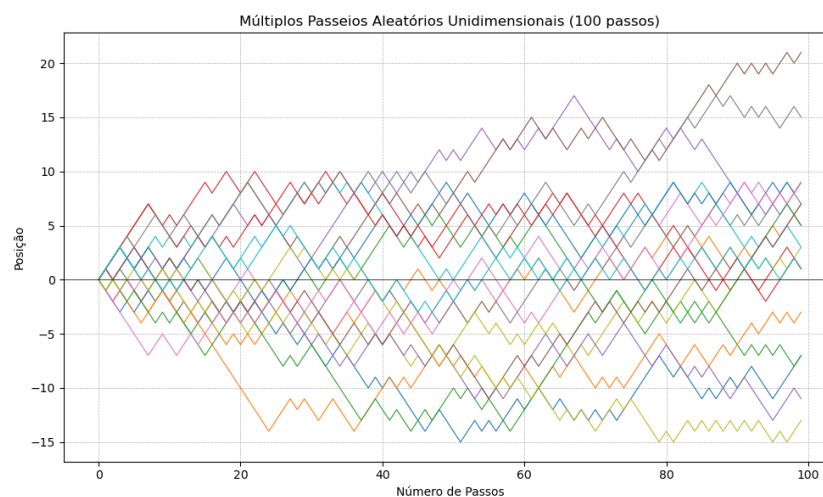


Figura 3.2: Simulação computacional de vários passeios aleatórios unidimensionais em 100 passos. O comportamento difusivo do conjunto de caminhos fica evidente. Fonte: Elaboração própria (2023).

Algumas propriedades que podem ser extraídas desses exemplos são a existência de uma *posição média* e uma tendência dos caminhos se *espalharem* da posição inicial. A posição média pode ser facilmente obtida através do valor esperado da posição $E(X(t)) =$

$\langle X(t) \rangle$ onde

$$\begin{aligned} \langle X(t) \rangle &= \langle X(t-1) \pm \delta \rangle \\ &= \langle X(t-1) \rangle + \delta[P(+)-P(-)] \\ &= \langle X(0) \rangle + t\delta[P(+)-P(-)] , \end{aligned} \tag{3.1}$$

onde $P(+)$ e $P(-)$ são as probabilidades de haver uma soma ou subtração na posição da partícula, respectivamente. Quando $P(+)\neq P(-)$ há uma tendência de deslocamento para um dos lados. Se $X(0)=0$ e $P(+)=P(-)$, a média da posição será na origem.

Agora, considere a sua propriedade de dispersão. A propriedade de dispersão em um passeio aleatório refere-se à maneira como as trajetórias individuais tendem a se afastar da origem à medida que o número de passos aumenta. Então, seja $X(0)=0$ e $P(+)=P(-)$, o valor esperado do quadrado da posição para o primeiro passo será sempre $\langle X^2(1) \rangle = \delta$, uma vez que $X(1) = \pm\delta$. Recursivamente, sabemos que [8]

$$X^2(t) = (X(t-1) \pm \delta)^2 , \tag{3.2}$$

o que nos leva à conclusão de que

$$X^2(t) = \begin{cases} X^2(t-1) + 2\delta X(t-1) + \delta^2, \\ X^2(t-1) - 2\delta X(t-1) + \delta^2. \end{cases} \tag{3.3}$$

onde ambos os casos possuem igual probabilidade. Consequentemente,

$$\langle X^2(t) \rangle = \langle X^2(t-1) \rangle + \delta^2 . \tag{3.4}$$

Pela Equação (3.1) temos recursivamente $\langle X^2(t) \rangle = t\delta^2$, ou

$$\langle X^2(t) \rangle = 2Dt . \tag{3.5}$$

Na literatura, define-se $D = \frac{\delta^2}{2\tau}$, onde τ é um tempo característico, aqui considerado como unitário e D é chamado de coeficiente de difusão, que será abordado nos próximos

capítulos. Assim, a raiz do valor quadrático médio é

$$\langle X^2(t) \rangle^{\frac{1}{2}} = \delta\sqrt{t}. \quad (3.6)$$

Isso pode ser interpretado como a distância média dos caminhos estando a uma distância proporcional a \sqrt{t} da origem após t passos.

3.2.2 Distribuição

Um passeio aleatório discreto com deslocamento unitário é formado por uma soma de variáveis aleatórias que possuem valor $\pm\delta$. Podemos decompor um caminho com base nesses incrementos, onde $X(t) - X(t-1) = \pm\delta$, onde esses incrementos são i.i.d., também chamados de independentes e estacionários. Veremos mais sobre esta propriedade no capítulo seguinte.

Podemos montar incrementos de qualquer tamanho, como por exemplo $I = X(t) - X(t-s)$, onde $t \geq s$ e ambos t e s são números naturais.

O incremento I é uma variável aleatória que possui distribuição estatística dada pela distribuição binomial:

$$P(I) = \binom{s}{(I+s)/2} P(+)^{(I+s)/2} P(-)^{(s-I)/2}, \quad (3.7)$$

onde $P(I)$ é a probabilidade de um incremento ser igual ao valor I , podendo ser positivo ou negativo.

Um comportamento emergente que ocorre nos passeios aleatórios simples é que os seus incrementos, como definidos na subseção 3.1, respeitam os requisitos para a aplicação do teorema do limite central. Dessa forma, quando $s \rightarrow \infty$, temos que [7]

$$P(I) = \mathcal{N}(0, s). \quad (3.8)$$

Dessa forma, podemos explorar melhor um aspecto da subseção anterior: a distância média dos caminhos está a uma distância proporcional a \sqrt{t} da origem após t passos. Podemos compreender essa propriedade através do valor esperado da distância de uma partícula até a origem após t passos, para $t \rightarrow \infty$. Em uma dimensão isso é equivalente

ao calculo:

$$E[|X|] = 2 \frac{1}{\sqrt{2t\pi}} \int_0^{\infty} x \exp \left[-\frac{(x)^2}{2t} \right] dx = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sqrt{t}. \quad (3.9)$$

De fato, o valor esperado da distância das partículas até a origem, em uma dimensão, dado um certo tempo t é igual a $\sqrt{\frac{2}{\pi}} \sqrt{t}$.

3.3 Passeio aleatório em múltiplas dimensões

Podemos construir um passeio aleatório em múltiplas dimensões a partir de uma generalização dos conceitos anteriores. Definimos que o movimento em direções ortogonais possuem independência estatística, ou seja, o movimento em cada direção perpendicular pode ser visto como um passeio aleatório independente.

Assim, podemos definir um passeio aleatório multidimensional como um vetor $(X(t), Y(t), \dots)$, composto por um passeio aleatório independente para cada componente. Quando assim definido, o movimento das partículas é computado simultaneamente em todas as direções, tornando o movimento diagonal. Muitas das propriedades básicas pertencentes aos passeios aleatórios em 1 dimensão são herdadas pelos passeios aleatórios em 2 dimensões. Particularmente, isso ocorre com todas as propriedades abordadas neste trabalho.

A partir de passeios aleatórios em duas dimensões, começamos a notar de forma mais evidente algumas características visuais do passeio aleatório. Entre elas, notamos o surgimento de segmentos que exploram uma região local, enquanto que outros segmentos realizam grandes deslocamentos de uma região para outra.

Em três dimensões esse comportamento, como esperado, continua, mas agora de forma espacial. Nas Figuras 3.3 e 3.4 podemos observar realizações de múltiplas caminhadas em 2 e 3 dimensões.

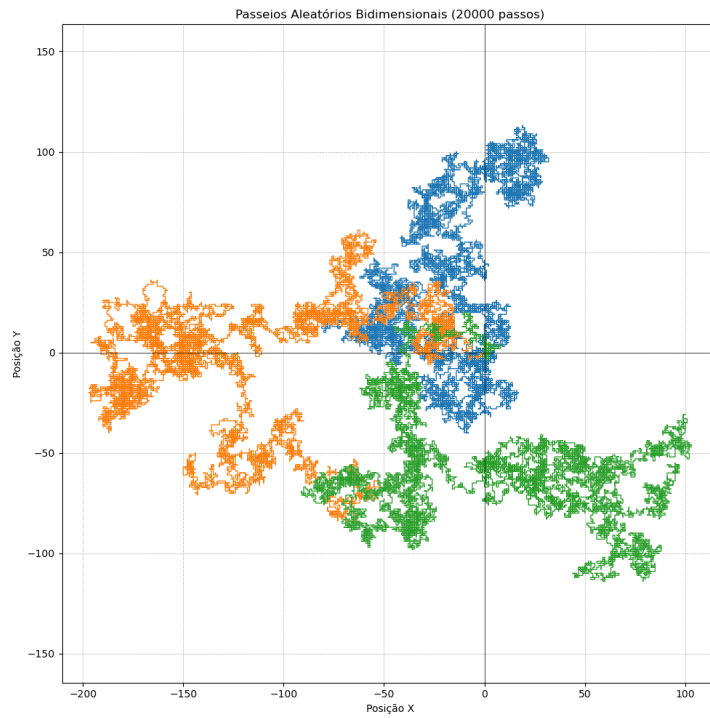


Figura 3.3: Simulação computacional de três passeios aleatórios 2-dimensionais. Em cores distintas estão realizações diferentes do passeio aleatório. Fonte: Elaboração própria (2023).

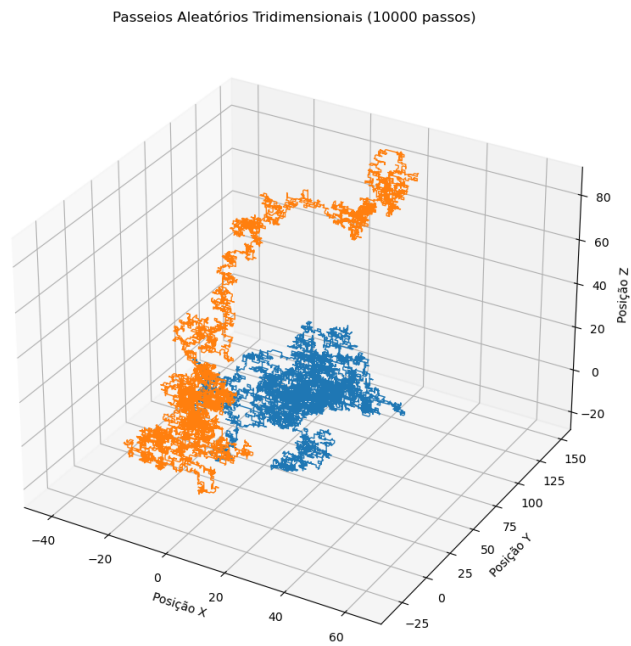


Figura 3.4: Simulação computacional de dois passeios aleatórios 3-dimensionais. Em cores distintas estão realizações diferentes do passeio aleatório. Fonte: Elaboração própria (2023).

Capítulo 4

Movimento Browniano

4.1 Motivação histórica

Movimento Browniano é o nome dado ao movimento do pólen suspenso na água, inicialmente observado por Robert Brown em 1828 [9]. Mais tarde foi descrito matematicamente por Albert Einstein no início do século 20 [10]. Einstein mostrou que esse movimento era resultado das colisões das partículas com as moléculas do fluido, uma evidência importante para a teoria atômica da matéria. Além disso, o estudo da matemática desse movimento foi importante para entender melhor o processo da difusão, bem como muitos outros fenômenos em muitas outras áreas do conhecimento.

4.2 Convergência do passeio aleatório para o movimento Browniano

O movimento Browniano é um tipo de passeio aleatório em um regime contínuo. Mais especificamente, se tomarmos um passeio aleatório simples e observamos em uma grande escala, o movimento se aproxima de um movimento Browniano. Este resultado advém do teorema de Donsker [11]. Seja $S_n = \xi_1 + \dots + \xi_n$ uma soma parcial de n variáveis aleatórias ξ independentes e identicamente distribuídas (iid), com média $\mu = 0$ e variância $\sigma^2 \geq 0$ finita, este objeto é um passeio aleatório. Agora, seja ω um caminho escolhido do espaço amostral Ω , então

$$X_n(t, \omega) = \frac{1}{\sigma\sqrt{n}} S_{[nt]}(\omega) . \quad (4.1)$$

- O termo à direita é uma aproximação discreta do caminho que termina no ponto respectivo ao tempo $[t]$, onde os colchetes representam a parte inteira do número.
- O termo $\frac{1}{\sqrt{n}}$ é um termo de reescalonamento típico para garantir que a não divergência da variância do processo quando $n \rightarrow \infty$.
- O termo $S_{[nt]}$ representa os valores da trajetória ω em tempos discretos até $\frac{[nt]}{n}$, onde cada intervalo de tempo contínuo t é discretizado em n pequenos intervalos. Isso implica que a precisão da trajetória é garantida nos pontos discretos. O valor de n age como um controlador da resolução da trajetória.

Dessa forma, o teorema de Donsker diz que, à medida que n cresce,

$$X_n(t, \omega) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} W(t) , \quad (4.2)$$

onde $W(t)$ é chamado de processo de Wiener [11]. Neste trabalho utilizaremos a notação $B(t)$ para se referir à posição no tempo t de um movimento Browniano realizado através do processo de Wiener. Observe na Figura 4.1 como um passeio aleatório discreto passa a convergir para um movimento browniano sob transformação de escala.

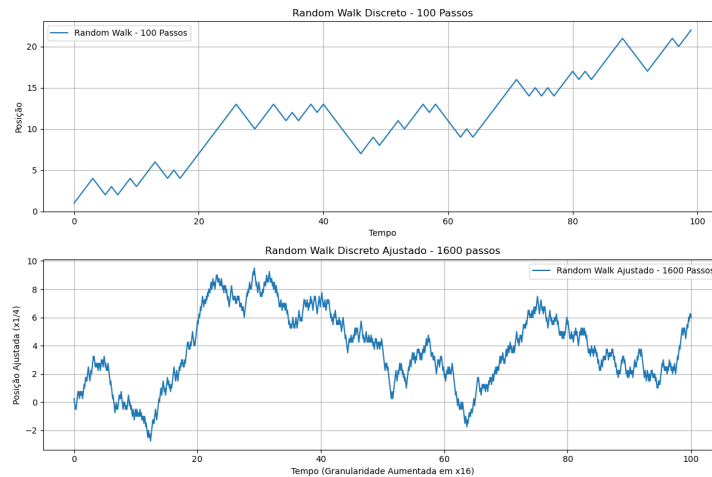


Figura 4.1: Comparação de dois passeios aleatórios sob diferentes níveis de granularidade. O segundo passeio aleatório foi realizado com 1600 passos, mas reescalado em $1/4$ espacialmente e $1/16$ temporalmente para demonstrar a convergência para um movimento browniano. Fonte: Elaboração própria (2023).

4.3 Propriedades do processo de Wiener

4.3.1 Continuidade e não-diferenciabilidade

O processo de Wiener é dito *quase certamente* contínuo e *quase certamente* não diferenciável em todos os pontos. Isso implica que o caminho não possui saltos ou discontinuidades. Porém, devido à sua natureza fractal, não apresenta derivada definida em qualquer ponto [12].

O termo *quase certamente* possui um significado específico: Seja $A \in \mathbf{F}$ um conjunto que contém todos os caminhos $\omega \in \Omega$ que possuem algum ponto onde *não* são contínuo ou *são* diferenciáveis, então $P(A) = 0$. Em outras palavras, se a probabilidade de um subconjunto é dada pela densidade desse subconjunto em Ω , então o subconjunto $A \subset \Omega$ possui densidade zero em Ω .

4.3.2 Incrementos independentes, estacionários e a propriedade de Markov

Uma das características fundamentais do movimento Browniano é a independência entre seus incrementos. Em termos simples, isso significa que incrementos do movimento Browniano, em intervalos de tempo não sobrepostos, não possuem qualquer correlação estatística. Considere o conjunto de tempos não sobrepostos $0 \leq t_1 < t_2 \leq t_3 < t_4$.

Então os incrementos $B(t_2) - B(t_1)$ e $B(t_4) - B(t_3)$ são independentes entre si, ou seja, o primeiro incremento não influencia no desenvolvimento do segundo incremento. Logo,

$$\text{Cov}[B(t_2) - B(t_1), B(t_4) - B(t_3)] = 0 . \quad (4.3)$$

Além de serem independentes, os incrementos do Movimento Browniano são estacionários. Isso indica que a distribuição estatística de um incremento $B(t+h) - B(t)$ é a mesma para todo t [12]. Ou seja, a distribuição não depende de qual instante começamos a observar.

A junção dessas duas propriedades pode ser abreviada pelo termo independentes e identicamente distribuídas (i.i.d.). Embora relacionada, a propriedade de independência dos incrementos não deve ser confundida com a propriedade de Markov do Movimento Browniano. Enquanto a independência se refere à natureza não correlacionada da distribuição de diferentes incrementos, a propriedade de Markov afirma que a distribuição futura do processo depende apenas do estado atual e não do caminho passado. A cada instante, é como se o movimento começasse novamente no tempo $t = 0$, mas a partir da posição atual.

4.3.3 Média, variância e covariância

O movimento Browniano padrão herda suas propriedades de média, variância e covariância do passeio aleatório padrão. Assim como no passeio aleatório padrão, a sua média, dada pelo valor esperado, é

$$E[B(t)] = 0 . \quad (4.4)$$

A sua variância é proporcional ao tempo e, por uma questão de construção, é igual a este

$$\text{Var}[B(t)] = t . \quad (4.5)$$

Podemos calcular a covariância através das propriedades até aqui apresentadas. Considere $\text{Cov}[B(s), B(t)]$ para $s < t$. Temos por definição da covariância

$$\text{Cov}[B(s), B(t)] = E[(B(s) - E[B(s)])(B(t) - E[B(t)])] . \quad (4.6)$$

Usando a Equação 4.4 e tratando $B(t) = B(s) + (B(t) - B(s))$ como dois incrementos, obtemos [12]

$$\begin{aligned}
 \text{Cov}[B(s), B(t)] &= E[(B(s) - \underbrace{E[B(s)]}_0)(B(t) - \underbrace{E[B(t)]}_0)] \\
 &= E[B(s)B(t)] \\
 &= E[\underbrace{(B(s)(B(t) - B(s))}_0) + B(s)B(s)] \\
 &= E[B(s)^2] \\
 &= s ,
 \end{aligned} \tag{4.7}$$

onde decompos $B(t) = (B(t) - B(s)) + B(s)$ e utilizamos a propriedade da independência estatística dos incrementos apresentados na Equação (4.3).

4.3.4 Distribuição Normal

O movimento Browniano, devido à sua natureza, é construído a partir de uma série contínua de incrementos estatisticamente independentes e estacionários. Estes incrementos, quando somados, podem ser vistos como uma sequência de médias de variáveis aleatórias i.i.d. Semelhante ao passeio aleatório, podemos invocar o Teorema do Limite Central, que estabelece que a soma (ou média) de um número suficientemente grande de variáveis aleatórias i.i.d., cada uma com média e variância finitas, terá uma distribuição que se aproxima de uma distribuição normal, independentemente da distribuição original das variáveis.

Considere o incremento $B(t) - B(s)$ para $s < t$ com média zero e variância $t - s$. Podemos expressar este incremento como:

$$B(t) - B(s) \sim \mathcal{N}(0, t - s) , \tag{4.8}$$

onde $\mathcal{N}(0, t - s)$ é uma distribuição normal com média 0 e variância $t - s$. Esta distribuição descreve a probabilidade da partícula se deslocar para cada distância do ponto atual, com probabilidade uniforme em qualquer direção.

4.3.5 Isotropia do Movimento

Quando consideramos um movimento Browniano para duas ou mais dimensões, devemos considerar a sua distribuição do movimento para cada direção individualmente. Em um movimento Browniano padrão, a distribuição estatística é igual em todos os eixos. Seja $P(\Delta x, \Delta t)$ a probabilidade do movimento Browniano se deslocar por uma distância Δx após um tempo Δt dada por

$$P(\Delta x, \Delta t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta t}} \exp\left(-\frac{\Delta x^2}{2\Delta t}\right). \quad (4.9)$$

Então a probabilidade de deslocamento do movimento Browniano por um vetor $(\Delta x, \Delta y)$, dado que ambas as direções são independentes, é dada pela conjunção das probabilidades:

$$\begin{aligned} P(\Delta x, \Delta y, \Delta t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta t}} \exp\left(-\frac{\Delta x^2}{2\Delta t}\right) \exp\left(-\frac{\Delta y^2}{2\Delta t}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta t}} \exp\left(-\frac{\Delta x^2 + \Delta y^2}{2\Delta t}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta t}} \exp\left(-\frac{\Delta r^2}{2\Delta t}\right), \end{aligned} \quad (4.10)$$

onde Δr é a distância da posição atual até o ponto antes do deslocamento. Este resultado é uma consequência do movimento Browniano possuir incrementos i.i.d. e a propriedade de Markov.

4.3.6 Comportamento sob transformações de escala

O movimento Browniano, além de suas características fundamentais, apresenta propriedades adicionais que têm implicações profundas em sua análise e aplicações. Algumas delas, como o comportamento em largas escalas oferecem *insights* sobre a natureza universal e auto-similar do Movimento Browniano. Uma propriedade bastante interessante do movimento Browniano, que advém da sua origem como sendo um limite de escala para o passeio aleatório padrão, é a sua invariância de escala, que se refere à ideia de que o movimento Browniano possui uma estrutura auto-similar. Isso significa que existe uma transformação na escala temporal e espacial que preserva as propriedades do movimento Browniano, como a sua distribuição.

Seja $B(t) : t \geq 0$ um movimento Browniano, então o processo definido por $\{X(t) :$

$t \geq 0\} = \frac{1}{a}B(a^2t)$, naturalmente, preserva as propriedades de *quase certamente* continuidade e não-diferenciabilidade, independência e estacionaridade dos incrementos. Resta saber se preserva as propriedades de média e variância.

Uma vez que a média inicial é zero, uma mudança de escala não modifica essa média. A variância dos incrementos $X(t) - X(s) = \frac{1}{a}(B(a^2t) - B(a^2s))$ para $s \leq t$ pode ser calculada por

$$\begin{aligned}\text{Var}(X(t) - X(s)) &= \text{Var}\left[\frac{1}{a}(B(a^2t) - B(a^2s))\right] \\ &= \frac{1}{a^2}(a^2t - a^2s) \\ &= t - s ,\end{aligned}\tag{4.11}$$

não é modificada. Enquanto que a covariância também se mantém a mesma, dado que a média e a variância não mudam. Logo, o processo resultante também é um movimento Browniano, com as exatas mesmas propriedades [12]. Uma consequência desse resultado é a propriedade de inversão temporal, onde seja $X(t) : t \geq 0$ definido como

$$X(t) = \begin{cases} 0 & t = 0 , \\ tB(1/t) & t > 0 . \end{cases}\tag{4.12}$$

Aqui, $X(t)$ também é um movimento Browniano com as mesmas propriedades de $B(t)$. Essa é uma propriedade contraintuitiva mas bastante útil para a dedução de certas propriedades. Uma delas a lei dos grandes números, que diz que, *quase certamente*,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{B(t)}{t} = 0 .\tag{4.13}$$

Esse é um resultado que mostra que a probabilidade de um movimento Browniano crescer a uma velocidade maior ou igual a uma função linear é igual a zero. Isso coloca um limite superior na taxa de expansão de um movimento Browniano que podemos esperar após observar o movimento por longos períodos de tempo.

Capítulo 5

Leis de Fick e simulações

5.1 Processo de difusão

A difusão é um fenômeno caracterizado pelo transporte de matéria de uma região para outra dentro de um sistema devido ao movimento aleatório das partículas constituintes. Embora um dos exemplos mais conhecidos de difusão seja através do movimento browniano das partículas, a difusão também através do transporte de íons, na condução do calor em sólidos e em muitos outros sistemas. Essencialmente, este processo direciona as partículas de locais com maior concentração para locais com menor concentração. Essa descrição não se limita somente a partículas, mas para qualquer propriedade quantizável que evolua no tempo através de um passeio aleatório [13].

5.2 Primeira Lei de Fick

A lei de Fick proporciona uma descrição matemática do processo de difusão que ocorre em sistemas contínuos. Podemos deduzi-la através de uma análise de um passeio aleatório discreto. Considere um sistema de partículas que se movem de acordo com um passeio aleatório unidimensional construído com os seguintes parâmetros para o eixo X :

- Seja $\langle v_x^2 \rangle$ a velocidade média quadrática das partículas de um sistema.
- O tamanho do passo pode ser dado por $\delta = \pm v_x \tau$, τ é um tempo característico constante que representa o nosso intervalo de iteração.
- $P(+) = P(-)$.

Assim, se sabemos a quantidade de partículas em cada ponto em uma reta em um tempo t , após um tempo τ , $\frac{N(x)}{2}$ partículas irão para a direita e $\frac{N(x+\delta)}{2}$ virão da direita, onde $N(x)$ é o número de partículas no ponto x . Com base nisso, podemos definir o fluxo J_x de partículas por unidade de área como:

$$J_x = -\frac{1}{2A\tau}[N(x+\delta) - N(x)] , \quad (5.1)$$

onde A é a porção da área perpendicular ao fluxo J_x sob consideração. Rearranjando termos, obtemos:

$$J_x = -D\frac{1}{\delta}[C(x+\delta) - C(x)] , \quad (5.2)$$

onde $D = \frac{\delta^2}{2\tau}$ é o coeficiente de difusão e $C(x) = \frac{N(x)}{A\delta}$ define a concentração de partículas no ponto x . No limite de escala para $\delta \rightarrow 0$, a expressão acima converge para

$$J_x = -D\frac{\partial C}{\partial x} . \quad (5.3)$$

Esta expressão é conhecida como Lei de Fick ou Primeira Equação de Fick, que afirma que o fluxo de partículas na direção X em um área infinitesimal é proporcional ao gradiente de concentração naquele ponto.

Quando a concentração é uma função constante de x , dizemos que o sistema está em equilíbrio e $J_x = 0$. Uma vez em equilíbrio, o sistema permanecerá em equilíbrio e a função $C(x, t)$ permanecerá constante, uma vez que não há fluxo [7].

5.3 Segunda Lei de Fick

A segunda lei de Fick descreve como a variação espacial e temporal da distribuição de matéria se relacionam. A partir da primeira lei de Fick, sabemos que, após um período de tempo τ , a variação no número de partículas em um ponto é equivalente ao ganho de partículas vindas do fluxo $J_{x+\delta}$ a partir da direita menos as vindas do fluxo líquido J_x a partir da esquerda. Assim, obtemos:

$$\delta[C(t+\tau) - C(t)] = -\tau[J_x(x+\delta) - J_x(x)]$$

$$\implies \frac{1}{\tau}[C(t + \tau) - C(t)] = -\frac{1}{\delta}[J_x(x + \delta) - J_x(x)] \quad (5.4)$$

No limite onde $\tau, \delta \rightarrow 0$, obtemos:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial J_x}{\partial x} . \quad (5.5)$$

Substituindo a Equação (5.3) em em (5.5) obtemos

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} . \quad (5.6)$$

Esta é a segunda equação de Fick que descreve a evolução temporal da função de concentração. Se soubermos a distribuição inicial de um sistema e as condições de contorno, podemos utilizar a segunda lei de Fick para encontrar todas as distribuições posteriores [7].

5.4 Passeios Aleatórios como Modelo de Difusão

A difusão é frequentemente descrita em termos de equações diferenciais contínuas, como as leis de Fick. No entanto, modelos simplificados, como passeios aleatórios, podem ser úteis e intuitivos. Embora a difusão em fluidos seja predominantemente um resultado do movimento browniano das moléculas, conforme discutido no capítulo anterior, o comportamento difusivo pode ser aproximado por um simples *random walk*.

Ao modelar a difusão através de passeios aleatórios, utilizamos partículas que dão passos aleatórios em um espaço definido. Para esta simulação, o espaço foi considerado unidimensional, com partículas começando no centro. O tamanho do passo e a frequência desses passos são unitários.

Usar passeios aleatórios para modelar a difusão não apenas fornece uma alternativa mais intuitiva, mas também é flexível e adaptável para cenários não triviais. Na figura 5.1, é apresentada uma simulação que compara a difusão livre usando passeios aleatórios e a solução numérica da lei de Fick.

A figura 5.1 ilustra que, mesmo com uma quantidade razoavelmente pequena de partículas, a modelagem utilizando passeio aleatórios consegue capturar o comportamento esperado da difusão, como descrito pelas leis de Fick. Isso tem implicações significativas,

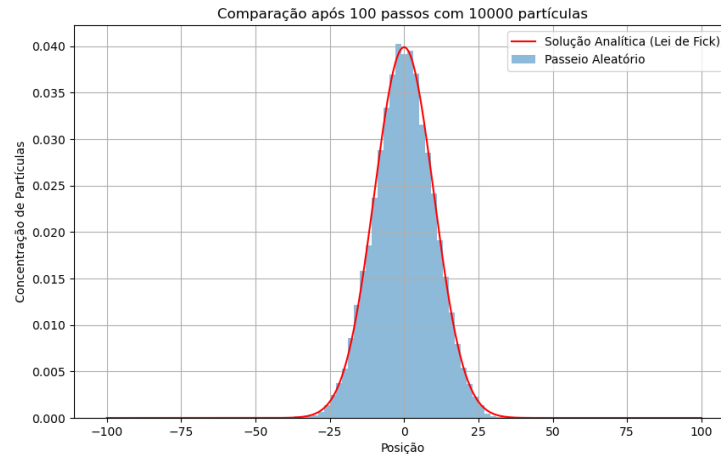


Figura 5.1: Comparação entre a solução analítica da lei de Fick e uma simulação em passeios aleatório para uma difusão livre. Fonte: Elaboração própria (2023).

especialmente em cenários onde abordagens analíticas são complexas ou impraticáveis. Podemos reproduzir outros exemplos clássicos de difusão para ilustrar esta abordagem.

5.4.1 Exemplo: Difusão em um cano unidimensional

Podemos exemplificar a difusão através de uma simulação em um cano limitado unidimensional. Os parâmetros que definem o sistema são:

- **Domínio:** Ambiente unidimensional limitado a um certo intervalo $[-a, a]$.
- **Condições do ambiente:** Espaço homogêneo, isotrópico.
- **Condição inicial:** $C(x, 0) = x + a$.
- **Condições de contorno:**
 1. Para a simulação usando a lei de Fick temos $\frac{\partial C}{\partial x}(\pm a) = 0$;
 2. Para o passeio aleatório temos que o movimento é refletido quando $X(t) = \pm a$, ou seja, $X(t + 1) = \pm a \mp 1$.

Como ilustrado na figura 5.2:

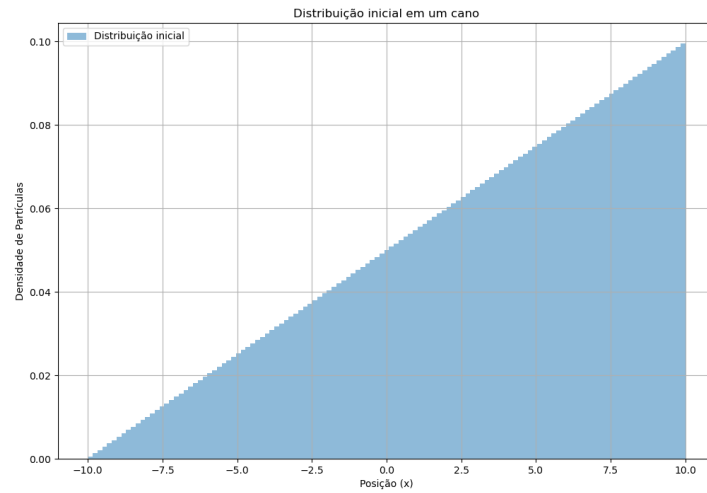


Figura 5.2: Distribuição inicial de partículas em um cano unidimensional. Fonte: Elaboração própria (2023).

Após realizar ambas as simulações em Python para diferentes tempos, obtemos os resultados ilustrados na figura 5.3.

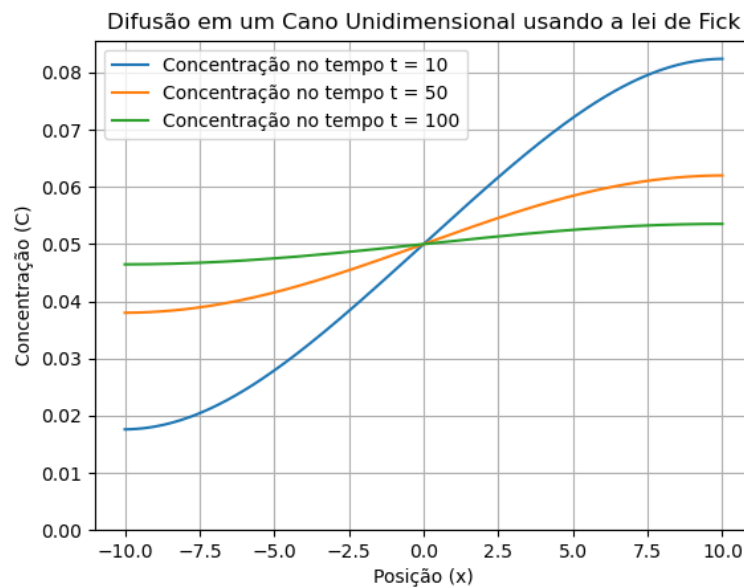


Figura 5.3: Simulação da evolução temporal da difusão usando a lei de Fick em um cano onde a concentração inicial é linear. Fonte: Elaboração própria (2023).

A simulação da figura 5.3 foi feita através da resolução das leis de Fick para as condições iniciais descritas. Obtivemos os valores para diferentes tempos. Observe que a distribuição adquire um formato curvado e se aproxima assintoticamente do estado de equilíbrio.

Igualmente, podemos fazer a mesma simulação, mas utilizando o método de passeios

aleatórios discretos, como na figura 5.4. Observe que o resultado apresenta o mesmo comportamento da simulação utilizando a lei de Fick.

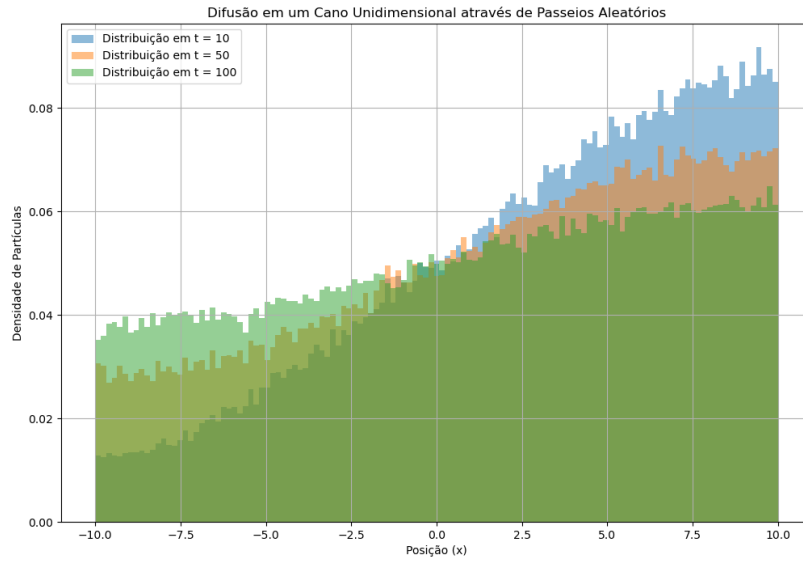


Figura 5.4: Simulação em passeios aleatórios da evolução temporal da difusão em um cano onde a concentração inicial é linear. Fonte: Elaboração própria (2023).

Capítulo 6

Difusão anômala em passeios aleatórios

6.1 Regimes de difusão

A difusão, quando simulada através de passeios aleatórios, está intimamente relacionada com a variância da distribuição dos passos. Mais especificamente, vimos anteriormente que quando a média do deslocamento de um passeio aleatório $\mu = 0$, a variância será $\sigma^2 = \langle X^2 \rangle$. Em outras palavras, o comportamento do deslocamento quadrático médio regula a amplitude da difusão em um passeio aleatório.

Até aqui, trabalhamos com regimes onde $\langle (X(t) - X(s))^2 \rangle \propto t - s$ para $t > s \geq 0$. Mas alguns regimes difusivos podem possuir deslocamentos quadráticos médios com proporcionalidade diferente. Chamamos esses casos de regimes de difusão anômala. Assim, podemos generalizar a difusão com base nessa proporcionalidade, mais especificamente estamos buscando descrever um regime difusivo como possuindo o comportamento de $\langle (X(t) - X(s))^2 \rangle \propto (t - s)^\alpha$. O valor de α caracteriza o tipo de difusão [14, 15, 17, 18]:

- Para $\alpha = 1$ temos o regime difusivo normal, como visto por exemplo no movimento browniano, mas mais especificamente em qualquer passeio aleatório onde seus incrementos respeitem os requisitos para o limite do teorema central.
- Para $\alpha \geq 1$ temos o chamado regime superdifusivo. Neste regime, o deslocamento quadrático médio esperado é maior do que uma função linear do tempo, implicando uma difusão muito mais rápida.
- Para $0 \leq \alpha \leq 1$ obtemos os regimes subdifusivos. Nestes regimes, a difusão é menor do que na difusão normal.

Observe na figura 6.1 uma comparação dos crescimentos dos deslocamentos quadráticos médios.

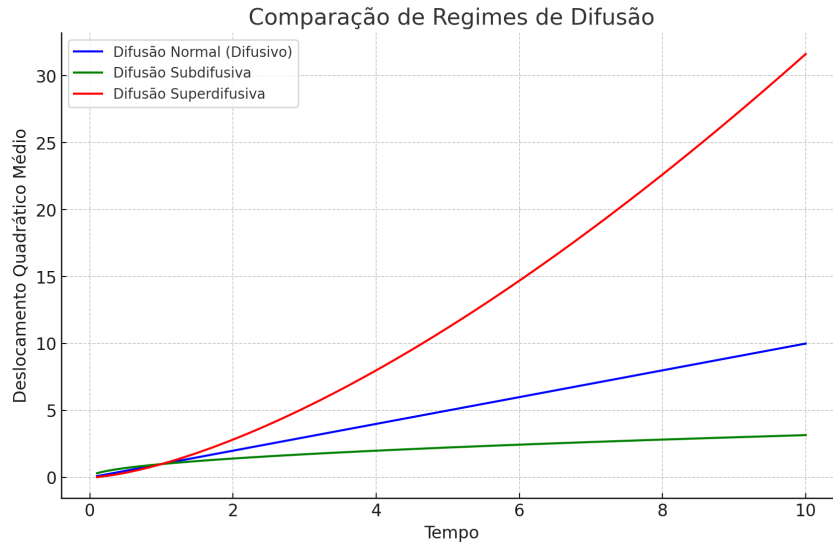


Figura 6.1: Comparação entre o crescimento dos deslocamentos quadráticos médios para diferentes regimes de difusão. Fonte: Elaboração própria (2023).

Esses regimes anômalos são obtidos a partir de distribuições especiais através da introdução de certos tipos de heterogeneidades no espaço que estamos trabalhando. Assim, algumas equações que descrevem a difusão normal, como as leis de Fick, que são deduzidas a partir de condições características da difusão normal, não são capazes de descrever a difusão anômala [14]. Assim, utilizar simulações com passeios aleatórios se torna uma alternativa interessante ou mesmo necessária.

6.2 Superdifusão

A superdifusão é um processo onde a difusão escala mais rapidamente do que em uma difusão normal ao longo do tempo. Um exemplo clássico de passeio aleatório que apresenta superdifusão são os voos de Lévy [21], caracterizados por uma distribuição de probabilidade para os deslocamentos com caudas longas. Uma distribuição de probabilidade é dita ter cauda longa se a partir de certo ponto ela passa a decrescer estritamente mais lentamente do que a distribuição normal.

Tipicamente, tais distribuições não obedecem os requisitos do teorema do limite central, como média e variância finitas, o que significa que a soma de suas variáveis aleatórias não converge para uma distribuição normal. Um dos exemplos desse tipo de

distribuição são as funções α -estáveis de Lévy [15]. Esta é uma família de funções estáveis sob convolução, sendo a própria distribuição normal parte dessa família [16]. A figura 6.2 ilustra o gráfico de algumas dessas distribuições. Utilizando uma distribuição desse tipo

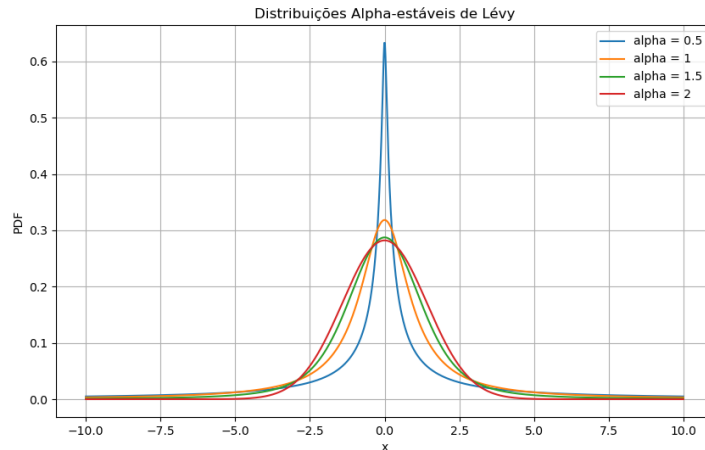


Figura 6.2: Gráfico comparativo das funções α estáveis de Lévy para diferentes valores do parâmetro α . Para $\alpha = 2$, que é o limite, a curva coincide com a distribuição gaussiana. Fonte: Elaboração própria (2023).

para modelar a magnitude dos saltos, podemos simular um voo de Lévy. No caso dos voos de Lévy especificamente assim definidos, características como incrementos independentes e estacionárias são mantidas. Por ser uma distribuição estável sob convolução, podemos esperar que existe uma lei de invariância de escala assim como no movimento browniano.

Os voos de Lévy possuem o comportamento de pequenos deslocamentos seguidos de grandes saltos, como podem ser observados na figura 6.3. Estes saltos permitem ao caminho cobrir grandes distâncias e, conseqüentemente, são responsáveis pelo crescimento do deslocamento quadrático médio ultrapassar um crescimento linear. Exemplos de sistemas onde pode surgir superdifusão são: sistemas de átomos ultra-frios [19], sistemas de massa-mola harmônicos [20] ou até como modelo aproximativo para as trajetórias migratórias em busca de comida de muitos animais [21].

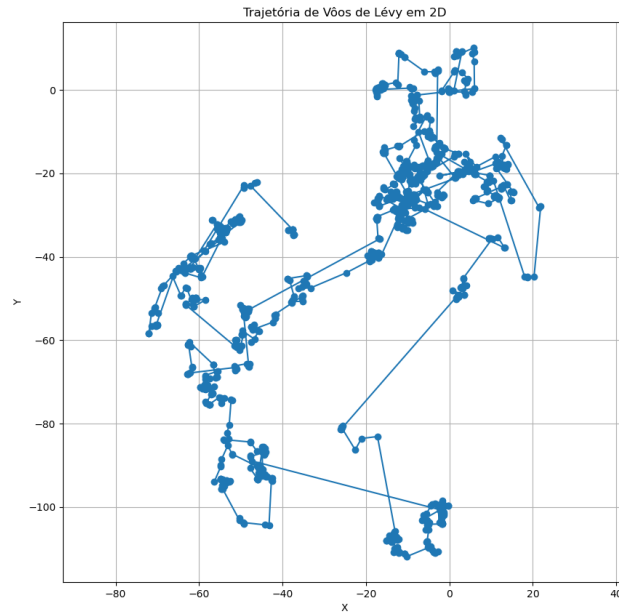


Figura 6.3: Simulação computacional da trajetória de um voo de Lévy. Podemos observar o comportamento de "saltos" repentinos seguidos de pequenas regiões de exploração. Fonte: Elaboração própria (2023).

6.3 Subdifusão

A subdifusão é um processo onde a difusão escala mais lentamente do que em uma difusão normal ao longo do tempo.

Exemplos de regimes de subdifusão são: canais de íons na membrana plasmática [22]; alguns tipos de reservatórios que possuem meios porosos [23]; inclusive alguns tipos de reservatório de petróleo [24].

Um dos cenários que esse regime de difusão pode surgir são em reservatório de hidrocarbonetos, onde petróleo e gás estão presos entre as porosidades no meio. Essa característica leva a caminhos que tendem a explorar áreas muito mais contidas do que nos outros regimes de difusão para grandes tempos.

Tipicamente, para obter um regime subdifusivo, precisamos introduzir obstáculos, outros tipos de heterogeneidades no nosso espaço, algum tipo de correlação entre partículas ou processos de memória. Isso pois, se utilizarmos somente uma distribuição com cauda mais leve do que a distribuição normal e mantendo características como o i.i.d. e $\mu = 0$ e $\sigma > 0$ dos incrementos, tais distribuições convergem para a distribuição normal sob con-

volução, pois obedecem às condições do teorema do limite central, tornando o processo normalmente difusivo para escalas maiores.

Em geral, introduzir subdifusão em um sistema pode ser significativamente mais complexo do que para os outros regimes de difusão. Muitos comportamentos subdifusivos se manifestam somente durante um certo intervalo de tempo, como em alguns passeios aleatórios com viés [15].

Capítulo 7

Considerações finais

Passeios aleatórios são uma maneira simples e eficiente de modelar diversos processos estocásticos da vida real. Com sua abordagem direta e dinâmica flexível, podemos construir uma ampla classe de comportamentos macroscópicos com base em somente regras microscópicas. Exploramos algumas propriedades básicas dos tipos mais simples de passeios aleatórios, explorando desde a sua elegância matemática até a suas aplicabilidades para modelagem de diversos fenômenos.

Em especial, vimos que a difusão é um processo emergente que pode ser bastante influenciada pelas propriedades microscópicas do sistema em consideração. Em muitos casos, o ambiente que estamos considerando pode ser muito complexo para ser analisado analiticamente. Podemos recorrer a uma abordagem microscópica nesses casos através dos passeios aleatórios sem perda significativa de precisão, principalmente para muitas partículas, convertendo a complexidade do ambiente em regras microscópicas que serão responsáveis pela evolução do nosso passeio aleatório e, ultimamente, do comportamento macroscópico do sistema.

Referências Bibliográficas

- [1] Carazza, B. The history of the random-walk problem: considerations on the interdisciplinarity in modern physics. *Riv. Nuovo Cim.* **7**, pp.419–427 (1977).
- [2] Moore, Gregory H., *Zermelo's Axiom of Choice*. Springer-Verlag, 1982, pp. 100–101
- [3] Ross, S.M., *A first course in probability*.
- [4] Papoulis, Athanasios, S. Unnikrishna Pillai. *Probability, random variables and stochastic processes.*, 2002.
- [5] Ross, Sheldon M., *Introduction to probability models*. Academic press, 2014.
- [6] Gikhman, Iosif Il'ich, Anatoliï Vladimirovich Skorokhod. *Introduction to the theory of random processes*. W. B. Saunders, 1969.
- [7] Berg, H.C., *Random walks in biology*. Princeton University Press, p.142 (1993).
- [8] Feynman, Richard P., Robert B. Leighton, Matthew Sands. *Six easy pieces: Essentials of physics explained by its most brilliant teacher*. Basic Books, 2011.
- [9] Karatzas, Ioannis, Steven Shreve. *Brownian motion and stochastic calculus*. Vol. **113**. Springer Science & Business Media, 2012.
- [10] Einstein, Albert, "Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen", [On the Movement of Small Particles Suspended in Stationary Liquids Required by the Molecular-Kinetic Theory of Heat]. *Annalen der Physik (in German)*., **322 (8)**, pp.549–560 (1905).
- [11] Billingsley, Patrick. *Convergence of probability measures*. John Wiley & Sons, 2013.

- [12] Mörters, P., Y. Peres. *Brownian Motion*. Cambridge Series in Statistical and Probabilistic Mathematics, Cambridge University Press, New York, 2010.
- [13] Crank, J, *The Mathematics of Diffusion*. 2nd Edition, Oxford University Press, London, 69-88, 1975
- [14] Deng Weihua et al. *Modeling Anomalous Diffusion: From Statistics to Mathematics.*, World Scientific, 2020.
- [15] Pełkalski, Andrzej, Katarzyna Sznajd-Weron. *Anomalous diffusion: from basics to applications*. Berlin/Heidelberg, Germany: Springer, 1999.
- [16] Nolan, John P. "Univariate Estimation." *Univariate Stable Distributions: Models for Heavy Tailed Data*. Cham: Springer International Publishing (2020). 159-222.
- [17] Sharifi-Viand, A., Mahjani, M.G., Jafarian, M., Investigation of anomalous diffusion and multifractal dimensions in polypyrrole film. *Journal of Electroanalytical Chemistry*, **671**, pp.51-57 (2012).
- [18] Evangelista, Luiz Roberto, Ervin Kaminski Lenzi. *Fractional diffusion equations and anomalous diffusion*. Cambridge University Press (2018).
- [19] Sagi, Y., Brook, M., Almog, I. Davidson, N., Observation of anomalous diffusion and fractional self-similarity in one dimension. *Physical review letters*, **108**(9), p.093002 (2012).
- [20] Katz, O.S., Efrati, E., Self-driven fractional rotational diffusion of the harmonic three-mass system. *Physical review letters*, **122**(2), p.024102 (2019).
- [21] Viswanathan, G.M., Raposo, E.P., Da Luz, M.G.E., Lévy flights and superdiffusion in the context of biological encounters and random searches. *Physics of Life Reviews*, **5**(3), pp.133-150 (2008).
- [22] Weigel, A.V., Simon, B., Tamkun, M.M. Krapf, D., Ergodic and nonergodic processes coexist in the plasma membrane as observed by single-molecule tracking. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, **108**(16), pp.6438-6443 (2011).

- [23] Razminia, K., Razminia, A., Shiryaev, V.I., Application of fractal geometry to describe reservoirs with complex structures. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, **82**, p.105068 (2020).
- [24] Obembe, A.D., Abu-Khamsin, S.A., Hossain, M.E., Mustapha, K., Analysis of sub-diffusion in disordered and fractured media using a Grünwald-Letnikov fractional calculus model. *Computational Geosciences*, **22**, pp.1231-1250 (2018).