

## Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

---

# Um estudo sobre Fenômenos com Difusão Anômala através de simulações pelo Método de Monte Carlo

Luiz Otávio R. A. Sereno<sup>1</sup>

Departamento de Matemática e Estatística, PUC-MG, Belo Horizonte, MG

Ana Paula de Paiva Pereira<sup>2</sup>

Unifei - Campus Itabira, Itabira, MG

João Paulo Oliveira Fernandes<sup>3</sup>

CEFET-MG, Belo Horizonte, MG

Allbens Atman Picardi Faria<sup>4</sup>

Departamento de Física e Matemática, CEFET-MG, Belo Horizonte, MG

National Institute of Science and Technology in Complex Systems - INCT-SC, Rio de Janeiro, RJ

José Luiz Acebal<sup>5</sup>

Departamento de Física e Matemática, CEFET-MG, Belo Horizonte, MG

**Resumo.** O estudo dos fenômenos que apresentam difusão anômala pode ser realizado por meio de diferentes abordagens. Para a descrição da dispersão de um conjunto de partículas, em grande escala, equações de difusão generalizadas por meio de derivadas fracionárias, no tempo e/ou no espaço, têm sido amplamente utilizadas. Por outro lado, em pequena escala, simulações computacionais baseadas em caminhadas aleatórias também são utilizadas para modelar a dispersão de populações. Neste trabalho, utilizaremos simulações através do método estocástico de Monte Carlo para o estudo dos processos de Difusão Anômala.

**Palavras-chave.** Difusão anômala, Caminhada Aleatória, Monte Carlo

## 1 Introdução

Na Física, a difusão é frequentemente descrita através de uma relação de dispersão entre o desvio quadrático médio,  $dqm(t)$  e o tempo, por meio de uma lei de potência  $dqm(t) \sim Dt^\alpha$ , onde  $D$  é o coeficiente de difusão e  $t$  é o tempo decorrido. Em um típico processo de difusão conhecido como difusão normal, temos  $\alpha = 1$  [5]. Neste caso, o processo subjacente em pequena escala é o movimento browniano das partículas. Em grandes escalas, esse processo é descrito pela equação de difusão clássica, cuja solução é um função de densidade de probabilidade (PDF) no espaço gaussiana, porém evoluindo

---

<sup>1</sup>otaviosereno@gmail.com

<sup>2</sup>anapereira@unifei.edu.br

<sup>3</sup>jjpp.of@hotmail.com

<sup>4</sup>atman@dppg.cefetmg.br

<sup>5</sup>acebal@dppg.cefetmg.br

no tempo. A variância associada a esta solução obedece, portanto, a lei de dispersão na forma de lei de potência.

Na lei de potência que descreve o fenômeno de difusão, caso o expoente seja  $\alpha \neq 1$  o processo difusivo é tratado como difusão anômala, ocorrendo em diversas situações na natureza. Para o caso em que  $\alpha > 1$ , o fenômeno é conhecido como superdifusão. Por outro lado, se  $\alpha < 1$ , o fenômeno é chamado de subdifusão. Recentemente, muitos exemplos de fenômenos foram observados, em variados campos como, por exemplo, os de turbulência, infiltração em meios porosos, controle de poluição, dentre outros [3].

O fenômeno de superdifusão pode ser observado, por exemplo, em sistemas biológicos, nos quais, seres vivos adotam estratégias de busca por alimentos, locomovendo-se segundo o movimento de superdifusão. Estudar estes fenômenos pode ajudar a entender melhor o problema de busca aleatória, avaliando o que seria mais eficiente neste tipo de busca [8]. Já o processo de subdifusão pode ser observado, por exemplo, dentro das células vivas, sendo as moléculas do citoplasma sujeitas a este tipo de fenômeno devido à interação entre as partículas presentes na própria célula [9].

Para compreender melhor a difusão anômala, estudos abordam diversos modelos matemáticos e/ou computacionais para tentar descrever o processo. Um dos mais conhecidos é o de caminhada aleatória de tempo contínuo, introduzido por Montroll e Weiss [1], no qual uma partícula realiza saltos de tamanhos variados aguardando em cada passo um tempo de espera.

A modelagem não-linear é uma abordagem conhecida para descrever uma variedade de fenômenos de difusão anômala complexa, mas difícil de analisar matematicamente e possui um custo computacional elevado para simulações, além de exigir parâmetros que nem sempre estão disponíveis. Alternativamente, podem ser utilizados fractais e derivadas fracionais [3].

Estudos recentes mostram sucesso ao adotar o Cálculo Fracionário em modelos para os quais ocorre difusão anômala em meios complexos [10]. Operadores fracionários podem ser uma ferramenta para modelar e investigar processos com difusão anômala [7].

Para encontrar constantes em modelos matemáticos que se adequem corretamente em simulações computacionais, recorre-se ao processo conhecido como calibração. Estudos recentes descrevem esta tarefa aplicando-a em diversas situações como feito em [5] e [6].

Neste trabalho, utilizaremos simulações baseadas em caminhadas aleatórias de tempo contínuo através do método estocástico de Monte Carlo para o estudo dos processos de difusão anômala.

## 2 Simulações

Para simular a trajetória de partículas que estão sujeitas à difusão anômala, podemos sortear valores para o tempo de espera e para o tamanho de cada salto, ambos através de funções de densidade de probabilidade (FDP). Neste estudo estocástico, cada conjunto de movimentos realizados por uma partícula é chamado de voo aleatório. Consideramos as FDP's:

$$p(x) = \begin{cases} \frac{K}{(x-x_0)^r}, & \text{se } x < x_0 \\ \frac{K}{x^r}, & \text{se } x > x_0 \end{cases} \quad \text{e} \quad p(t) = \frac{C}{(t+e)^s}$$

As funções  $p(x)$  e  $p(t)$  estão associadas aos saltos e aos tempos de espera, respectivamente, sendo  $K$  e  $C$  constantes de normalização. Os voos difusivos são gerados sorteando variáveis aleatórias segundo as distribuições  $p(x)$  e  $p(t)$ . Nesse sentido, utilizamos o método de Monte Carlo [2] pela função inversa para obter valores que indicam como as partículas devem se movimentar, fornecendo os tempos de espera e diferentes comprimentos de saltos. Este método considera uma proporção entre áreas. Desta forma, sorteia-se uma área,  $0 \leq a \leq 1$ . Assim, pode-se escrever

$$a = \int_{-\infty}^{\xi'} p(\xi) d\xi = P(\xi').$$

Então isola-se o evento  $\xi'$  utilizando a técnica da função inversa,

$$\xi' = F^{-1}(a), 0 \leq a \leq 1.$$

Nas simulações foram considerados em cada voo um vetor  $\delta_t$  de  $N$  posições com valores sorteados pelo procedimento citado, contendo os tempos de espera e um segundo vetor  $\delta_x$  de mesmo tamanho com os saltos sorteados. Em seguida, foram criados um vetor com os saltos acumulados  $X_n$  e um outro com os tempos acumulados  $T_n$ , ambos com tamanho  $N$ , sendo que cada posição de  $X_n$  é dada por  $\sum_{k=1}^{N-1} \delta_x(k)$  e de  $T_n$  por  $\sum_{k=1}^{N-1} \delta_t(k)$ . Foram simulados  $N$  voos, obtendo-se assim uma matriz  $N \times N$  de dados.

### 3 Resultados

Para simulações realizadas com 1000 voos, foram obtidos os resultados para os tempos de espera e para os tamanhos dos saltos. Nas Figuras 1 e 2 foram registrados em cada coordenada um valor para o tempo de espera acumulado e um comprimento de salto acumulado.

Os histogramas da Figura 3 mostram onde ocorrem os acúmulos de pontos para diferentes valores de  $x_0$ . Nos histogramas da Figura 4 são mostrados os valores de tempo de espera, também variando o parâmetro  $x_0$ . Neste caso, como os valores da variável  $t$  devem ser todos positivos, observa-se a ocorrência de uma maior concentração próxima do valor  $t_0 = 0$ , havendo uma distribuição de tempo de espera caracterizada pelo comportamento assintótico.

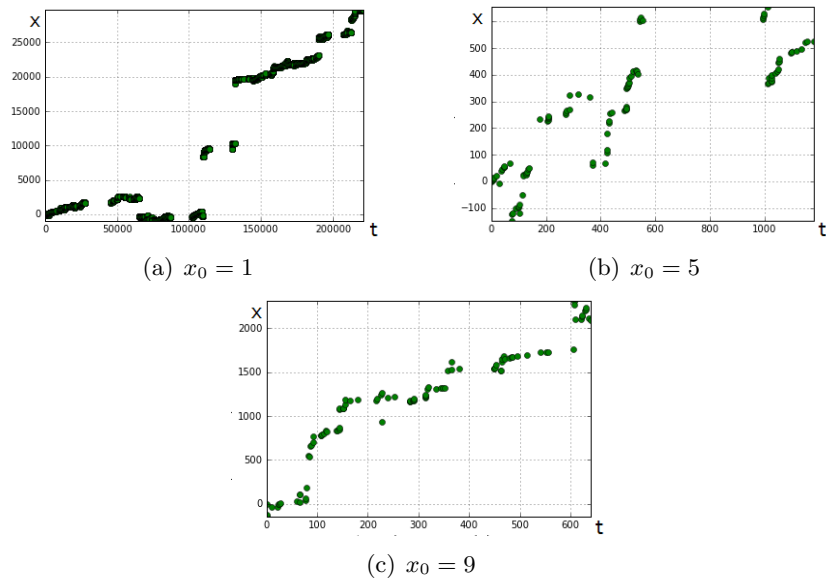


Figura 1:  $x_n \times t_n$  acumulados para  $N = 1000$  voos aleatórios para  $r = 2$  e  $s = 2$ .

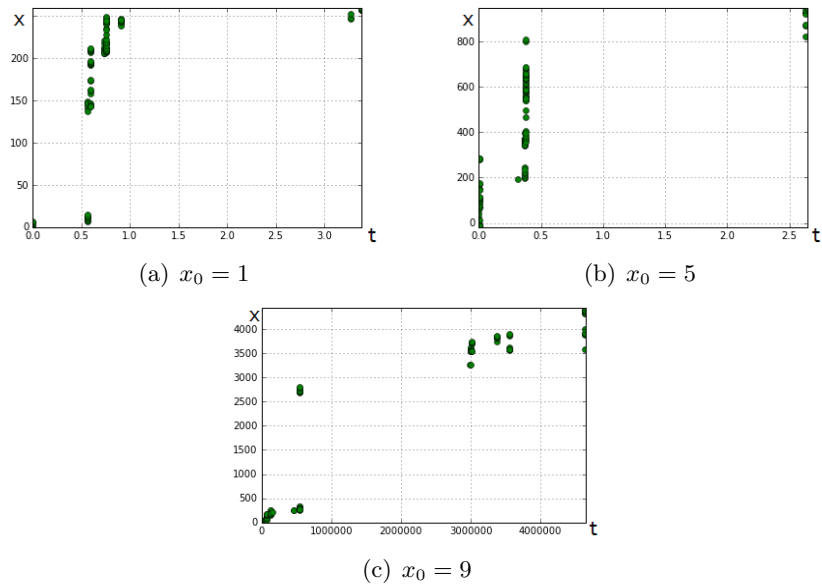


Figura 2:  $x_n \times t_n$  acumulados para  $N = 10000$  voos aleatórios para  $r = 2$  e  $s = 4$ .

## 4 Conclusões

Realizando simulações através do Método de Monte Carlo para função inversa, foi possível observar a existência de difusão anômala realizado por uma partícula unidimensionalmente. Nos histogramas de posição e dos tempos de espera (Figuras 3 e 4, respectivamente), observa-se uma cauda pesada para valores elevados de partículas, ou seja, eles

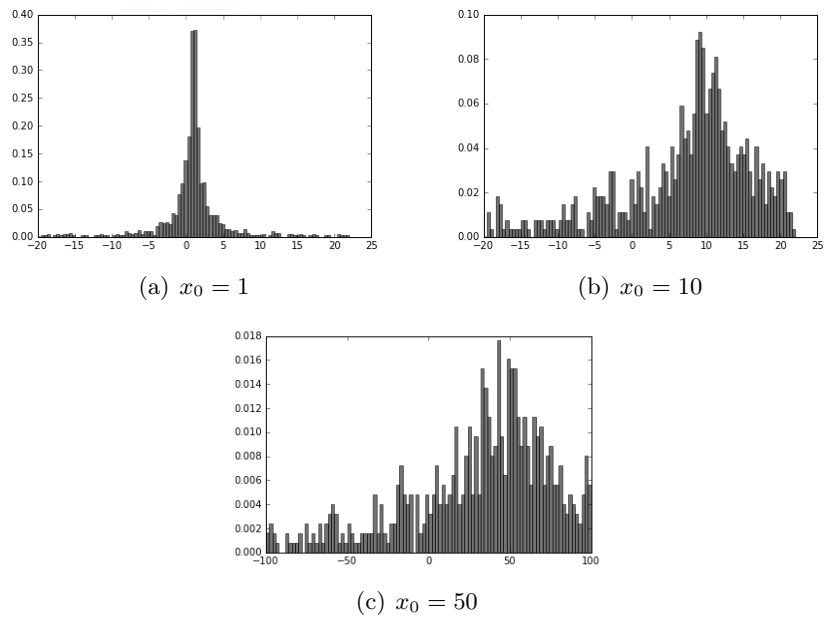


Figura 3: Histogramas de posição para  $N = 1000$ ,  $r = 2$  e  $s = 4$

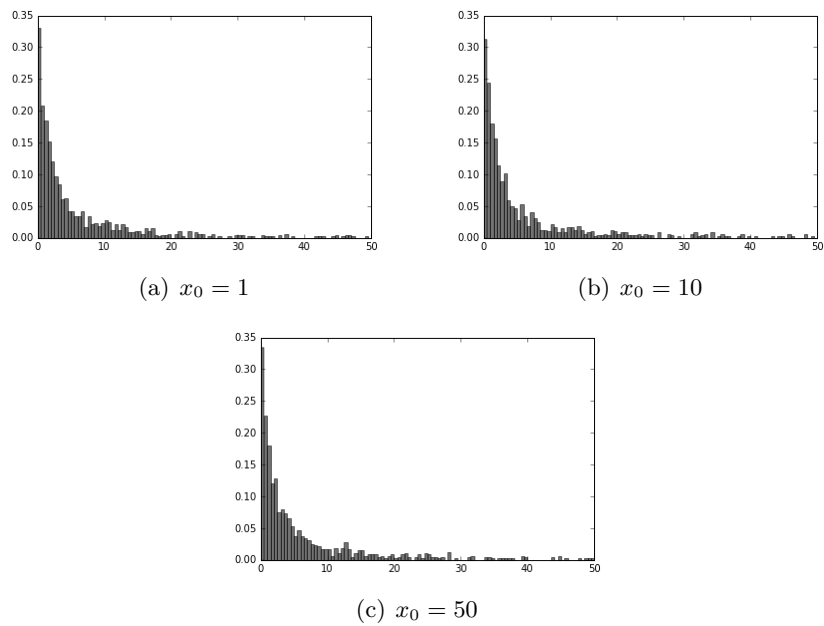


Figura 4: Histogramas de tempos de espera para  $N = 1000$ ,  $r = 2$  e  $s = 4$

apresentam uma quantidade muito maior de dados ao longo da cauda em tais histogramas. Este comportamento é esperado em fenômenos para os quais ocorre a difusão anômala, pois a função de densidade de probabilidade decai mais lentamente que uma gaussiana

usual. Para os histogramas de tempo de espera, os pontos se acumulam próximos a  $t = 0$  e para os de posição, os pontos se acumulam próximos a  $x_0$ .

## Agradecimentos

Os autores expressam seus agradecimentos ao Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais e à Pontifícia Universidade Católica de Minas Gerais por fornecerem os recursos necessários ao desenvolvimento deste trabalho.

## Referências

- [1] E. Barkai. CTRW pathways to the fractional diffusion equation, *Chemical Physics*, Volume 284, Issues 1–2, p.13-27,2002. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0301-0104\(02\)00533-5](https://doi.org/10.1016/S0301-0104(02)00533-5).
- [2] K. Binder, D. Heermann, L. Roelofs, A. J. Mallinckrodt e S. McKay. Monte Carlo simulation in statistical physics. *Computers in Physics*, v. 7, n. 2, p. 156-157, 1993. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4823159>
- [3] W. Chen, H. Sun, X. Zhang e D. Korošak. Anomalous diffusion modeling by fractal and fractional derivatives. *Computers & Mathematics with Applications*, 59(5), 1754-1758, 2010. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.camwa.2009.08.020>
- [4] R. Metzler, & J. Klafter. The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach. *Physics reports*, 339(1), 1-77, 2000. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0370-1573\(00\)00070-3](https://doi.org/10.1016/S0370-1573(00)00070-3)
- [5] A. P. P. Pereira, J. P. Fernandes, A. P. F. Atman e J. L. Acebal. Parameter calibration between models and simulations: Connecting linear and non-linear descriptions of anomalous diffusion. *Physica A*, 509, 369-382, 2008. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physa.2018.06.025>
- [6] A. P. P. Pereira, J. P. Fernandes, A. P. F. Atman e J. L. Acebal. Simulation and calibration between parameters of continuous time random walks and subdiffusive model. *TEMA*, 18:305–315, 2017. DOI: <http://dx.doi.org/10.5540/tema.2017.018.02.0305>.
- [7] A. A. Tateishi, H. V. Ribeiro e E. K. Lenzi. The role of fractional time-derivative operators on anomalous diffusion. *Frontiers in Physics*, v. 5, p. 52, 2017. DOI: <https://doi.org/10.3389/fphy.2017.00052>
- [8] G. M. Viswanathan, E. P. Raposo e M. G. E. Da Luz. Lévy flights and superdiffusion in the context of biological encounters and random searches. *Physics of Life Reviews*, v. 5, n. 3, p. 133-150, 2008. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.pprev.2008.03.002>
- [9] M. Weiss, M. Elsner, F. Kartberg e T. Nilsson. Anomalous subdiffusion is a measure for cytoplasmic crowding in living cells. *Biophysical journal*, 87(5), 3518-3524, 2004. DOI: <https://doi.org/10.1529/biophysj.104.044263>

- [10] X. J. Yang, J. A. Tenreiro Machado e D. Baleanu. Anomalous diffusion models with general fractional derivatives within the kernels of the extended Mittag-Leffler type functions, 2017.