

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO JOÃO DEL-REI

Luana Aparecida de Barros

Busca por processos subdifusivos na caminhada de insetos confinados

Ouro Branco - MG
Dezembro de 2021

Luana Aparecida de Barros

Busca por processos subdifusivos na caminhada de insetos confinados

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física da Universidade Federal de São João del-Rei, em associação ampla com as Universidades Federais de Alfenas e Lavras, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Física.

Área de Concentração: Física Estatística e Sistemas Não-Lineares.

Orientador: Leticia Ribeiro de Paiva

Co-orientador: José Eloy Ottoni

Ouro Branco - MG

Dezembro de 2021

Ficha catalográfica elaborada pela Divisão de Biblioteca (DIBIB)
e Núcleo de Tecnologia da Informação (NTINF) da UFSJ,
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

B277b Barros, Luana .
Busca por processos subdifusivos na caminhada de insetos confinados / Luana Barros ; orientadora Leticia Paiva; coorientador José Eloy Ottoni. -- Ouro Branco, 2021.
45 p.

Dissertação (Mestrado - Programa de Pós-Graduação em Física) -- Universidade Federal de São João del-Rei, 2021.

1. Essa dissertação de mestrado se trata do estudo de processos difusivos em caminhadas aleatórias de cupins operários do gênero *Cornitermes Cumulans*, conhecidos também como cupim do pasto.. I. Paiva, Leticia, orient. II. Ottoni, José Eloy, co-orient. III. Título.



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO JOÃO DEL-REI
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

PARECER TÉCNICO Nº 113 / 2021 - PPGF (13.29)

Nº do Protocolo: 23122.049287/2021-28

São João del-Rei-MG, 21 de dezembro de 2021.

São João del-Rei, 10 de dezembro de 2021.

A dissertação de mestrado "**Busca por processos subdifusivos em animais confinados**" elaborada por **Luana Aparecida de Barros** e aprovada por todos os membros da banca examinadora, foi aceita pelo Programa de Pós-graduação em Física da Universidade Federal de São João del-Rei como requisito parcial à obtenção do título de

MESTRE EM FÍSICA

(Assinado digitalmente em 22/12/2021 05:55)

LETICIA RIBEIRO DE PAIVA
PROFESSOR DO MAGISTERIO SUPERIOR
DEFIM (12.30)
Matrícula: 1848861

(Assinado digitalmente em 21/12/2021 20:08)

MARCELO MARTINS DE OLIVEIRA
PROFESSOR DO MAGISTERIO SUPERIOR
PPGF (13.29)
Matrícula: 1555825

(Assinado digitalmente em 21/12/2021 20:33)

ANGÉLICA SOUSA DA MATA
ASSINANTE EXTERNO
CPF: 077.235.426-07

Para verificar a autenticidade deste documento entre em <https://sipac.ufsj.edu.br/public/documentos/index.jsp> informando seu número: **113**, ano: **2021**, tipo: **PARECER TÉCNICO**, data de emissão: **21/12/2021** e o código de verificação: **16c2852f13**

Agradecimentos

Agradeço primeiramente à Deus por me iluminar durante todo o mestrado. Agradeço aos meus pais Luiz Antonio e Leila, meu irmão e meus amigos, por todo o apoio e paciência.

À minha orientadora Dra. Leticia Ribeiro de Paiva que me acompanhou durante esses anos e meu coorientador Dr. José Eloy Ottoni pelo apoio.

Um agradecimento especial ao meu amigo Victor que me ajudou muito em programação e as colegas de laboratório Betânia e Gabryelly.

E agradeço a UFSJ.

“É preciso sabedoria para lidar com os problemas e força de vontade para consertá-los.”

(Autor desconhecido)

“Sou uma mulher de garra, com a força no olhar e a coragem no coração porque tenho sonhos e não irei desistir até os alcançar.”

(Autor desconhecido)

Resumo

Difusão anômala é um termo usado para descrever um processo de difusão com uma relação não linear ao tempo, em contraste ao típico processo de difusão normal, no qual o deslocamento quadrático médio de uma partícula é uma função linear do tempo. A difusão é frequentemente descrita por uma lei de potência, $x^2(t) \sim Dt^\alpha$, onde D é o coeficiente de difusão e t é o tempo decorrido. Em um típico processo de difusão, $\alpha = 1$. Se $\alpha > 1$, o fenômeno é chamado superdifusão. Se $\alpha < 1$, a partícula sofre subdifusão. Essa dissertação de mestrado se trata do estudo de processos difusivos em caminhadas aleatórias de cupins operários do gênero *Cornitermes Cumulans*, conhecidos também como cupim do pasto. Os experimentos foram realizados em placas de 10 cm de diâmetro e 1 centímetro de altura e foram baseados no rastreamento de partícula única. Os primeiros testes foram realizados em placas de Petri sem armadilhas ou restrições geométricas, e foi encontrado um expoente que condiz com difusão anômala, mas do tipo superdifusiva. Após esses primeiros experimentos, utilizamos um labirinto de mesmo tamanho e altura da placa de Petri.

Abstract

Anomalous diffusion is a term used to describe a diffusion process with a nonlinear relationship to time, in contrast to the typical normal diffusion process, in which the mean square displacement of a particle is a linear function of time. Diffusion is often described by a power law, $x^2(t) \sim Dt^\alpha$, where D is the diffusion coefficient and t is the elapsed time. In a typical diffusion process, $\alpha = 1$. If $\alpha > 1$, the phenomenon is called superdiffusion. If $\alpha < 1$, the particle undergoes subdiffusion. This master's thesis deals with the study of diffusion processes in random walks of worker termites of the genus *Cornitermes Cumulans*, also known as pasture termites. The experiments were carried out on plates 10 cm in diameter and 1 cm in height and were based on single particle tracking. The first tests were carried out in Petri dishes without traps or geometric restrictions, and an exponent was found that matches anomalous diffusion, but of the superdiffusion type. After these first experiments, we used a maze of the same size and height as the Petri dish.

Conteúdo

Lista de Figuras	iii
1 Introdução	1
1.1 Cupins	1
1.2 Objetivos	2
1.3 Difusão	3
1.4 Noções básicas da Física Estatística	6
1.5 Caracterização dos processos de difusão	9
1.6 Principais modelos subdifusivos	12
1.6.1 Armadilhas (CTRW - <i>Continuous Time Random Walk</i>)	12
1.6.2 Meio viscoelástico (FBM - <i>Fractional Brownian Motion</i>)	12
1.6.3 Restrição geométrica (RWF - <i>Random Walk on a Fractal Structure</i>)	13
2 Metodologia	14
2.1 Métodos experimentais	14
2.2 Métodos computacionais	15
2.3 Métodos analíticos	17
2.3.1 Equação de Langevin	18
2.3.2 Equação de Fokker-Planck	19
2.3.3 CTRW - <i>Continuous Time Random Walk</i>	22
3 Resultados e Discussão	25
3.1 Experimentos utilizados para análise do comportamento subdifusivo	25
3.2 Experimento sem armadilhas	25
3.3 Experimentos com armadilhas ou obstáculos	28
4 Conclusões e Perspectivas	32
Referências	33

Lista de Figuras

1.1	a) Vários cupins operários na natureza b) Cupinzeiros - Fotos retiradas de proec.ufabc.edu.br/cupim/cornitermes-bequaerti/	1
1.2	Castas	2
1.3	a) Foto retirada no laboratório de Física Biológica da UFSJ de vários cupins operários; b) Cupim operário visto de perto	2
1.4	Trajectoria esquemática gerada por computador que representa o movimento Browniano de uma partícula	3
1.5	Gotas de corante diluído em água; no começo o corante ocupa uma pequena região que se espalha de forma homogênea	4
1.6	Deslocamento quadrático médio $\langle r^2(\tau) \rangle$ para diferentes tipos de difusão anômala - Figura retirada do site https://en.wikipedia.org/wiki/Anomalousdiffusion	5
1.7	Os processos subdifusivos têm $H < 1/2$. Caminhantes aleatórios confinados têm desaparecimento de H . Superdifusão corresponde a $H > 1/2$, com $H = 1$ sendo o limite balístico. Movimento superbalístico ($H > 1$), corresponde a partículas em aceleração.	6
1.8	a) Modelo de armadilha com diferentes tempos de espera representados por círculos de diferentes tamanhos, aqui considerados para o caso de um tempo médio de espera infinito, que é uma caminhada aleatória contínua. Os pontos vermelhos representam o caminhante e as setas o caminho que ele percorre; b) Aglomerado de percolação, o caminhante é representado pelo círculo vermelho e as setas o caminho que ele percorre no labirinto; Etapas negativamente correlacionadas, o círculo vermelho representa o caminhante e as setas representam as mudanças de direções que o caminhante faz.	9
1.9	Modelos de Fractais: a) Romanesco visto de perto; b) Vasos sanguíneos no corpo humano; c) Triângulo de Sierpinski - Figuras retiradas do site https://pt.wikipedia.org/wiki/Fractal	10

1.10	Os propagadores de caminhada aleatória $P(x, x_0; t, t_0)$ dão a densidade de probabilidade para alcançar a posição x no tempo t , começando na posição x_0 no tempo t_0 . Para $t = t_0$, o propagador é uma função de Dirac δ . A difusão normal é descrita por densidade de probabilidade Gaussiana $P(x, x_0; t, t_0) = P(x - x_0, t - t_0)$, cuja variância cresce linearmente no tempo. A figura mostra propagadores gaussianos normalizados em tempos sucessivos, onde t é um intervalo de tempo arbitrário escolhido para ilustrar a evolução do propagador.	11
2.1	Cupim - Foto tirada no laboratório de Física Biológica da UFSJ	14
3.1	Experimento realizado na placa de Petri com 01 cupim, durante um período de 30 minutos: a) Gráfico dos tempos de espera em log-log com ajuste em lei de potência; b) Gráfico da variação dos tempos de espera	26
3.2	Gráfico dos tamanhos de passos do experimento realizado em uma placa de Petri de 10 cm de diâmetro	27
3.3	Caminhada de 01 cupim em uma placa circular de 10 cm de diâmetro por 30 minutos	27
3.4	Gráfico do MSD no experimento realizado com apenas 01 cupim durante o intervalo de tempo de 30 minutos	28
3.5	Gráfico do MSD no intervalo de tempo, com crescimento em lei de potência e expoente de $\alpha = 1.851$, condizente com difusão anômala mas do tipo superdifusiva	29
3.6	Gráfico da maior distância x que o caminhante alcança em um tempo t	29
3.7	Gráfico dos quantis do experimento realizado na placa de Petri com apenas 01 cupim	29
3.8	Labirinto em impressão 3D	30
3.9	Gráfico da variação dos tempos de espera no labirinto de 10 cm de diâmetro com 01 cupim: a) experimento 01; b) experimento 02; c) experimento 03	30
3.10	Gráfico dos tamanhos de passos dos experimentos realizados no labirinto de 10 cm de diâmetro: a) experimento 01; b) experimento 02; c) experimento 03	30
3.11	Caminhada de um cupim no labirinto	31
3.12	Gráfico do MSD x Δt nos labirintos: a) experimento 01; b) experimento 02; c) experimento 03	31

Capítulo 1

Introdução

1.1 Cupins

Os cupins são insetos sociais, que contém cerca de 2750 espécies descritas no mundo. Uma colônia típica contém um casal reprodutor, rei e rainha, e sua função é apenas de produzir ovos; de inúmeros operários, que executam todo o trabalho e alimentam os outros cupins; e de soldados, que são responsáveis pela defesa da colônia. Na figura 1.2 é possível observar as diferenças de forma e tamanho entre os cupins de uma colônia [1]. Existem também reprodutores secundários, que podem substituir rei e rainha quando esses morrem [2].



Figura 1.1: a) Vários cupins operários na natureza b) Cupinzeiros - Fotos retiradas de proec.ufabc.edu.br/cupim/cornitermes-bequaerti/

Em um mesmo termiteiro (cupinzeiro) é comum a presença de muitas espécies de cupins, sendo que uma delas é responsável pela construção e as outras, chamadas de inquilinos, ocupam várias partes do ninho, mas vivendo em galerias separadas. Os inquilinos são geralmente menores que os hospedeiros. Em alguns ninhos velhos de *Cornitermes* chegam a ser encontradas mais de 10 espécies de inquilinos [2].

A espécie utilizada nesse trabalho é a *Cornitermes Cumulans*, conhecidos também como cupim do pasto. Estão distribuídos desde o sul do Nordeste brasileiro até o Norte da Argentina. Nessa pesquisa utilizamos apenas os cupins do tipo operário. São encontrados em abundância nos arredores do Campus da UFSJ em Ouro Branco - MG e o laboratório de Física Biológica da UFSJ tem autorização para utilizar os cupins na pesquisa.



Figura 1.2: Castas

1.2 Objetivos

Difusão anômala é um termo usado para descrever um processo de difusão com uma relação não linear ao tempo, em contraste ao típico processo de difusão normal, no qual o deslocamento quadrático médio de uma partícula é uma função linear do tempo. A difusão é frequentemente descrita por uma lei de potência, $x^2(t) \sim Dt^\alpha$, onde D é o coeficiente de difusão e t é o tempo decorrido. Em um típico processo de difusão, $\alpha = 1$. Se $\alpha > 1$, o fenômeno é chamado superdifusão. Se $\alpha < 1$, a partícula sofre subdifusão [3].

O objetivo desse trabalho é buscar subdifusão em cupins. Há muitas evidências de animais que se movem de forma consistente com superdifusão, como abelhas [4], mariposas [5], caramujos [6] e animais marinhos como tubarões e focas. Também temos indício de superdifusão em cupins confinados [7] [8]. Por outro lado, o movimento subdifusivo é encontrado apenas em: fluidos complexos [9] e células citoplasmáticas [10].

Assim, como ainda não temos evidências de subdifusão em animais tentamos propor mecanismos e estratégias para induzir a subdifusão. Vamos inicialmente esclarecer definições e nomenclaturas utilizadas no trabalho, apresentando brevemente os principais modelos de subdifusão e explicando as diferentes propriedades de cada modelo.



Figura 1.3: a) Foto retirada no laboratório de Física Biológica da UFSJ de vários cupins operários; b) Cupim operário visto de perto

1.3 Difusão

O movimento browniano é um dos problemas mais interessantes da ciência, pois é encontrado em diferentes áreas do conhecimento. Esse fenômeno ficou conhecido como uma dança, ou seja um movimento aleatório de pequenas partículas em um líquido [11].

O movimento Browniano ficou conhecido pelos trabalhos de Robert Brown e também pela contribuição feita por Einstein no estudo da natureza atômica da matéria [12].

Na figura 1.4 temos a trajetória esquemática gerada por um computador que representa o movimento Browniano de uma partícula [12].

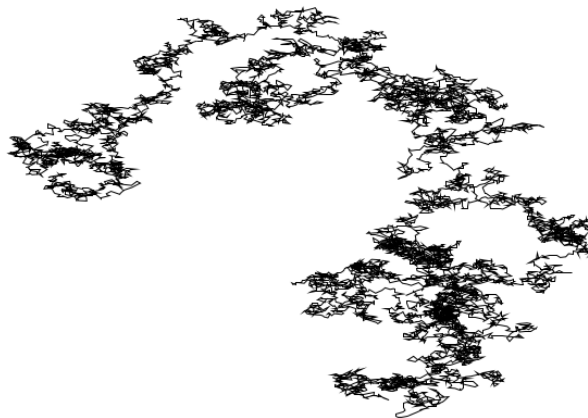


Figura 1.4: Trajetória esquemática gerada por computador que representa o movimento Browniano de uma partícula

Em 1785, foi observado pela primeira vez o movimento browniano pelo físico Jan Ingenhauz, que estudava carvão pulverizado em uma superfície de álcool. Mas apenas em 1828, o fenômeno recebeu esse nome após os trabalhos de Brown, que investigava os movimentos de partículas de pólen, poeira e fuligem. No início acreditavam que esse movimento era uma demonstração de moléculas vivas, de uma matéria primitiva. Mas Brown percebeu que todas as partículas apresentavam esse movimento [12].

Antes dos trabalhos de Einstein surgiram algumas explicações para o movimento Browniano. Em 1858, Regnault acreditava que o movimento era causado por um aquecimento devido à luz incidente; em 1863, Weiner concluiu que não poderia ser causado por aquecimento. Em 1865, Cantoni e Oehl descobriram que o movimento não cessava mesmo em um intervalo de tempo grande. Em 1867, S. Exner descobriu que o movimento Browniano era mais rápido em partículas leves e voltou à teoria que o movimento era acentuado em casos de variação de luz e temperatura. Em 1870, Jevons demonstrou que o movimento era causado por forças elétricas, mas no mesmo ano Dancer mostrou que essas forças não influenciavam. Em 1877, Delsaux mostrou que o movimento Browniano tem origem de impactos das moléculas do líquido com as partículas. Essa ideia é aceita até os dias de hoje e também foi expressa por Cabronelle, mas de forma mais precisa só foi abordada

por Gouy em 1888, quando ele descobriu que a viscosidade do líquido também interfere (o movimento diminui quando a viscosidade aumenta [12]).

Depois de todos esses trabalhos, foram observados alguns pontos que ficaram estabelecidos sobre o movimento Browniano: o movimento é constante, irregular, é mais frequente quando as partículas são menores e também quando o fluido é menos viscoso. A variação de temperatura também interfere, quando mais alta, mais movimento acontece. A composição e a densidade das partículas não interferem no movimento [12].

Em 1905, ficou demonstrado com a teoria cinética que o movimento Browniano era causado pelo bombardeio de moléculas do fluido. No trabalho de Einstein, é proposta a seguinte expressão que relaciona a constante de difusão D , o tempo t e o deslocamento quadrático médio $\langle x^2(t) \rangle$ de uma partícula que difunde em um meio [12]

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle x^2(t) \rangle}{2t} \quad (1.1)$$

onde D , é dada por

$$D = \frac{k_B T}{m\gamma} \quad (1.2)$$

Aqui, T é a temperatura absoluta, k_B é a constante de Boltzmann e γ é a fricção. Estas relações, que descrevem a difusão normal, são também deduzidas a partir da equação de Langevin [12].

A difusão é um fenômeno comum na natureza e ocorre, em geral, quando um sistema encaminha-se para o estado de equilíbrio. Ela consiste em um mecanismo de transferência de massa, energia ou informação. Um exemplo de difusão seria quando colocamos algumas gotas de corante em água, inicialmente a água muda de cor apenas numa região, mas com o passar do tempo, toda a água fica colorida e homogênea, como pode ser observado na figura 1.5 [11].



Figura 1.5: Gotas de corante diluído em água; no começo o corante ocupa uma pequena região que se espalha de forma homogênea

A difusão é frequentemente descrita por uma lei de potência, $x^2(t) \sim Dt^\alpha$, onde D é o coeficiente de difusão e t é o tempo decorrido. Por muitos anos, o movimento browniano

foi mais utilizado para descrever o movimento de animais, mas foi observado ultimamente que os animais executam outros tipo de caminhadas aleatórias [3].

O processo de difusão pode ocorrer de duas formas, difusão normal, governado por uma função densidade de probabilidade gaussiana cuja variância cresce linearmente com o tempo e a difusão anômala, processo de difusão com uma relação não linear ao tempo [11]. A difusão anômala pode ser definida como superdifusiva se $\alpha > 1$ e denominada subdifusiva se $\alpha < 1$ [3].

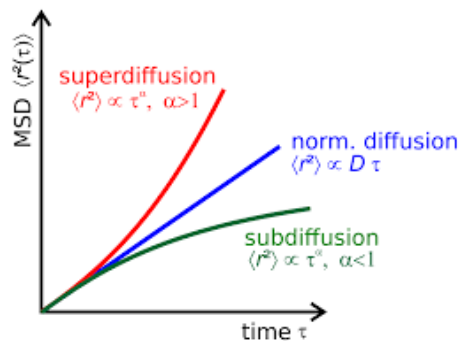


Figura 1.6: Deslocamento quadrático médio $\langle r^2(\tau) \rangle$ para diferentes tipos de difusão anômala - Figura retirada do site <https://en.wikipedia.org/wiki/Anomalousdiffusion>

Outra forma de caracterizar o tipo de difusão é através do expoente de Hurst. Hurst estudou problemas de dimensionamento de reservatórios, analisando a vazão anual de várias represas. Sua ideia básica era encontrar os volumes máximo e mínimo nos reservatórios para prever secagem ou transbordamento. Essa diferença entre os valores máximo e mínimo de água do reservatório foi chamada por ele de "range". Além deste cálculo foram realizados os desvios padrões das vazões de água [13].

A estatística R/S é o resultado da divisão do range pelo desvio padrão. Hurst notou também que havia uma função relacionando o valor da estatística R/S ao número de observações que entram no cálculo. Ele descobriu que a estatística R/S é igual à metade do número de observações elevado a um expoente " H ", conhecido hoje como Expoente de Hurst. Assim, tem-se a seguinte relação [13]:

$$H = \frac{\log\left(\frac{R}{s}\right)}{\log(N)} \quad (1.3)$$

R/S é a diferença da amplitude entre a maior e a menor ocorrência registrada (R), dividida pelo desvio padrão encontrado na série (S) e N é o número de observações, H é o fator da lei de potência, que originalmente foi objeto de estudo de Hurst (nesta fórmula chamado de expoente de Hurst, variando entre zero e um) [13].

O trabalho de Hurst foi redescoberto em 1969 por Mandelbrot e Wallis, que verificaram que há uma relação empírica entre o expoente de Hurst e o movimento browniano fracionário [13].

Os valores do expoente de Hurst podem ser interpretados da seguinte maneira: $0 < H < 0,5$: indica que a série é anti-persistente, no qual uma tendência positiva no passado é mais provável de se converter em tendência negativa e vice-versa. Para $H = 0,5$: movimento é puramente aleatório. E para $0,5 < H < 1$ a série é persistente, no qual uma tendência positiva no passado é mais provável de continuar positiva e vice-versa, e o nível desta persistência é medido quão maior for o valor [13].

$$x^2 \sim t^{2H} \tag{1.4}$$

Para $H > 1/2$ temos superdifusão, nesse caso ocorre um crescimento superlinear no tempo do deslocamento quadrático médio. E para $H < 1/2$ temos subdifusão, e o crescimento ocorre de forma sublinear [13].

Na figura 1.7 é possível observar os processos subdifusivos para diferentes valores de H [14].

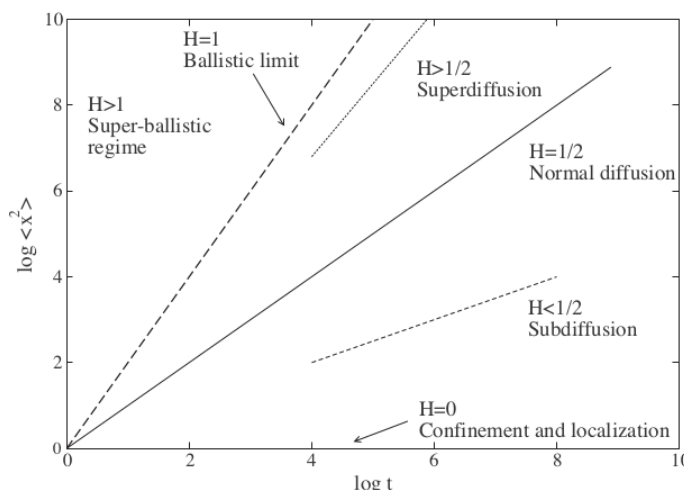


Figura 1.7: Os processos subdifusivos têm $H < 1/2$. Caminhantes aleatórios confinados têm desaparecimento de H . Superdifusão corresponde a $H > 1/2$, com $H = 1$ sendo o limite balístico. Movimento superbalístico ($H > 1$), corresponde a partículas em aceleração.

1.4 Noções básicas da Física Estatística

Alguns conceitos são básicos para compreensão desse trabalho, então aqui faremos uma introdução breve sobre ergodicidade, processos estocásticos, estacionariedade.

Um sistema é considerado ergódico se a média temporal de uma função $f(p, q)$ ao longo de uma trajetória no intervalo de tempo $(t_0, t_0 + T)$ for igual a média do ensemble do mesmo observável, considerando um intervalo de tempo grande. A hipótese ergódica, introduzida por Ludwig Eduard Boltzmann, consiste em assumir que sistemas com $N \gg 1$ são ergódicos [15]. Para sistemas em equilíbrio as médias de ensemble deverão, em princípio,

ser iguais às médias temporais. Esta propriedade designa-se por ergodicidade [16].

Esse conceito é importante nesse trabalho pois em certas situações, como no cálculo do deslocamento quadrático médio, assumimos que a média temporal é equivalente à média sobre diferentes amostras.

Ao contrário dos processos determinísticos que são facilmente modelados e previsíveis, os processos estocásticos são regidos por fenômenos aleatórios. Alguns exemplos de fenômenos aleatórios: variação do tráfego em um cruzamento, variação diária no tamanho do estoque de uma empresa e variação minuto a minuto do índice IBOVESPA [17].

Os processos estocásticos podem ser ainda divididos em processos de tempo contínuo (as mudanças podem ocorrer em qualquer tempo) e processos em tempo discreto (as mudanças ocorrem somente em determinados pontos fixos no tempo). Para analisar o processo estocástico é preciso especificar o período de tempo T envolvido. Se T é contínuo, trata-se de um processo estocástico de parâmetros contínuos [17]:

$$T = (t : 0 \leq t < \infty) \quad (1.5)$$

se T é discreto, trata-se de um processo estocástico de parâmetros discretos [17]:

$$T = 0, 1, 2, \dots \quad (1.6)$$

Na prática costuma-se descrever um processo estocástico através das funções média, variância e autocovariância. Estas funções são definidas a seguir para o caso contínuo sendo que definições similares se aplicam ao caso discreto [17].

Seja μ o valor médio esperado dado por

$$\mu(t) = E[X(t)] \quad (1.7)$$

a variância é o valor esperado para o quadrado dos desvios

$$\sigma^2(t) = Var[X(t)] \quad (1.8)$$

e a função de autocovariância:

$$\gamma(t_1, t_2) = E[X(t_1) - \mu(t_1)][X(t_2) - \mu(t_2)] \quad (1.9)$$

note que a função de variância é um caso especial da função de autocovariância quando $t_1 = t_2$ [17].

O processo de Markov é um processo estocástico em particular. Neste tipo de processo, somente o valor corrente é relevante para se prever o futuro. O histórico de uma variável e todo seu comportamento anterior é irrelevante para a previsão [18].

Também conhecido como Movimento Browniano, é um tipo específico de processo

estocástico de Markov, que tem sido utilizado pela física para descrever o movimento de uma partícula sujeita a uma grande quantidade de pequenos choques moleculares. Ele possui três propriedades: a primeira delas se refere ao fato de ser um processo de Markov, a segunda se refere ao fato de ter incrementos independentes, a terceira e última, se refere ao fato de que estes incrementos seguem uma distribuição normal com parâmetros que dependem só do intervalo de tempo [18].

Uma importante classe de processos estocásticos são os chamados processos estacionários. Um processo estocástico é dito ser estritamente estacionário se a distribuição de probabilidade conjunta de $X(t_1), \dots, X(t_k)$ é a mesma de $X(t_1+\tau), \dots, X(t_k+\tau)$. Ou seja, o deslocamento da origem dos tempos por uma quantidade τ não tem efeito na distribuição conjunta que portanto depende apenas dos intervalos entre t_1, \dots, t_k . [19].

Em particular, para $k = 1$ a estacionariedade estrita implica que a distribuição de $X(t)$ é a mesma para todo t de modo que, se os dois primeiros momentos forem finitos, temos que $\mu(t)$ e $\sigma^2(t)$ são constantes que não dependem de t [19].

$$\mu(t) = \mu \quad (1.10)$$

$$\sigma^2(t) = \sigma^2 \quad (1.11)$$

Para $k = 2$ a estacionariedade da distribuição conjunta de $X(t_1)$ e $X(t_2)$ depende apenas da distância $t_2 - t_1$, chamada defasagem. A função de autocovariância $\gamma(t_1, t_2)$ também depende apenas de $t_2 - t_1$ e pode ser escrita como $\gamma(\tau)$ [19].

$$\gamma(\tau) = E[X(t) - \mu][X(t + \tau) - \mu] = Cov[X(t), X(t + \tau)] \quad (1.12)$$

note que o tamanho de $\gamma(\tau)$ depende da escala em que $X(t)$ é medida [19].

Na prática é muito difícil usar a definição de estacionariedade estrita e costuma-se definir estacionariedade de uma forma menos restrita. Um processo estocástico $X(t), t \in T$ é dito ser estacionário de segunda ordem ou fracamente estacionário se a sua função média é constante e sua função de autocovariância depende apenas da defasagem [19],

$$E[X(t)] = \mu \quad (1.13)$$

e

$$Cov[X(t), X(t + \tau)] = \gamma(\tau). \quad (1.14)$$

Nenhuma outra suposição é feita a respeito dos momentos de ordem mais alta. Além disso, fazendo $\tau = 0$ segue que $Var[X(t)] = \gamma(0)$, ou seja a variância do processo assim como a média também é constante. Note também que tanto a média quanto a variância precisam ser finitos [19].

Nos experimentos realizados, nossas hipóteses são que o sistema não pode ser considerado ergódico, os processos são estocásticos e como os experimentos são biológicos, realizados com ser vivo, não são estacionários.

1.5 Caracterização dos processos de difusão

Alguns casos podem levar à difusão anômala como modelo de armadilha com diferentes tempos de espera, difusão em um aglomerado de percolação fractal e etapas negativamente correlacionadas.

No caso das armadilhas com diferentes tempos de espera, o objetivo é que o cupim ao esbarrar nas armadilhas tente sair e com isso o tempo médio de espera pode divergir levando a subdifusão anômala. É possível observar na figura 1.8 que os tempos de espera, representados pelas circunferências, variam e o cupim age de forma diferente em cada armadilha [3].

Em um aglomerado de percolação, ou seja, um labirinto, o cupim teria seu movimento modificado porque encontraria vários obstáculos e tentaria sair do labirinto. O MSD (deslocamento quadrático médio) do tamanho do passo diverge [3].

Em um meio viscoelástico a caminhada do cupim, pode levar a sub ou superdifusão, dependendo se a caminhada é antipersistente (as etapas subsequentes são tipicamente em direções opostas, ou seja, negativamente correlacionadas) ou persistente (as etapas subsequentes seguem na mesma direção, ou seja, correlacionam-se positivamente) [3].

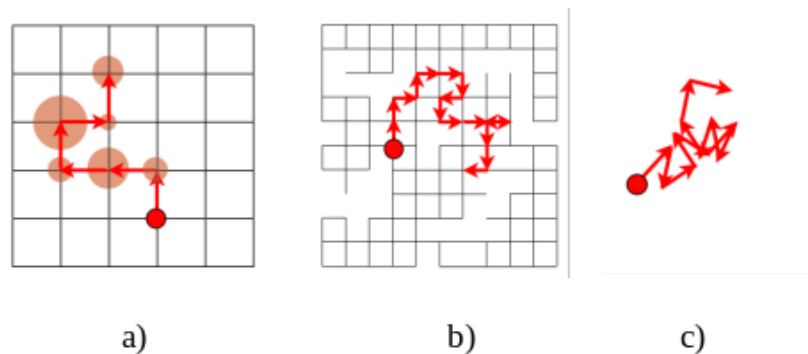


Figura 1.8: a) Modelo de armadilha com diferentes tempos de espera representados por círculos de diferentes tamanhos, aqui considerados para o caso de um tempo médio de espera infinito, que é uma caminhada aleatória contínua. Os pontos vermelhos representam o caminhante e as setas o caminho que ele percorre; b) Aglomerado de percolação, o caminhante é representado pelo círculo vermelho e as setas o caminho que ele percorre no labirinto; Etapas negativamente correlacionadas, o círculo vermelho representa o caminhante e as setas representam as mudanças de direções que o caminhante faz.

Agora apresentamos algumas definições necessárias para caracterizar os processos de difusão anômala como: fractais, dimensão fractal, número de passos, propagador, dimensão

espectral e exploração compacta.

Na natureza é possível observar que os objetos apresentam uma diversidade de estruturas, possuem formatos irregulares que fogem da geometria Euclidiana. Encontramos objetos lisos como pedras, árvores, mas quando ampliamos a escala de visualização observamos deformações na superfície. O estudo da formação dessas superfícies está relacionado com a teoria dos fractais [20].

Mandelbrot foi o responsável por difundir a geometria Fractal. Ele estudou os mais variados ramos da ciência: geologia, economia, comunicação, biologia, termodinâmica, meteorologia e computação. Mas os fractais não foram descobertos por ele. Os Fractais são objetos geométricos que não podem ser classificados nos moldes da geometria euclidiana, pois possuem auto semelhança em diferentes níveis de escala, complexidade infinita e dimensão fracionária. Os fractais são agrupados em três grupos: Lineares (fractais definidos por sistemas de funções iteradas), Não-lineares (fractais definidos por uma relação de recorrência), objetos fractais (fractais aleatórios mais conhecidos como fractais naturais) [20].

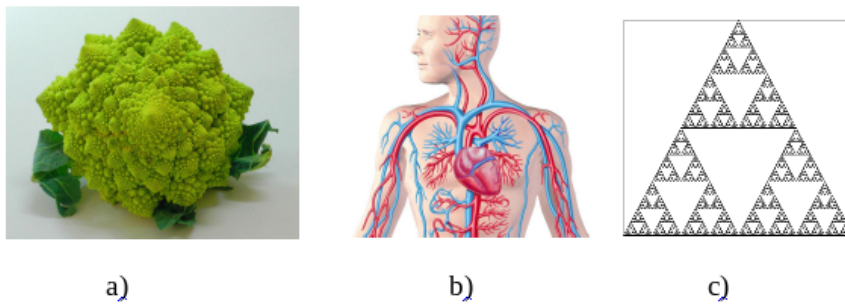


Figura 1.9: Modelos de Fractais: a) Romanesco visto de perto; b) Vasos sanguíneos no corpo humano; c) Triângulo de Sierpinski - Figuras retiradas do site <https://pt.wikipedia.org/wiki/Fractal>

A massa de uma estrutura geométrica euclidiana cresce à medida que o tamanho linear da estrutura cresce a uma potência de dimensão d [3].

$$M(x) = x^d \quad (1.15)$$

para $d = 1, 2, 3$. Em alguns geométricos as estruturas não seguem esta regra, ou seja, a dimensão não é um número inteiro, mas uma fração [3]:

$$M(x) \sim x^{d_f} \quad (1.16)$$

onde d_f é, portanto, denominado dimensão fractal, e a respectiva estrutura é denominada fractal [3].

Supondo que a dimensão da trajetória seja proporcional a n , o deslocamento quadrático médio, pode ser reescrito sob a forma [3]:

$$x^2(n) \sim n^{2/dw} \quad (1.17)$$

dw é a dimensão da caminhada, ou

$$x^2(t) \sim t^{2/dw} \quad (1.18)$$

no caso em que o tempo médio da etapa está bem definido. Observe que $2/dw$ coincide com a difusão anômala de expoente α , e $dw = 2$ corresponde à difusão normal [3].

Propagador ou função densidade de probabilidade é a probabilidade $P(x, t)$ de encontrar uma partícula em posição x no tempo t , dado que começa no tempo $t = 0$ na origem $x = 0$. Uma propriedade particular do propagador é a dependência temporal de $P(0, t)$, ou seja, a probabilidade de estar na posição inicial em algum momento t [3].

Na figura 1.10 é possível observar propagadores gaussianos normalizados em tempos sucessivos, onde t é um intervalo de tempo arbitrário escolhido para ilustrar a evolução do propagador [14].

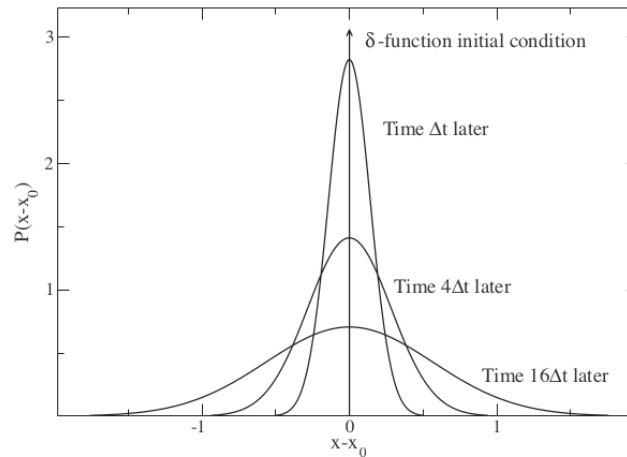


Figura 1.10: Os propagadores de caminhada aleatória $P(x, x_0; t, t_0)$ dão a densidade de probabilidade para alcançar a posição x no tempo t , começando na posição x_0 no tempo t_0 . Para $t = t_0$, o propagador é uma função de Dirac δ . A difusão normal é descrita por densidade de probabilidade Gaussiana $P(x, x_0; t, t_0) = P(x - x_0, t - t_0)$, cuja variância cresce linearmente no tempo. A figura mostra propagadores gaussianos normalizados em tempos sucessivos, onde t é um intervalo de tempo arbitrário escolhido para ilustrar a evolução do propagador.

$$P(0, t) \sim t^{-ds/2} \quad (1.19)$$

Para difusão normal em um espaço euclidiano d -dimensional, a dimensão espectral é igual à dimensão espacial d . Pode-se interpretar ds como uma grandeza que descreve a quantidade de volume ou o número de locais que a partícula pode visitar dentro do tempo t , informando assim algo sobre a geometria do ambiente [3].

A relação entre d_f e d_w define a propriedade de recorrência do passeio. Calculamos o número médio de vezes que um caminhante visita um local dividindo $n(x)$, o número médio de etapas necessárias para alcançar uma distância x , pelo número médio de locais $M(x)$ dentro deste raio. Lembramos que do MSD temos $n(x) \sim x^{d_w}$. Verifica-se então que o número médio de visitas por local escala como $x^{d_w - d_f}$ significando que para $d_w > d_f$ cada local é revisitado um número crescente de vezes, ou seja, o ambiente é escrupulosamente explorada. Isto é chamado de exploração compacta. A exploração do espaço, no caso de difusão normal, é compacta em $d \leq 2$ e não compacta em $d \geq 3$, que tem a ver com propriedades de recorrência de caminhadas aleatórias simples [3].

1.6 Principais modelos subdifusivos

Os principais modelos que podem levar a uma subdifusão são armadilhas, agregado de percolação fractal e etapas negativamente correlacionadas.

1.6.1 Armadilhas (CTRW - *Continuous Time Random Walk*)

Em 1975, Scher e Montroll estudaram o modelo de caminhada aleatória de tempo contínuo (CTRW - Continuous Time Random Walk) para descrever as surpreendentes propriedades anômalas de transporte de portadores de carga em materiais. Nesse modelo são utilizadas armadilhas e nesse sistema, o tempo total gasto nos estados presos é muito maior que o tempo gasto em movimento livre [3].

CTRWs permitem uma generalização dos processos de Wiener subjacentes às equações de Langevin. O ingrediente principal nesta generalização envolve permitir distribuições mais gerais dos tamanhos de salto de caminhada aleatória e tempos de pausa. Um CTRW permite que um passo j de passeio aleatório leve um tempo τ_j e tenha tamanho l_j . O passeio aleatório padrão corresponde ao caso especial $\tau = 1$ e $l = \pm 1$ [3].

A difusão anômala pode surgir por meio de momentos divergentes para l ou τ .

1.6.2 Meio viscoelástico (FBM - *Fractional Brownian Motion*)

Agora consideramos sistemas em que uma partícula não se move simplesmente em um potencial fixo, mas faz parte de um complexo sistema interativo exibindo comportamento viscoelástico, o que significa que a dinâmica dos diferentes componentes do sistema são correlacionados [3].

1.6.3 Restrição geométrica (RWF - *Random Walk on a Fractal Structure*)

Outra classe de restrições físicas que levam ao comportamento subdifusivo é a geometria do ambiente subjacente. Imagine uma partícula que se difunde em um ambiente altamente lotado, como o de uma célula biológica, onde ela só pode se mover caminhos estreitos e tortuosos com becos sem saída, como em um labirinto. O comportamento do deslocamento quadrático médio nas estruturas fractais é tipicamente subdifusivo devido à forte antipersistência da caminhada. As etapas são anti-correlacionadas porque viajando em uma estrutura fractal, o caminhante encontra muitos obstáculos e muitas vezes precisa voltar [3].

Capítulo 2

Metodologia

2.1 Métodos experimentais

Os experimentos foram feitos no laboratório de Física Biológica da UFSJ, e foram utilizados cupins (*cornitermes cumulans* (Kollar))(do tipo operário). Os cupins foram retirados do cupinzeiro e trazidos para o laboratório, a cada dia do processo de experimentação. Foram utilizadas placas de Petri de tamanhos variados para rastreamento do cupim. Baseamos nossos experimentos no rastreamento de partícula única, ou seja, cada série foi obtida utilizando um cupim diferente. O movimento dos cupins foi capturado por uma câmera, inicialmente por um período de 30 minutos. Os dados foram coletados por um programa elaborado pelo professor Sidiney Geraldo Alves na linguagem *Python* e através dos algoritmos que criamos foram calculadas as informações necessárias.

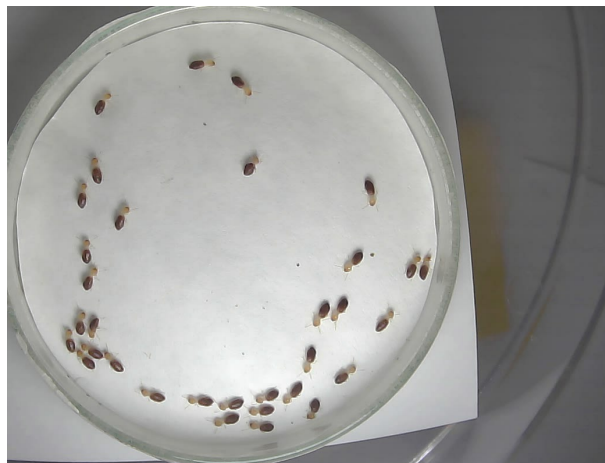


Figura 2.1: Cupim - Foto tirada no laboratório de Física Biológica da UFSJ

Na montagem alguns cuidados foram necessários para que a luz não atrapalhasse o experimento. Montamos uma estrutura de madeira com tnt em formato quadrado para impedir a entrada de luz do sol durante o dia. E também foram utilizadas 3 lâmpadas para que não houvesse sombra na placa. A câmera foi fixada a certa altura da placa com auxílio de parafusos em uma haste vertical que facilitava o movimento vertical.

Outro cuidado importante na montagem do experimento foi a utilização de papel filtro na placa de Petri, para que o cupim não deslizesse na placa, evitando assim que ele virasse na placa e impedisse o movimento normal do cupim. Inicialmente, nenhum obstáculo ou armadilha foi colocado na placa.

É importante ressaltar que durante todo o processo de experimentação, os cupins foram observados, caso houvesse algum problema, como eles saírem das placas, ficarem virados de cabeça para baixo ou até mesmo morrerem.

Também é importante falar sobre os cuidados que tivemos durante um experimento e outro para que os feromônios dos cupins não atrapalhassem no movimento do cupim do experimento seguinte. A cada experimento a placa de Petri foi lavada com água e detergente e secou naturalmente e um novo papel filtro foi utilizado.

2.2 Métodos computacionais

Após a filmagem de um experimento realizado em uma placa de Petri de 10 cm de diâmetro, por 30 minutos, utilizamos o programa *Python* para fazer a leitura, marcamos o cupim e rastreamos para coletar as séries temporais das posições do cupim. Utilizando o Fortran como ferramenta, desenvolvemos algoritmos para analisar as séries.

O primeiro algoritmo desenvolvido foi para calcular os tempos de espera. O cupim movimenta a maior parte do tempo na placa de Petri, mas muitas vezes observamos tempos de espera que variam, por isso essa medida é tão importante. As decisões que os animais tomam sobre quanto tempo esperar entre as atividades podem determinar o sucesso de diversos comportamentos, como forrageamento, formação de grupo ou prevenção de riscos. Os expoentes de escala que quantificam as proporções de esperas curtas e frequentes a raras e muito longas são específicas da espécie, sendo determinadas por características como modo de forrageamento, tamanho do corpo e preferência pela presa [21].

O segundo algoritmo é para encontrar uma medida crucial no forrageamento conhecida como tamanho do passo. Considerando uma caminhada contínua, discretizamos a caminhada para encontrar o tamanho do passo. Existem vários métodos para saber essa medida, definimos como a distância entre dois intervalos de tempos consecutivos e fixos. Considerando um intervalo de tempo de 1s, o tamanho de um passos é a distância linear entre dois pontos.

Um dos algoritmos mais valiosos é o deslocamento quadrático médio, do inglês *Mean squared displacement* (MSD), é uma medida da capacidade de dispersão (difusão) das partículas no sistema. É uma propriedade macroscópica que mede a evolução no tempo ou espaço do processo difusivo. É definido como a distância quadrática que o organismo avança a partir do ponto da origem (x_0 e y_0) do movimento para sua posição em um momento posterior t , calculada a média de um conjunto de trajetórias [1].

$$MSD(t) = (x(t) - x_0)^2 + (y(t) - y_0)^2 \quad (2.1)$$

Quando analisamos uma caminhada de um único organismo, uma medida mais conveniente seria o MSD em um intervalo de tempo, pois o MSD em função do tempo apresenta muito ruído e para analisar precisaria de uma média de todas as amostras. O MSD no intervalo de tempo, pode ser obtido se a média ao longo da montagem é substituída por uma média ao longo do tempo. Isto é feito percorrendo no tempo a posição inicial $[x(t_0), y(t_0)]$ em relação a medida $\langle x(t)^2 \rangle$ para obter origens múltiplas e maior precisão no cálculo [1].

O algoritmo de método da excursão máxima média (*mean maximal excursion* - MME) é uma alternativa ao ajuste do MSD para determinar o expoente de difusão anômala. Em seguida, considera-se o segundo momento do MME, calculando a média das trajetórias [3]:

$$\langle x_{max}^2(t) \rangle = \int_0^\infty x_0 P(x_{max} = x_0, t) dx_0 \quad (2.2)$$

onde $P(x_{max})$ é a probabilidade de que a distância máxima da origem alcançada até o tempo t seja igual a x_0 . A excursão máxima é a maior distância x que o caminhante alcança em um tempo t . A vantagem do MME sobre o MSD como observável está no fato de que a razão do desvio padrão versus a média é menor para o MME. Essa razão é uma medida para a dispersão em torno do centro (média) da distribuição, significando que o MME produz um expoente anômalo mais preciso [3].

E por último foi feito um algoritmo para os quantis. Esse teste é útil para estacionariedade quando os dados são limitados e é baseado na plotagem de linhas quantílicas. Dada uma amostra (ou coleção de dados), define-se uma medida de localização a que se dá o nome de quantil de ordem p , com $0 < p < 1$, como sendo o valor Q_p tal que $100p\%$ dos elementos da amostra são menores ou iguais a Q_p e os restantes $100(1 - p)\%$ elementos da amostra são maiores ou iguais a Q_p .

Para facilitar a obtenção dos quantis, que se calculam a partir da amostra ordenada, considere-se a seguinte notação para a amostra de dimensão n, x_1, x_2, \dots, x_n , depois de ordenada, por ordem crescente:

$$x_1 : n, x_2 : n, \dots, x_n : n \quad (2.3)$$

com esta notação, a obtenção do quantil de ordem p, Q_p , faz-se da seguinte forma:

$$Q_p = x_{(np)} + 1 : n \quad (2.4)$$

quando np não for inteiro

$$Q_p = \frac{1}{2}(x_{(np):n} + X_{np} + 1 : n) \quad (2.5)$$

se np for inteiro, onde se representa por (np) a parte inteira de np .

Por exemplo, suponha que se pretende calcular o quantil de ordem 0,90 para os seguintes dados que representam o peso (em kg) de 16 alunos de uma turma

$$52 \ 56 \ 62 \ 54 \ 52 \ 51 \ 60 \ 61 \ 56 \ 55 \ 56 \ 54 \ 57 \ 67 \ 61 \ 49 \quad (2.6)$$

para obter o quantil $Q_{0,90}$, começa-se por ordenar os dados (por ordem crescente)

$$49 \ 51 \ 52 \ 52 \ 54 \ 54 \ 55 \ 56 \ 56 \ 56 \ 57 \ 60 \ 61 \ 61 \ 62 \ 67 \quad (2.7)$$

de acordo com a fórmula anteriormente indicada, considerando $n = 16$ e $p = 0,90$, calcula-se

$$16 \cdot 0,90 = 14,4 \quad (2.8)$$

cuja parte inteira é 14, de onde $Q_{0,90} = x_{14+1:16} = x_{15:16} = 62$, que é o elemento de ordem 15 na amostra ordenada.

O teste é pertinente ao nível do conjunto. No nível da trajetória única, pode-se tentar cortar a trajetória em pedaços e comparar os quantis correspondentes.

2.3 Métodos analíticos

Existem três formalismos matemáticos para tratar uma difusão normal, são eles: as equações de Langevin, Fokker Planck e Mestra. A equação de Langevin é uma equação diferencial estocástica de velocidade em termos de ruído. A equação de Fokker-Planck (FP) (ou equação direta de Kolmogorov) é uma equação de difusão geral e uma das mais simples[22]. A equação mestra governa os processos estocásticos markovianos[11]. E todas as três abordagens são formalmente equivalentes[14].

Da mesma forma temos os formalismos matemáticos para a difusão anômala. A abordagem mais conhecida é o formalismo de caminhada aleatória de tempo contínuo (CTRW). As CTRWs foram propostas por Montroll e Weiss em 1965[14]. Mais tarde, o formalismo mostrou ser capaz de lidar e explicar a difusão anômala em sistemas físicos.

É importante explicar melhor alguns desses formalismos começando pela equação de Langevin.

2.3.1 Equação de Langevin

Consideramos uma partícula com massa m realizando uma caminhada aleatória dentro de um fluido, devido ao bombardeio de moléculas do fluido, ela obedece a uma distribuição de equilíbrio (maxwelliana) [22].

Pierre Langevin descreveu esse movimento com uma equação diferencial estocástica simples, mas muito interessante (vamos trabalhar em uma dimensão por simplicidade) [22].

$$m\ddot{x} = -a\dot{x} + F(t) \quad (2.9)$$

onde $a\dot{x}$ representa a força de atrito, x é a posição, \dot{x} é a velocidade da partícula, a é a taxa de amortecimento e depende do raio da partícula e da viscosidade do fluido, e $F(t)$ é uma força flutuante aleatória devido ao bombardeio aleatório da partícula pelas moléculas do fluido [22].

Se a força aleatória flutuante estava ausente, a partícula começando com uma velocidade inicial v_0 diminuiria gradualmente devido ao atrito. Multiplicando a equação 2.11 com x , nós temos

$$mx\ddot{x} = m\left[\frac{d(x\dot{x})}{dt} - \dot{x}^2\right] = -ax\dot{x} + xF(t) \quad (2.10)$$

e depois de calcular médias sobre um grande número de partículas, encontramos, que $\langle xF(t) \rangle = 0$ devido à natureza irregular da força $F(t)$,

$$m\frac{d(x\dot{x})}{dt} = m\langle \dot{x}^2 \rangle - a\langle x\dot{x} \rangle \quad (2.11)$$

o teorema de equipartição da energia diz que, no equilíbrio térmico, a energia cinética média vale $kT/2$. Como o gás de fundo está em equilíbrio, a energia cinética da partícula é proporcional a temperatura do gás, $m\langle \dot{x}^2 \rangle / 2 = kT/2$, em que k é a constante de Boltzmann e T a temperatura do gás. A equação agora assume a forma [22]

$$\left(\frac{d}{dt} + \gamma\right) \langle x\dot{x} \rangle = \frac{kT}{m} \quad (2.12)$$

onde $\gamma = \frac{a}{m}$, que tem a solução

$$\langle x\dot{x} \rangle = \frac{1}{2} \frac{d\langle x^2 \rangle}{dt} = Ce^{-\gamma t} + \frac{kT}{a} \quad (2.13)$$

em $t = 0$, o deslocamento quadrado médio é zero, de modo que $0 = C + kT/a$, a equação torna-se:

$$C = -\frac{kT}{a}$$

$$\frac{1}{2} \frac{d \langle x^2 \rangle}{dt} = \frac{kT}{a} (e^{-\gamma t}) + \frac{kT}{a}$$

$$\frac{1}{2} \frac{d \langle x^2 \rangle}{dt} = \frac{kT}{a} (1 - e^{-\gamma t}) \quad (2.14)$$

ao integrar a equação acima, encontramos a solução

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2kt}{a} \left[t - \frac{1}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}) \right] \quad (2.15)$$

o limite $t \ll 1/\gamma$ (tempo muito menor que o tempo de colisão), a solução na equação anterior tem a forma $\langle x^2 \rangle \sim t^2$ (expandindo o exponencial até segunda ordem), que é chamada difusão "balística" e significa que, poucas vezes as partículas não são impedidas por colisões e se difundem muito rapidamente.

No outro limite, $t \gg 1/\gamma$, a solução tem a forma [22]

$$\langle x^2 \rangle \sim \frac{2kT}{a} t \quad (2.16)$$

ou, para o caso tridimensional, se novamente o gás estiver em equilíbrio e for isotrópico de modo que $\frac{\langle r^2 \rangle}{3} = \langle x^2 \rangle$,

$$\frac{\langle r^2 \rangle}{3} = \frac{2kT}{a} t$$

$$\langle r^2 \rangle = \frac{6kT}{a} t = Dt \quad (2.17)$$

onde $D = 6kT/a$ é uma expressão para a constante de difusão em termos de características de partículas e fluidos e observe que novamente $\langle r^2 \rangle$ tem uma relação de escala simples com o tempo, $\langle r^2 \rangle = Dt$ [22].

2.3.2 Equação de Fokker-Planck

A equação de Fokker-Planck (FP) (ou equação direta de Kolmogorov) é a equação de difusão mais simples. Partimos de uma descrição de difusão em termos de um passeio aleatório [22]:

- (i) Assumimos que o valor médio $\mu_{\Delta z}$ dos passos aleatórios pode ser diferente de zero, o que corresponde a um movimento sistemático das partículas na direção do sinal de $\mu_{\Delta z}$, e
- (ii) assumimos que a média e a variância podem ser espacialmente dependentes.

$$\mu_{\Delta z} = \mu_{\Delta z}(z) \quad (2.18)$$

e,

$$\sigma_{\Delta z}^2 = \sigma_{\Delta z}^2(z) \quad (2.19)$$

o que significa que a distribuição dos incrementos depende da localização espacial, ou seja, é da forma $q\Delta z, z(\Delta z, z)$. Para ser compatível com essas suposições, a equação abaixo deve ser reescrita de forma um pouco mais geral,

$$P(z, t) = \int_{-\infty}^{\infty} P(z - \Delta z, t - \Delta t) q_{\Delta z}(\Delta z) d\Delta z \quad (2.20)$$

ficando assim:

$$P(z, t) = \int_{-\infty}^{\infty} P(z - \Delta z, t - \Delta t) q_{\Delta z, z}(\Delta z, z - \Delta z) d\Delta z \quad (2.21)$$

que é a equação de Chapman-Kolmogorov, e onde agora $q_{\Delta z, z}(\Delta z, z)$ é a densidade de probabilidade de estar na posição z e dar um passo Δz no tempo Δt [22].

Expandimos o integrando da equação acima em uma série de Taylor em termos de z , de modo que

$$P(z, t) = \int_{-\infty}^{\infty} AB d\Delta z \quad (2.22)$$

com

$$A = P(z, t) - \partial_t P(z, t) \Delta t - \partial_z P(z, t) \Delta z + \frac{1}{2} \partial_z^2 P(z, t) \Delta z^2 + \dots \quad (2.23)$$

onde também expandimos para a primeira ordem em t .

$$P(z - \Delta z, t - \Delta t) = P(z, t) - \Delta t \partial_t P(z, t) - \Delta z \partial_z P(z, t) + \frac{1}{2} \Delta z^2 \partial_z^2 P(z, t) \quad (2.24)$$

e temos

$$B = q_{\Delta z, z}(\Delta z, z) - \partial_z q_{\Delta z, z}(\Delta z, z) \Delta z + \frac{1}{2} \partial_z^2 q_{\Delta z, z}(\Delta z, z) \Delta z^2 + \dots \quad (2.25)$$

(observe que a expansão de Taylor é em relação ao segundo argumento de $q_{\Delta z, z}$, expandimos apenas em relação a z , mas não em relação a Δz).

No multiplicando e avaliando as integrais, usamos a normalização de $q_{\Delta z, z}$

$$\int q_{\Delta z, z}(\Delta z, z) d\Delta z = 1 \quad (2.26)$$

a definição do valor médio

$$\mu_{\Delta z}(z) := \int \Delta z q_{\Delta z, z}(\Delta z, z) d\Delta z \quad (2.27)$$

e o segundo momento

$$\langle (\Delta z^2) \rangle (z) = \int \Delta z^2 q_{\Delta z, z}(\Delta z, z) d\Delta z \quad (2.28)$$

e expressões como:

$$\int \Delta z \partial_z q_{\Delta z, z}(\Delta z, z) \Delta z d\Delta z \quad (2.29)$$

são consideradas iguais:

$$\int \Delta z \partial_z q_{\Delta z, z}(\Delta z, z) \Delta z d\Delta z = \partial_z \mu_{\Delta z}(z) \quad (2.30)$$

de modo que, se mantiver todos os termos até a segunda ordem em Δz , encontramos a equação de Fokker-Planck,

$$P(z, t) = \int [P(z, t) - \partial_t P(z, t) \Delta t - \partial_z P(z, t) \Delta z + \frac{1}{2} \partial_z^2 P(z, t) \Delta z^2 + \dots]$$

$$[q_{\Delta z, z}(\Delta z, z) - \partial_z q_{\Delta z, z}(\Delta z, z) \Delta z + \frac{1}{2} \partial_z^2 q_{\Delta z, z}(\Delta z, z) \Delta z^2 + \dots] d\Delta z \quad (2.31)$$

substituindo na equação acima,

$$\partial_t P(z, t) \Delta t = [-\partial_z P(z, t) \Delta z + \frac{1}{2} \partial_z^2 P(z, t) \Delta z^2] [-\partial_z \mu \Delta z + \frac{1}{2} \partial_z^2 \Delta z^2] \quad (2.32)$$

isolando $-\partial_z$ e $\frac{1}{2} \partial_z^2$

$$\partial_t P(z, t) \Delta t = -\partial_z [P(z, t) \mu \Delta z] + \frac{1}{2} \partial_z^2 [\Delta z^2(z) P(z, t)] \quad (2.33)$$

passando o Δt dividindo:

$$\partial_t P(z, t) = -\partial_z [V(z) P(z, t)] + \partial_z^2 [D(z) P(z, t)], \quad (2.34)$$

onde,

$$V(z) = \frac{\mu_{\Delta z}(z)}{\Delta t} \quad (2.35)$$

é a velocidade de deriva e

$$D(z) = \frac{\langle \Delta z^2 \rangle (z)}{2\Delta t} \quad (2.36)$$

o coeficiente de difusão.

A diferença básica entre a equação FP e a equação de difusão simples é que tanto a velocidade de deriva e o coeficiente de difusão podem ser espacialmente dependentes. Essas diferenças permitem que a equação de FP modele comportamentos difusivos mais

complexos.

Ela tem a vantagem de ser uma equação diferencial determinística que permite descrever a evolução dos sistemas estocásticos, desde que as difusividades e as velocidades de deriva sejam conhecidas e, desde que as condições de sua aplicabilidade sejam atendidas [22].

A equação de FP é adequada apenas para sistemas próximos ao equilíbrio, com apenas pequenos desvios de algumas partículas do equilíbrio, ou, no sentido da caminhada aleatória, com apenas pequenos passos das partículas realizando a caminhada aleatória, exatamente como é o caso da difusão simples [22].

2.3.3 CTRW - *Continuous Time Random Walk*

Considere o caso de uma caminhada aleatória em 1-D, com a posição do caminhante aleatório após n passos dados pela versão 1-D da equação [22],

$$\vec{r}_n = \Delta \vec{r}_n + \Delta \vec{r}_{n-1} + \Delta \vec{r}_{n-2} + \dots + \Delta \vec{r}_1 + \vec{r}_0 \quad (2.37)$$

e o deslocamento quadrático médio (para $z_0 = 0$) dado pela equação

$$\langle \vec{r}_n^2 \rangle = \sum_{j=1, (k=j)}^n \sigma_{\Delta \vec{r}, j}^2 + \sum_{j, k=1, k \neq j}^n cov(\Delta \vec{r}_j, \Delta \vec{r}_k) \quad (2.38)$$

vamos supor que as etapas são independentes uns dos outros, de modo que as covariâncias sejam zero e o deslocamento quadrático médio:

$$\langle z_n^2 \rangle = n\sigma_{L, \alpha}^2 \quad (2.39)$$

Em teoria da probabilidade e na estatística, a covariância, ou variância conjunta, é uma medida do grau de interdependência numérica entre duas variáveis aleatórias. Assim, variáveis independentes têm covariância zero.

O tempo agora é uma variável que evolui dinamicamente, como faz a posição do caminhante. Portanto, forma passos infinitos no espaço que podem ser acompanhados por um tempo infinito para a etapa ser concluída, e a variância do passeio aleatório, ou seja, seu deslocamento quadrático médio, permanece finito. A extensão da caminhada aleatória que inclui o tempo é chamado de *Continuous Time Random Walk(CTRW)*. Sua definição formal consiste novamente na equação de posição, e, além disso, o momento em que se dá o número de passos da caminhada é agora também aleatório (uma variável aleatória), e evolui de acordo com [22]

$$t_n = \Delta t_n + \Delta t_{n-1} + \Delta t_{n-2} + \dots + \Delta t_1 + \Delta t_0, \quad (2.40)$$

onde t_0 é o tempo inicial, e o Δt_j são incrementos temporais aleatórios.

Para completar a definição da CTRW, precisamos também da distribuição de

probabilidade Δt_i , ou seja, devemos especificar a probabilidade para i -ésima etapa durar um tempo Δt_i :

(i) No modelo de espera, a posição dos passos e o tempo são independentes, e são duas probabilidades, uma para $\Delta \vec{r}$, o $q_{\Delta \vec{r}}$ já apresentado, e uma para Δt , digamos $q_{\Delta t}$. Aqui então Δt é interpretado como um tempo de espera, a partícula espera em sua posição atual até o momento Δt transcorrido, e então executa um passo espacial $\Delta \vec{r}$ durante o qual não há tempo consumido.

(ii) No modelo de velocidade, o tempo Δt é interpretado como o tempo de viagem da partícula, $\Delta t = |\Delta \vec{r}|/v$, onde v é uma velocidade constante assumida, de modo que a distribuição dos incrementos é $q_{\Delta z, \Delta t} = \delta(\Delta t - |\Delta \vec{r}|/v)q_{\Delta \vec{r}}(\Delta \vec{r})$. Basta observar que no caso geral seria necessário especificar a distribuição de probabilidade conjunta $q_{\Delta z, \Delta t}(\Delta z, \Delta t)$ para os incrementos espaciais e temporais.

As equações da CTRW podem ser entendidas como uma generalização da equação de Einstein ou a equação de Chapman-Kolmogorov. É a equação útil para introduzir o conceito dos pontos de virada, que são os pontos em que uma partícula chega e inicia uma nova etapa de caminhada aleatória. A evolução da equação da distribuição dos pontos de viragem $Q(z, t)$ (aqui em 1-D) segue basicamente a partir da conservação de partículas,

$$Q(z, t) = \int d(\Delta z) \int_0^t d\Delta t Q(z - \Delta z, t - \Delta t) q_{\Delta z, \Delta t}(\Delta z, \Delta t) + \delta(t)P(z, t = 0) + S(z, t), \quad (2.41)$$

onde o primeiro termo do lado direito descreve uma caminhada aleatória completa, incluindo etapas no espaço e no tempo, o segundo termo leva a condição inicial $P(z, t = 0)$ em conta, e o terceiro termo S é um termo de origem [22].

A expressão para $P(z, t)$, é a probabilidade do caminhante estar na posição z no tempo t , é diferente para o modelo de espera e para o modelo de velocidade, respectivamente. No caso do modelo de espera, onde [22]

$$q_{\Delta z, \Delta t}(\Delta z, \Delta t) = q_{\Delta t}(\Delta t)q_{\Delta z}(\Delta z) \quad (2.42)$$

nós teremos

$$P_w(z, t) = \int_0^t d\Delta t Q(z, t - \Delta t) \Phi_w(\Delta t) \quad (2.43)$$

com

$$\Phi_w(\Delta t) := \int_{\Delta t}^{\infty} dt' q_{\Delta t}(t') \quad (2.44)$$

a probabilidade de esperar Δt . No modelo de velocidade, onde

$$q_{\Delta z, \Delta t}(\Delta z, \Delta t) = \delta(\Delta t - |\Delta z|/v)q_{\Delta z}(\Delta z), P(z, t) \quad (2.45)$$

toma a forma

$$P_v(z, t) = \int_{-vt}^{vt} d\Delta z \int_0^t d\Delta t Q(z - \Delta z, t - \Delta t), \Phi_v(\Delta z, \Delta t) \quad (2.46)$$

com

$$\Phi_v(\Delta z, \Delta t) = \frac{1}{2} \delta(|\Delta z| - v\Delta t) \int_{|\Delta z|}^{\infty} dz' \int_{\Delta t}^{\infty} dt' \delta(t' - |z'|/v) q_{\Delta z}(z') \quad (2.47)$$

a probabilidade de dar um passo de duração pelo menos $|\Delta z|$ e de duração pelo menos Δt [22].

A expressão para P_W e P_V determinam a probabilidade de ver a partícula ao mover-se entre dois pontos de retorno, levando em conta apenas a parte da caminhada aleatória na qual o tempo é gasto pela partícula [22].

O tipo de difusão que o formalismo da CTRW produz depende da distribuição dos incrementos dos passos. Se os incrementos forem pequenos, então o tratamento anterior pode ser aplicado novamente, a difusão é normal, e novamente uma simples equação de difusão pode ser derivada. Se os incrementos não forem pequenos, então pode resultar em super ou subdifusão, dependendo da escolha concreta de distribuições dos incrementos. Por exemplo, pequenos passos espaciais em combinação com distribuições de Lévy, longos tempos de espera, produzirão sub-difusão no modelo de espera [22].

Capítulo 3

Resultados e Discussão

3.1 Experimentos utilizados para análise do comportamento subdifusivo

Os experimentos para analisar o comportamento subdifusivo podem ser classificados em duas categorias, experimento em conjunto ou rastreamento de partícula única. No rastreamento de conjunto, mais de uma partícula é rastreada durante o experimento e no rastreamento de partícula única, mesmo que se tenha várias partículas em conjunto, apenas uma é rastreada. A vantagem do rastreamento de partícula única é, obviamente, que temos todas as informações sobre o movimento do rastreado e a desvantagem é que, em muitos casos, o procedimento de aquisição de dados é complicado, de modo que apenas uma ou poucas trajetórias consideráveis estão disponíveis [3].

Alguns dos obstáculos na obtenção de dados e análise é quando o sistema não é ergódico ou no caso de não estacionariedade, as informações de interesse podem ser difíceis de deduzir. Mesmo que a situação corresponda a um processo aleatório estacionário e ergódico, a situação ainda pode estar longe de ser trivial. Até no mais simples caso de difusão normal, a obtenção de dados é complicada [3].

No entanto, uma análise completa das trajetórias do processo permite um palpite fundamentado sobre as propriedades, que por sua vez dizem algo sobre o ambiente em que a difusão ocorre. Tais ambientes são classificados como "armadilha", "labiríntico", "viscoelástico". E através de modelos matemáticos podemos ter uma visão geral do sistema. Os modelos mais populares são caminhadas aleatórias de tempo contínuo, caminhadas aleatórias em fractais (por exemplo, num aglomerado de percolação), e movimentos brownianos fracionários [3].

3.2 Experimento sem armadilhas

Inicialmente rastreamos o cupim em uma placa de Petri, sem nenhuma armadilha ou obstáculo. O objetivo desse primeiro experimento foi conhecer o comportamento do cupim,

esperando reproduzir alguns resultados já conhecidos na literatura, ou seja, que a difusão seria do tipo anômala, mas superdifusiva com $\alpha > 1$ [7].

Colocamos apenas 01 cupim na placa de Petri e rastreamos durante 30 minutos. Calculamos os tempos de espera, o tamanho de cada passo, o deslocamento quadrático médio (MSD) e o MSD no intervalo de tempo, a máxima excursão média (MME) e os quantis.

Os tempos de espera decaem em lei de potência, como já foi reportado na literatura [7]. Observa-se na figura 3.1 que o tempo de espera de 1s é muito frequente e essa frequência vai diminuindo gradativamente até os 16s que o tempo de espera máximo que o cupim ficou parado durante o experimento.

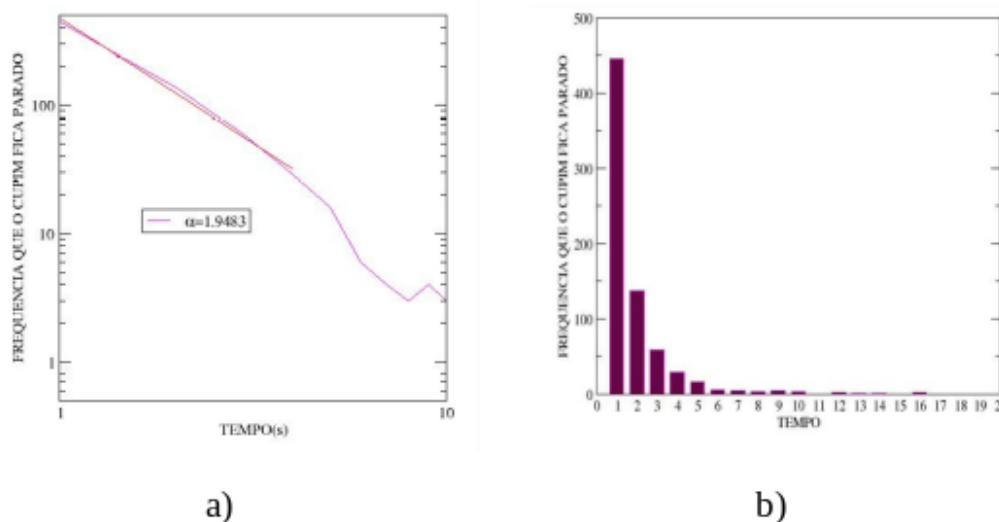


Figura 3.1: Experimento realizado na placa de Petri com 01 cupim, durante um período de 30 minutos: a) Gráfico dos tempos de espera em log-log com ajuste em lei de potência; b) Gráfico da variação dos tempos de espera

O cupim dá saltos longos e passos curtos, mas não está relacionado com o cansaço, o cupim intercala sua caminhada com períodos de repouso, que é um comportamento típico do forrageamento dos cupins. É importante ressaltar o caráter autoafim da figura 3.2, ou autosimilar, ou seja um pedaço da figura se parece com a imagem original, ou ao todo.

A figura 3.3 é muito interessante, porque mostra como os cupins caminham boa parte do tempo nas laterais da placa deixando uma área bem sombreada na figura, enquanto no centro observa-se uma área que nem foi visitado em nenhum momento do rastreo, o que é um comportamento típico do forrageamento dos cupins confinados.

Na figura 3.4 é possível observar que o MSD cresce com o tempo e depois sofre oscilações. Esperava-se que o crescimento inicial fosse em lei de potência, note que os eixos estão em escala logarítmica, mas o experimento está com muita flutuação, muito ruído, pois temos apenas uma amostra. Para conseguir fazer um ajuste seria necessários mais amostras. E a saturação que ocorre no final é devido ao tamanho limitado (finito) da arena.

Na figura 3.5 é possível observar o MSD no intervalo de tempo. Nesse caso ao invés

de fazer a média em várias amostras, fizemos uma média temporal (média no tempo), o gráfico tem muito menos flutuações, menos ruídos. E podemos estimar um expoente para parte inicial do gráfico. Temos um crescimento em lei de potência, com valor do coeficiente $\alpha = 1.851$, condizente com difusão anômala mas do tipo superdifusiva, concordando com o que já foi reportado na literatura [7], pois não foi utilizado nenhum modelo para forçar uma subdifusão.

Na figura 3.6, temos o gráfico da maior distância x que o caminhante alcança em um tempo t . O MME (*mean maximal excursion*) pode produzir um expoente anômalo mais preciso, mas como é possível observar o gráfico tem muito ruído, pois utilizamos apenas uma amostra.

Observa-se na figura 3.7, o gráfico dos quantis, apesar de não se esperar observar estacionariedade, já que o experimento é biológico, com ser vivo, mas os quantis mais baixos tem o comportamento aproximadamente constante.

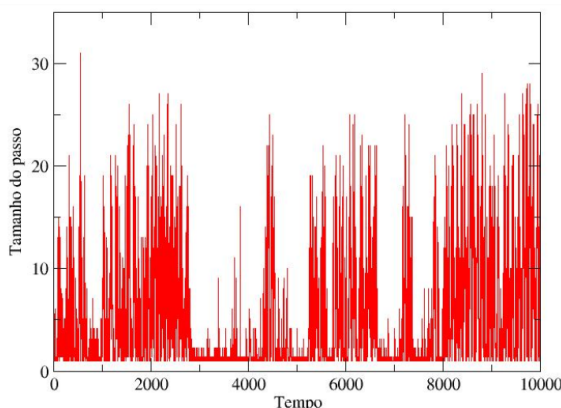


Figura 3.2: Gráfico dos tamanhos de passos do experimento realizado em uma placa de Petri de 10 cm de diâmetro

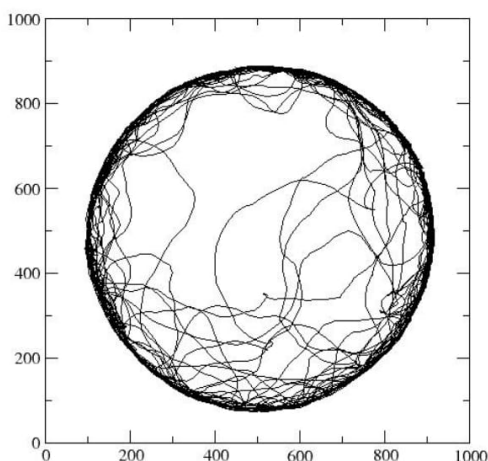


Figura 3.3: Caminhada de 01 cupim em uma placa circular de 10 cm de diâmetro por 30 minutos

3.3 Experimentos com armadilhas ou obstáculos

Após esses experimentos resolvemos fazer um projeto para confeccionar um labirinto em impressão 3D. A plaquinha tem 10 cm de diâmetro e as paredes possuem 1 cm de altura. Realizamos vários experimentos no labirinto com intervalos de tempo variáveis, mas apenas 03 experimentos ficaram bons para o rastreamento. O labirinto dificulta muito a filmagem por gerar muitas sombras, muitos experimentos não conseguimos utilizar devido a perda do cupim no momento do rastreamento. Durante os experimentos foram utilizados 1 cupim diferente em cada montagem.

Os tempos de espera dos experimentos sofreram variações como podem ser observados na figura 3.9. Mas o tempo de espera de 1s ainda é muito frequente e a frequência vai diminuindo gradativamente.

Como ocorreu no experimento sem obstáculos ou restrições o cupim deu saltos longos e passos curtos, como pode ser observado na figura 3.10.

Na figura 3.11 é possível notar que mesmo em um labirinto o cupim revisita várias vezes o mesmo lugar.

Através dos 03 gráficos do MSD no intervalo de tempo, apresentados na figura 3.12, observamos um crescimento inicial em lei de potência, com expoentes em torno de 1.7, o que indica caminhadas superdifusivas.

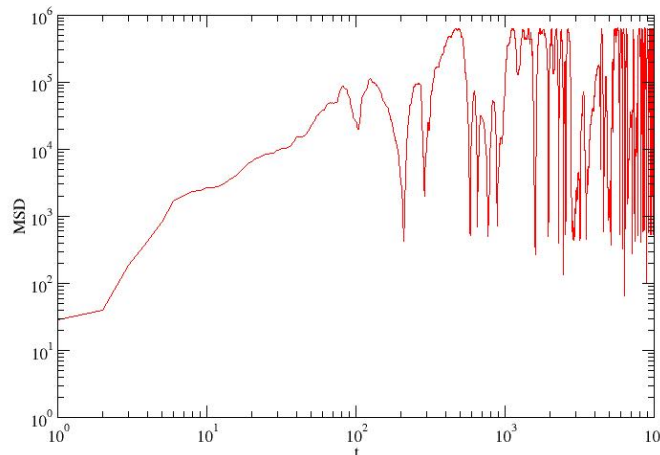


Figura 3.4: Gráfico do MSD no experimento realizado com apenas 01 cupim durante o intervalo de tempo de 30 minutos

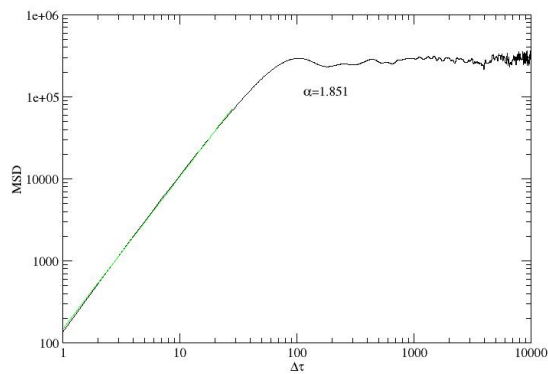


Figura 3.5: Gráfico do MSD no intervalo de tempo, com crescimento em lei de potência e expoente de $\alpha = 1.851$, condizente com difusão anômala mas do tipo superdifusiva

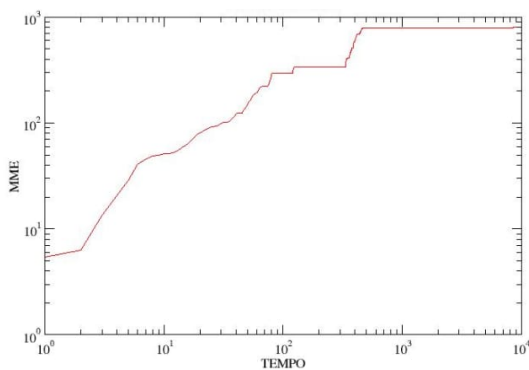


Figura 3.6: Gráfico da maior distância x que o caminhante alcança em um tempo t .

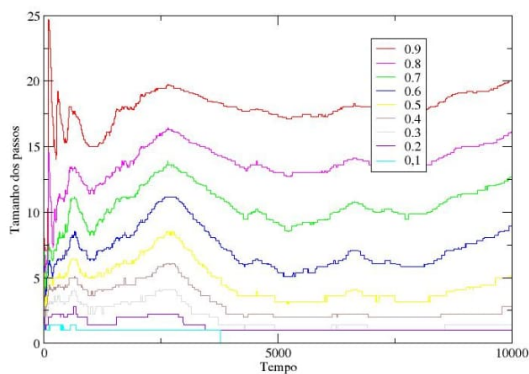


Figura 3.7: Gráfico dos quantis do experimento realizado na placa de Petri com apenas 01 cupim



Figura 3.8: Labirinto em impressão 3D

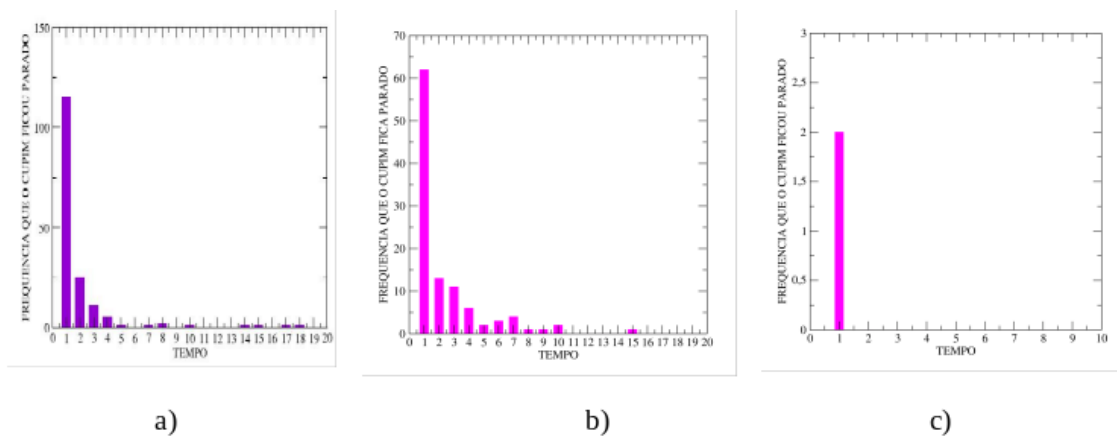


Figura 3.9: Gráfico da variação dos tempos de espera no labirinto de 10 cm de diâmetro com 01 cupim: a) experimento 01; b) experimento 02; c) experimento 03

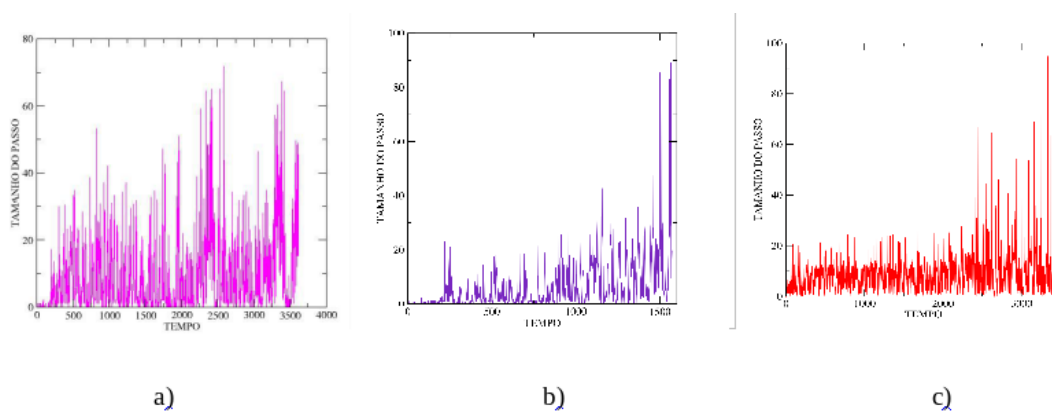


Figura 3.10: Gráfico dos tamanhos de passos dos experimentos realizados no labirinto de 10 cm de diâmetro: a) experimento 01; b) experimento 02; c) experimento 03

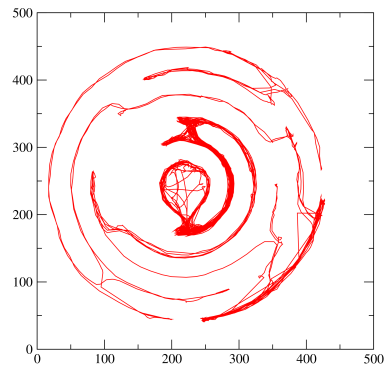


Figura 3.11: Caminhada de um cupim no labirinto

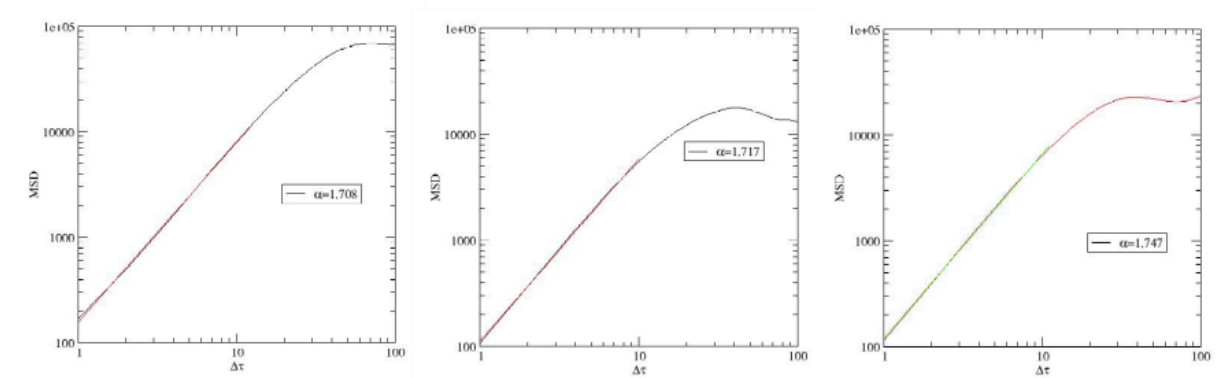


Figura 3.12: Gráfico do MSD x Δt nos labirintos: a) experimento 01; b) experimento 02; c) experimento 03

Capítulo 4

Conclusões e Perspectivas

Através dos primeiros experimentos sem utilizar armadilhas ou restrições geométricas, observou-se que através dos resultados, foi encontrado um expoente que condiz com difusão anômala, mas do tipo superdifusiva. O MSD encontrado foi $\alpha = 1.851$. Esse resultado condiz com os resultados já encontrados na literatura, pois os cupins caminham de forma superdifusiva. Nos experimentos realizados no labirinto, observou-se que o expoente foi na média de $\alpha = 1.724$, um valor um pouco menor, mas ainda superdifusivo.

Ainda existe muito trabalho para ser realizado, como calcular a dimensão fractal, dimensão da caminhada, realizar mais experimentos com tempos maiores ou com mais cupins no labirinto e também buscar novos ambientes para tentar forçar uma subdifusão, com armadilhas ou outros tipos de restrições.

Referências

- [1] Fuentes, S. A. O., 2008. “Complejidad y dinámica en caminatas de insectos”.
- [2] Constantino, R., 1999. “Chave ilustrada para identificação dos gêneros de cupins (insecta: Isoptera) que ocorrem no brasil”.
- [3] Meroz, Y., and Sokolov, I. M., 2015. “A toolbox for determining subdiffusive mechanisms”. *Physics Reports*, 1(6071), Fev, p. 29.
- [4] Reynolds, A. M., Smith, A. D., Menzel, R., Greggers, U., Reynolds, D. R., and Riley, J. R., 2007. “Displaced honey bees perform optimal scale free search flights”.
- [5] Reynolds, A. M., Reynolds, D. R., Smith, A. D., Svensson, G. P., and Lofstedt, C., 2007. “Appetitive flight patterns of male *agrotis segetum* moths over landscape scales”.
- [6] Seuront, L., Duponchel, A., and Chapperon, C., 2007. “Heavy-tailed distributions in the intermittent motion behaviour of the intertidal gastropod *littorina littorea*”.
- [7] Miramontes, O., DeSouza, O., Paiva, L. R., Marins, A., and Orozco, S., 2014. “Lévy flights and self-similar exploratory behaviour of termite workers: Beyond model fitting.”. *Plos One*, 9, p. e111183.
- [8] Paiva, L. R., Marins, A., Cristaldo, P. F., Ribeiro, D. M., Alves, S. G., Reynolds, A. M., DeSouza, O., and Miramontes, O., 2021. “Scale-free movement patterns in termites emerge from social interactions and preferential attachments”. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United of America*.
- [9] Ernst, D., Köhler, J., and Weiss, M., 2004. “Probing the type of anomalous diffusion with single-particle tracking”.
- [10] Weiss, M., Elsner, M., Kartberg, F., and Nilsson, T., 2004 Nov; 87(5): 3518–3524.. “Anomalous subdiffusion is a measure for cytoplasmic crowding in living cells f.,biophys j.”.
- [11] de Lima, G. M. B., 2013. “Processos aleatórios não-markovianos: Perfis de memória”. p. 94.
- [12] Vainstein, M. H., 2007. “Processos estocásticos não-markovianos”. *Universidade de Brasília Instituto de Física*.
- [13] da Silva Filho, A. C. “Os expoentes de hurst no reconhecimento de padrões em medicina”. p. 94.
- [14] Viswanathan, G., da Luz, M. G. E., Raposo, E. P., and Stanley, H. E., 2011. “The physics of foraging”. *Cambridge University Press*, 01, p. 117.
- [15] Stariolo, D. A., 2014. “Mecânica estatística”. p. 132.
- [16] Fernandes, F. M. S. “Cinquentenário da simulação computacional em mecânica estatística”. *Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa*.

- [17] de Camargo, C. C., 1981. “Confiabilidade aplicada à sistemas de potência”. *Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos Editora and Santa Catarina: FEESC*.
- [18] Pessoa, P. F. P. “Opções de conversão com movimento de reversão à média com saltos de poisson: o caso do setor sucroalcooleiro”. *Puc - Rj*.
- [19] Ehlers, R. S., 2009. “Análise de séries temporais”.
- [20] Filho, J. R. F., 2015. “Geometria fractal: da natureza para a sala de aula”.
- [21] Wearmouth, V. J., McHugh, M. J., Humphries, N. E., Naegelen, A., Ahmed, M. Z., Southall, E. J., Reynolds, A. M., and Sims, D. W., 2014. “Scaling laws of ambush predator ‘waiting’ behaviour are tuned to a common ecology”. <http://doi.org/10.1098/rspb.2013.2997>.
- [22] Vlahos, L., Isliker, H., Kominis, Y., and Hizanidis, K. “Normal and anomalous diffusion: A tutorial”.