

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE FÍSICA

**Ordenamento e destilação em um modelo
estocástico de partículas interagentes sob
contrafluxo**

Eduardo Velasco Stock

Porto Alegre
Agosto, 2016

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE FÍSICA

Ordenamento e destilação em um modelo estocástico de partículas interagentes sob contrafluxo*

Eduardo Velasco Stock

Dissertação realizada sob orientação do Prof. Dr. Roberto da Silva e apresentada ao Instituto de Física da UFRGS em preenchimento parcial dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Física.

Porto Alegre
Agosto, 2016

*Trabalho financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

Resumo

Neste trabalho estudamos uma dinâmica estocástica de partículas de duas espécies baseada em células. Basicamente, incorporamos algumas inovações em um modelo unidimensional proposto e resolvido por R. da Silva et al. (Physica A, 2015), que considera que em um célula, na ausência de partículas da espécie contrária, a partícula vai pra frente com uma probabilidade p , que representaria um campo na direção longitudinal de um corredor e fica na própria célula com $q=1-p$. Contudo, essa probabilidade p é reduzida de acordo com a concentração de partículas contrárias.

Nosso trabalho não apenas estendeu o problema pra duas dimensões como também incluiu aspectos relativos a colisão e o espalhamento para células vizinhas. Nossos resultados são divididos em duas situações: a) Espécie contrária permanece imóvel funcionando como obstáculos b) Espécie contrária em movimento. Na primeira situação podemos ver uma interessante transição na distribuição dos tempos de travessia em função das concentrações dos obstáculos, por monitorar a curtose da distribuição. Quando a espécie contrária se movimenta, vemos que o tempo de destilação entre as partículas (tempo para que as espécies estejam geograficamente separadas no corredor) depende do parâmetro ligado ao espalhamento transversal das partículas, parâmetro este, que não influencia no caso das partículas paradas. Finalmente nós colocamos as partículas em um sistema com condições periódicas de contorno. Neste caso, podemos observar o aparecimento de padrões de bandas longitudinais ao campo, exatamente como ocorrem em problemas de colóides carregados sob a ação de campos longitudinais e em modelos de pedestres em corredores. Mostramos como o sistema relaxa para tal tipo de estado estacionário utilizando um adequado parâmetro de ordem ligado a segregação das partículas. Nosso modelo, diferentemente dos modelos para pedestres, não se baseia em equações tipo Langevin. Nossa abordagem é totalmente estocástica e por esse ponto de vista ainda mais fundamental e geral, podendo ser estendida para mais modelos de partículas em fluxos contrários. Nossa solução vem tanto através de simulações Monte Carlo bem como soluções das equações diferenciais parciais que descrevem o sistema e que são oriundas das recorrências estabelecidas para os caminhantes aleatórios. As simulações Monte Carlo e soluções via EDP mostram boa concordância em todos os aspectos analisados, tanto qualitativa quanto quantitativamente.

Palavras chave: Dinâmica de partículas em fluxo contrário; Relaxação para o estado estacionário, Segregação de partículas; Destilação; Equações Diferenciais Parciais; Monte Carlo.

Abstract

In this work we study a stochastic dynamic of particles of two types based on cells. Basically we incorporate some innovations on a one-dimensional model proposed and solved by R. da Silva et al. (Physica A, 2015) which considers that in the absence of particles of the opposite species in the cell a particle goes toward the next cell with probability p and returns to the previous cell with probability $q = 1 - p$. However this motion probability linearly decreases with the relative density of the contrary species.

Our work not only expands the problem for two dimensions but also includes collision aspects by adding scattering to the neighbouring cells. Our results are divided into two different categories: a) One of the species remain fixed in their places which means that such particles will work as obstacles; b) Both species can move in the environment. In the first situation we can observe, by monitoring the kurtosis, that an interesting transition of the crossing time distribution arises as the concentration of the obstacles increases. When both species can move we can observe that the distillation time (spent time for the complete geographical separation of the species in the corridor) depends on the parameter related to the perpendicular scattering of the particles. This same parameter has shown no influence over the time distributions in the first situation. Finally we implement periodic boundary conditions in the field's direction. In this case we are able to observe the arising of band patterns parallel to the field's direction exactly as it does with oppositely charged colloids under the influence of a uniform electric field or pedestrian dynamics in corridors. We also show how the system relax to such stationary state by using a suitable order parameter related to the particles segregation. Differently from other pedestrian dynamics models, our model is not based on a Langevin-type equation. Our approach is totally stochastic and from this point of view, more fundamental and general to be extended to more types of models considering particles under counterflow. Our solution is obtained by both Monte Carlo simulations and numerical integration of partial differential equations (PDE) from recurrence relation of the directed random walkers. The Monte Carlo simulations and the solutions of the PDE show a good agreement in all aspects analysed both qualitatively and quantitatively.

Key words: particle dynamic under counterflow; relaxation to a stationary state; segregation of particles; distillation; Partial Differential Equations; Monte Carlo.

Sumário

1	Introdução	6
2	Dinâmica unidimensional - Breve revisão	10
2.1	Revisão do modelo original	10
2.2	Introduzindo efeitos de colisões quasi-elásticas	19
2.3	Fluxo em meio interagente com impurezas fixas	20
3	Fluxo de partículas em rede bidimensional e segregação	22
3.1	Segregação celular	25
3.2	Segregação por bandas	27
3.3	Contra-fluxo em simetria anelar - Condições periódicas de contorno	29
4	Resultados	32
4.1	Partículas B imóveis: Distribuição de tempos de travessia	33
4.2	Partículas B em movimento	38
4.2.1	Tempo médio de segregação e destilação	40
4.3	Simetria anelar e estado assintótico	48
4.3.1	Espécie A em distribuição inicial homogênea	49
4.3.2	Espécie A em distribuição inicial com assimetria em y	54
5	Conclusões e perspectivas	65

Lista de Figuras

2.1	Partículas A e B interagindo em uma dinâmica do tipo autômata celular.	12
2.2	Evolução da concentração das partículas A para $\alpha = 0.1$.	15
2.3	Evolução da concentração das partículas A para $\alpha = 0.4$.	16
2.4	Evolução temporal da posição média das partículas A para diferentes parâmetros α em escala log-log. A figura interior mostra o mesmo, porém em escala linear.	16
2.5	O desvio padrão cresce gradativamente em função do tempo até o momento da interação das partículas. Aqui utilizamos os mesmos parâmetros só que a figura está em escala linear enquanto o o grafico interior é que está em escala log-log. O tracejado corresponde ao ponto de isovariância para todos os parâmetros.	17
2.6	Evolução temporal da assimetria (skewness) da distribuição espacial das partículas.	18
2.7	Evolução temporal da curtose da distribuição espacial das partículas A visualizada para α de 0,1 até 0,4.	19
3.1	Partículas A e B interagindo em uma dinâmica na rede bidimensional. A dinâmica se dá por células.	23
3.2	Representação de uma situação em que haja alta segregação local por celular.	26
3.3	Representação de uma situação em que haja alta segregação local por bandas longitudinais.	28
3.4	Representação de uma situação em que haja alta segregação local por bandas transversais.	29
3.5	Ilustração de um sistema com condições de contorno periódicas. Obs.: Não estamos supondo uma geometria diferente da euclidiana.	30
4.1	Distribuições de tempos de travessia τ para diferentes valores de α , inicialmente considerando $\beta_{\parallel} = 0$ e $\beta_{\perp} = 0$. Temos um forte desvio do comportamento gaussiano no caso de $\alpha = 0,4$, o que corresponde a uma situação de alta resistência.	35
4.2	Distribuições de tempos de travessia deformam-se para diferentes valores de β . Podemos ver que há um inerente efeito do β_{\parallel} nos tempos de travessia. Contudo o mesmo não é observado para diferentes valores de β_{\perp} .	36

4.3	Gráfico log-log das distribuições de tempos de travessia para diferentes concentrações N_b . Há uma curiosa transição do tipo gaussiana para lei de potência para exponencial conforme aumentamos o número de obstáculos N_b	37
4.4	Distribuição espacial das partículas A marginalizada na direção y . Podemos observar uma excelente concordância entre EDP e MC.	39
4.5	Distribuições de tempos de travessia deformam-se para $\alpha's$ e $\beta's$ diferentes.	40
4.6	Configuração mais entropicamente provável no caso da segregação por bandas verticais. Esta configuração corresponde exatamente ao que entendemos como destilação.	41
4.7	Tempo de segregação celular para os diferentes valores de β_{\parallel} e β_{\perp} com dimensão lateral do sistema $L_y = 40$. Utilizamos $\alpha = 0, 1$ para obtenção destes mapas de cor.	42
4.8	Tempo de segregação celular para os diferentes valores de β_{\parallel} e β_{\perp} com dimensão lateral do sistema $L_y = 40$. Utilizamos $\alpha = 0, 4$ para obtenção destes mapas de cor.	44
4.9	Tempo de destilação para os diferentes valores de β_{\parallel} e β_{\perp} com dimensão lateral do sistema $L_y = 40$. Utilizamos $\alpha = 0, 1$ para obtenção destes mapas de cor.	45
4.10	Tempo de destilação para os diferentes valores de β_{\parallel} e β_{\perp} com dimensão lateral do sistema $L_y = 40$. Utilizamos $\alpha = 0, 4$ para obtenção destes mapas de cor.	46
4.11	Maior tempo médio de destilação encontrado na elaboração dos mapas de calor em função de N^{-1} , onde $N = N_A = N_B$ para os diferentes valores de α estudados.	47
4.12	Evolução temporal dos diferentes parâmetros de ordem considerando $\alpha = 0, 4$	48
4.13	Evolução temporal do parâmetro de ordem celular. Ambas as espécies estão uniformemente distribuídas no corredor $L_x \times L_y$. Utilizamos menor número de repetições (runs) conforme aumentamos o número de partículas.	50
4.14	Evolução temporal do parâmetro de ordem por bandas longitudinais. Ambas as espécies estão uniformemente distribuídas no corredor $L_x \times L_y$	51
4.15	Evolução temporal do parâmetro de ordem por bandas transversais. Ambas as espécies estão uniformemente distribuídas no corredor $L_x \times L_y$	51
4.16	Snapshot via simulação MC no instante $t = 1$ da evolução temporal com $N_{A,B} = 10^5$ partículas uniformemente distribuídas inicialmente.	52
4.17	Snapshot via simulação MC no instante $t = 100$ da evolução temporal com $N_{A,B} = 10^5$ partículas uniformemente distribuídas inicialmente.	53
4.18	Snapshot via simulação MC no instante $t = 8000$ da evolução temporal com $N_{A,B} = 10^5$ partículas uniformemente distribuídas inicialmente.	53
4.19	Snapshot via simulação MC no instante $t = 64000$ da evolução temporal com $N_{A,B} = 10^5$ partículas uniformemente distribuídas inicialmente.	54
4.20	Evolução do <i>parâmetro de ordem celular</i> para simulações MC e integração numérica, no caso da condição inicial assimétrica para A	55

4.21	Snapshot para $t = 1$ MCstep da média das concentrações de 200 repetições para uma condição inicial com assimetria em y	56
4.22	Snapshot para $t = 130$ MCsteps da média das concentrações de 200 repetições para uma condição inicial com assimetria em y	57
4.23	Snapshot para $t = 1$ da integração numérica para uma condição inicial com assimetria em y	57
4.24	Snapshot para $t = 130$ da integração numérica para uma condição inicial com assimetria em y	58
4.25	Evolução do parâmetro de ordem por bandas transversais para simulações MC e integração numérica, no caso da condição inicial assimétrica para A. 58	
4.26	Evolução do <i>parâmetro de ordem bandas longitudinais</i> para simulações MC e integração numérica no caso da condição inicial assimétrica para A. 59	
4.27	Snapshot para $t = 300$ MCsteps da média das concentrações de 200 repetições para uma condição inicial com assimetria em y	59
4.28	Snapshot para $t = 800$ MCsteps da média das concentrações de 200 repetições para uma condição inicial com assimetria em y	60
4.29	Snapshot para $t = 300$ da integração numérica para uma condição inicial com assimetria em y	60
4.30	Snapshot para $t = 800$ da integração numérica para uma condição inicial com assimetria em y	61
4.31	Snapshot para $t = 2500$ MCsteps da média das concentrações de 200 repetições para uma condição inicial com assimetria em y	61
4.32	Snapshot para $t = 2500$ da integração numérica para uma condição inicial com assimetria em y	62
4.33	Evolução do parâmetro de ordem celular para diferentes análises dos parâmetros extensivos e um estudo preliminar sobre o efeito do passo espacial.	63

Capítulo 1

Introdução

Sistemas físicos caracterizados pelo fluxo de partículas em sentidos contrários são comumente encontrados na natureza e em situações artificiais criadas pelo ser humano. Podemos tomar como exemplo, o processo de segregação de substâncias de densidades diferentes quando por exemplo agitadas em uma centrífuga [1]. Nestes processos, partículas de menor massa colidem com partículas de massa maior o que resulta em um processo de reorganização no sentido de separação.

Contudo, encontramos casos em que todos os componentes possuem a mesma massa, mas diferenciam-se no sentido de seu deslocamento. Em um estudo sobre misturas de colóides carregados Vissers et al. [2], realizam experimentos e simulações de dinâmica Browniana para mostrar que na presença de um campo elétrico uniforme e constante, um padrão de organização por bandas pode emergir naturalmente.

Em um contexto de dinâmica de pedestres, encontramos comportamento semelhante (ver [3] por exemplo). Em locais como corredores, calçadas, travessias ou em muitas outros pontos dentro de uma grande cidade, pode-se observar aglomerados de pessoas caminhando contrariamente. Este tema de estudo ganha maior importância sempre que grandes tragédias ocorrerem em eventos nos quais o número de pessoas presentes seja muito maior que o número de pessoas que as localidades comportam. Em Santa Maria, mais de 200 pessoas morreram asfixiadas devido a um incêndio em uma casa de eventos mal projetada e superlotada ¹. Na Alemanha, em 2010, 21 pessoas morreram sufocadas devido, novamente, à superlotação em um festival musical após deflagrar-se pânico generalizado [4]. O leitor interessado em outros interessantes trabalhos relacionados a simulações computacionais em situações de pânico ver por exemplo [5] e [6].

¹https://pt.wikipedia.org/wiki/Incêndio_na_boate_Kiss

Casos de tragédias deste tipo são muitos e revelam a importância do tema. Boa parte da literatura existente sobre o assunto tem como foco, a modelagem deste tipo de situação a partir da criação de uma equação de movimento definida por uma força “social”, além de outras forças dependendo do autor. Um estudo teórico [7], por exemplo, mostra que caminhantes podem chegar a um padrão de organização em que permanecem à esquerda do corredor em seu deslocamento devido à assimetria implementada nas paredes laterais. Um estudo experimental[8] analisa os efeitos na capacidade de transporte em fluxos de pedestres que intersectam-se em diferentes ângulos.

Por outro lado, podemos ter sistemas em que as partículas estejam se deslocando em apenas um fluxo, contudo interagem com um meio aleatório e não com partículas em fluxo contrário. Ou, como uma outra forma de pensar, poderíamos imaginar que as partículas no fluxo contrário estão paradas e posicionadas em células específicas de acordo com alguma distribuição determinística ou aleatória, o que funcionaria como algum tipo de desordem. Nestas bases, exemplos a citar são processos químicos cromatográficos (ver por exemplo [9, 10, 11]) ou o transporte eletrônico em semicondutores [12], [13], [14], [15], [16], [17], [18].

Nossa idéia nesta dissertação é abordar o tema inicialmente inspirado pelo modelo estocástico introduzido em [19]. Neste estudo, o autor sugere uma dinâmica de partículas definida por células do tipo caminhante aleatório direcionado, onde o movimento de cada caminhante depende da densidade da população contrária e é definido pela probabilidade de realizar um passo à frente ou permanecer na mesma posição (célula). O modelo é reativo, o que significa que a probabilidade de movimento é baseada na situação de ocupação da célula e instante que se esteja considerando.

A sugestão deste trabalho propõe e compreende a introdução de termos adicionais na dinâmica do modelo original, oriundos da implementação de uma dimensão espacial adicional. Apesar do modelo de referência ter sido fortemente motivado pela dinâmica de pedestres, procuramos realizar uma abordagem genérica de um sistema de partículas autodirigidas, o que abrange e muito seu potencial de aplicação.

Nosso intuito foi também analisar o comportamento assintótico do modelo, quando estabelece-se condições de contorno periódicas na dimensão do movimento direcionado. Neste tipo de situação, mostramos que surge *ordenamento em bandas* resultando em um estado das distribuição das partículas em que haja a otimização dos fluxos opostos. Nossos resultados ilustram um fenômeno observado experimentalmente em colóides

carregados [2] mas também simulações com dinâmica de pedestres baseadas em equações de movimento tipo Langevin [7]. O que é realmente surpreendente em relação ao trabalho encontrado em [7], é que nós não colocamos, por exemplo, algum tipo de condição de contorno tipo roquete (nas paredes), embora uma comparação direta com esse trabalho seja complicada.

Na primeira parte deste trabalho, dedicamo-nos a apresentar o modelo original unidimensional e alguns de seus resultados para estabelecer alguns parâmetros de comparação e introduzir algumas definições importantes para o resto do trabalho. Ainda no capítulo correspondente ao modelo unidimensional, nós já introduzimos alguns pontos adicionais que serão acrescentados na nossa extensão bidimensional do modelo *i)* como introduzir o efeito de colisões com as partículas opostas, *ii)* como reduzir o modelo a um estudo de transporte com desordem (tipo quenched), isto é, uma das espécies permanecem paradas em determinadas células.

Posteriormente, no capítulo 3, desenvolvemos as equações de recorrência baseadas na implementação da nossa proposta para o caso bidimensional e chegamos às equações diferenciais que regem a dinâmica.

Posteriormente, mostramos nossos principais resultados no capítulo 4. Nesta etapa, primeiramente analisamos as distribuições de tempos de travessia de partículas em um corredor com obstáculos (uma das espécies das partículas estão imóveis e dispostas sobre as células no corredor de acordo com alguma distribuição, funcionando como uma desordem), a fim de estudar a evacuação do local. Em seguida, analisamos a dependência do tempo médio de destilação com os parâmetros intensivos de um sistema de dois componentes onde ambas se locomovem em sentidos contrários. O que entendemos aqui por tempo de destilação refere-se ao tempo necessário para partículas de duas espécies, e partindo de uma situação inicial onde estejam homogeneamente misturadas, atingirem uma situação onde estejam geograficamente isoladas em clãs de forma que exista uma linha de secção no corredor da qual de um lado só haja partículas A(B) e do outro lado só haja partículas B(A).

Na parte final deste capítulo de resultados, mostramos os resultados da implementação das condições de contorno periódicas para duas condições iniciais diferentes para uma espécie, mas sempre mantendo a outra espécie em uma condição bastante abrangente: homogeneamente distribuída ao longo do corredor. Em ambos os casos, foram realizadas simulação Monte Carlo (MC) e integração numérica da equação di-

ferencial parcial (EDP), além da correspondente análise dos parâmetros de ordem do sistema, analisando o estado assintótico. Complementarmente, mostramos os resultados das simulações MC e integração da EDP, a fim de demonstrar a compatibilidade entre ambos e para quais condições os comportamentos se assemelham. Finalmente, apresentamos nossas conclusões e as perspectivas de continuidade de pesquisa no último capítulo dessa dissertação.

Capítulo 2

Dinâmica unidimensional - Breve revisão

Neste capítulo, iremos brevemente descrever o modelo original proposto pelo orientador deste trabalho e colaboradores em um trabalho prévio, além de mostrar alguns pontos adicionais que acrescentamos ainda no caso unidimensional e que serão incorporados a nossa extensão para duas dimensões do modelo a ser desenvolvido nos próximos capítulos.

2.1 Revisão do modelo original

A idéia original, apresentando por R. da Silva et. al [19], consiste em um sistema unidimensional dividido em células, onde dois tipos de partículas podem residir. As duas espécies de participantes, definidas por A e B , diferenciam-se pelo sentido preferencial no qual tendem a se deslocar. Primeiramente, vamos imaginar apenas que as partículas das duas espécies tenham uma direção preferencial, mas que não interajam, assim uma partícula A possui uma probabilidade p de se deslocar de $x_j = a j$ para a posição $x_{j+1} = a(j+1)$, gastando um tempo τ para fazê-lo, onde as constantes a e τ representam o tamanho da célula e o tamanho do passo de tempo, com j sendo um número inteiro que indexa a célula da partícula. A partícula A permanece em x_j com probabilidade $q = 1 - p$. Um caminhante B , de maneira simétrica, possui probabilidade p de se deslocar de $x_j = a j$ para $x_{j-1} = a(j - 1)$ e permanece em x_j com probabilidade $q = 1 - p$.

Nestas condições, naturalmente definimos a equação de recorrência:

$$n_{j,l+1} = pn_{j-1,l} + (1-p)n_{j,l}, \quad (2.1)$$

onde $n_{j,l}$ denota o número de partículas A na posição $x_j = ja$ e no instante $t = \tau l$, com $j = 0, \dots, N_{cell}$ e $l = 0, \dots, T_{max}$, onde N_{cell} é o número de células e T_{max} é o número máximo de passos de tempo utilizado, que teoricamente pode ser infinito.

Ao reescrevermos a equação 2.1 de maneira apropriada, obtemos a seguinte equação de diferenças finitas

$$n_{j,l+1} - n_{j,l} = -p(n_{j,l} - n_{j-1,l}). \quad (2.2)$$

Em uma primeira aproximação, $n_{j,l+1} - n_{j,l}$ torna-se $\frac{\partial c_A}{\partial t}$ e $n_{j,l} - n_{j-1,l}$ fica $\frac{\partial c_A}{\partial x}$. Portanto, resta-nos que

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} = -k_1 \frac{\partial c_A}{\partial x}, \quad (2.3)$$

onde $c_A = c_A(x, t)$ é a concentração de caminhantes do tipo A e $k_1 = \lim_{a, \tau \rightarrow 0} \frac{a}{\tau} p$. O fato de aniquilarmos a probabilidade da partícula voltar para uma célula anterior, proporciona uma solução que é uma onda que se propaga ao longo das células com uma velocidade k_1 , conhecida como velocidade de deriva [20], e sem o tradicional termo de difusão $\frac{\partial^2 c_A}{\partial x^2}$. Por simetria, teríamos justamente a mesma equação para as partículas B , exceto pelo sinal de k_1 , e por isso estas são naturalmente omitidas aqui.

Uma motivação básica para este tipo de estudo, por exemplo, é o transporte eletrônico na presença de um campo elétrico, onde a concentração $c_A(x, t)$, quando normalizada, refere-se à densidade de probabilidade e $c_A(x, t)dxdt$ refere-se à probabilidade de encontrarmos uma partícula entre x e $x + dx$, no intervalo de tempo entre os instantes t e $t + dt$. Contudo, o fato de não haver interação entre as partículas é algo bastante irreal e, neste sentido, o deslocamento em sentido contrário dos dois tipos de partículas deve balisar de alguma forma a interação entre elas, pois é razoável pensar que este seja um aspecto do modelo que venha a aumentar a possibilidade de que colisões e consequentes espalhamentos ocorram. A proposta é de que os caminhantes da espécie A interfiram no movimento coletivo da espécie B , e vice-versa, com uma dependência (no mínimo) linear com a densidade.

Baseado na idéia dos ‘clanish random walks’, proposta por Montroll e West [21], R. da Silva et al. [19] propuseram uma interação definida entre os entes que encontram-se

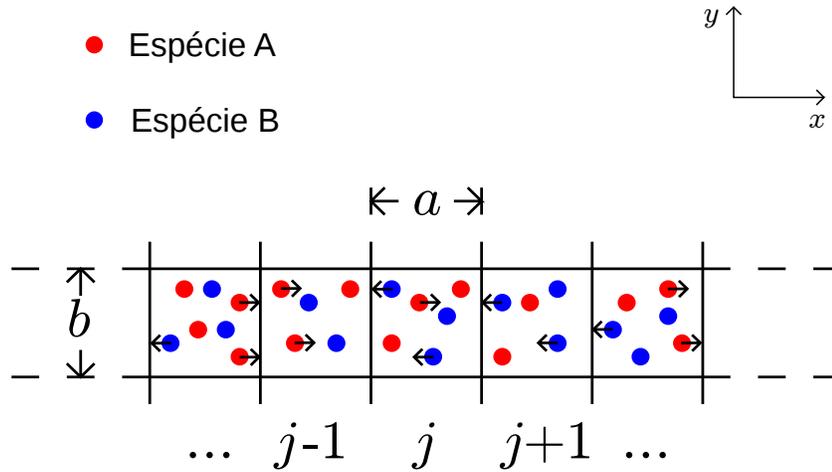


Figura 2.1: Partículas A e B interagindo em uma dinâmica do tipo autômata celular.

na mesma célula e, portanto, uma interação de curto alcance.

Sendo assim, iremos denotar, já com uma notação adequada à representação bidimensional, a probabilidade de uma dada partícula da espécie $A(B)$, situada na célula $(x, y) = (aj, bk)$ em um instante $t = \tau l$, de dar um passo para a célula $(a[j + (-)1], bk)$, por

$$P_r^{(A,B)}(j \rightarrow j \pm 1, k \rightarrow k | \rho_{B,A}) = p - \alpha \rho_{B,A} \quad (2.4)$$

$$\begin{aligned} &= 1 - (1 - p + \alpha \rho_{B,A}) \\ &= 1 - P_r^{(A,B)}(j \rightarrow j, k \rightarrow k | \rho_{B,A}), \end{aligned} \quad (2.5)$$

onde a constante α é igual para todos os caminhantes, tal que $0 < \alpha < p < 1$, e mede o nível da interação. A concentração relativa às espécies, $\rho_{A,B} = \rho_{A,B}(j, k, l)$, é dada por

$$\rho_{A,B} \equiv \frac{n_{j,k,l}(m_{j,k,l})}{n_{j,k,l}(m_{j,k,l}) + m_{j,k,l}(n_{j,k,l})}, \quad (2.6)$$

onde $n_{j,k,l}(m_{j,k,l})$ é o número de partículas da espécie $A(B)$ na célula. a e b são as dimensões da célula, τ é o tamanho do passo de tempo e as constantes $j, k, l \in \mathbb{N}$ por simplicidade.

A partir das equações 2.4 e 2.5, podemos escrever a seguinte equação de recorrência:

$$n_{j,k,l+1} = \left[p - \alpha \left(1 - \frac{n_{j-1,k,l}}{N_{j-1,k,l}} \right) \right] n_{j-1,k,l} + \left[1 - p + \alpha \left(1 - \frac{n_{j,k,l}}{N_{j,k,l}} \right) \right] n_{j,k,l}, \quad (2.7)$$

onde $N_{j,k,l} = m_{j,k,l} + n_{j,k,l}$ é o número total de partículas na célula.

O raciocínio é conduzido de maneira análoga para chegar à relação de recorrência referente às partículas do tipo B . Desta maneira, obtemos

$$m_{j-1,k,l+1} = \left[p - \alpha \left(1 - \frac{m_{j,k,l}}{N_{j,k,l}} \right) \right] m_{j,k,l} + \left[1 - p + \alpha \left(1 - \frac{m_{j-1,k,l}}{N_{j-1,k,l}} \right) \right] m_{j-1,k,l}. \quad (2.8)$$

Ao rearranjarmos os termos das equações 2.7 e 2.8 de maneira conveniente, obtemos as seguintes equações de diferenças finitas:

$$\begin{aligned} n_{j,k,l+1} - n_{j,k,l} &= -p(n_{j,k,l} - n_{j-1,k,l}) \\ &+ \alpha \left[\left(1 - \frac{n_{j,k,l}}{N_{j,k,l}} \right) n_{j,k,l} - \left(1 - \frac{n_{j-1,k,l}}{N_{j-1,k,l}} \right) n_{j-1,k,l} \right] \end{aligned} \quad (2.9)$$

e

$$\begin{aligned} m_{j-1,k,l+1} - m_{j-1,k,l} &= p(m_{j,k,l} - m_{j-1,k,l}) \\ &- \alpha \left[\left(1 - \frac{m_{j,k,l}}{N_{j,k,l}} \right) m_{j,k,l} - \left(1 - \frac{m_{j-1,k,l}}{N_{j-1,k,l}} \right) m_{j-1,k,l} \right]. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Em uma primeira aproximação, a equação 2.9 torna-se

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} = -k_1 \frac{\partial c_A}{\partial x} + k_2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{c_A c_B}{c_A + c_B} \right),$$

onde $c_A = c_A(x, y, t)$ é a concentração de partículas da espécie A e $k_1 = \lim_{a,b,\tau \rightarrow 0} \frac{a}{\tau} p$ e $k_2 = \lim_{a,b,\tau \rightarrow 0} \frac{a}{\tau} \alpha$. A constante k_1 , como no caso anterior, é a velocidade de deriva das partículas. Aliás, a equação acima recai na equação 2.3 no caso em que não há interação ($\alpha = 0$).

As partículas do tipo B devem seguir a mesma dinâmica, pois sua construção é análoga, mudando apenas o sentido do movimento. Portanto, é de se esperar que, *a priori*, uma mudança no referencial do tipo $x \rightarrow -x$ nos leve para a equação referente à espécie B . Da equação 2.10 obtemos

$$\frac{\partial c_B}{\partial t} = k_1 \frac{\partial c_B}{\partial x} - k_2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{c_A c_B}{c_A + c_B} \right),$$

corroborando o raciocínio anterior. As análises realizadas em [19] são restritas ao caso fundamental em que $p = 1/2$. É importante salientar que trata-se de um problema bidimensional, mas que fundamentalmente é um problema unidimensional já que as partículas não transitam na direção vertical, o que mudará a partir do próximo capítulo. Então, a partir deste momento nós eliminamos a dependência na variável y durante todo este capítulo, tornando-a sem perda de generalidade igual à 0, pois vamos explorar aqui apenas o caso unidimensional.

Em [19], o modelo é estudado numericamente por simulações *Monte Carlo* e através da evolução temporal das equações de recorrência dadas por 2.7 e 2.8, ao tomar-se as condições iniciais

$$c_A(x, y = 0, t = 0) = \delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} dk$$

e

$$c_B(x, y = 0, t = 0) = \delta(x - L_x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik(x-L_x)} dk.$$

Naturalmente $L_x = aN_{cell}$ é o comprimento do corredor (fita) no qual as partículas estão inseridas. Esta escolha para as condições iniciais torna o problema simétrico, de modo que fora escolhido apenas o referencial das partículas A para a análise de resultados.

Na ausência de interação, i.e., $\alpha = 0$, o tempo médio que um caminhante leva para atravessar o sistema está associado à probabilidade de que um caminhante, com probabilidade p de avançar uma célula, necessite de m tentativas para percorrer N_{cell} células. Pois esta é a distribuição binomial negativa [22] e é dada por

$$p_{m, N_{cell}} = \binom{m + N_{cell} - 1}{N_{cell} - 1} p^{N_{cell}} (1 - p)^{m - N_{cell}}. \quad (2.11)$$

No caso trabalhado, o tempo médio para um caminhante avançar N_{cell} corresponde a $\bar{T} = \tau N_{cell}/p = \frac{2\tau}{a} L_x$. Quando considera-se uma resistência não nula, o tempo esperado de travessia deve ser necessariamente maior que \bar{T} .

Para estudar a evolução do sistema com as condições iniciais propostas, realizamos integração numérica das diferenças finitas (ou das EDPs) e, concomitantemente, simulações MC do sistema para uma fita (caso unidimensional $y = 0$) a fim de reproduzir os resultados do modelo proposto em [19].

Estabeceu-se um sistema de tamanho $L_x = 100$ e definiu-se tanto o tamanho da célula, a , quanto o passo de tempo, τ , como sendo unitários – utilizou-se outros

valores mas nenhuma alteração qualitativa foi observado neste caso unidimensional. Nas simulações *Monte Carlo*, definimos o número total de partículas das espécies A e B como $N_A = 10^5$ e $N_B = 10^5$. A integração numérica e a simulação MC foram realizadas e seus resultados comparados para frações de \bar{T} .

Antes de prosseguir, é importante fazer uma ressalva (convenção) que vale para toda a dissertação. Quando nos referimos a t e a x nos gráficos realizados, nos referimos aos índices discretos l e j , respectivamente. Além disso, as curvas contínuas se referem à integração das EDPs e os pontos se referem às soluções via MC.

Na figura 2.2, o parâmetro de resistência escolhido é relativamente baixo, $\alpha = 0,1$, e, portanto, vê-se que a distribuição é fracamente deformada de seu aspecto de distribuição binomial negativa para frações de tempo. Em uma interpretação mais física, podemos dizer que a fraca interação entre partículas opostas determina uma baixa resistência ao movimento em direção ao alvo (meta) das partículas.

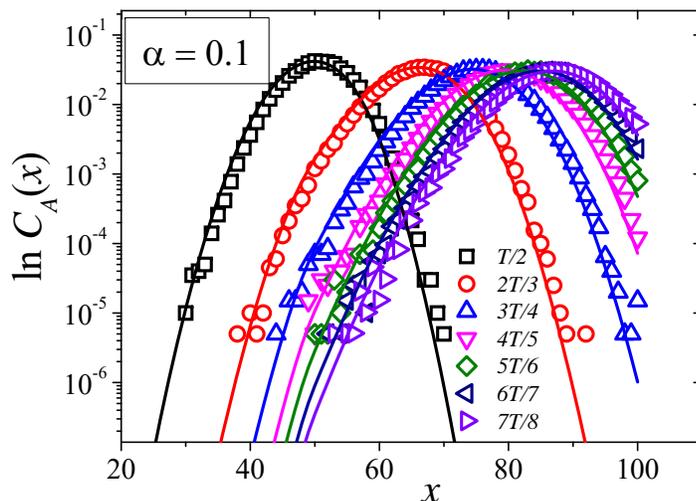


Figura 2.2: Evolução da concentração das partículas A para $\alpha = 0.1$.

Com $\alpha = 0,4$, no entanto, a distribuição A altera-se mais fortemente a partir do ponto em que as espécies começam a interagir, como podemos observar na Fig. 2.3. O efeito de α sobre a evolução temporal da posição média das partículas pode ser

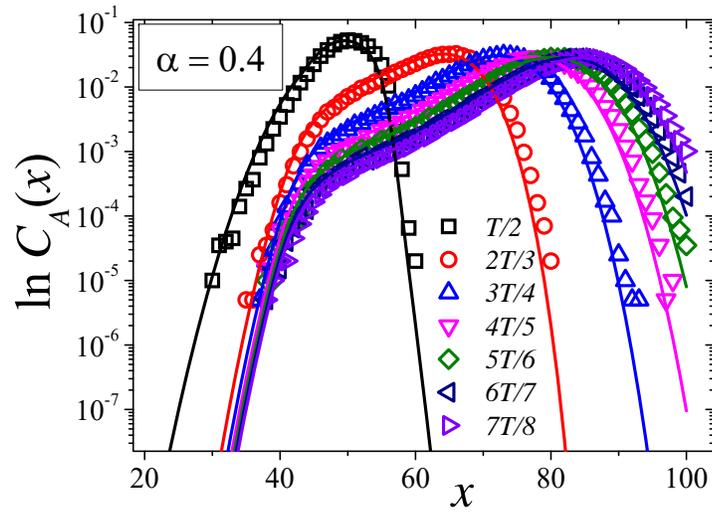


Figura 2.3: Evolução da concentração das partículas A para $\alpha = 0.4$.

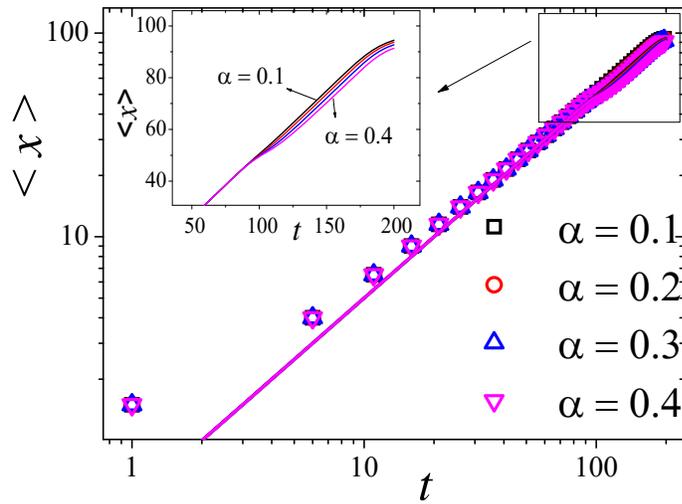


Figura 2.4: Evolução temporal da posição média das partículas A para diferentes parâmetros α em escala log-log. A figura interior mostra o mesmo, porém em escala linear.

observado na Fig. 2.4. É importante notar que aparentemente

$$\langle x \rangle (t) = \frac{\sum_{j=0}^{N_{cell}} x_j(t) c_A(x_j, t)}{\sum_{j=0}^{N_{cell}} c_A(x_j, t)}$$

segue uma lei de potência (gráfico log-log), mas tem um desvio deste comportamento a longos tempos, que é ressaltado pela figura interna que é mostrada em escala linear, indicando o efeito de α sobre a posição média das partículas no corredor.

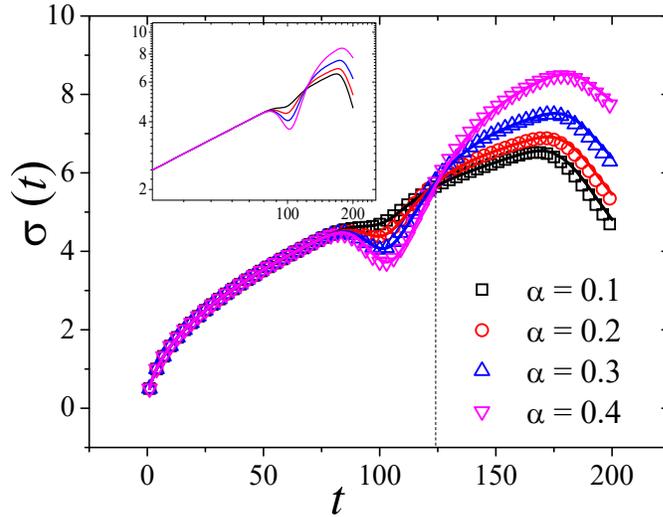


Figura 2.5: O desvio padrão cresce gradativamente em função do tempo até o momento da interação das partículas. Aqui utilizamos os mesmos parâmetros só que a figura está em escala linear enquanto o gráfico interior é que está em escala log-log. O tracejado corresponde ao ponto de isovariância para todos os parâmetros.

O efeito do α é melhor ressaltado pela a evolução temporal do desvio padrão, formalmente calculado aqui por:

$$\sigma(t) = \left[\frac{\sum_{j=0}^{N_{cell}} x_j(t)^2 c_A(x_j, t)}{\sum_{j=0}^{N_{cell}} c_A(x_j, t)} - \langle x \rangle^2(t) \right]^{1/2}.$$

Na figura 2.5, podemos ver que a distribuição gradativamente aumenta sua largura até o ponto de início da interação. Neste instante, os caminhantes mais avançados começam a enfrentar resistência do grupo contrário, o que gera um afinamento e uma consequente assimetria da distribuição, como pode ser visto na figura 2.6. Esta figura mostra a assimetria da distribuição que é calculada pelo terceiro momento central da distribuição:

$$skew(t) = \frac{1}{\sigma(t)^3} \sum_{j=0}^{N_{cell}} [x_j(t) - \langle x \rangle(t)]^3 c_A(x_j, t)$$

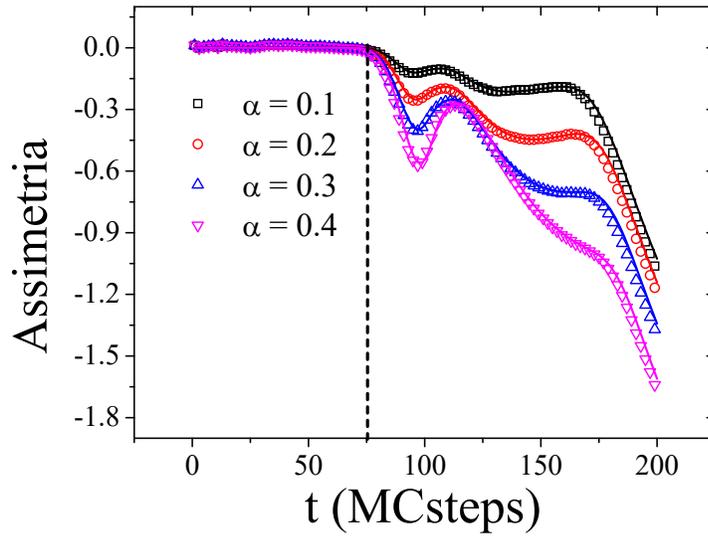


Figura 2.6: Evolução temporal da assimetria (skewness) da distribuição espacial das partículas.

O desvio padrão diminui até seu menor valor em, aproximadamente $t = 100$, sendo este o instante em que os picos das distribuições chegam ao seus máximos ao avançar um sobre o outro. A partir deste momento, a assimetria volta a diminuir fortemente até o final da simulação.

Finalmente, monitoramos a curtose (mais precisamente o excesso de curtose), que mede o peso da cauda da distribuição espacial das partículas, computado através da expressão:

$$kurt(t) = \frac{1}{\sigma(t)^4} \sum_{j=0}^{N_{cell}} [x_j(t) - \langle x \rangle(t)]^4 c_A(x_j, t) - 3$$

Sabe-se que $kurt = 0$ indica uma distribuição com cauda tipo gaussiana. O mesmo vale para $skew = 0$ que indicaria uma distribuição simétrica como uma gaussiana. No gráfico 2.7, podemos ver uma transição do comportamento da curtose nula para uma curtose positiva. Há um pequeno pico justamente no mesmo ponto onde a assimetria apresenta um vale $t = N_{cell} = 100$ passos de MC. É importante salientar a concordância entre as simulações Monte Carlo (pontos) e integração da EDP (curvas) em toda a análise unidimensional realizada neste trabalho.

A seguir, apresentaremos um efeito que pode ser introduzido no modelo para o caso unidimensional e naturalmente estendido para o caso geral. Ainda neste capítulo,

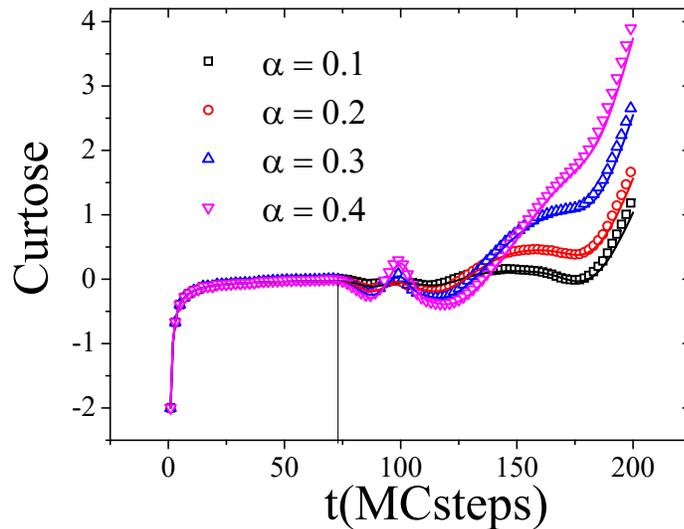


Figura 2.7: Evolução temporal da curtose da distribuição espacial das partículas A visualizada para α de 0,1 até 0,4.

abriremos espaço para falar de um outro aspecto peculiar que pode ser modelado com nossa abordagem, também não explorado em [19], mas que podemos estudar com esse modelo. Trata-se do caso de um transporte com impurezas. Este estudo corresponde ao caso onde as partículas B permanecem paradas gerando, assim, barreiras naturais ao movimento direcionado das partículas.

2.2 Introduzindo efeitos de colisões quasi-elásticas

A base do modelo apresentado até ento, consiste na dificuldade de deslocamento que as partículas encontram devido ao fluxo de partículas em sentido contrário. A resistência imposta ao movimento tem como maior efeito a simples manutenção da posição do caminhante, de modo que, em uma explicação mais física, estaria associado à ocorrência de colisões inelásticas. Em resumo, os participantes não podem retroceder com relação ao sentido de sua preferência.

Para tentar dar uma noção mais geral aos possíveis efeitos de colisões, dentro de nossa abordagem estocástica, iremos definir a probabilidade de uma partícula, da espécie $A(B)$, retroceder de sua posição por

$$Pr^{(A,B)}(j \rightarrow j \mp 1, k \rightarrow k | \rho_{B,A}) = \beta_{\parallel} \rho_{B,A}, \quad (2.12)$$

onde a constante β_{\parallel} está associado à componente paralela à direção do movimento coletivo, do momentum linear médio transferido às partículas.

Quando incluímos o termo de retorno no processo, estamos interferindo diretamente na probabilidade de permanência na célula, pois há o vínculo de normalização das probabilidades. Sendo assim, devemos escrever que

$$\begin{aligned} Pr^{(A,B)}(j \rightarrow j, k \rightarrow k | \rho_{B,A}) &= 1 - p + (\alpha - \beta_{\parallel}) \rho_{B,A} \\ &= 1 - Pr^{(A,B)}(j \rightarrow j \pm 1, k \rightarrow k | \rho_{B,A}) \\ &\quad - Pr^{(A,B)}(j \rightarrow j \mp 1, k \rightarrow k | \rho_{B,A}), \end{aligned} \quad (2.13)$$

determinando que $0 < \beta_{\parallel} < 1 - p + \alpha$.

No caso em que $\beta_{\parallel} = \alpha$, temos a fração subtraída da probabilidade de movimento no sentido do fluxo, sendo adicionada integralmente à probabilidade de movimento contrário ao fluxo, o que corresponderia a uma colisão elástica [23].

2.3 Fluxo em meio interagente com impurezas fixas

O modelo que apresentamos pode ser aplicável também a sistemas nos quais exista apenas um tipo de partícula deslocando-se em um único sentido ao mesmo tempo que interage com um meio que lhe impõem resistência. Tais modelos podem representar, por exemplo, a condução eletrônica em semicondutores ou a formação de colunas cromatográficas observadas no processo de separação de substâncias quando há uma fase estacionária [9, 10]. Em um contexto de dinâmica de pedestres, podemos considerar que hajam obstáculos no caminho dos transeuntes.

Para representarmos o meio não homogêneo, iremos supor que uma das espécies seja imóvel. Para tanto, tomamos a probabilidade das partículas do tipo B (sem perda de generalidade) de mudar de célula como sendo nula, representando assim os obstáculos ou barreiras no modelo. Assim, temos que

$$\begin{aligned} Pr^{(B)}(j \rightarrow j - 1, k \rightarrow k | \rho_A) &= Pr^{(B)}(j \rightarrow j + 1, k \rightarrow k | \rho_A) = \\ Pr^{(B)}(j \rightarrow j, k \rightarrow k + 1 | \rho_A) &= Pr^{(B)}(j \rightarrow j, k \rightarrow k - 1 | \rho_A) = 0, \end{aligned} \quad (2.14)$$

sendo, portanto, $Pr^{(B)}(j \rightarrow j, k \rightarrow k | \rho_A) = 1$, onde impusemos nas soluções numéricas que $m_{j,k,l+1} = m_{j,k,l}$. De forma similar, $\frac{\partial c_B}{\partial t} = 0$ e naturalmente $c_B(x, y, t) = c_B(x, y, 0)$.

Para representarmos o meio com o qual as partículas A irão interagir durante o processo, basta que escolhamos a condição inicial apropriada para estudar o problema.

No próximo capítulo, trataremos de estender o modelo unidimensional agregando os aspectos de colisões quasi-elásticas, bem como a possibilidade de movimento perpendicular à direção do campo (que é aqui representado pela probabilidade p).

Capítulo 3

Fluxo de partículas em rede bidimensional e segregação

A dinâmica unidimensional que foi apresentada no capítulo anterior, restringe as partículas dentro do sistema de maneira a criar uma disputa direta entre o campo e a outra espécie em contrafluxo. A incapacidade de “encontrar” ou ser desviado para um caminho alternativo para se percorrer, determina que os caminhantes enfrentem uma trajetória altamente populada antes de chegar a sua meta.

Ao implementarmos uma dimensão espacial adicional ao sistema, abrimos a possibilidade dos caminhantes se movimentarem na direção perpendicular ao fluxo [21]. Entretanto, devemos ter em mente que as bases deste trabalho se encontram na introdução do conceito qualitativo de colisões quasi-elásticas e suas consequências frente ao movimento coletivo das partículas. Portanto, iremos definir a probabilidade de um caminhante, do tipo $A(B)$, de realizar um passo lateral por

$$Pr^{(A,B)}(j \rightarrow j, k \rightarrow k + 1) = Pr^{(A,B)}(j \rightarrow j, k \rightarrow k - 1) = \beta_{\perp} \rho_{B,A} \quad (3.1)$$

onde β_{\perp} está relacionado à componente perpendicular, ao fluxo de partículas, do momento linear médio transferido.

Com esta definição, estabelecemos uma dependência linear da ocorrência de espalhamento lateral com a densidade de partículas em contra-fluxo.

O vínculo de normalização que resulta das equações de probabilidades 2.4, 2.12 e 3.1 nos define o seguinte conjunto de equações:

$$\begin{aligned}
Pr^{(A,B)}(j \rightarrow j \pm 1, k \rightarrow k | \rho_{B,A}) &= p - \alpha \rho_{B,A} \\
Pr^{(A,B)}(j \rightarrow j \mp 1, k \rightarrow k | \rho_{B,A}) &= \beta_{\parallel} \rho_{B,A} \\
Pr^{(A,B)}(j \rightarrow j, k \rightarrow k + 1 | \rho_{B,A}) &= \beta_{\perp} \rho_{B,A} \\
Pr^{(A,B)}(j \rightarrow j, k \rightarrow k - 1 | \rho_{B,A}) &= \beta_{\perp} \rho_{B,A} \\
Pr^{(A,B)}(j \rightarrow j, k \rightarrow k | \rho_{B,A}) &= 1 - p + (\alpha - \beta) \rho_{B,A}
\end{aligned} \tag{3.2}$$

onde $\beta \equiv \beta_{\parallel} + 2\beta_{\perp}$. Desta forma, temos um modelo bidimensional com partículas interagentes, contudo no nosso caso cada célula pode ter mais do que uma partícula como previamente definido e as transições para outras células não dependem das células vizinhas e sim apenas das concentrações relativas das espécies em cada célula, o que é tipicamente diferente de um autômato celular. Uma típica interação no nosso modelo é representado no Fig. 3.1.

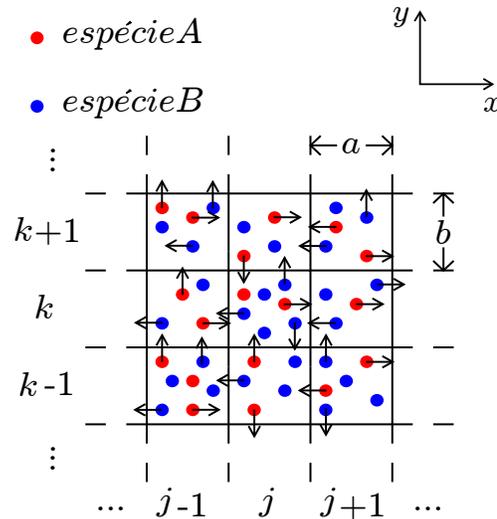


Figura 3.1: Partículas A e B interagindo em uma dinâmica na rede bidimensional. A dinâmica se dá por células.

A partir do conjunto de equações acima, podemos escrever a seguinte equação de recorrência referente à espécie A :

$$\begin{aligned}
n_{j,k,l+1} &= \left[p - \alpha \left(1 - \frac{n_{j-1,k,l}}{N_{j-1,k,l}} \right) \right] n_{j-1,k,l} + \beta_{\parallel} \left(1 - \frac{n_{j+1,k,l}}{N_{j+1,k,l}} \right) n_{j+1,k,l} \\
&+ \beta_{\perp} \left(1 - \frac{n_{j,k+1,l}}{N_{j,k+1,l}} \right) n_{j,k+1,l} + \beta_{\perp} \left(1 - \frac{n_{j,k-1,l}}{N_{j,k-1,l}} \right) n_{j,k-1,l} \\
&+ \left[1 - p + (\alpha - \beta) \left(1 - \frac{n_{j,k,l}}{N_{j,k,l}} \right) \right] n_{j,k,l}. \tag{3.3}
\end{aligned}$$

Ao reorganizarmos a equação 3.3 em termos de fatores comuns, ficamos com

$$\begin{aligned}
n_{j,k,l+1} - n_{j,k,l} &= -p(n_{j,k,l} - n_{j-1,k,l}) + \alpha \left[\left(1 - \frac{n_{j,k,l}}{N_{j,k,l}} \right) n_{j,k,l} - \left(1 - \frac{n_{j-1,k,l}}{N_{j-1,k,l}} \right) n_{j-1,k,l} \right] \\
&+ \beta_{\perp} \left[\left(1 - \frac{n_{j,k+1,l}}{N_{j,k+1,l}} \right) n_{j,k+1,l} + \left(1 - \frac{n_{j,k-1,l}}{N_{j,k-1,l}} \right) n_{j,k-1,l} - 2 \left(1 - \frac{n_{j,k,l}}{N_{j,k,l}} \right) n_{j,k,l} \right] \\
&+ \beta_{\parallel} \left[\left(1 - \frac{n_{j+1,k,l}}{N_{j+1,k,l}} \right) n_{j+1,k,l} - \left(1 - \frac{n_{j,k,l}}{N_{j,k,l}} \right) n_{j,k,l} \right] \tag{3.4}
\end{aligned}$$

A partir do formato de diferenças finitas desta última equação, fica facilitada a visualização da transição do discreto para o contínuo. Portanto, obtemos que

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} = -k_1 \frac{\partial c_A}{\partial x} + k_3 \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{c_A c_B}{c_A + c_B} \right) + k_4 \frac{\partial^2}{\partial y^2} \left(\frac{c_A c_B}{c_A + c_B} \right), \tag{3.5}$$

onde $k_3 = \lim_{a,b,\tau \rightarrow 0} \frac{a}{\tau} (\alpha + \beta_{\parallel})$ e $k_4 = \lim_{a,b,\tau \rightarrow 0} \frac{b^2}{\tau} \beta_{\perp}$.

A equação de recorrência relativa aos caminhantes do tipo de B é dada por

$$\begin{aligned}
m_{j-1,k,l+1} &= \left[p - \alpha \left(1 - \frac{m_{j,k,l}}{N_{j,k,l}} \right) \right] m_{j,k,l} + \beta_{\parallel} \left(\frac{m_{j-2,k,l}}{N_{j-2,k,l}} \right) m_{j-2,k,l} \\
&+ \beta_{\perp} \left(\frac{m_{j-1,k+1,l}}{N_{j-1,k+1,l}} \right) m_{j-1,k+1,l} + \beta_{\perp} \left(\frac{m_{j-1,k-1,l}}{N_{j-1,k-1,l}} \right) m_{j-1,k-1,l} \\
&+ \left[1 - p + (\alpha - \beta) \left(\frac{m_{j-1,k,l}}{N_{j-1,k,l}} \right) \right] m_{j-1,k,l}, \tag{3.6}
\end{aligned}$$

que, após o rearranjo de termos comuns, fica

$$\begin{aligned}
m_{j-1,k,l+1} - m_{j-1,k,l} &= p(m_{j,k,l} - m_{j-1,k,l}) - \alpha \left[\left(1 - \frac{m_{j,k,l}}{N_{j,k,l}}\right) m_{j,k,l} \right. \\
&\quad - \left. \left(1 - \frac{m_{j-1,k,l}}{N_{j-1,k,l}}\right) m_{j-1,k,l} \right] + \beta_{\perp} \left[\left(1 - \frac{m_{j-1,k+1,l}}{N_{j-1,k+1,l}}\right) m_{j-1,k+1,l} \right. \\
&\quad + \left. \left(1 - \frac{m_{j-1,k-1,l}}{N_{j-1,k-1,l}}\right) m_{j-1,k-1,l} - 2 \left(1 - \frac{m_{j-1,k,l}}{N_{j-1,k,l}}\right) m_{j-1,k,l} \right] \\
&\quad - \beta_{\parallel} \left[\left(1 - \frac{m_{j,k,l}}{N_{j,k,l}}\right) m_{j,k,l} - \left(1 - \frac{m_{j-1,k,l}}{N_{j-1,k,l}}\right) m_{j-1,k,l} \right]. \quad (3.7)
\end{aligned}$$

A equação diferencial correspondente a equação de diferenças acima, fica

$$\frac{\partial c_B}{\partial t} = k_1 \frac{\partial c_B}{\partial x} - k_3 \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{c_A c_B}{c_A + c_B} \right) + k_4 \frac{\partial^2}{\partial y^2} \left(\frac{c_A c_B}{c_A + c_B} \right) \quad (3.8)$$

e corresponde a mesma dinâmica imposta para os participantes do tipo oposto, exceto pelo sentido de movimento em x .

A densidade de partículas por célula resulta da soma das equações 3.5 e 3.8, ou seja,

$$\frac{\partial(c_A + c_B)}{\partial t} = -k_1 \frac{\partial(c_A - c_B)}{\partial x} + 2k_4 \frac{\partial^2}{\partial y^2} \left(\frac{c_A c_B}{c_A + c_B} \right) \quad (3.9)$$

3.1 Segregação celular

Um importante aspecto de sistemas compostos por mais de um tipo de partículas, diz respeito ao grau de mistura de seus componentes. A segregação que pode surgir da dinâmica das partículas pode apresentar padrões extremamente interessantes. A *segregação* pode ser, por exemplo, em *bandas* ou em outros rebuscados arranjos. No caso da segregação por tiras, as partículas de um tipo não podem ocupar a mesma tira da outra. Contudo, o primeiro padrão mais simples do ponto de vista configuracional e, correspondentemente, mais entrópico (e portanto mais comum) é o que surge exatamente da interação de duas componentes, o que denominamos *segregação por células*. Neste caso, os padrões podem ser muitos, de fato, mas a característica que é guardada é a de que partículas de tipos diferentes tendem a não compartilhar a mesma célula. Isto, do ponto de vista combinatorial, corresponde a um número muito grande dado o número de células do sistema e, portanto, claramente a segregação por bandas constitui um subcaso seletivo deste tipo de segregação.

Outro subcaso interessante de segregação por células, mas que também é bastante específico, é por exemplo o conhecido padrão de tabuleiro de xadrez. Na Figura 3.2 mostramos pictoricamente a dinâmica de dois tipos de partículas em fluxo contrário em típica situação onde há alta segregação local por célula.

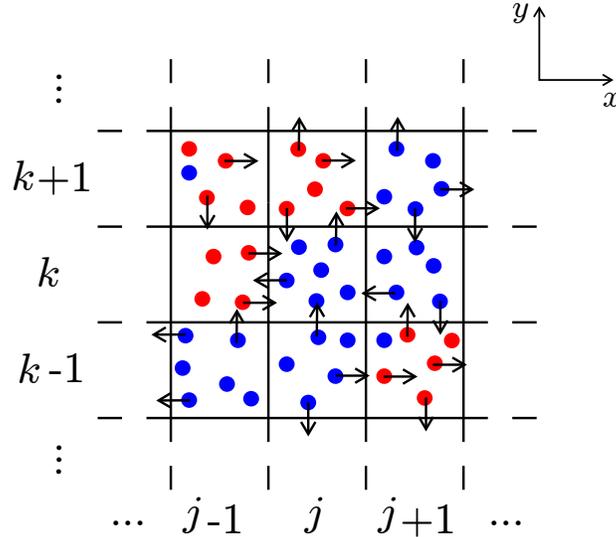


Figura 3.2: Representação de uma situação em que haja alta segregação local por celular.

Como um dos nossos objetivos neste trabalho é inferir sobre padrões de ordenamento em uma dinâmica de partículas de duas espécies interagentes, é importante definirmos um parâmetro que mensure a evolução do nível desta segregação por célula. A idéia de que esta variável consiga reproduzir de maneira clara as situações antagônicas de uma região com apenas entes de mesma espécie e de outra região em que ambas as espécies estejam, nos conduziu a definir um parâmetro de ordem celular de acordo com a expressão:

$$\Phi_l^{cell} \equiv \frac{\sum_{j=1, k=1}^{Lx, Ly} |n_{j,k,l} - m_{j,k,l}|}{\sum_{j=1, k=1}^{Lx, Ly} (n_{j,k,l} + m_{j,k,l})} = \frac{1}{N} \sum_{j=1, k=1}^{Lx, Ly} |n_{j,k,l} - m_{j,k,l}|, \quad (3.10)$$

onde l indexa a variável temporal $t = l\tau$ e $N \equiv N_A + N_B$ é o número total de partículas.

O parâmetro de ordem celular, definido pela equação 3.10, possui seu valor mínimo em zero quando todas as partículas dos dois tipos compartilham células e em proporções iguais. Desta maneira, apesar de existirem células mais povoadas do que outras, todas

as que estão povoadas possuem a mesma quantidade de partículas de ambas as espécies. Em contrapartida, o valor máximo que o parâmetro de ordem pode atingir é um (1) e acontece quando nenhum ente de uma dada espécie compartilha a mesma célula com um de outra espécie.

Quando realizamos a transição do plano discreto para o plano contínuo, o parâmetro de ordem é expresso por

$$\begin{aligned}\Phi^{cell}(t) &\equiv \lim_{a,b,\tau \rightarrow 0} \Phi_l^{cell}(t) \\ &= \frac{\int_0^{Lx} \int_0^{Ly} |c_A(x,y) - c_B(x,y)| dy dx}{\int_0^{Lx} \int_0^{Ly} (c_A(x,y) + c_B(x,y)) dy dx} \\ &= \frac{1}{2} \int_0^{Lx} \int_0^{Ly} |c_A - c_B| dy dx\end{aligned}$$

onde o fator $1/2$ corresponde a normalização das distribuição das espécies A e B .

Na próxima seção vamos definir um tipo particular e mais seletivo de segregação que muito nos interessa para o prosseguimento do trabalho, a segregação por bandas.

3.2 Segregação por bandas

Um outro padrão que pode surgir da dinâmica de partículas em que haja uma direção preferencial de movimento, é o padrão de bandas paralelas a esta mesma direção. As partículas movem-se sob a influência de um campo externo (neste trabalho representado pela probabilidade p) e de outras partículas em fluxo contrário e podem, eventualmente, apresentar alguma organização referente à minimização da resistência ao seu deslocamento. Uma típica situação deste padrão é mostrada na Fig.3.3. Desta maneira, necessitamos de um parâmetro de ordem que seja capaz de identificar o surgimento destas bandas longitudinais. Com isto em mente, definimos o parâmetro de ordem longitudinal ao campo como

$$\Phi_l^{\parallel} \equiv \frac{\sum_{k=1}^{Ly} |\sum_{j=1}^{Lx} (n_{j,k,l} - m_{j,k,l})|}{\sum_{j=1, k=1}^{Lx, Ly} (n_{j,k,l} + m_{j,k,l})} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{Ly} |n_{k,l} - m_{k,l}|, \quad (3.11)$$

onde $n_{k,l}$ e $m_{k,l}$ representa a quantidade de caminhantes do tipo A e B , respectivamente, somados ao longo da direção x para a posição $y = kb$. Na transição para o contínuo, o parâmetro de ordem longitudinal é expresso como

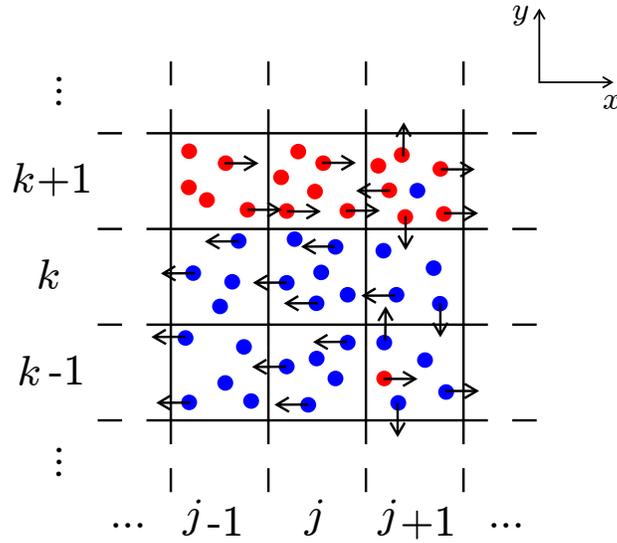


Figura 3.3: Representação de uma situação em que haja alta segregação local por bandas longitudinais.

$$\begin{aligned} \Phi^{\parallel}(t) &\equiv \lim_{a,b,\tau \rightarrow 0} \Phi_l^{\parallel} = \frac{1}{2} \int_0^{Ly} \left| \int_0^{Lx} (c_A(x, y, t) - c_B(x, y, t)) dx \right| dy \\ &\frac{1}{2} \int_0^{Ly} |c_A(y, t) - c_B(y, t)| dy, \end{aligned} \quad (3.12)$$

onde $c_A(y, t)$ e $c_B(y, t)$ são as distribuições marginalizadas em y .

Um padrão contrário ao último apresentado e que pode surgir, relaciona-se a padrões transversais a direção do campo (veja uma típica situação representada na Fig. 3.4). Neste sentido, a segregação está associada à destilação das partículas, pois compreende a separação dos componentes em bandas transversais à direção preferencial de movimento. Para identificar este padrão, definimos o parâmetro de ordem transversal como

$$\Phi_l^{\perp} = \frac{\sum_{j=1}^{Lx} \left| \sum_{k=1}^{Ly} (n_{j,k,l} - m_{j,k,l}) \right|}{\sum_{j=1, k=1}^{Lx, Ly} (n_{j,k,l} + m_{j,k,l})} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{Lx} |n_{j,l} - m_{j,l}|, \quad (3.13)$$

onde $n_{j,l}$ e $m_{j,l}$ são o número de partículas de A e B , respectivamente, somadas na direção y para a posição $x = ja$.

Na transição para o plano contínuo, o parâmetro de ordem torna-se

$$\Phi^\perp(t) \equiv \lim_{a,b,\tau \rightarrow 0} \Phi_t^\perp = \frac{1}{2} \int_0^{L_x} \left| \int_0^{L_y} (c_A(x,y,t) - c_B(x,y,t)) dy \right| dx \quad (3.14)$$

$$\frac{1}{2} \int_0^{L_x} |c_A(x,t) - c_B(x,t)| dx,$$

onde $c_A(x,t)$ e $c_B(x,t)$ são as distribuições marginalizadas em y das espécies A e B , respectivamente.

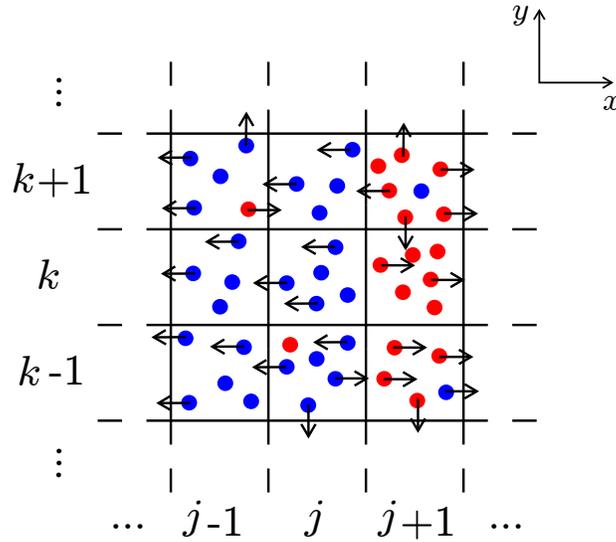


Figura 3.4: Representação de uma situação em que haja alta segregação local por bandas transversais.

3.3 Contra-fluxo em simetria anelar - Condições periódicas de contorno

Neste trabalho, propusemos um sistema retangular de partículas com dimensões L_x e L_y , sendo que na direção x há a peculiaridade de um campo agindo sobre as partículas. Para que possamos estudar de maneira completa os efeitos do movimento coletivo na direção x , precisamos analisar o seu comportamento em situações que efeitos de fronteiras não interfiram no processo. Ao aumentarmos o comprimento do sistema o suficiente, tal que $L_x \rightarrow \infty$, os efeitos de fronteiras são negligenciáveis, entretanto, perdemos poder computacional. Um estudo alternativo e interessante neste sentido está em assumir condições de contorno periódicas na direção x como ilustrado na Fig. 3.5.

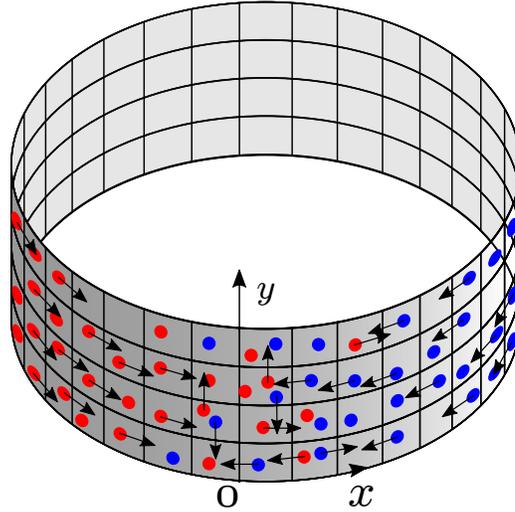


Figura 3.5: Ilustração de um sistema com condições de contorno periódicas. Obs.: Não estamos supondo uma geometria diferente da euclidiana.

A partir de condições periódicas de contorno na direção x , teríamos que

$$c_A(x, y, t) = c_A(x + L_x, y, t)$$

e

$$c_B(x, y, t) = c_B(x + L_x, y, t).$$

A ideia é estudar, por exemplo, o efeito da reentrância das partículas a fim de observar os padrões formados como fizeram autores estudando colóides carregados [2], dinâmica de pedestres por exemplo [7], utilizando nosso modelo e os parâmetros de segregação aqui definidos. Nossa alternativa é interessante por dois motivos:

1. Não necessariamente devemos ter uma dinâmica baseada nas leis de Newton, uma vez que temos um processo estocástico para descrever a dinâmica com parâmetros altamente arbitrários inicialmente;
2. Não necessariamente estamos limitados em estudar uma dinâmica de pedestres ou de colóides carregados. Mas claro podemos observar se nosso modelo reproduz padrões apresentados nos trabalhos [2] e [7], o que indicaria que aspectos mais fundamentais são os protagonistas para a formação de tais padrões.

No próximo capítulo apresentaremos os resultados numéricos obtidos em nosso modelo bidimensional de duas espécies de partículas auto-dirigidas e interagentes.

Capítulo 4

Resultados

O estudo do comportamento das distribuições de partículas regidas pelas equações diferenciais propostas neste trabalho, compreende uma parte fundamental dada pela comparação de simulações em *Monte Carlo* e a evolução numérica das equações de recorrências obtidas nos capítulos anteriores.

Ao escolhermos as condições iniciais e de contornos de maneira apropriadas, podemos estudar diferentes situações em que os contextos das motivações sejam diferentes. Por exemplo, quando estudamos a dinâmica de pedestres estamos interessados em aspectos que estejam relacionados a otimização do tempo de evacuação ou tempo de travessia. Um outro caso se dá quando analisamos o contexto de destilação de substâncias, onde estamos interessados no tempo médio que um sistema misturado leva para segregar seus componentes. Quando estamos tratando de sistemas periódicos ou muito grandes, estamos interessados em aspectos espaciais das distribuições em tempos muito longos.

Em cada etapa que segue, mostramos os resultados para diferentes condições iniciais e de contorno, induzindo o leitor aos contextos nos quais o modelo pode se aplicar.

Nosso estudo referente à evolução temporal do sistema unidimensional dado pelas equações 2.9 e 2.10, teve o objetivo de analisar aspectos diferentes dos resultados em comparação aos realizados em [19]. Para tanto, nas seções seguintes, definimos conceitos relacionados às distribuições temporais da dinâmica de partículas agora para o caso bidimensional.

4.1 Partículas B imóveis: Distribuição de tempos de travessia

O estudo da dinâmica de pedestres muitas vezes tem motivação no planejamento da construção de grandes estruturas nas quais espera-se a passagem de grandes grupos de pessoas. O conhecimento de como esses grandes aglomerados de transeuntes comportam-se em situações de diferentes fluxos ajuda no planejamento de tais construções, inclusive com o intuito de evitar que tragédias ocorram. Em 2010, por exemplo, morreram 21 pessoas esmagadas ou pisoteadas e mais de 500 ficaram feridas no festival musical “Love parade” na Alemanha, devido a um início de pânico generalizado que resultou em correria. Mais recentemente, em Santa Maria, mais de 200 pessoas morreram asfixiadas após um incêndio iniciar-se no palco da casa de eventos “Kiss”, onde havia poucas portas de saída para evacuações de emergência. Geralmente, tragédias deste tipo ocorrem quando grandes massas de pessoas encontram-se reunidas em locais mal projetados para comportarem tal quantidade.

No sentido de evitar a ocorrência de tragédias, a análise do tempo de evacuação torna-se fator importante para o planejamento de lugares que venham a receber um grande número de pessoas. Contudo, estudar tais situações, remete também não apenas estudar uma dinâmica de pedestres em situações de pânico, mas fenômenos físicos simples relativo ao transporte de partículas em meio a barreiras em um determinado ambiente. E a análise do tempo de evacuação também é um importante parâmetro a ser calculado nestes casos. Para fazer isso no nosso modelo necessitamos de escolhas para as condições iniciais que venham a representar uma distribuição inicial de pessoas/partículas antes do início de um processo de evacuação.

Uma das situações que procuramos simular é definida pelo alto número de pessoas inicialmente localizadas em uma das extremidades ($x = 0$) de um sistema retangular de dimensões L_x e L_y , que devem realizar a travessia para a outra extremidade ($x = L_x$). Estamos supondo que não haja fluxo de pessoas no sentido contrário, entretanto o corredor possui obstáculos aleatoriamente distribuídos. A representação dos obstáculos foi implementada ao tomarmos uma distribuição inicial de partículas da espécie B (paradas durante toda a evolução temporal) uniformemente distribuídas utilizando um tradicional gerador uniforme de números aleatórios, a função `ran2` do Numerical Recipes [24]. Para efeitos de obstáculos imóveis, tomamos as probabilidades de movimento

para partículas B dadas pelas equações (2.14).

A obtenção dos tempos de travessia é feita através de simulações MC, de modo que quando um caminhante A atinge a posição $x = L_x$, tomados o passo de tempo e o número de chegada do caminhante. O passo de tempo que corresponde ao tempo que um caminhante leva para a finalizar a travessia do sistema é aqui definido como τ . É importante salientar que τ já fora utilizado para definir o tamanho do passo, mas nesta seção só terá este significado quando devidamente contextualizado.

Nossas primeiras simulações correspondem à verificação da influência do parâmetro α , que reflete a resistência ao movimento devido à presença dos obstáculos. Para estas simulações, definimos $N_A = 10^6$ e N_B variará dependendo do estudo realizado. As dimensões espaciais são previamente fixadas em $L_x = 100$ e $L_y = 10$, onde a , b e τ (tamanho do passo temporal) foram definidos unitários. Ao levarmos em conta que $0 < \alpha < p < 1$ e sempre utilizando o caso simples em que $p = 1/2$, realizamos simulações para um caso de fraca interação, $\alpha = 0, 2$, e outro de forte interação, $\alpha = 0, 4$, e considerando uma alta concentração de partículas B (obstáculos): $N_B = 10^8$.

Com o intuito de fazer uma análise detalhada dos efeitos de cada parâmetro intensivo que compõe o sistema, tomamos os parâmetros de espalhamento, β_{\parallel} e β_{\perp} , como sendo inicialmente nulos nesta etapa do estudo e dessa forma estamos analisando a distribuição dos tempos de travessia como se fosse exatamente um estudo do caso unidimensional, já que este não foi analisado anteriormente. Esta escolha, $\beta_{\perp} = 0$, determina que todo o comprimento L_x , para cada posição y , defina um sistema unidimensional isolado, uma vez que β_{\perp} é responsável por proporcionar a possibilidade das partículas deslocarem-se lateralmente.

Na figura 4.1, vemos que no caso em que há baixa resistência ao movimento das partículas A , a distribuição de tempos de travessia apresenta leve assimetria (quadrados) em comparação ao ajuste gaussiano (limite da binomial negativa) em vermelho. No mesmo gráfico, vemos que a assimetria acentua-se na distribuição de tempos (agora descrita pelos círculos) devido à forte interação que as partículas A agora sentem, afastando completamente a distribuição do caráter de binomial negativa, onde o ajuste está representado pela curva em azul. Notoriamente enxergamos uma parábola em escala monolog. A resistência imposta pelas partículas B gera um atraso no tempo de travessia, que apresenta um comportamento de lei de potência em sua cauda no breve período de $t = 800$ a $t = 1000$ passos aproximadamente. Isto significa dizer que neste

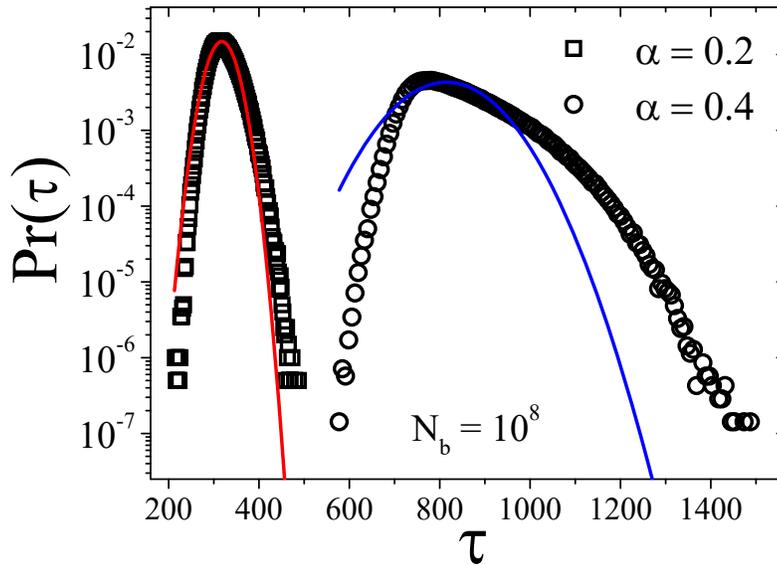


Figura 4.1: Distribuições de tempos de travessia τ para diferentes valores de α , inicialmente considerando $\beta_{\parallel} = 0$ e $\beta_{\perp} = 0$. Temos um forte desvio do comportamento gaussiano no caso de $\alpha = 0, 4$, o que corresponde a uma situação de alta resistência.

intervalo de tempo, os caminhantes chegam à posição $x = L_x$ em uma determinada taxa que dá à distribuição um caráter de lei de potência.

Para analisarmos de maneira controlada os efeitos que os parâmetros de espalhamento causam nas distribuições de tempos, definimos o parâmetro de resistência em $\alpha = 0, 4$ e variamos β_{\parallel} e β_{\perp} alternadamente. Neste caso, os parâmetros extensivos do sistema (N_A, N_B, L_x e L_y) foram mantidos os mesmos que os utilizados na análise anterior, a menos do parâmetro $N_B = 10^6$.

Na figura 4.2, as três curvas em que $\beta_{\perp} = 0$ ainda correspondem a um sistema bidimensional composto por $L_y = 10$ sistemas unidimensionais independentes. Nestes casos, vemos que o aparecimento do parâmetro β_{\parallel} , acentua o comportamento de lei de potência já visto anteriormente e, apesar de a densidade média de obstáculos, $\frac{N_B}{L_x L_y}$, ter diminuído por um fator de 10^2 , o aumento de β_{\parallel} mostra que o sistema é sensível a pequenas mudanças nos parâmetros intensivos.

Ainda na Fig. 4.2, vemos que aumento do parâmetro de espalhamento lateral, β_{\perp} , não altera as distribuições de tempos. A justificativa para a manutenção da forma das curvas reside no fato dos obstáculos serem uniformemente distribuídos e fixos. Isto significa

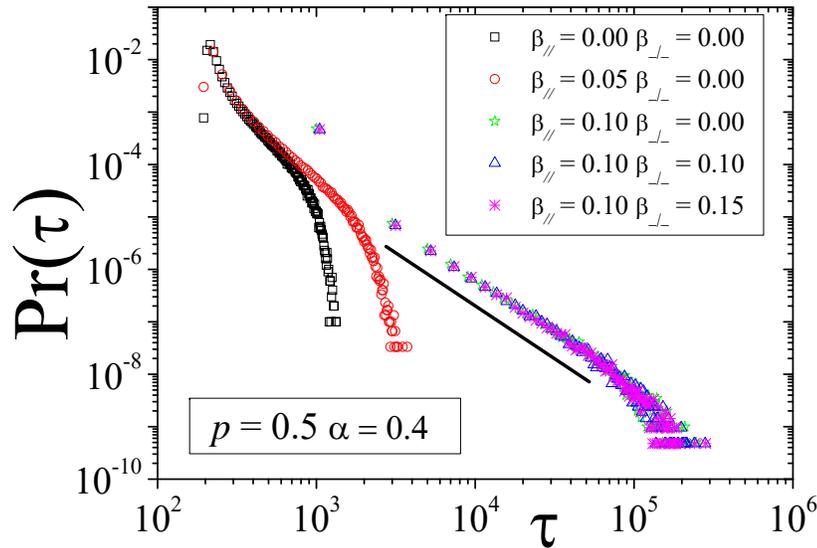


Figura 4.2: Distribuições de tempos de travessia deformam-se para diferentes valores de β . Podemos ver que há um inerente efeito do β_{\parallel} nos tempos de travessia. Contudo o mesmo não é observado para diferentes valores de β_{\perp} .

que o simples fato de um caminhante pular para uma célula lateral não cria nenhum benefício de, em média, encontrar um caminho com menor densidade de obstáculos.

Finalmente analisamos os efeitos de diferentes concentrações de partículas B no ambiente como pode ser observado no gráfico da Fig. 4.3. Nela estão postos os gráficos das distribuição de tempos de travessia das partículas A , resultantes das simulações *Monte Carlo* para $L_y = 10$ e $N_A = 10^6$. Podemos ver que há mudança de comportamento da distribuição de tempos à medida que a escala de densidade média de obstáculos aumenta. Em uma situação onde a densidade média de obstáculos é $\frac{N_B}{L_x L_y} = 1$ em comparação a de caminhantes, $\frac{N_A}{L_x L_y} = 10^3$, a distribuição de tempos ainda possui forte aspecto de distribuição de binomial negativa apesar de já surgir uma flagrante assimetria. Nesta situação, o formato de sino é mantido, contudo ocorre um alongamento da cauda da distribuição. Tal fenômeno pode ser explicado pelo desgarramento de alguns caminhantes de A do grande grupo, o que os faz enfrentar uma resistência maior, pois esta depende da densidade relativa.

Ainda na figura 4.3, o caso intermediário em que $N_B = 10^6$ mostra que a forma da distribuição altera-se drasticamente neste contexto em que as densidades médias de

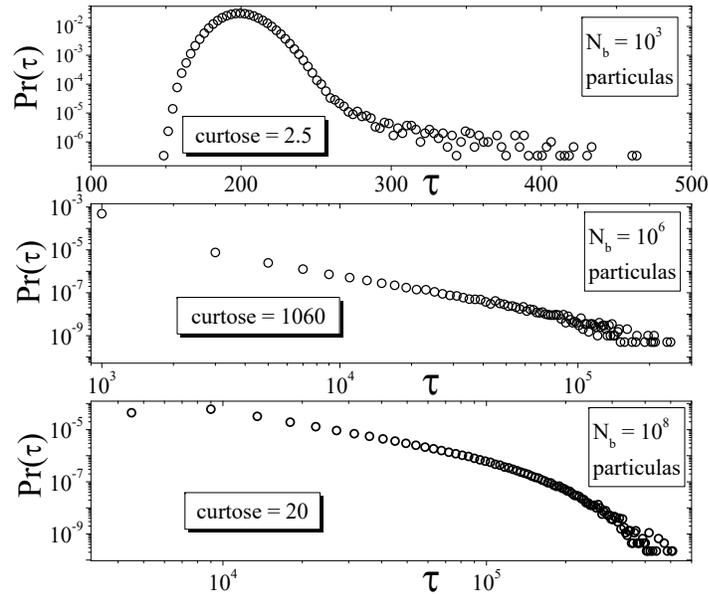


Figura 4.3: Gráfico log-log das distribuições de tempos de travessia para diferentes concentrações N_b . Há uma curiosa transição do tipo gaussiana para lei de potência para exponencial conforme aumentamos o número de obstáculos N_b .

obstáculos B e caminhantes A se igualam. Além de um aumento de mais de três vezes na ordem de magnitude do tempo médio de travessia, a distribuição de tempos agora apresenta um comportamento de lei de potência em praticamente toda sua extensão e a sua curtose tem um considerável aumento com relação ao caso anterior. Esta situação, podemos interpretar como se os primeiros caminhantes a completar a travessia fossem aqueles que conseguissem manter-se junto ao grande grupo. Os caminhantes que não conseguiram acompanhar o grupo principal, foram chegando em grupos cada vez menores de tal forma que a taxa de chegada destes grupos deu um forte aspecto de lei de potência para a cauda da distribuição.

No último caso da figura 4.3, a distribuição altera novamente a sua forma, mas no sentido de diminuir sua assimetria. Em uma densidade média de obstáculos superior a densidade média de caminhantes, tal que a razão é $\frac{N_B}{N_A} = 10^2$, a distribuição apresenta um comportamento exponencial. Nossa interpretação é de que a situação se torna tão difícil para praticamente todas as partículas que não há mais distinção, dado o cenário de alta concentração de obstáculos.

Portanto, a distribuição de tempos, primeiramente, realiza uma transição de com-

portamento gaussiano para uma função de lei de potência quando a densidade média de obstáculos aumenta até tornar-se da ordem da densidade média de caminhantes. A segunda transição ocorre quando a densidade média de obstáculos torna-se muito superior a densidade de caminhantes, alterando a forma da curva de uma função de lei de potência para um comportamento exponencial.

4.2 Partículas B em movimento

Vamos agora concentrar nossos esforços na situação onde as partículas B se movimentam contrariamente ao fluxo de A . Assim a fim de retomar os resultados obtidos no caso unidimensional, começamos aqui por simular tanto por MC quanto via integração das EDPs.

Assim, tomamos um particular caso para analisar a evolução temporal da distribuição espacial de partículas A partindo de uma condição inicial onde agora há um alto número de partículas inicialmente localizadas em uma das extremidades ($x = 0$):

$$n_A(i, j; t = 0) = \begin{cases} \frac{N_A}{L_y} & \text{if } i = 1, j = 1, \dots, L_y \\ 0 & \text{if } 2 < i < L_x, j = 1, \dots, L_y \end{cases}$$

que devem realizar a travessia para a outra extremidade ($x = L_x$), contrariamente as partículas B que inicialmente estão localizadas na extremidade ($x = L_x$) e devem realizar a travessia para a extremidade ($x = 0$), o que seria um espelho das partículas A na situação diametralmente oposta:

$$n_B(i, j; t = 0) = \begin{cases} \frac{N_B}{L_y} & \text{if } i = L_x, j = 1, \dots, L_y \\ 0 & \text{if } 1 < i < L_x - 1, j = 1, \dots, L_y \end{cases}$$

Aqui nós marginalizamos as concentrações com respeito a variável y , uma vez que temos interesse na concentração espacial e suas propriedades (média, desvio, assimetria e curtose) com respeito a sua posição longitudinal com relação ao corredor. O objetivo é apenas ilustrar a interação entre as partículas A e B , olhando para a distribuição espacial da espécie A , já que a situação é simétrica. A Fig. 4.4 ilustra as concentrações para diferentes instantes de tempo considerando uma particular escolha de parâmetros: $\alpha = 0,49$, $\beta_{\parallel} = 0,245$ e $\beta_{\perp} = \beta_{\parallel}/2 = 0,1225$. As curvas contínuas mostram os resultados via EDP enquanto os pontos ilustram as simulações obtidas por MC. As

deformações do comportamento gaussiano podem ser observadas bem como no caso unidimensional.

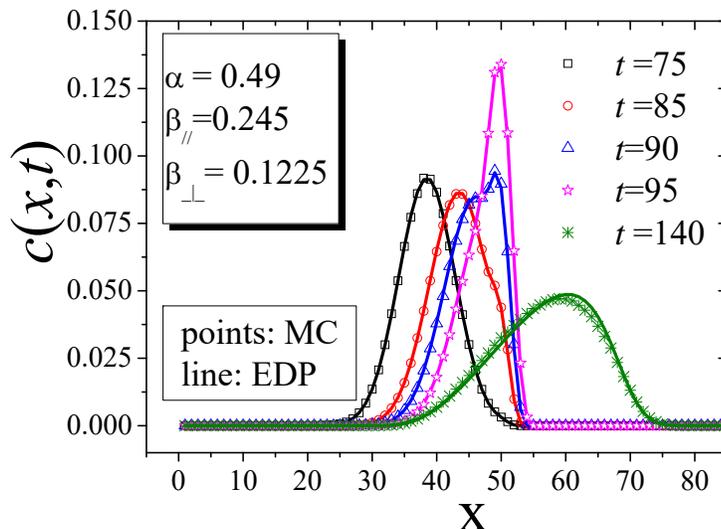


Figura 4.4: Distribuição espacial das partículas A marginalizada na direção y . Podemos observar uma excelente concordância entre EDP e MC.

Isso nos motivou a olhar a evolução temporal dos parâmetros desta distribuição, o que pode ser observado na Fig. 4.5. Nos quatro gráficos desta figura, podemos olhar respectivamente a evolução temporal da posição (canto superior esquerdo), do desvio (canto superior direito), da assimetria (canto inferior esquerdo) e da curtose (canto inferior direito). Podemos ver claramente uma boa concordância entre EDP e MC e, embora para tempos maiores haja uma leve perda de similaridade entre as curvas, qualitativamente os parâmetros são corroborados.

Uma questão que parece saltar aos olhos, principalmente relativa a seção anterior, é que o β_{\perp} parece não ser um parâmetro relevante para a dinâmica. Isso não é verdade, como veremos no caso em que há mobilidade das partículas B simultaneamente às partículas A . Isso ficará claro na nossa análise de um parâmetro muito interessante que é o tempo de segregação e seu caso particular, o tempo de destilação.

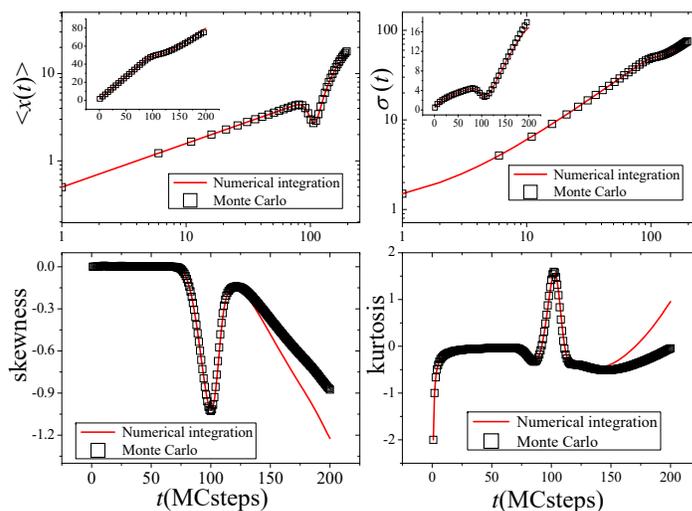


Figura 4.5: Distribuições de tempos de travessia deformam-se para $\alpha's$ e $\beta's$ diferentes.

4.2.1 Tempo médio de segregação e destilação

Várias áreas da ciência que estudam a composição química de misturas necessitam de técnicas de separação de substâncias. Um meio muito comum de realizar esta separação de componentes químicos é através da técnica de destilação. Neste sentido, o tempo médio que misturas levam para separar-se em seus componentes, acaba sendo um parâmetro importante do processo de destilação.

Nossa ideia é agora estabelecer como o nosso modelo estocástico pode também explorar estatísticas relacionadas ao processo de destilação de dois tipos de substâncias, representadas aqui pelas espécies A e B . O processo de destilação, do ponto de vista experimental, acontece devido à colisões entre partículas distintas na presença de um campo externo. Em centrífugas, o campo externo é gerado por inércia devida a rotação do recipiente das substâncias. Em outros casos, como a destilação de bebidas alcoólicas, o campo que age sobre as substâncias de diferentes densidades é o gravitacional.

Contudo, podemos analisar antes da destilação propriamente dita, um caso mais geral de separação de duas espécies em um espaço particionado por células com concentrações arbitrárias de partículas. Estes casos compreendem o que nós definimos por segregação no capítulo 3 dessa dissertação, que podem ser de 3 tipos: a) celular, b) por bandas longitudinais e c) por bandas verticais. Este último caso corresponderia

exatamente ao que entendemos por destilação quando estudamos o sistema com muitas partículas, uma vez que é improvável as partículas se segregarem por bandas verticais em um padrão diferente da situação onde todas partículas A estejam localizadas numa região à esquerda e todas partículas B localizadas numa região à direita do corredor de acordo com uma nítida separatriz como representado na Fig. 4.6. Essa afirmação é fundamentada no fato de que a direção deste tipo de segregação é a direção do campo, de modo que qualquer padrão de segregação por bandas transversais é transitório, exceto o do caso definido na Fig. 4.6.

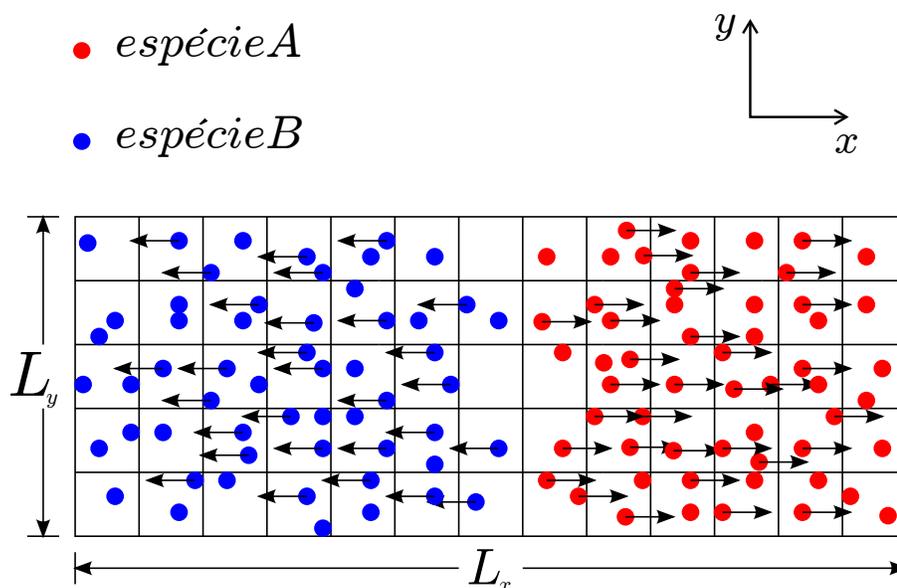


Figura 4.6: Configuração mais entropicamente provável no caso da segregação por bandas verticais. Esta configuração corresponde exatamente ao que entendemos como destilação.

A segregação por bandas longitudinais será interessante como veremos para o caso de simetria anelar para as partículas, o que será visto na próxima seção deste capítulo.

Neste particular estudo, também nos concentramos apenas nas simulações MC uma vez que a integração numérica das EDPs não permitem a computação dos tempos de segregação. Assim iniciamos com uma situação bastante típica, onde as partículas A e B estão inicialmente espalhadas de maneira uniforme no corredor de $L_x = 100$ por $L_y = 40$. Então, para todos os valores possíveis de β_{\parallel} e β_{\perp} , deixamos o sistema evoluir e computamos o tempo necessário para o parâmetro de segregação de nosso interesse

(previamente definidos) atingir seu valor máximo $\Phi = 1$.

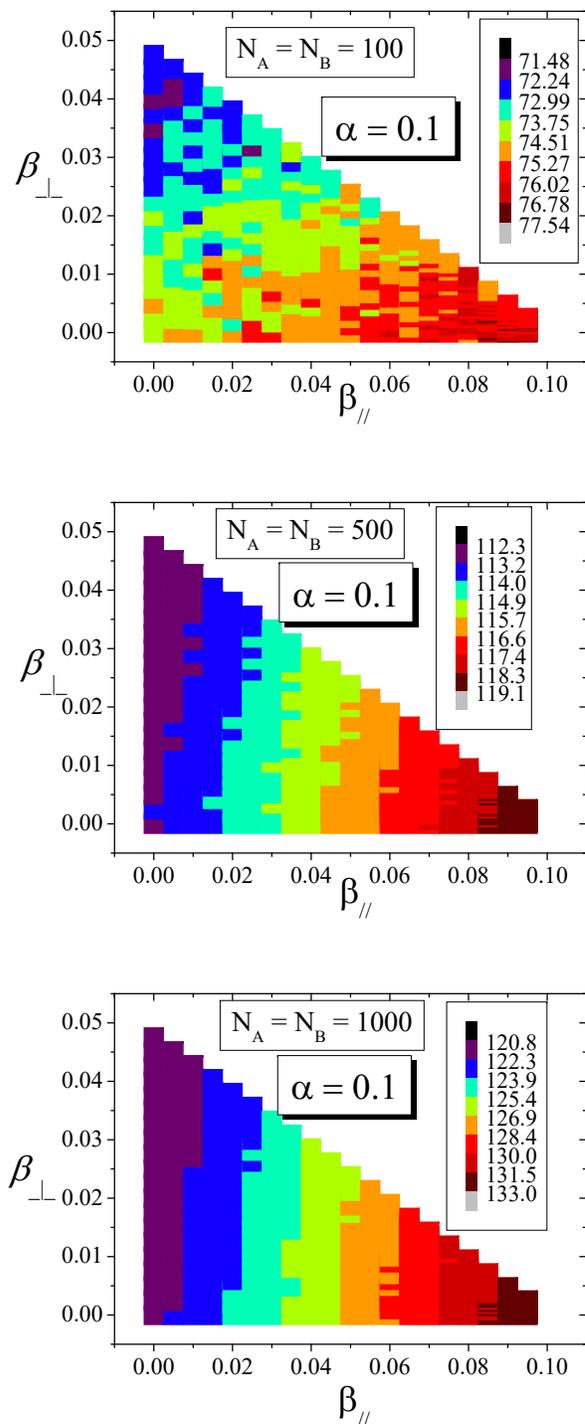


Figura 4.7: Tempo de segregação celular para os diferentes valores de $\beta_{//}$ e β_{\perp} com dimensão lateral do sistema $Ly = 40$. Utilizamos $\alpha = 0,1$ para obtenção destes mapas de cor.

Neste caso, temos que repetir a simulação num número razoável de vezes ($N_{run} = 10^3$) a fim de produzir um aceitável valor para o tempo médio de segregação. Começamos com o tempo médio de segregação celular mostrado respectivamente para $\alpha = 0, 1$ nas Fig. 4.7 que correspondem respectivamente a $N/2 = N_A = N_B = 100, 500$ e 1000 .

Podemos ver que para $\alpha = 0, 1$, no caso de poucas partículas, $N/2 = 100$ (situação rarefeita), o tempo de segregação mostrado neste mapa de cores não ilustra uma situação de dependência com β_{\perp} uma vez que não há uma definição clara. Contudo, para $N/2 = 500$ e $N/2 = 1000$ já vemos com mais clareza que não há dependência com β_{\perp} de acordo com o padrão de faixas observados no gráfico.

Isso muda radicalmente para o caso em que $\alpha = 0, 4$. Observa-se, na Fig. 4.8, que agora surge uma dependência em β_{\perp} , pois o padrão de faixas mostra-se inclinado. Vemos neste caso, uma clara dependência de β_{\perp} no tempo de segregação que diminui com o aumento deste parâmetro, o que é bastante razoável esperar, pois β_{\perp} representa a existência de um grau de liberdade adicional para que as partículas se separem umas das outras. Este efeito, no entanto, é mais forte nas situações rarefeitas, pois quanto mais partículas o sistema tiver, menores são as chances de encontrar-se uma célula vazia ao lado.

Elaboramos os mesmos gráficos para o caso de $\alpha = 0, 1$ e $\alpha = 0, 4$, só que agora analisando a segregação por bandas verticais (o que corresponde ao tempo de destilação das partículas como foi previamente explicado), que é mostrado respectivamente nos gráficos das Figs. 4.9 e 4.10.

Nesta situação, podemos observar que a inexistência de relação do tempo médio de destilação com β_{\perp} para $\alpha = 0, 1$ acompanha o caso de segregação celular. Há de maneira similar a dependência do parâmetro β_{\perp} na situação de alta resistência ($\alpha = 0, 4$) num padrão de faixas inclinadas. No entanto, é importante salientar que a magnitude dos tempos de destilação são maiores do que dos tempos de segregação por células, conforme pode ser observado pelas legendas nos gráficos de cores. Isso também é esperado uma vez que trata-se de um arranjo mais complexo do que simplesmente segregar as partículas por células.

É importante notar que o efeito da concentração de partículas é sentido de forma distinta para diferentes valores de α , conforme é mostrado na Fig. 4.11. Esta figura mostra, numa escala log-log, o comportamento do maior tempo de médio de destilação encontrado nos mapas de cores ($\langle \tau \rangle_{\max}$) em função de N^{-1} . Apesar de haver apenas 4

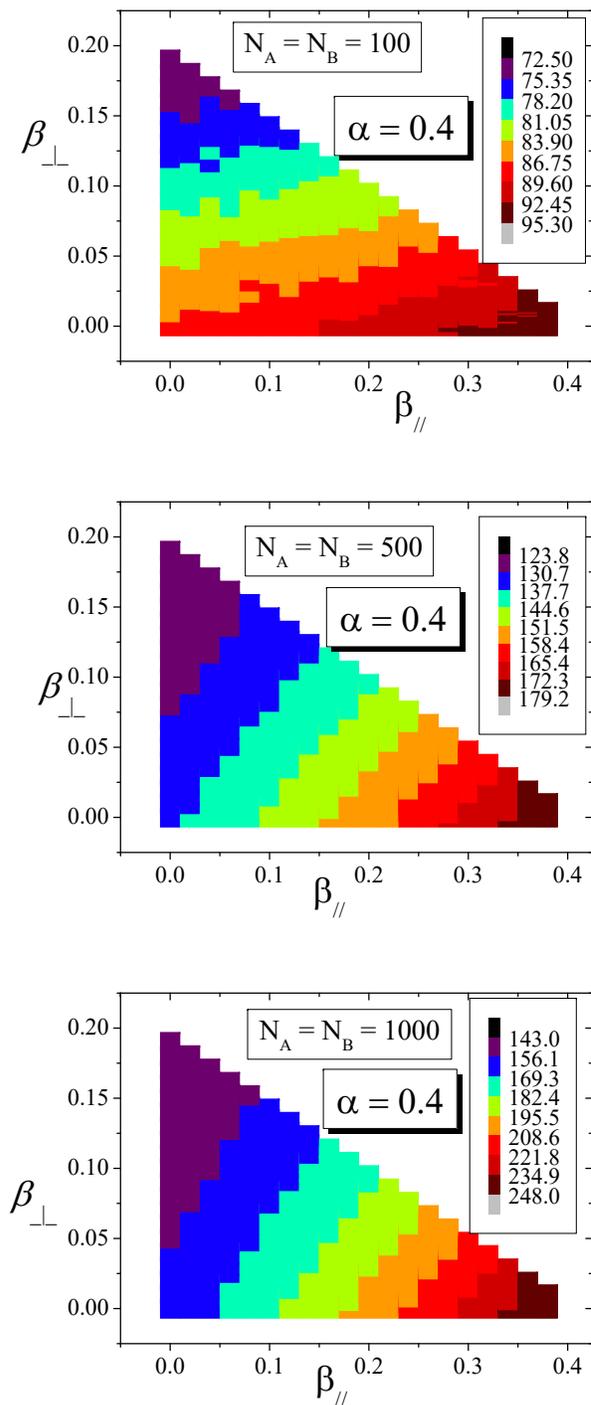


Figura 4.8: Tempo de segregação celular para os diferentes valores de $\beta_{//}$ e β_{\perp} com dimensão lateral do sistema $Ly = 40$. Utilizamos $\alpha = 0, 4$ para obtenção destes mapas de cor.

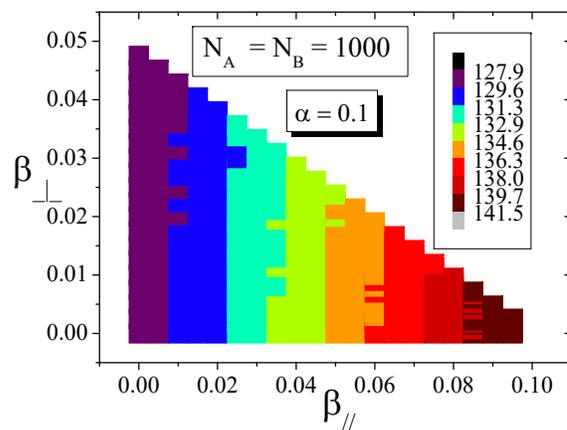
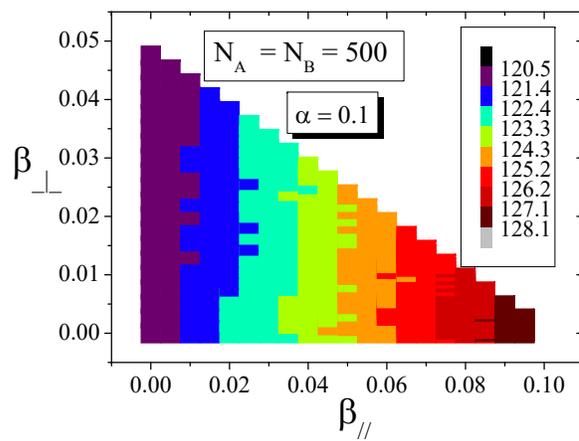
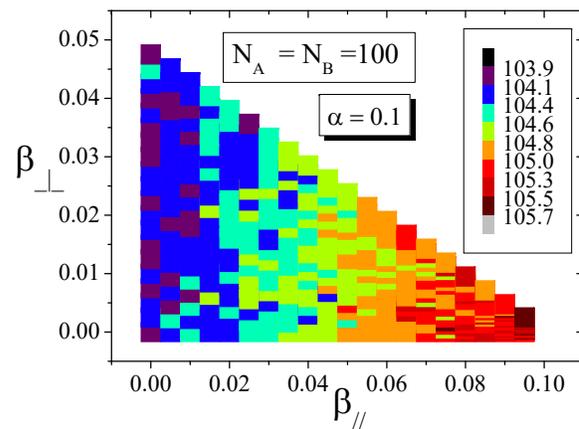


Figura 4.9: Tempo de destilação para os diferentes valores de $\beta_{//}$ e β_{\perp} com dimensão lateral do sistema $L_y = 40$. Utilizamos $\alpha = 0, 1$ para obtenção destes mapas de cor.

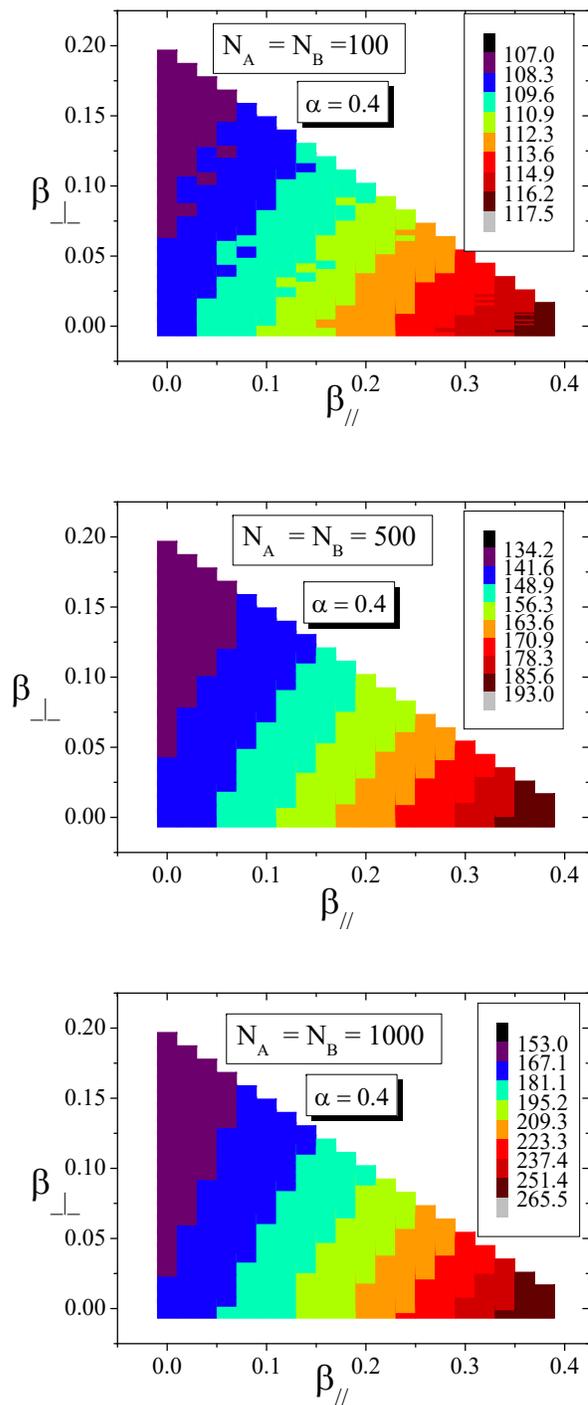


Figura 4.10: Tempo de destilação para os diferentes valores de $\beta_{//}$ e β_{\perp} com dimensão lateral do sistema $L_y = 40$. Utilizamos $\alpha = 0,4$ para obtenção destes mapas de cor.

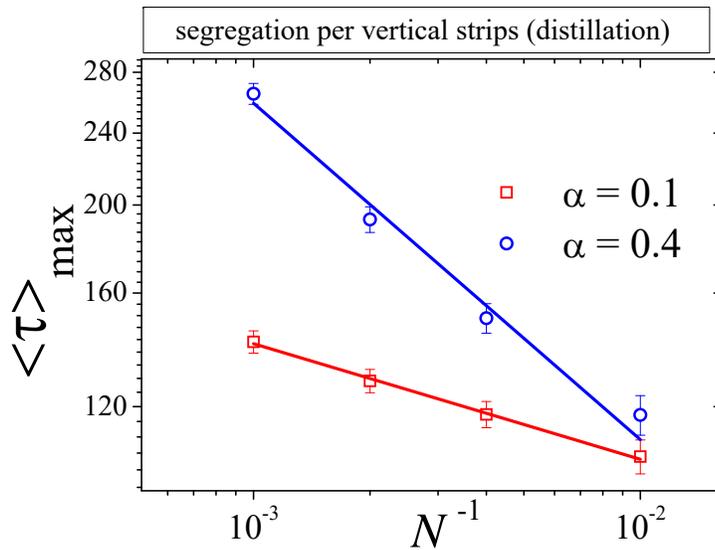


Figura 4.11: Maior tempo médio de destilação encontrado na elaboração dos mapas de calor em função de N^{-1} , onde $N = N_A = N_B$ para os diferentes valores de α estudados.

pontos, podemos ver duas retas e uma inclinação maior para $\alpha = 0,4$ do que em relação à $\alpha = 0,1$.

Finalmente, terminamos essa análise mostrando como os diferentes parâmetros de ordem, por células e por bandas verticais (destilação), relaxam para o valor máximo ao longo do tempo. Neste caso utilizamos $\alpha = 0,4$ e fixamos $\beta_{\parallel} = 0,1$. Notoriamente podemos ver que quanto maior o β_{\perp} , maior é o valor de Φ independente do tipo de segregação analisado, conforme ilustrado na Fig. 4.12.

Desta maneira, é notório que temos uma forte influência de β_{\perp} nos tempos de segregação mostrado por diferentes formas nesta subseção. Agora, gostaríamos de explorar padrões emergentes de segregação por bandas longitudinais. Para isso vamos fazer as partículas de uma espécie confrontarem-se com as de outra espécie considerando uma simetria anelar. Mostraremos que, surpreendentemente, não apenas o padrão de segregação por bandas longitudinais emerge no sistema, mas também que há relaxação do sistema para este padrão e que esta ocorre independentemente da distribuição inicial das partículas.

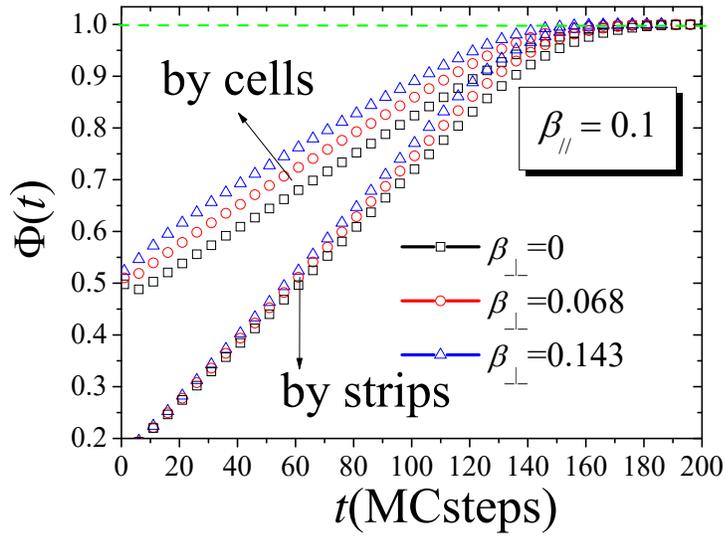


Figura 4.12: Evolução temporal dos diferentes parâmetros de ordem considerando $\alpha = 0, 4$.

4.3 Simetria anelar e estado assintótico

A implementação de condições periódicas de contorno são costumeiramente realizadas com objetivos de minimizar efeitos de bordas que sistemas pequenos podem apresentar. O quão pequeno um sistema pode ser considerado depende muito dos parâmetros que definem cada sistema físico. Em nosso modelo, os parâmetros extensivos são N_A , N_B , L_x e L_y e, portanto, nossa primeira análise de um sistema periódico baseou-se em verificar os efeitos de suas variações.

Nesta etapa, estudamos a dinâmica de contra-fluxo para condições periódicas na direção x e reflexivas na direção y . Analisamos duas condições iniciais da espécie A . A primeira condição inicial que utilizamos é uma distribuição homogênea. A outra condição inicial que utilizamos é função linear em y na posição $x = 0$. Para ambos os casos, a condição inicial utilizada para a espécie B foi a distribuição homogênea e implementamos nossos resultados numéricos tanto utilizando simulações MC quanto integrando numericamente as equações que dão origem às EDPs (equações 3.3 e 3.6).

Mostraremos que independentemente das condições iniciais utilizadas, o sistema evolui para um estado de dinâmica ordenado. Mostramos também que se faz necessária a utilização de condições iniciais com assimetria entre A e B para que a relaxação para

um estado ordenado possa ser reproduzida via integração numérica.

Nesta etapa, utilizamos a chegada a este estado estacionário como sendo critério de parada da evolução temporal nas simulações MC e integração numérica das EDP's em ambas condições iniciais implementadas. Utilizamos um erro de $\delta = 0.001$ entre o valor obtido do parâmetro de ordem e o valor ideal esperado (valor unitário) que é teoricamente atingido quando o sistema atinge o estado ordenado.

Para o acompanhamento completo da evolução temporal do sistema, os códigos foram escritos em *FORTRAN 77*, com o auxílio do programa gerador de vídeos *ffmpeg*. Desta maneira, cada passo de tempo é esboçado através de um script do *GNUPLOT* gerado dentro do próprio código e, posteriormente, é formado o vídeo. Juntamente a esta análise visual, acompanhamos a evolução dos parâmetros de ordem celular, por bandas longitudinais e transversais definidos pelas equações 3.10, 3.11 e 3.13 respectivamente.

4.3.1 Espécie A em distribuição inicial homogênea

Vamos agora considerar o caso em que a distribuição espacial homogênea é utilizada. Para gerá-la, consideramos duas variáveis aleatórias uniformes para determinar a posição inicial de cada uma das partículas que definem o sistema. Isso restringe as simulações Monte Carlo, pois o custo computacional é grande para gerar uma condição inicial simultaneamente ao fato de que muitas repetições devem ser utilizadas para estabelecer boas estimativas, diferentemente do que acontece quando resolvemos uma EDP. Por outro lado, vale ressaltar que as simulações MC proporcionam uma análise das flutuações do sistema, que pode não ser capturada pelas soluções numéricas via EDP.

Neste ponto é importante fazer algumas ressalvas. A ausência de flutuações no caso das soluções numéricas via EDP implica que, em uma condição inicial simétrica entre partículas A e B , não há a produção de algum elemento gerador de assimetria necessário para fazer o sistema evoluir para um estado ordenado. Os resultados proporcionados por essa condição inicial das EDPs (triviais neste caso) foram omitidos neste trabalho por razões óbvias, já que o sistema não evolui a partir de sua condição inicial à medida que o tempo passa.

A evolução dos parâmetros de ordem também foi monitorada. As dimensões espaciais que utilizamos nesta etapa são $L_x = 100$ e $L_y = 40$.

Assim, verificamos a evolução do nível de segregação do sistema para diferentes densidades (ocupação das células). Na Fig. 4.13, observamos a relaxação do parâmetro

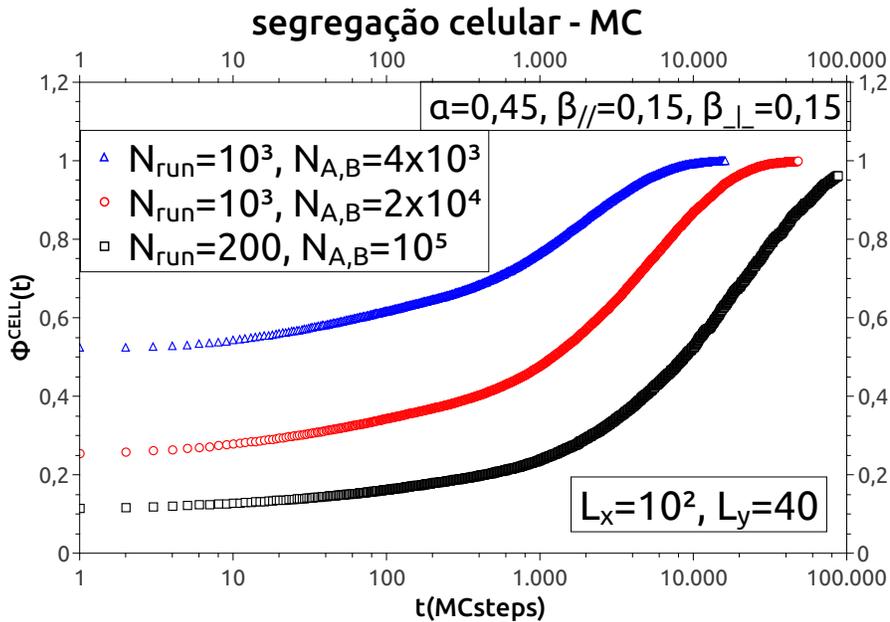


Figura 4.13: Evolução temporal do parâmetro de ordem celular. Ambas as espécies estão uniformemente distribuídas no corredor $L_x \times L_y$. Utilizamos menor número de repetições (runs) conforme aumentamos o número de partículas.

de ordem celular para uma particular escolha de parâmetros, mas sem perda de generalidade. Podemos notar que $\Phi^{cell}(t)$ vai pra 1 para valores grande de t , mostrando notoriamente a relaxação para uma situação da segregação das espécies por células. Na situação de altas densidades o parâmetro de ordem migra de um valor muito baixo para o valor unitário, o que é razoável esperar, pois o estado inicial é mais segregado para menores densidades. O motivo está no fato de que quanto maior for o número de partículas para distribuir aleatoriamente em $L_x L_y$ células, maiores são as chances de que uma partícula caia em uma célula já povoado com um caminhante da outra espécie.

Logo após, analisamos nossos resultados mais importantes nesta seção que correspondem a relaxação do sistema ao estado de ordenamento por bandas longitudinais. Vemos pelo gráfico 4.14, que o sistema sai de um estado aleatório (distribuição uniforme com espécies misturadas no interior das células) para um estado de ordenamento por bandas conforme corroborado pela evolução do parâmetro. Nesta figura, mostramos as evoluções para os casos $N/2 = N_A = N_B = 4 \cdot 10^3$, $2 \cdot 10^4$ e 10^5 .

Por completude, apresentamos na Fig. 4.15 a evolução temporal do parâmetro de ordem por bandas transversais. Como podemos observar, os valores de Φ^\perp são baixos

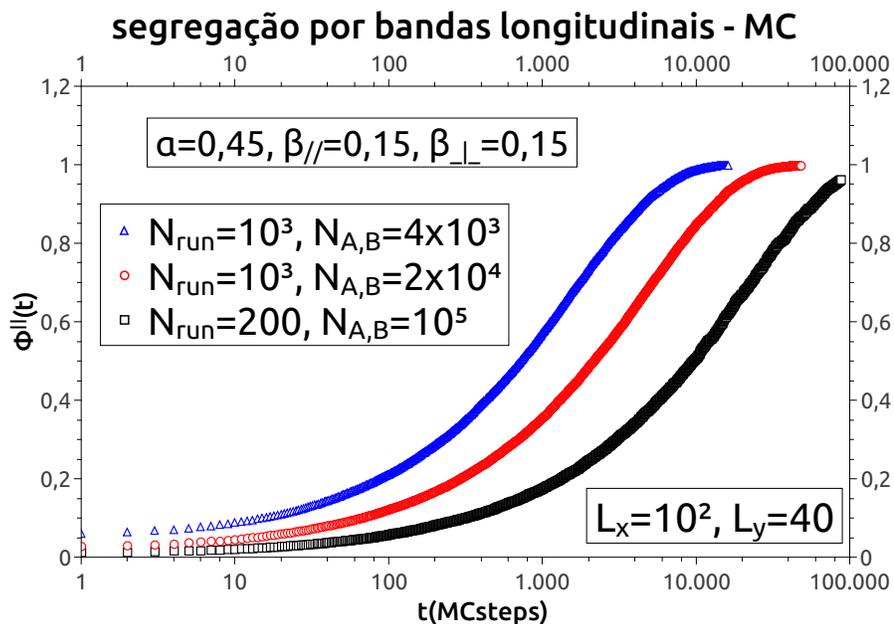


Figura 4.14: Evolução temporal do parâmetro de ordem por bandas longitudinais. Ambas as espécies estão uniformemente distribuídas no corredor $L_x \times L_y$.

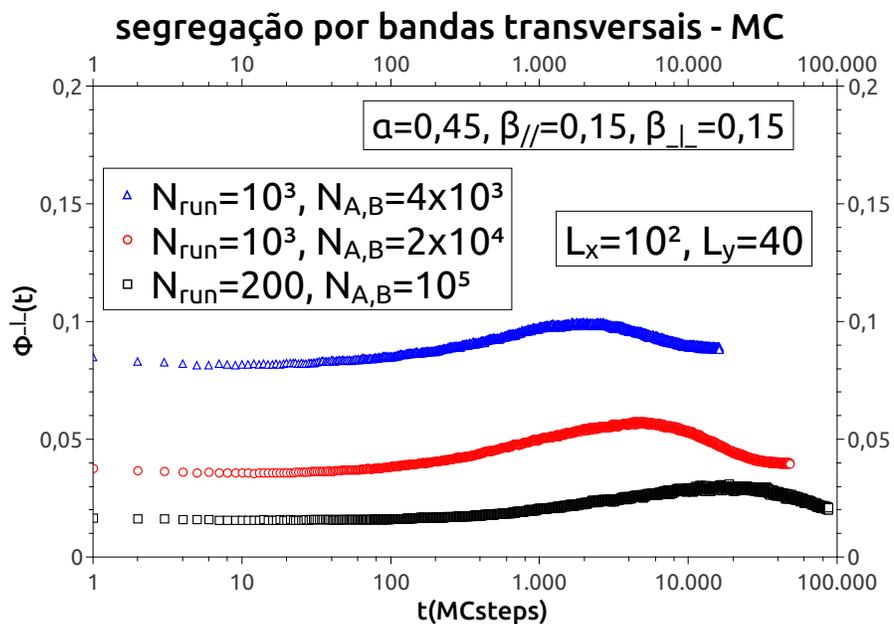


Figura 4.15: Evolução temporal do parâmetro de ordem por bandas transversais. Ambas as espécies estão uniformemente distribuídas no corredor $L_x \times L_y$.

mas de forma interessante apresentam um máximo global. Este instante de máximo corresponde a uma situação onde o sistema segregado por bandas longitudinais pode estar apresentando variações de densidades ao longo da banda. Desta maneira, caso os pontos de altas e baixas densidades das bandas paralelas, que surgem de uma mesma espécie, estiverem se deslocando juntos podemos ter esta situação de maximização temporária do parâmetro de ordem transversal. Contudo, como Φ^{\parallel} continua crescendo esse ligeiro padrão transversal começa a desaparecer, pois as bandas longitudinais formadas tendem a ficar mais homogêneas com o passar do tempo devido a estocasticidade do processo.

Nas figuras 4.16, 4.17, 4.18 e 4.19, podemos ver, através dos “snapshots”, como o sistema parte de um estado de mistura e gradativamente começa a se organizar em bandas.

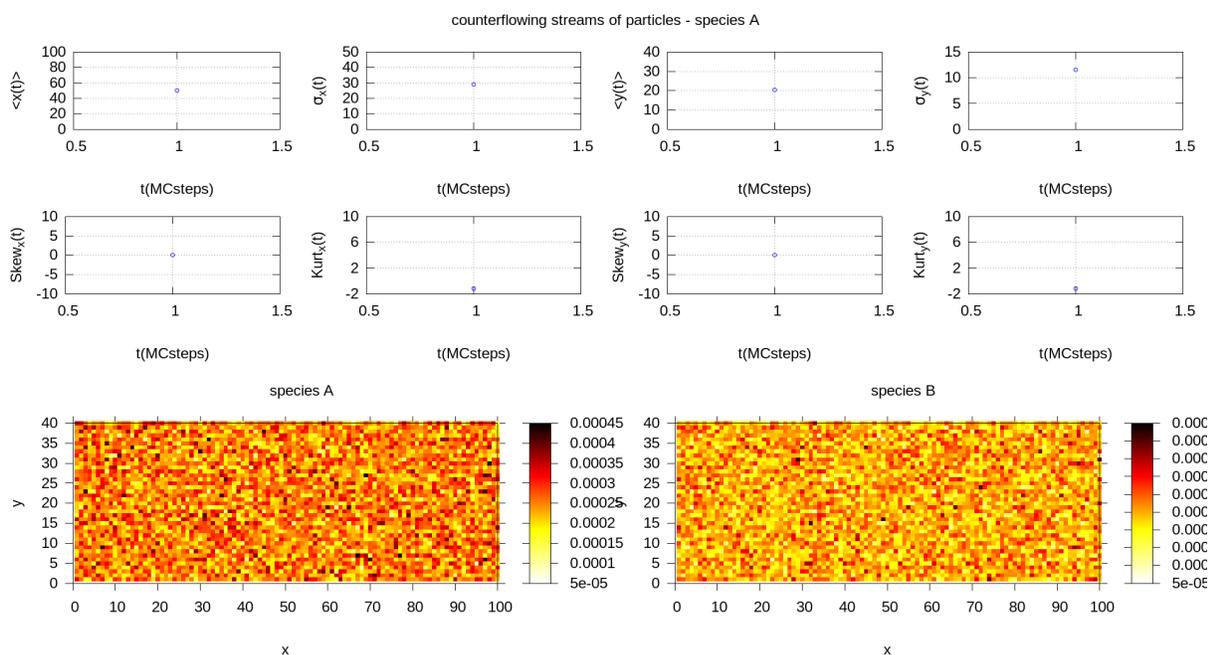


Figura 4.16: Snapshot via simulação MC no instante $t = 1$ da evolução temporal com $N_{A,B} = 10^5$ partículas uniformemente distribuídas inicialmente.

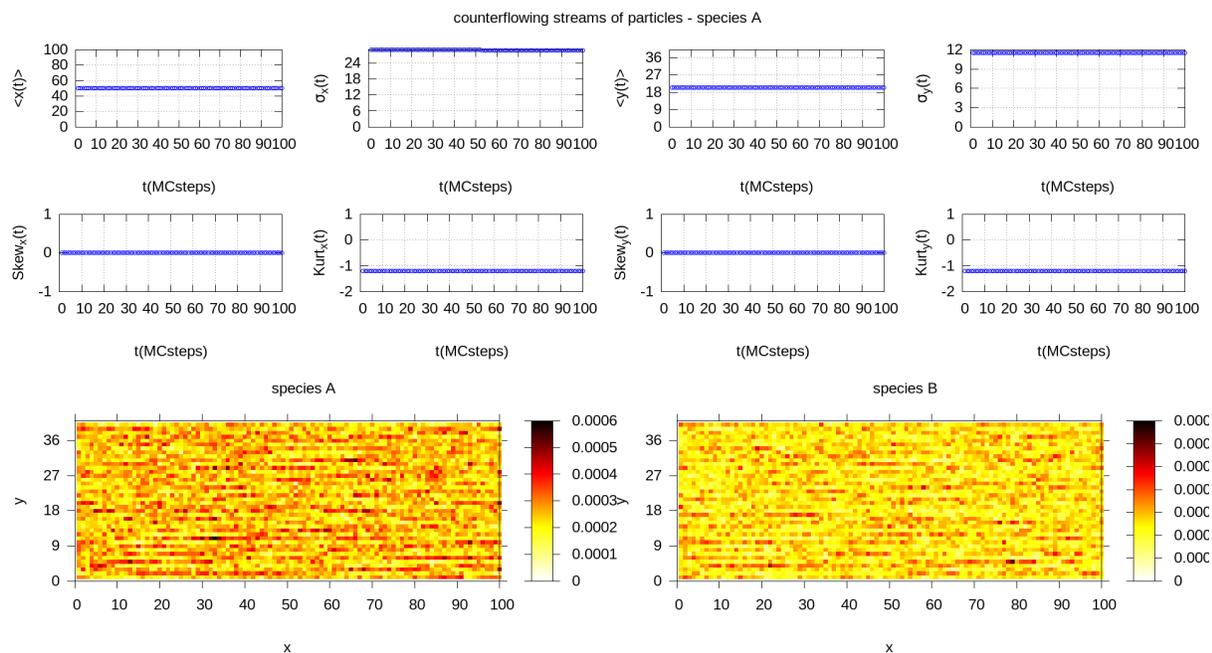


Figura 4.17: Snapshot via simulação MC no instante $t = 100$ da evolução temporal com $N_{A,B} = 10^5$ partículas uniformemente distribuídas inicialmente.

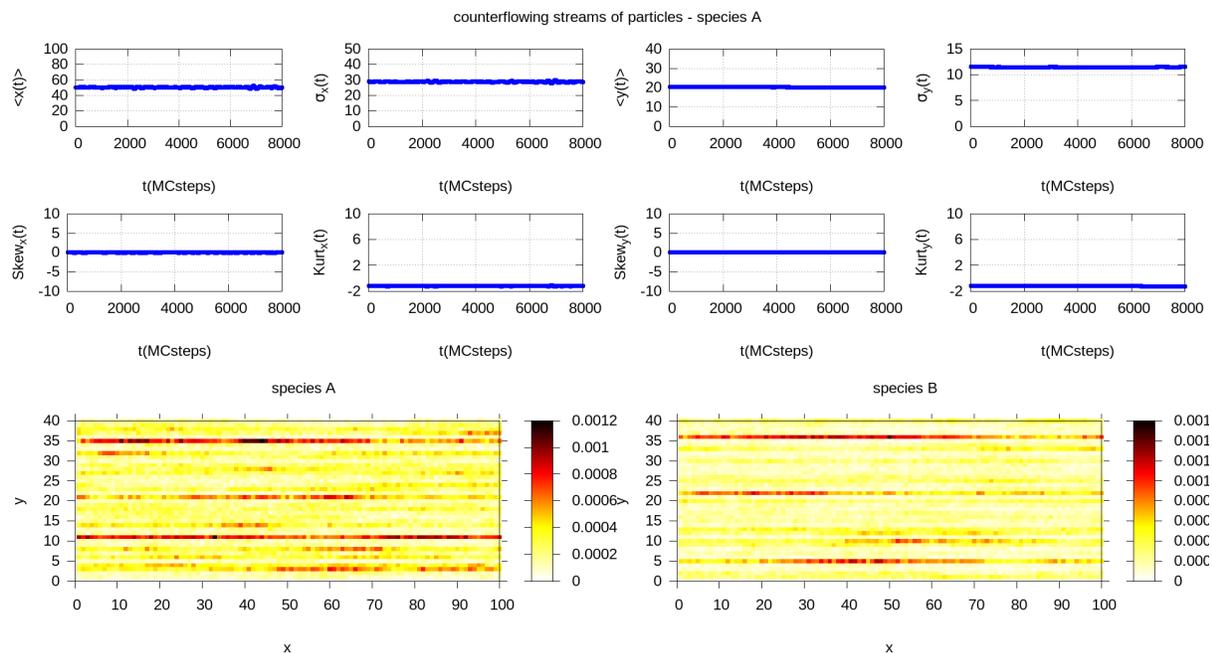


Figura 4.18: Snapshot via simulação MC no instante $t = 8000$ da evolução temporal com $N_{A,B} = 10^5$ partículas uniformemente distribuídas inicialmente.

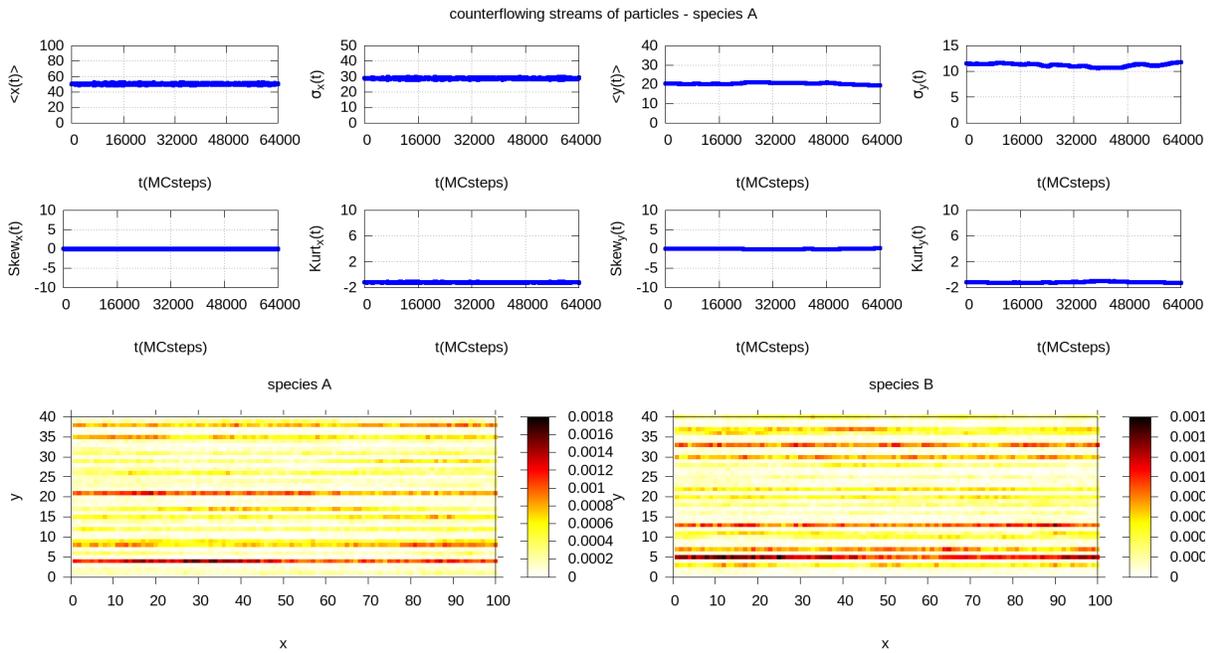


Figura 4.19: Snapshot via simulação MC no instante $t = 64000$ da evolução temporal com $N_{A,B} = 10^5$ partículas uniformemente distribuídas inicialmente.

4.3.2 Espécie A em distribuição inicial com assimetria em y

Nesta etapa, iremos supor que as partículas da espécie A estejam inicialmente distribuídas na posição $x = 1$, caracterizando uma banda fina transversal. Esta condição já retira a simetria entre as espécies que havia no caso anterior. Entretanto, utilizaremos uma distribuição não homogênea das partículas A sobre a banda fina. Estudaremos o caso de uma distribuição que cresce linearmente com y , na posição $x = 1$.

Assim, a condição inicial terá uma anisotropia na direção y , vindo a induzir o sistema para um determinado estado de equilíbrio. No caso anterior, por utilizarmos as distribuições iniciais homogêneas, apenas o caráter estocástico das simulações *Monte Carlo* eram capazes de gerar flutuações necessárias para levar o sistema a um estado de equilíbrio ordenado, de maneira que não fomos capazes de reproduzir a dinâmica do sistema via integração numérica.

Neste sentido, implementamos a condição inicial para as partículas do tipo A da seguinte maneira:

$$n_A(i, j; t = 0) = \begin{cases} \frac{2N_A}{L_y^2}(L_y - j) & \text{se } i = 1, j = 1, \dots, L_y \\ 0 & \text{se } 2 \leq i \leq L_x, j = 1, \dots, L_y \end{cases}$$

e

$$n_B(i, j; t = 0) = \frac{N_B}{L_x L_y}, \quad i = 1, \dots, L_x, \quad j = 1, \dots, L_y.$$

Nossa primeira análise numérica consiste em verificar a comparação da dinâmica em simulações MC e integração numérica das EDP's. Nesta direção, o gráfico 4.20 mostra a evolução do parâmetro de ordem celular para um sistema de dimensões $L_x = 100$ e $L_y = 40$. Podemos perceber que a segregação celular reproduz o estado dado pela condição inicial de banda fina transversal, pois esta representa um estado ordenado.

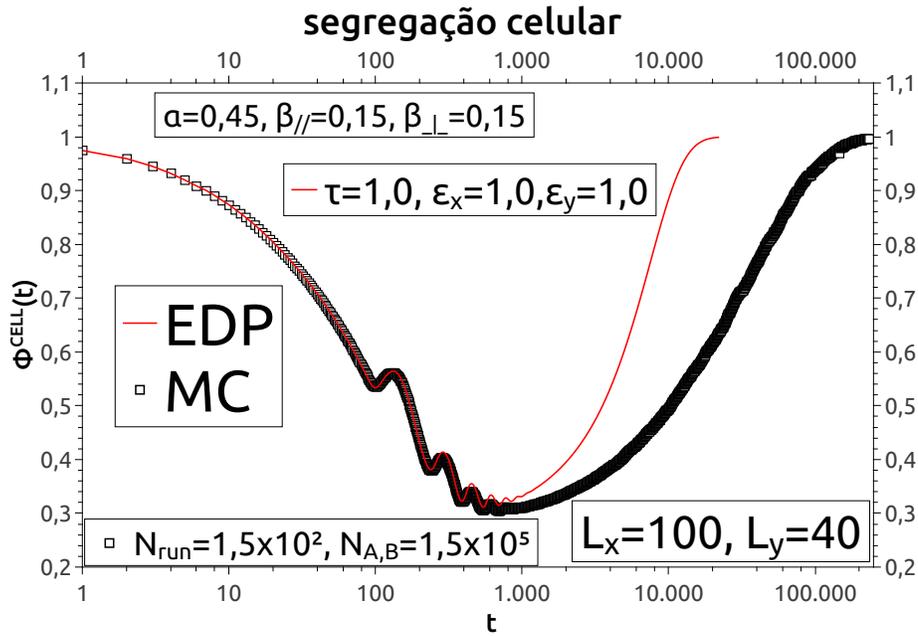


Figura 4.20: Evolução do *parâmetro de ordem celular* para simulações MC e integração numérica, no caso da condição inicial assimétrica para A.

No estágio inicial da evolução, onde o sistema percorre o trajeto *ordem* \rightarrow *desordem*, as simulações MC e a integração numérica apresentam comportamento quantitativamente idênticos. O caráter ondulatorio que o parâmetro de ordem celular apresentada nesta fase corresponde aos efeitos causados pela escolha de uma condição inicial altamente concentrada para condições periódicas de contorno. Resumidamente, a distribuição inicial da espécie A altera a distribuição da espécie B de maneira a criar bandas

transversais de alta concentração, como podemos ver comparando a figura 4.21 à figura 4.22, no caso de MC e comparando a figura 4.23 à figura 4.24 para o caso das EDP's.

A figura 4.25 nos mostra que o padrão inicial vai sendo perdido à medida que acontece a evolução.

Após o sistema atingir um estado de mínima segregação celular em $t = 1000$ passos, aproximadamente, um estado de ordenamento por bandas longitudinais começa a surgir, como podemos observar pela figura 4.26. Este padrão, no entanto, começa a aumentar anteriormente, em $t = 50$ aproximadamente.

As figuras 4.27 e 4.28, para o caso das simulações MC, e as figuras 4.29 e 4.30, para o caso de integração numérica, mostram o período transiente em que o sistema sai de um estado de ordenado por banda transversal para um estado de ordenamento por banda longitudinal. Nesta etapa do processo, o sistema percorre o trajeto *desordem*→*ordem* e as simulações MC e a integração numérica deixam de ser quantitativamente idênticas como podemos ver pelos gráficos 4.20 e 4.26, apesar de manterem o mesmo comportamento qualitativamente. Os resultados mostram que a evolução do sistema via integração numérica apresenta processo de formação de bandas longitudinais mais rápido

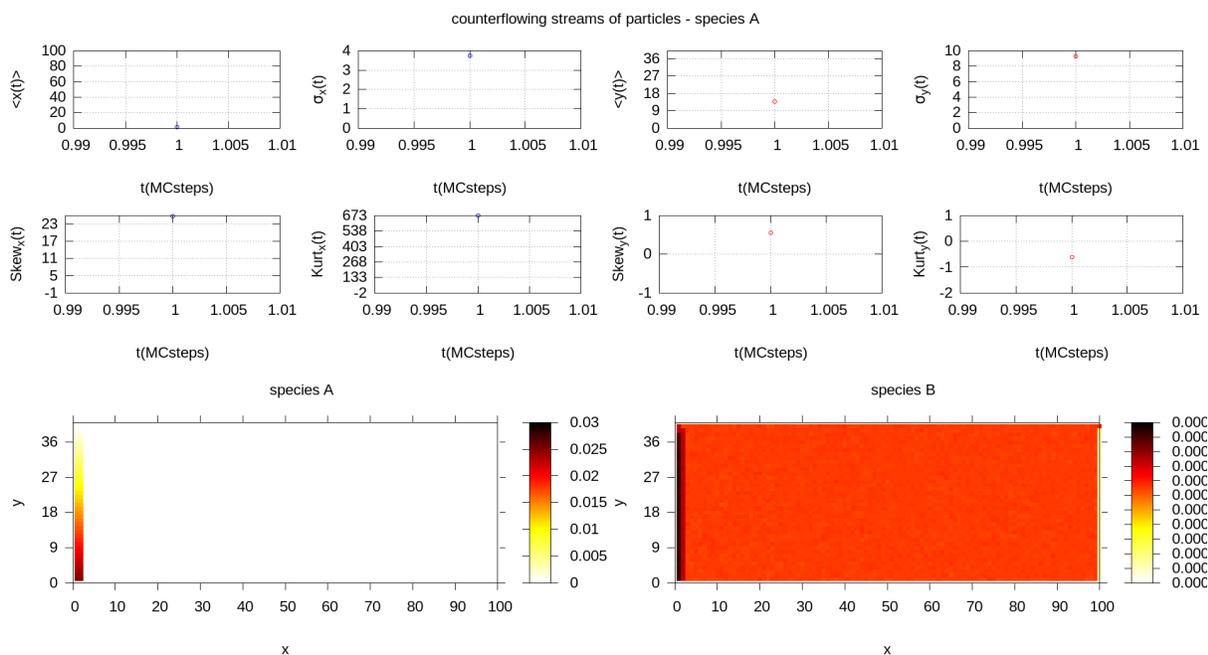


Figura 4.21: Snapshot para $t = 1$ MCstep da média das concentrações de 200 repetições para uma condição inicial com assimetria em y .

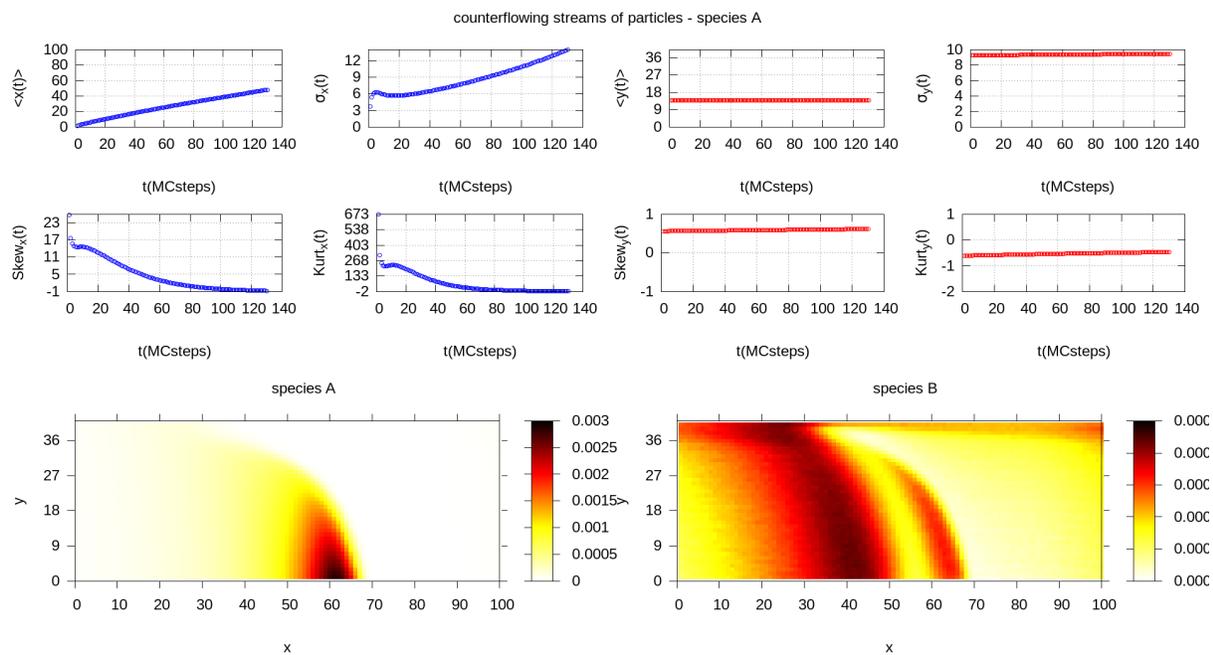


Figura 4.22: Snapshot para $t = 130$ MCSteps da média das concentrações de 200 repetições para uma condição inicial com assimetria em y .

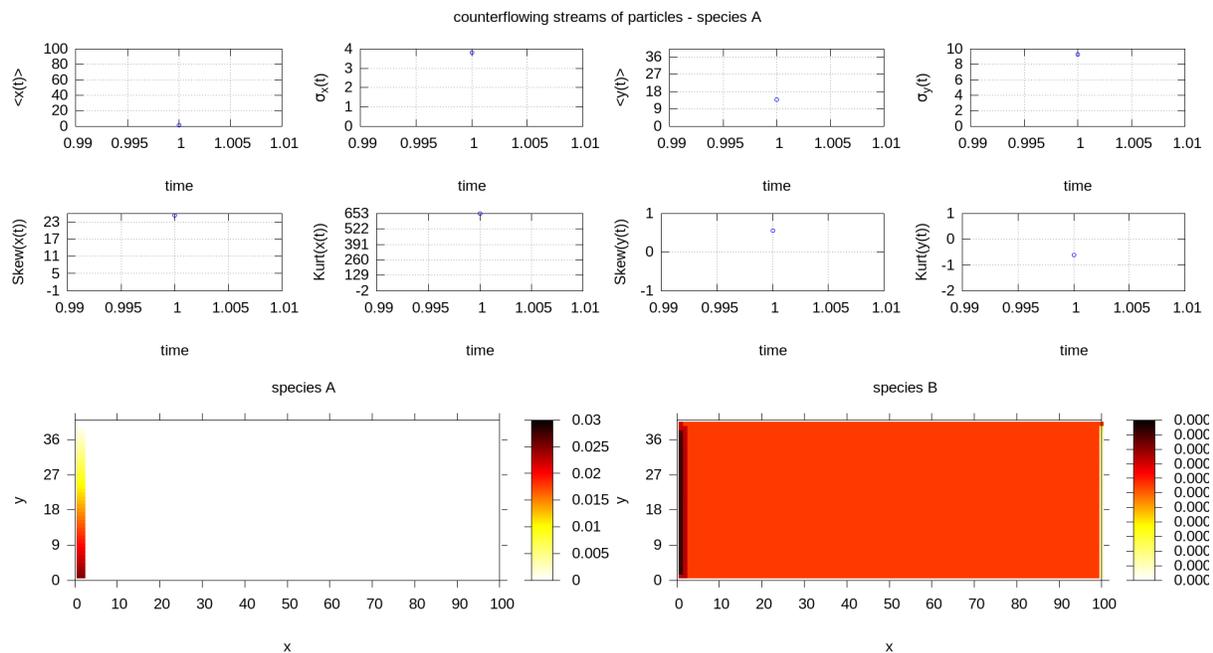


Figura 4.23: Snapshot para $t = 1$ da integração numérica para uma condição inicial com assimetria em y .

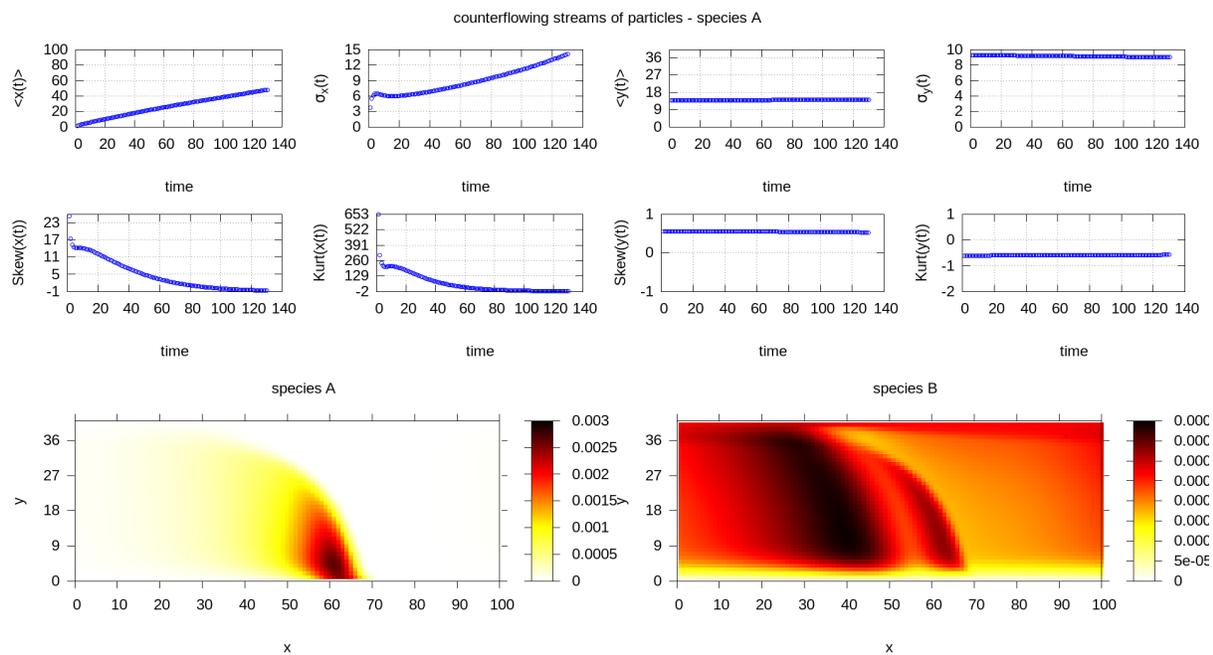


Figura 4.24: Snapshot para $t = 130$ da integração numérica para uma condição inicial com assimetria em y .

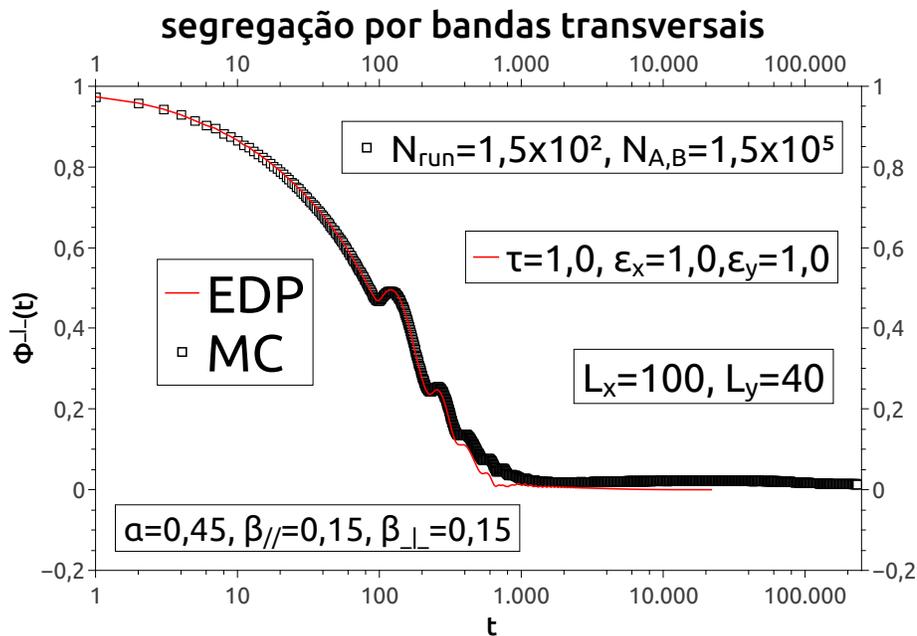


Figura 4.25: Evolução do parâmetro de ordem por bandas transversais para simulações MC e integração numérica, no caso da condição inicial assimétrica para A.

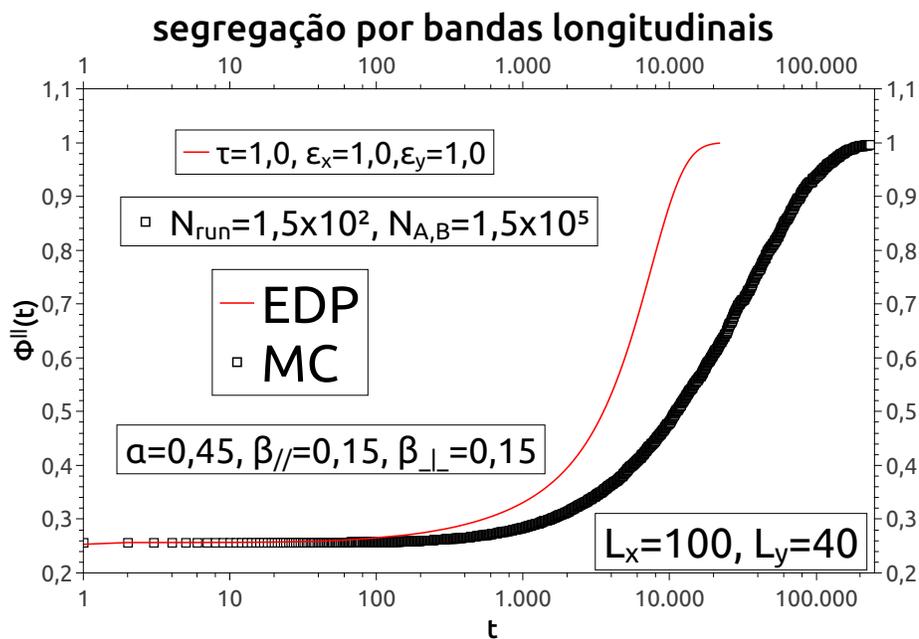


Figura 4.26: Evolução do *parâmetro de ordem bandas longitudinais* para simulações MC e integração numérica no caso da condição inicial assimétrica para A.

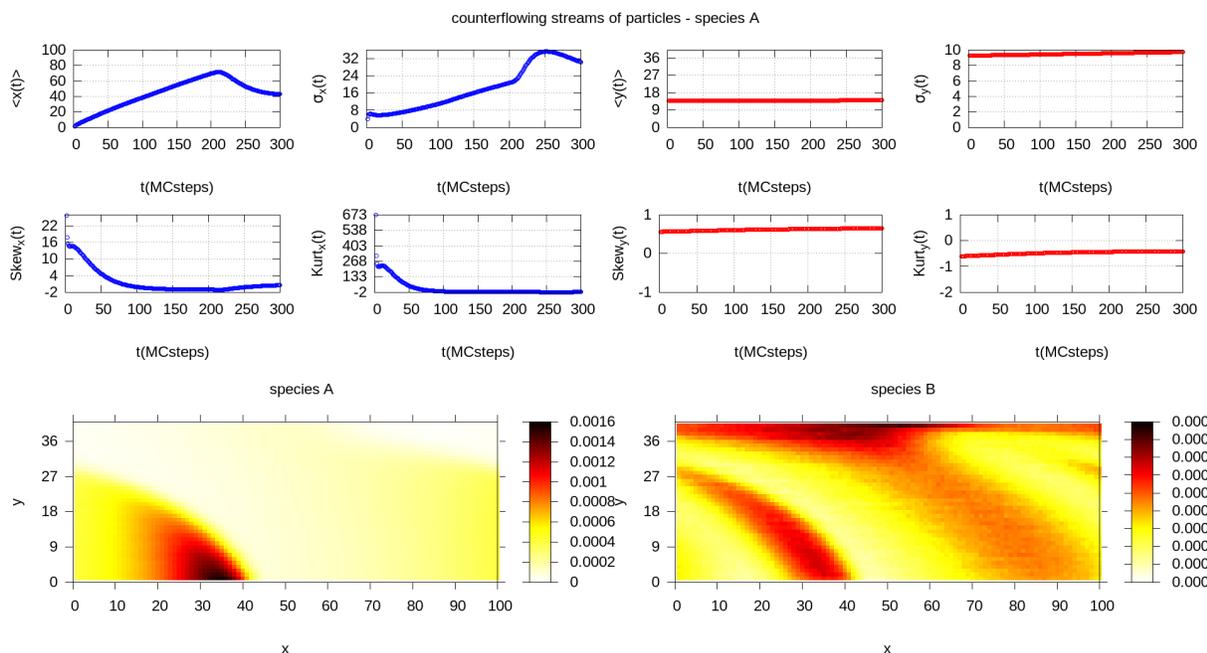


Figura 4.27: Snapshot para $t = 300$ MCsteps da média das concentrações de 200 repetições para uma condição inicial com assimetria em y .

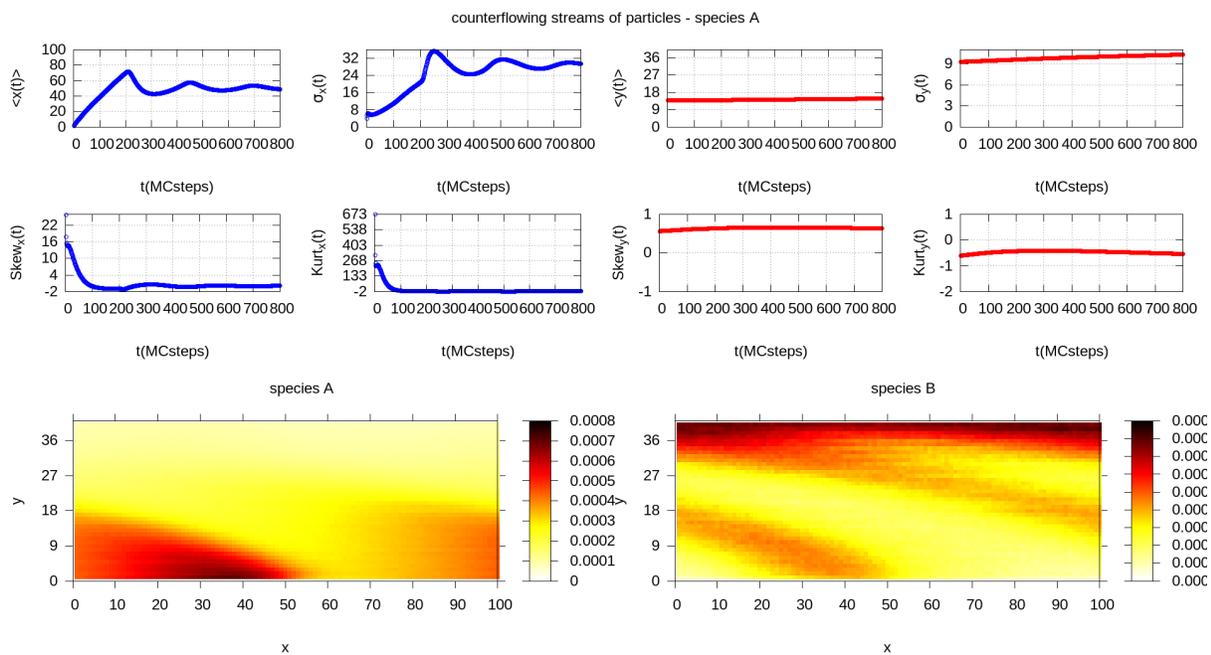


Figura 4.28: Snapshot para $t = 800$ MCsteps da média das concentrações de 200 repetições para uma condição inicial com assimetria em y .

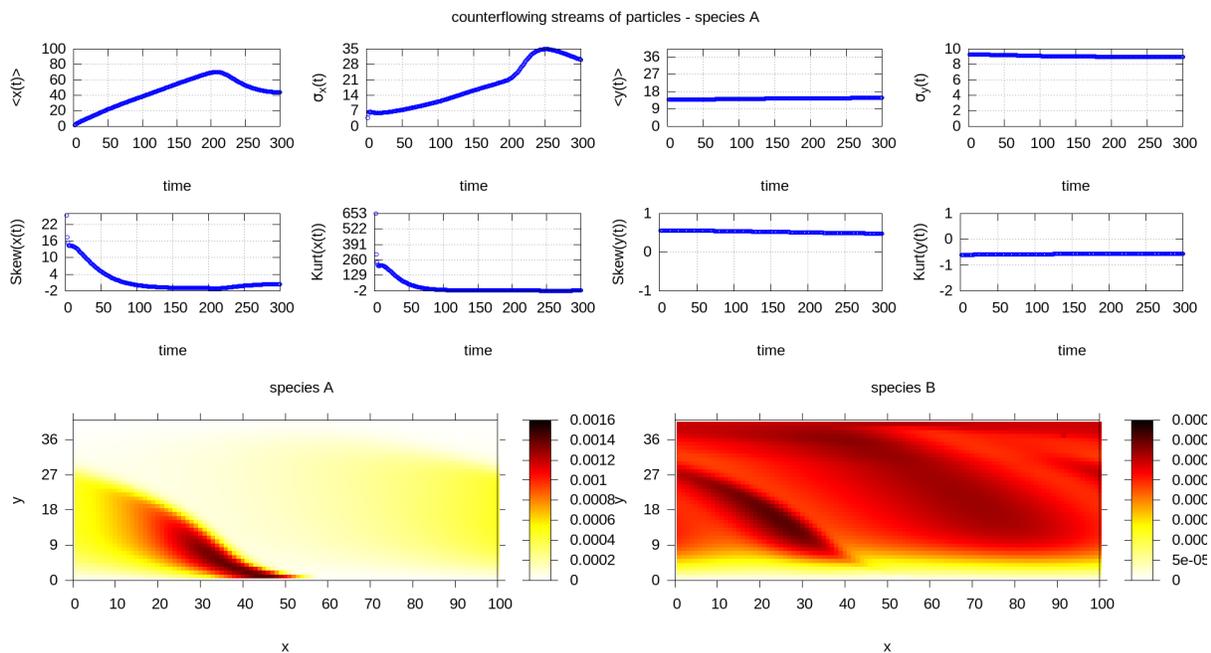


Figura 4.29: Snapshot para $t = 300$ da integração numérica para uma condição inicial com assimetria em y .

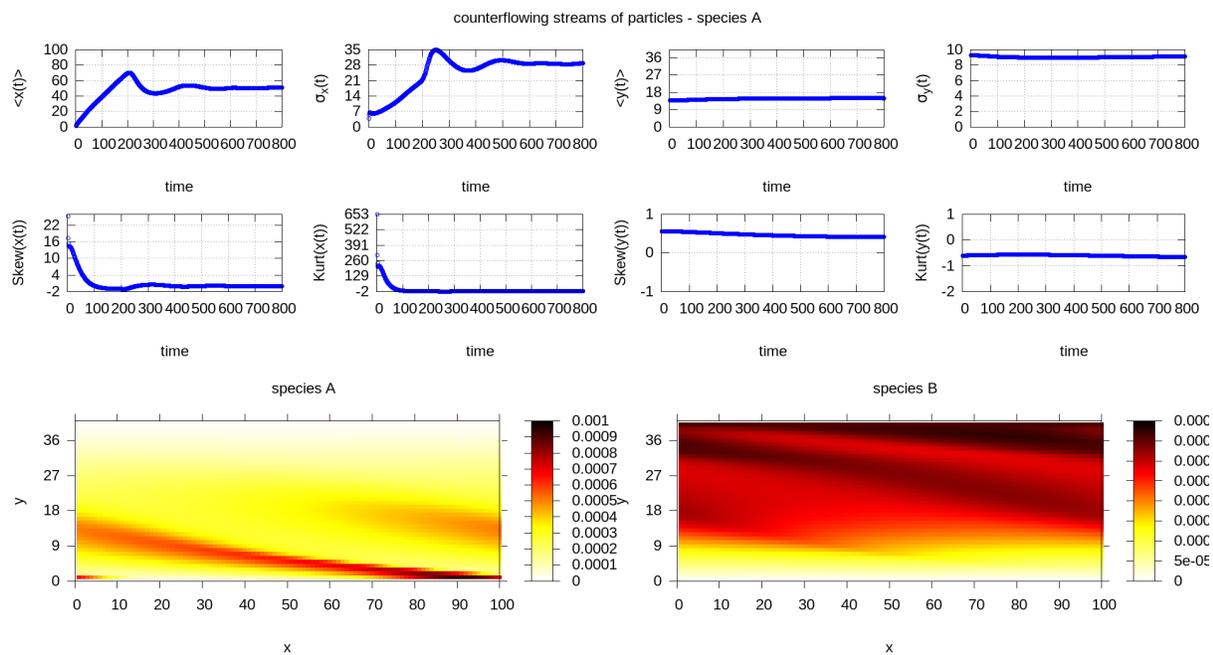


Figura 4.30: Snapshot para $t = 800$ da integração numérica para uma condição inicial com assimetria em y .

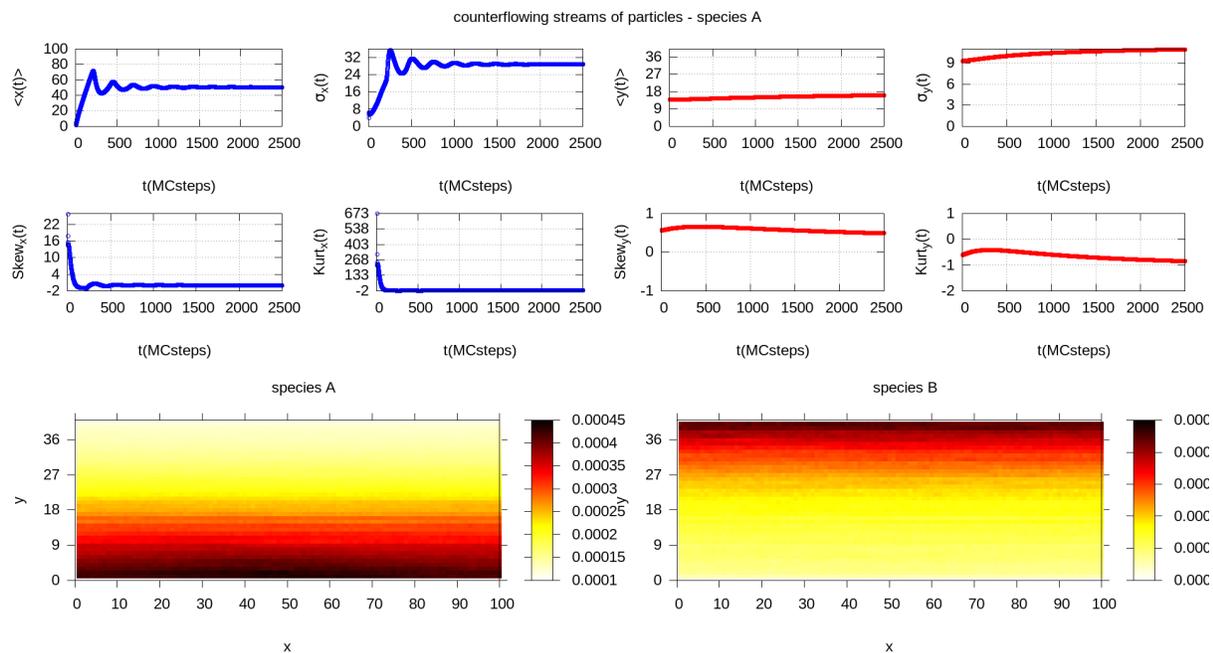


Figura 4.31: Snapshot para $t = 2500$ MCSteps da média das concentrações de 200 repetições para uma condição inicial com assimetria em y .

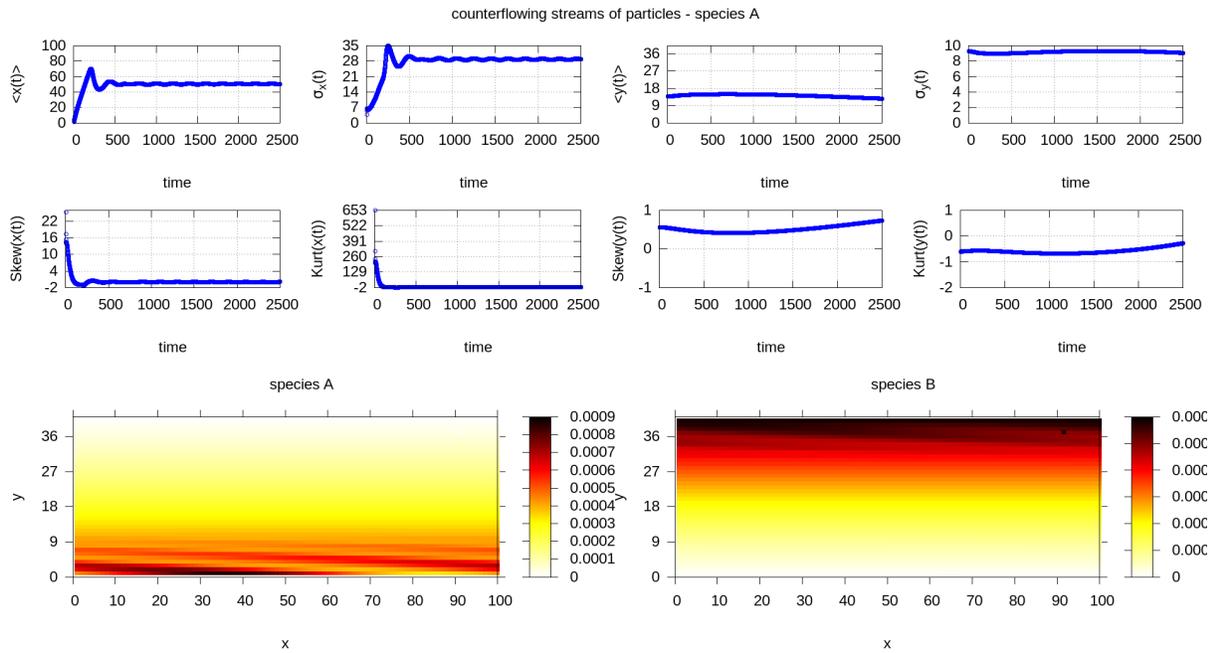


Figura 4.32: Snapshot para $t = 2500$ da integração numérica para uma condição inicial com assimetria em y .

do que em comparação com as simulações MC. Esta diferença, quantitativamente inexistente no estágio *ordem* \rightarrow *desordem*, pode ser causada pelas limitações de validade das equações de recorrência (equações 3.3 e 3.6) que dão origem às EDP's. Contudo, podemos ver pelas figuras 4.31 e 4.32 que as distribuições apresentam praticamente o mesmo padrão.

A partir desta etapa, iremos realizar um estudo dos efeitos que a variação dos parâmetros extensivos do sistema podem vir a causar à dinâmica do nosso modelo. Nesta análise, definimos os parâmetros intensivos $\alpha = 0,45$, $\beta_{\perp} = 0,15$ e $\beta_{\parallel} = 0,15$.

O gráfico superior esquerdo da figura 4.33 apresenta a evolução do parâmetro de ordem celular para diferentes densidades de ocupação de células nas simulações MC. Podemos perceber que quanto maior for a densidade de ocupação celular, maior é o tempo em que o mínimo global do parâmetro de ordem celular ocorre. Inclusive, este mínimo ocorre com menor magnitude para maiores densidades, pois há mais chances de termos um estado misturado quanto mais partículas o sistema possuir.

No gráfico superior direito, apresentamos o comportamento da evolução do parâmetro de ordem celular quando implementamos diferentes comprimentos ao sistema para in-

tegração numérica. Podemos verificar que o processo de desordem é mais lento para maiores tamanhos de L_x e o ponto de mínimo global torna-se ligeiramente maior. Nossa interpretação do motivo está no fato de que as condições periódicas de contorno são na direção x , portanto quanto maior for o L_x , maior será o tempo que uma partícula qualquer demorará para reentrar no sistema. Quando esta partícula reentra no sistema, sua condição “inicial” carrega informação a respeito de qual sua última posição antes de “sair” do sistema provavelmente fora. Desta maneira, a cada reentrância a organização coletiva das partículas aumenta.

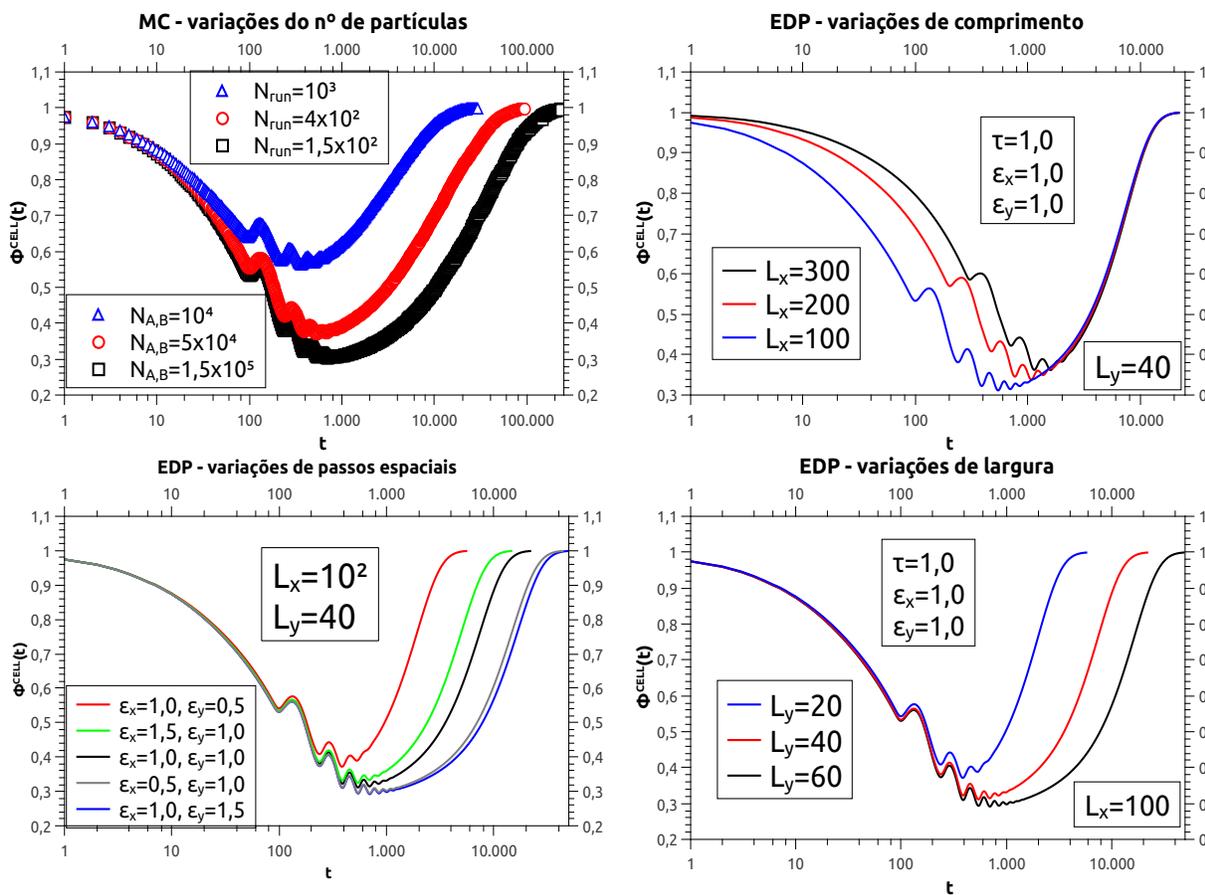


Figura 4.33: Evolução do parâmetro de ordem celular para diferentes análises dos parâmetros extensivos e um estudo preliminar sobre o efeito do passo espacial.

No gráfico inferior esquerdo, realizamos um estudo preliminar do que seria a influência do efeito do espaçamento espacial nas soluções da EDP, já que no trabalho, realizamos o estudo considerando $\varepsilon_x = \varepsilon_y = \tau = 1$ uma vez que partimos diretamente das relações de recorrência e não de uma discretização propriamente dita da EDP. Po-

demostremos de forma preliminar que há uma influência na relaxação com a mudança do espaçamento espacial e detalhes sobre isso merecem uma futura atenção.

No gráfico inferior direito, mostramos como a evolução do parâmetro de ordem celular é alterada para diferentes larguras do sistema na integração numérica. Podemos perceber que, contrariamente ao que ocorre quando varia-se o comprimento L_x , ao variarmos a largura L_y a fase da evolução em que ocorre a desordem praticamente não se altera em rapidez. Contudo, o ponto em que a segregação celular é minimizada globalmente é ligeiramente adiantado para menores larguras. Também ocorre um aumento da magnitude do parâmetro de ordem celular no ponto de mínimo quando diminui-se o comprimento.

Entretanto, o interessante ocorre no trajeto evolução para um estado ordenado. Nesta fase do processo, quanto menor for o valor de L_y , menor é o tempo que o sistema leva para chegar ao estado estacionário. Este fenômeno é explicado pelo fato de que quanto maior for a largura, maiores são as chances de uma partícula encontrar uma banda em que a quantidade de entes de sua espécie seja maior que a de entes da espécie oposta.

Capítulo 5

Conclusões e perspectivas

Neste trabalho, propusemos um modelo estocástico para a dinâmica de partículas autodirigidas em contrafluxo em um sistema bidimensional de células onde mais de uma partícula pode ocupar a mesma célula. Neste modelo, a interação acontece de acordo com os parâmetros da célula e não é dependente da situação das células vizinhas. Definimos a interação das partículas dentro de uma célula, por intermédio das probabilidades que cada partícula tem de realizar um passo (movimento) para uma das células vizinhas da célula em que a partícula se encontra, definindo assim o modelo que aqui chamamos de reativo. A interferência das células vizinhas na tomada de decisão (preditivo) deve ser futuramente explorado. A abrangência do modelo proposto é fortemente motivado por uma dinâmica de pedestres, mas também tem validade para processos cromatográficos, processos de destilação, sistemas de colóides carregados sob a influência de um campo elétrico externo, etc, desde que as condições sejam alteradas convenientemente.

Pudemos mostrar que em um contexto onde uma das espécies está parada e uniformemente distribuída sobre o meio, a distribuição de tempos de travessia sai de um comportamento inicial gaussiano para uma distribuição de lei de potência e, posteriormente, chega a um comportamento de decaimento exponencial a medida que a densidade média de obstáculos aumenta nos parâmetros chamados intensivos, α e β_{\parallel} não nulos. Verificamos que o comportamento das curvas de tempos não dependia da probabilidade de realização de movimento lateral, β_{\perp} , uma vez que os obstáculos eram imóveis e aleatoriamente distribuídos.

Quando realizamos simulações em um contexto de processos de destilação, mostramos que o tempo médio de destilação por bandas transversais é dependente de todos

os parâmetros intensivos do sistema (α , β_{\parallel} e β_{\perp}). Vimos que a dependência do tempo médio com o parâmetro β_{\perp} é maior a medida que saímos de uma condição mais rarefeita para uma situação onde a densidade de ocupação celular é maior.

Conseguimos mostrar que em simulações MC, quando implementamos condições periódicas de contorno, o sistema possui um estado estacionário onde as partículas ordenam-se em bandas longitudinais, otimizando o fluxo. Para a integração numérica, no entanto, mostramos que quando a condição inicial apresenta assimetria relativa às partículas, o comportamento do modelo assemelha-se às simulações MC, embora diferenças quantitativas são observadas.

Como perspectiva de continuidade deste trabalho, temos em mente analisar com mais profundidade as diferenças apresentadas entre as simulações MC e a integração numéricas das EDPs. Mais precisamente, queremos estudar o comportamento da dinâmica das EDPs quando utilizamos diferentes passos espaciais e temporal. Outra idéia que desejamos implementar é a de estudar o sistema quando não mais supomos que o campo externo que define a dinâmica do tipo caminhante aleatório direcionado seja constante. Nosso intuito é verificar os efeitos de aplicar um campo externo alternado no sistema como realizado em experimentos para colóides carregados [25].

Já no contexto da adaptação do modelo para uma dinâmica de pedestres, pretendemos observar os efeitos de um modelo preditivo e o real alcance do modelo reativo. A idéia do tamanho da célula perante a predição é algo que não é bem claro e merece uma profunda atenção nossa em trabalhos futuros.

Referências Bibliográficas

- [1] Yumin Li, Xiaohua Li, Ying Wang, YinYin Chen, Jianbing Ji, Yunliang Yu, and Zhichao Xu. Distillation in a counterflow concentric-ring rotating bed. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 53(12):4821–4837, 2014.
- [2] Teun Vissers, Adam Wysocki, Martin Rex, Hartmut Lowen, C. Patrick Royall, Arnout Imhof, and Alfons van Blaaderen. Lane formation in driven mixtures of oppositely charged colloids. *Soft Matter*, 7:2352–2356, 2011.
- [3] Dirk Helbing and Péter Molnár. Social force model for pedestrian dynamics. *Phys. Rev. E*, 51:4282–4286, May 1995.
- [4] Barbara Krausz and Christian Bauckhage. Loveparade 2010: Automatic video analysis of a crowd disaster. *Computer Vision and Image Understanding*, 116(3):307 – 319, 2012. Special issue on Semantic Understanding of Human Behaviors in Image Sequences.
- [5] Dirk Helbing, Ills Farkas, and Tams Vicsek. Simulating dynamical features of escape panic. *Nature*, 407:487–490, 2000.
- [6] Dirk Helbing, Anders Johansson, and Habib Zein Al-Abideen. Dynamics of crowd disasters: An empirical study. *Phys. Rev. E*, 75:046109, Apr 2007.
- [7] C. L. N. Oliveira, A. P. Vieira, D. Helbing, J. S. Andrade, and H. J. Herrmann. Keep-left behavior induced by asymmetrically profiled walls. *Phys. Rev. X*, 6:011003, Jan 2016.
- [8] J. Zhang and A. Seyfried. Comparison of intersecting pedestrian flows based on experiments. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 405:316 – 325, 2014.

- [9] J. Calvin Giddings. Chromatography: Introduction. *Chemical Reviews*, 89(2):277–277, 1989.
- [10] J. Calvin Giddings and Henry Byring. A molecular dynamic theory of chromatography. *The Journal of Physical Chemistry*, 59(5):416–421, 1955.
- [11] Roberto da Silva, Luis C. Lamb, Eder C. Lima, and Jairton Dupont. A simple combinatorial method to describe particle retention time in random media with applications in chromatography. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 391(12):1 – 7, 2012.
- [12] Stefan Machlup. Noise in semiconductors: Spectrum of a twoparameter random signal. *Journal of Applied Physics*, 25(3), 1954.
- [13] M.J. Kirton and M.J. Uren. Noise in solid-state microstructures: A new perspective on individual defects, interface states and low-frequency (1/) noise. *Advances in Physics*, 38(4):367–468, 1989.
- [14] Roberto Da Silva, Luis C. Lamb, and Gilson Inacio Wirth. Collective poisson process with periodic rates: applications in physics from micro-to nanodevices. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 369(1935):307–321, 2010.
- [15] Roberto da Silva, Lucas Brusamarello, and Gilson I. Wirth. Statistical fluctuations for the noise current from random telegraph signals in semiconductor devices: Monte carlo computer simulations and best fits. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 389(14):2687 – 2699, 2010.
- [16] Roberto da Silva and Gilson I Wirth. Logarithmic behavior of the degradation dynamics of metaloxidesemiconductor devices. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2010(04):P04025, 2010.
- [17] ROBERTO DA SILVA, GILSON INACIO WIRTH, and LUCAS BRUSAMARELLO. A novel and precise time domain description of mosfet low frequency noise due to random telegraph signals. *International Journal of Modern Physics B*, 24(30):5885–5894, 2010.

- [18] Roberto da Silva, Gilson Inacio Wirth, and Lucas Brusamarello. An appropriate model for the noise power spectrum produced by traps at the sio 2 interface: a study of the influence of a time-dependent fermi level. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2008(10):P10015, 2008.
- [19] Roberto da Silva, Agenor Hentz, and Alexandre Alves. Stochastic model of self-driven two-species objects inspired by particular aspects of a pedestrian dynamics. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 437:139 – 148, 2015.
- [20] C. Scherer. *Métodos Computacionais da Física*. Editora Livraria da Física, 2005.
- [21] Elliott W Montroll and BRUCE J West. On an enriched collection of stochastic processes. *Fluctuation phenomena*, 66:61, 1979.
- [22] W. Feller. *An introduction to probability theory and its applications*. Wiley series in probability and mathematical statistics: Probability and mathematical statistics. Wiley, 1971.
- [23] M. Spiegel. *Schaum'S Theoretical Mechanics*.
- [24] William H. Press, Saul a. Teukolsky, William T. Vetterling, and Brian P. Flannery. *Numerical Recipes in Fortran 77: the Art of Scientific Computing. Second Edition*, volume 1. 1996.
- [25] Teun Vissers, Alfons van Blaaderen, and Arnout Imhof. Band formation in mixtures of oppositely charged colloids driven by an ac electric field. *Phys. Rev. Lett.*, 106:228303, Jun 2011.