

## Métodos Computacionais em Física I (2010/1)

EP9 - Turma IFA - Prof. Edivaldo Santos

Entrega: 21/06/2010 até 13h

*Caminhada aleatória em 3 dimensões e difusão molecular em gases:*

Imagine uma partícula em movimento, cuja trajetória possa ser decomposta em uma sequência de passos consecutivos de tamanho  $\epsilon$  e que o tempo gasto para executar cada passo seja  $\delta t$ . Se a direção e o sentido de cada passo podem ser tomados como sendo aleatórios, o movimento resultante é conhecido como *caminhada aleatória* (ou também *passeio aleatório*) e pode se dar sobre uma reta, uma superfície, no espaço 3D, etc.

O conceito de caminhada aleatória é mais geral do que o movimento de uma partícula, de forma que a variável aleatória não necessariamente precisa ser um deslocamento. Assim, a caminhada pode ser usada para a modelagem de inúmeros fenômenos: a trajetória de uma molécula no interior de uma gás ou a de alguns transeuntes pela Rua Mem de Sá por volta das 2h de um sábado, o preço de certas ações no mercado financeiro, etc.

A figura abaixo ilustra caminhadas aleatórias em 3 dimensões.

- Escreva um programa que simule uma caminhada aleatória em 3 dimensões dados valores para o passo  $\epsilon$  e para o intervalo de tempo entre passos  $\delta t$ .
- Seu programa deve então realizar um grande número  $N_c$  de caminhadas de uma partícula. O movimento deve terminar depois de um tempo  $\Delta T$ , ou equivalentemente, após um número total de passos  $N_p$ , também fornecidos.
- Ao final da caminhada, o programa deve imprimir num arquivo de saída os valores finais das coordenadas cartesianas da partícula, tomando como origem do sistema de coordenadas a posição inicial da partícula.
- Para um número de passos  $N_p \rightarrow \infty$ , o teorema do limite central garante que a distribuição da posição da partícula é gaussiana com variância  $\sigma^2$  dada por:

$$\sigma^2 = \epsilon^2 \frac{\Delta T}{\delta t} \quad (1)$$

**Pergunta:** antes de graficar o histograma no Gnuplot, você seria capaz de dizer qual o valor médio da distribuição de cada coordenada?

Histograme as distribuições de cada coordenada cartesiana e compare os resultados com as previsões teóricas, lembrando-se que:

$$r^2 = x^2 + y^2 + z^2 \implies \sigma^2 = \sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2 \quad (2)$$

**Pergunta:** Que relação você espera haver entre  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$  e  $\sigma_z$ ?

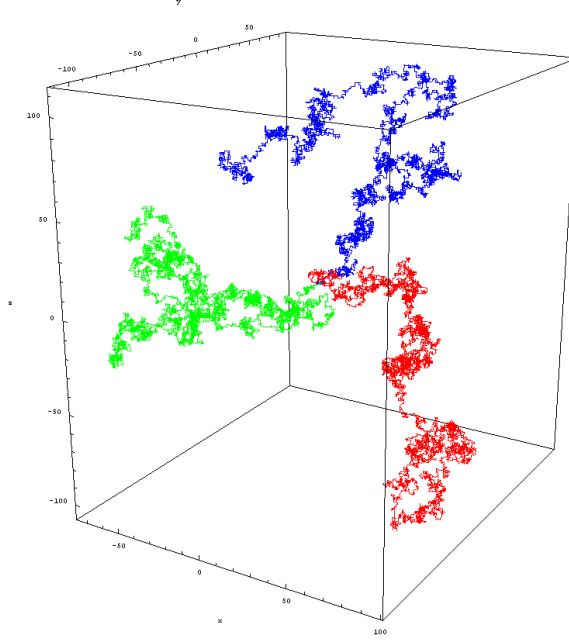


Figure 1: Caminhada aleatória em 3 dimensões de 3 partículas diferentes.

---

Se tomarmos as partículas acima como moléculas gasosas, os histogramas de posição podem ser utilizados para se estimar uma velocidade de difusão molecular:

$$v_d = \frac{\sqrt{\sigma^2}}{T} = \frac{\epsilon}{\sqrt{\delta t}}. \quad (3)$$

Num gás ideal, por exemplo,  $\epsilon$  pode ser interpretado como o livre caminho médio  $\lambda$ , e de acordo com a teoria cinética, depende somente do diâmetro molecular  $d$  e da densidade do gás:

$$\lambda = \frac{V}{N} \frac{1}{\sqrt{2}\pi d^2}, \quad (4)$$

onde  $N$  é o número de moléculas contidas no volume  $V$ . Por outro lado,  $\delta t$ , de acordo com a mesma teoria, deve depender, de alguma forma, do livre caminho médio  $\lambda$  e da velocidade molecular média, que num gás com distribuição Maxwelliana de velocidades é dada por:

$$\bar{v} = \sqrt{\frac{8}{\pi} \frac{RT}{M}}, \quad (5)$$

onde  $R$  é a constante molar dos gases,  $T$  a temperatura e  $M$  a massa molar do gás.

Apesar da velocidade molecular média numa mistura gasosa como o ar atmosférico ser da ordem de centenas de metros por segundo (nas CNTP), a velocidade de difusão calculada a partir de (3) é muito menor devido às numerosas colisões entre moléculas. Se você abrir um frasco de perfume num dos cantos de uma sala fechada, o tempo necessário para que outra pessoa no canto oposto comece a sentir o odor deve ser calculado utilizando-se a velocidade de difusão.