

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

**EP9 - Turma IFB - Prof. João Torres**

**Entrega: 23/06/2010 até 13h**

### *Difusão e Entropia*

Vamos estudar aqui a difusão de uma gota de creme derramada numa xícara de café. O nosso modelo será uma xícara bi-dimensional, composta de uma rede retangular de  $200 \times 200$  quadrados. Vamos supor que o creme seja composto por 400 moléculas que inicialmente ocupem a região central da xícara (por exemplo, um quadrado de lado  $10 \times 10$ ). As partículas vão evoluir por caminhada aleatória bidimensional. À medida que o tempo (número de passos) passa, as moléculas vão espalhando-se.

Esta simulação é equivalente à solução da equação de difusão bidimensional. Para estabelecer a conexão entre a segunda lei da termodinâmica e a evolução do sistema para o estado de equilíbrio, é útil considerar a entropia do sistema. De forma muito simplificada, a entropia é uma medida da desordem do sistema.

No nosso caso, inicialmente todas as moléculas estão acumuladas no centro. Depois elas se espalham na rede. Podemos tornar a descrição quantitativa calculando a entropia explicitamente. A definição estatística de entropia é:

$$S = - \sum_i P_i \ln P_i$$

onde a soma é sobre todos os estados possíveis do sistema e  $P_i$  é a probabilidade de se encontrar o sistema no estado  $i$ . No nosso problema, vamos imaginar que o sistema numa outra rede quadrada, de  $10 \times 10$  células. Essa segunda rede é apenas uma forma conveniente de particionar o espaço, cada uma dessas partições é um estado distinto no qual uma molécula pode ser encontrada.

De acordo com a hipótese ergódica, todos os estados disponíveis do sistema em equilíbrio serão ocupados com igual probabilidade e essa hipótese tem um papel central na física estatística. Neste exemplo, o comportamento ergódico é resultado das regras da caminhada aleatória.

Escreva um programa para efetuar a simulação descrita acima. Leve em conta as condições de contorno. Faça gráficos bi-dimensionais da distribuição de partículas para  $10^4$ ,  $10^5$  e  $10^6$  passos. Faça o gráfico da entropia como função do tempo (número de passos).