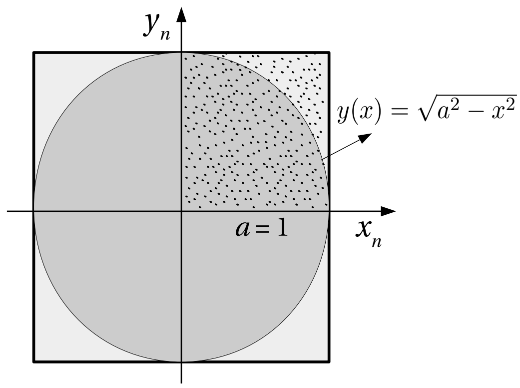
AULAS 27 E 28: FIS271 - Física Computacional I

Para implementar os exercícios desse roteiro utilize o gerador de números pseudo-aleatórios `marsaglia.f90` do Roteiro das Aulas 25 e 26.

Exercício 1. Considere N pontos cujas posições são definidas pelos vetores $\vec{z}_n = x_n\hat{\imath} + y_n\hat{\jmath}$ $(n = 1, \ldots, N)$, com as componentes (não correlacionadas) x_n e y_n determinadas por números uniformemente distribuídos no intervalo $]0, 1[$. Assuma que, do total de N pontos, N_c pontos se encontram no interior de um círculo de raio $a = 1$ que está inscrito em um quadrado de lado $2a$, conforme indica a figura ao lado.



a) Considerando uma sequência com $N = 1000$ pontos, faça um gráfico similar ao mostrado na figura, porém, indicando em azul os pontos dentro do círculo e em vermelho os pontos fora do círculo. Inclua também a função $y(x)$ no seu gráfico para confirmar que os pontos estão sendo amostrados na região de interesse (não é preciso graficar todo o círculo, grafique apenas o quadrante onde $x_n > 0$ e $y_n > 0$).

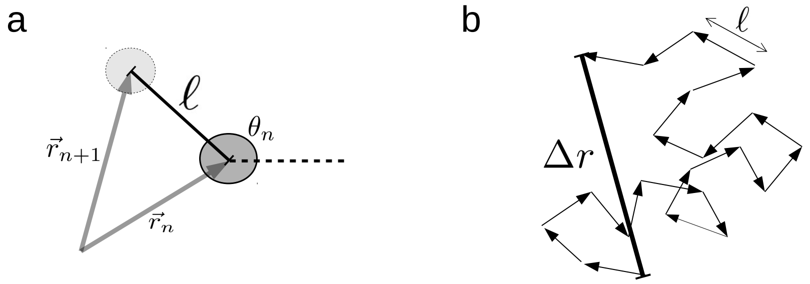
b) Dado número de pontos N é possível obter uma estimativa para a área do círculo A_c a partir da seguinte relação:

$$A_c = 4\frac{N_c}{N} \quad . \tag{1}$$

Indique o valor de A_c para $N = 10000$ e compare com o resultado esperado fornecendo o erro relativo ε.

c) Faça os gráficos de A_c e do erro ε em função de N para mostrar que A_c converge para π no limite de N grande.

Exercício 2. Um fenômeno bastante importante na Física é a **difusão** de partículas microscópicas imersas em um meio líquido homogêneo. Tal fenômeno pode ser relacionado ao **movimento browniano**, o qual foi descrito pela primeira vez por Einstein [1], onde assume-se que as colisões entre uma partícula microscópica e as partículas que compõem o meio são aleatórias. O movimento browniano pode ser modelado assumindo que, após um intervalo pequeno de tempo $\tau = t_{n+1} - t_n$, uma partícula que estava localizada na posição $\vec{r}_n = \vec{r}(t_n)$ se deslocará aleatoriamente para a posição $\vec{r}_{n+1} = \vec{r}(t_{n+1})$. Em duas dimensões ($d = 2$), por exemplo, podemos fazer uma simulação considerando que a nova posição da partícula é obtida de acordo com um ângulo aleatório θ_n distribuído uniformemente no intervalo $[0, 2\pi]$ de modo que $\vec{r}_{n+1} = \vec{r}_n + [\ell\cos(\theta_n)\hat{\imath} + \ell\sin(\theta_n)\hat{\jmath}]$ (como ilustrado na Fig. (a) abaixo).



Assumindo que o deslocamento da partícula no intervalo de tempo τ seja fixo e dado por ℓ, após k passos teremos uma trajetória (vide Fig. (b) acima) com o vetor deslocamento da partícula no tempo $t_k = k\tau$ dado por:

$$\Delta\vec{r}(t_k) = \vec{r}_k - \vec{r}_0 = \sum_{n=0}^{k-1}\left[\ell\cos(\theta_n)\hat{\imath} + \ell\sin(\theta_n)\hat{\jmath}\right] \quad , \tag{2}$$

o qual pode ser utilizado para calcular o **deslocamento quadrático** $\Delta r_k^2 = [\Delta\vec{r}(t_k)]^2 = (\vec{r}_k - \vec{r}_0)^2$.

a) Implemente um programa para obter trajetórias de uma partícula que realiza o movimento browniano como descrito acima. Faça um gráfico com $M = 5$ trajetórias com $t_k = k\tau$, $k = 0, \ldots, 500$, assumindo $\ell = 1\,\mu$m e $\tau = 1\,$s.

b) Considerando $M = 10000$ trajetórias, obtenha o deslocamento quadrático **médio** em cada tempo t_k:

$$\langle\Delta r_k^2\rangle = \frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M}\Delta r_{k,i}^2 \quad . \tag{3}$$

com $k = 1, \ldots, 100$, $\ell = 1\,\mu$m e $\tau = 1\,$s. A partir do gráfico de $\langle\Delta r_k^2\rangle$ em função de t_k, calcule o **coeficiente de difusão** D fazendo uma regressão linear (Roteiro 4) considerando a expressão obtida por Einstein [1], $\langle\Delta r^2\rangle = 4Dt$.

c) Refaça o item (b) considerando os seguintes valores de ℓ (em μm): $\ell = 0.5$, 1.0, 1.5, 2.0, 2.5 e 3.0. Além de um gráfico incluindo todas as curvas $\langle\Delta r_k^2\rangle$ em função de t_k com $k = 1, \ldots, 100$, faça um gráfico para mostrar que existe uma relação entre o coeficiente de difusão D e o parâmetro de comprimento ℓ que é dada por [1] $D = \ell^2/4\tau$.

Referências:

[1] J. M. Silva, J. A. S. Lima. Quatro abordagens para o movimento browniano. Rev. Bras. Ens. Fís. 29 (2007) 25.