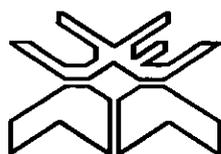


Fis 53



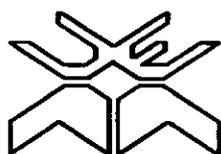
UNIVERSIDADE EDUARDO MONDLANE
FACULDADE DE CIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

TRABALHO DE LICENCIATURA

"RANDOM WALK" :

Um modelo numérico de processos de
difusão

AUTOR :
MAÚRE, GENITO AMÓS



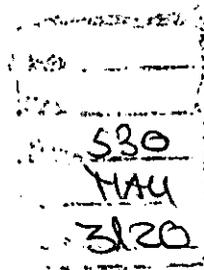
UNIVERSIDADE EDUARDO MONDLANE
FACULDADE DE CIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

TRABALHO DE LICENCIATURA

"RANDOM WALK" :
Um modelo numérico de processos de
difusão

SUPERVISOR :
Prof. Dr. YURI RAKOV

MAPUTO, JULHO DE 1997



Aos meus pais, Amós e Cristina,

e

meus irmãos.

[...ad augusta per angusta...]

AGRADECIMENTOS

Este trabalho foi realizado graças àqueles que em mim depositam uma esperança. Agradeço:

- Ao meu supervisor, Prof. Dr. Rakov, por me ter feito acreditar na possibilidade da realização deste trabalho e pelos frutuosa pontos de vista.
- Aos dirigentes do Departamento de Física, dr. Hermínio Tembe e dr^a Mayra Hernández, por terem sabido usar de uma flexibilidade incrível no desdobramento de todas as burocracias inerentes à época da realização de trabalho.
- A todos aqueles que foram meus docentes durante os cinco anos de curso, especialmente Dr. Tchernych e Dr. Rogério Utui, por serem alguns dos meus ideais.
- Aos meus colegas Carlos Nuvunga, Eduardo Machiana, Samuel Matlombe, Afonso Zandamela (postumamente), Mundau Cossa, Marcelino Macome, Ana Maria e Ângela Bilale pelo apoio moral nos sinuosos caminhos por que juntos passámos e culminam em tornar realidade um sonho de cinco anos.
- Aos meus amigos Palmira Zandamela, Aminó Naran, Ibraimo Mussá, Joaquim Samuel, Joaquim Uaiene, Paulino Dinís, Rogério Manjate, Sérgio Saca e Peta pela força de alma que me transmitem.
- Aos meus tios Micas e Sabine e aos meus primos Doreen, Sandro e Genito pela importantíssima presença espiritual.
- A todos que directa ou indirectamente estiveram envolvidos na realização deste trabalho.
- À natureza.

DECLARAÇÃO DE HONRA

Este trabalho foi completamente realizado com base no material a que ao longo do mesmo se faz referência. As ideias originais nele expressas, são de inteira responsabilidade do autor.

Maputo, Junho de 1997

O autor

Genito Amós Maúre
(Genito Amós Maúre)

RESUMO

Um tipo de equações diferenciais frequentemente usadas em Física é o parabólico. Um exemplo deste tipo de equações é a chamada equação de difusão.

Existem vários modelos para a resolução da equação de difusão, mas, cada um deles oferece dificuldades na aplicação dos seus métodos.

Propõe-se neste trabalho um método simples, visual e bastante rápido de solução desta equação. Com efeito, a introdução de um operador de deslocamento permite de uma forma simples encontrar a solução desta equação, no modelo de "Random Walk".

Os resultados foram obtidos com uma precisão incrível (da ordem de 1%), podendo-se já de partida crer na aplicabilidade deste método para a solução deste tipo de equações.

ÍNDICE

	<i>Página</i>
1 Introdução	7
2 Fundamentação teórica	8
2.1 Aspectos Básicos de Movimento Browniano	8
2.1.1 Modelo Matemático de "Random Walk".....	8
2.1.2 Modelo Físico de "Random Walk".....	15
3 Metodologia	21
3.1 Equipamento Utilizado	21
3.2 Procedimentos	21
3.1 Resultados	25
4 Discussão e conclusões	26
5 Recomendações	27
6 Literatura	28
7 Anexos	29

1. Introdução

É largamente reconhecido que um dos métodos mais coerentes para a investigação de qualquer fenómeno da natureza é o de observação em condições naturais.

Para processos cujas observação e interpretação directas são impossíveis ou penosas, o recurso a modelos simulados das características dos mesmos habitualmente oferece, após um estudo estatístico dos resultados obtidos, uma valiosa informação.

Um desses casos de processos de cansativa observação é o chamado *Movimento Browniano*.

Em 1827, o naturalista Robert Brown, ao examinar suspensões de vários pólenes com a ajuda de uma das lentes acromáticas então acabadas de ser inventadas, descobriu que as partículas individuais estavam constantemente num estado de movimento muito animado. Desde então, surgiram várias especulações visando explicar as origens deste tipo de movimento.

Sabe-se actualmente que este movimento é simplesmente uma ilustração do fenómeno de agitação térmica das moléculas. Este movimento agitado e aleatório ocorre também em líquidos e sólidos, mas, em grau cada vez menor. Uma consequência importante do *Movimento Browniano* é o fenómeno de difusão da matéria. Este fenómeno é descrito por uma equação conhecida por *equação de difusão* ou *equação do calor*, já que ela descreve também o fluxo (difusão) de calor através de um conductor :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2},$$

onde u representa o parâmetro em difusão e D a constante de difusão.

As dificuldades de um tratamento matemático exacto do problema de difusão levam a que vários métodos sejam propostos para a sua resolução. Dentre os mais usados, podem-se encontrar essencialmente quatro: (1) analítico, (2) gráfico, (3) experimental e (4) numérico. Infelizmente, muitas condições de fronteira reais ou práticas são tais que soluções simples e razoáveis deste problema não sejam possíveis com esses métodos. A selecção de um destes métodos para a resolução de um problema específico, depende da existência de uma técnica adequada e do tempo requerido para a produção de uma solução satisfatória. Cada um destes métodos tem vantagens sobre os outros para certos tipos de problemas.

Nos últimos anos, uma grande parte da atenção tem sido prestada no desenvolvimento de métodos numéricos para a solução deste tipo de problemas. Isto deve-se principalmente ao crescente interesse em análise numérica e à possibilidade de recurso ao uso de máquinas electrónicas.

Fazendo uso das bases teóricas já desenvolvidas sobre a difusão e a possibilidade de sua aplicação em máquinas electrónicas, propõe-se neste trabalho a solução da equação de difusão, com a ajuda do modelo "Random Walk" unidimensional e de um algoritmo numérico.

2. Fundamentação teórica

2.1. Aspectos básicos do *Movimento Browniano*.

2.1.1. Modelo matemático de "Random Walk"¹

O movimento de uma partícula macroscópica visível (uma partícula de fumo no ar ou uma partícula coloidal num líquido) reflecte um movimento (zigue-zague) aleatório de moléculas. Se se observa a tal partícula durante um certo período, conclui-se que ela segue uma trajectória caótica como a mostrada na Fig.1; este comportamento é chamado de *Movimento Browniano*. O movimento da partícula é determinado pelas colisões com as moléculas das cercanias e, estas colisões são *não correlacionadas* (*verbi gratia*, aleatórias) para intervalos suficientemente longos de observação.

Uma descrição teórica deste fenómeno foi dada por *Albert Einstein* em 1905. Esta descrição tem aplicações numa larga variedade de fenómenos, incluindo o movimento de partículas coloidais, sistemas de muitas partículas, reacções químicas e hidrodinâmica.

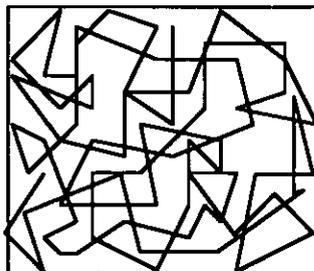


Fig.1

Observação de Movimento Browniano: Cada vértice representa a posição da mesma partícula, em intervalos de 30s. (A verdadeira trajectória entre cada par de vértices não é, de facto, uma linha recta, mas uma curva denticulada de menor escala.

Investigue-se um simples modelo unidimensional de "Random Walk".(Todos os aspectos relevantes do caso tridimensional estão presentes no caso unidimensional):

Considere-se uma partícula inicialmente ($t = 0$) situada na posição $x = 0$, Fig.2. Suponha-se agora que em intervalos regulares τ a partícula se desloca em passos unitários a , ou na direcção

¹ "Random Walk"- Termo em inglês que significa marcha fortuita. Inspirado numa história de um marinheiro ébrio que deve negociar, a favor de seu navio, uma doca. A doca tem 50 passos de comprimento e 20 de largura. Um oficial de marinha coloca o marinheiro na metade da largura da doca, na ponta do desembarcador e aponta-o para o navio. Supõe-se que a cada passo ele tenha uma certa probabilidade de cambalear para o navio e outra probabilidade de andar para a esquerda ou direita (no sentido desembarcador-navio). Se ele atingir a ponta da doca ele embarca. O problema é simular o seu progresso ao longo da doca e estimar a chance de ele chegar ao navio, depois de um certo número de passos sem cair no mar.[NA]

positiva de x , com probabilidade p , ou na direcção negativa de x , com probabilidade q . Se p e q são iguais, i.e., $1/2$ cada, então em média, metade dos deslocamentos estão em cada direcção.

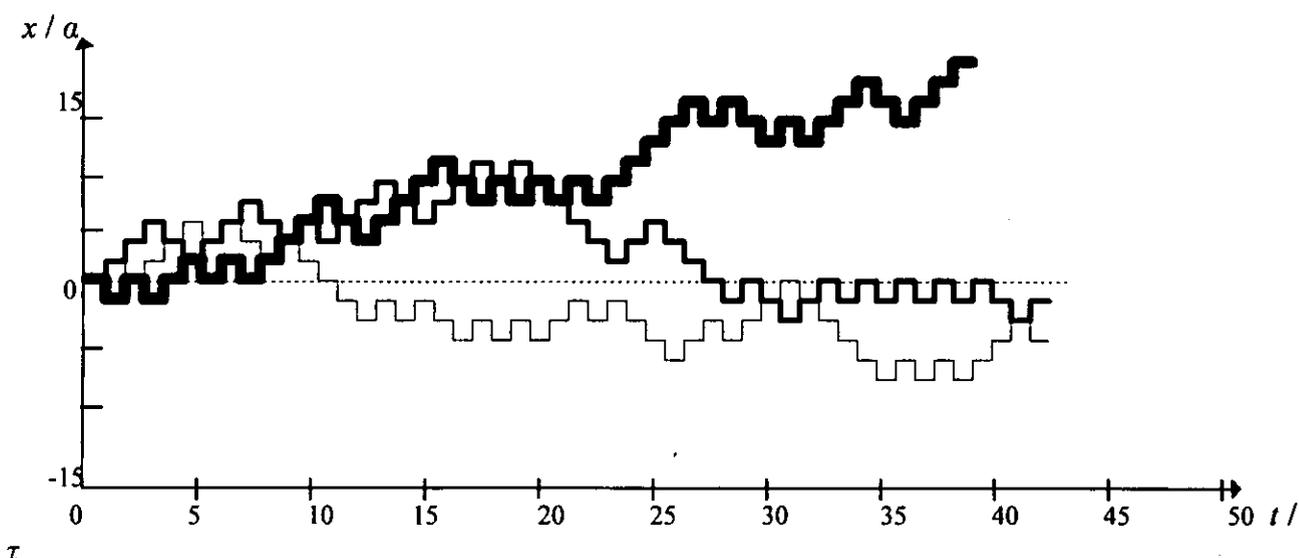


Fig.2

Ilustração de três movimentos caóticos unidimensionais gerados por uma tabela de números aleatórios. A partícula começa na posição $x = 0$, no instante $t = 0$, e, aleatoriamente, faz saltos de comprimento α em ambas direcções, com probabilidades de salto iguais para cada direcção.

Seja n_1 o verdadeiro número (não o número médio) de deslocamentos na direcção positiva de x e, n_2 o número de deslocamentos na direcção negativa de x ; então o número total de deslocamentos é

$$N = n_1 + n_2 \quad (1)$$

e o número absoluto de deslocamentos para a direita (direcção positiva) é

$$m = n_1 - n_2. \quad (2)$$

Destas equações temos

$$m = n_1 - (N - n_1) = 2n_1 - N. \quad (3)$$

Se N é um número ímpar(par), então m também é ímpar (par).

Suponha-se agora que ao construir-se uma sequência de deslocamentos, as probabilidades p e q em cada passo são independentes dos deslocamentos anteriores. Isto é, os deslocamentos são estatisticamente independentes. Se se observar partículas de fumo ou poeira num feixe de luz, de facto, seu movimento parece caótico numa escala de tempo correspondente, por exemplo, a tirar-se uma fotografia em cada 0.1 segundo.

A suposição de deslocamentos aleatórios parece infundada quando aplicada à uma molécula cercada por oito (8) ou dez (10) outras e retida nessa "rede" por talvez 10^{-11} s: Nessa escala de tempo os deslocamentos sucessivos são certamente *não estatisticamente independentes*. Contudo, quando se questiona sobre os deslocamentos de uma partícula macrascópica por um período 10^{10} vezes mais longo, então, aí já é claro que a correlação de eventos de um local ao seguinte provavelmente desaparece e a independência estatística é uma suposição razoável.

Com essa suposição, a probabilidade de n_1 passos positivos é p^{n_1} , a probabilidade de passos negativos é q^{n_2} , e a probabilidade de uma dada sequência de n_1 passos positivos e n_2 passos negativos é $p^{n_1}q^{n_2}$. Contudo, muitas sequências de $N (= n_1 + n_2)$ podem levar à um deslocamento absoluto $(n_1 - n_2)$. O número de tais sequências é o mesmo que o do problema clássico de estatística que consiste no número de maneiras de se distribuir N objectos distintos em duas pilhas, contendo n_1 e n_2 objectos respectivamente, independentemente do arranjo dos n_1 objectos numa pilha e n_2 na outra pilha. Este número é dado por:

$$\frac{N!}{n_1!n_2!}$$

Portanto a probabilidade de um deslocamento absoluto $(n_1 - n_2)$ depois de n_1 passos positivos e $n_2 (= N - n_1)$ passos negativos, independentemente da sequência dos passos, é

$$P(n_1; N) = \frac{N!}{n_1!(N - n_1)!} p^{n_1} q^{N - n_1} \quad (4)$$

Notar que este é um termo da expansão binomial de $(p + q)^N$.

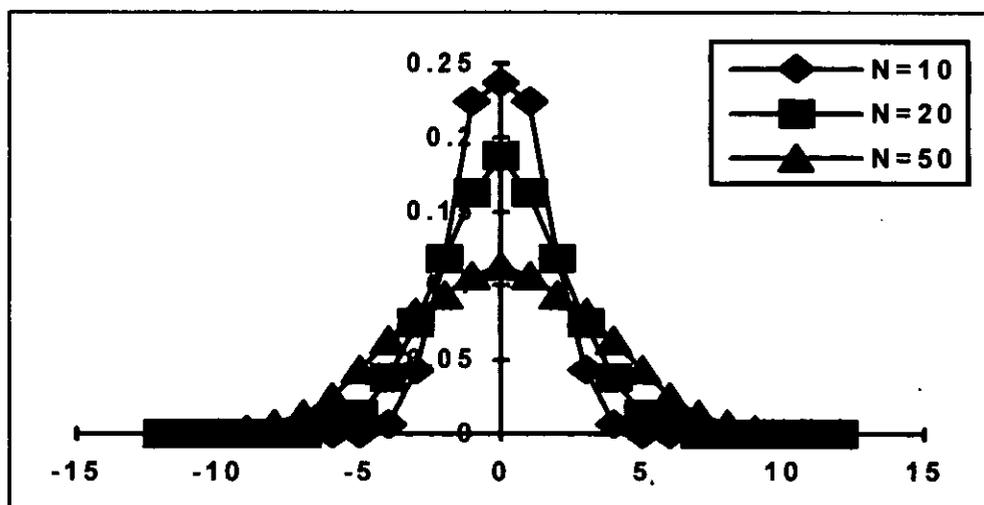


Fig.3

Distribuição das probabilidades de deslocamentos segundo Eq.(4) para vários valores de N e $n (= N - m)$, com $p = q = 1/2$. Com o aumento de N , a distribuição aproxima-se à curva Gaussiana.

Um gráfico da distribuição de probabilidades de deslocamentos é mostrado na Fig.3. Mesmo para pequenos valores de N mostrados, a linha unindo os pontos aproxima-se muito à forma da

distribuição gaussiana. Portanto, suspeita-se que $P(n_1; N)$ tenda à distribuição gaussiana no limite $N \rightarrow \infty$. Para mostrar isto, tome-se o logaritmo da probabilidade :

$$\ln P(n_1; N) = \ln N! - \ln n_1! - \ln(N - n_1) + n_1 \ln p + (N - n_1) \ln q \quad (5)$$

e, considere-se n_1 como sendo uma variável contínua para valores suficientemente grandes de N e n_1 . O valor de n_1 que maximiza P , e daí $\ln P$, é obtido igualando a derivada a zero:

$$\left[\frac{\partial \ln P(n_1; N)}{\partial n_1} \right]_N = 0. \quad (6)$$

Nesta diferenciação usa-se a aproximação de *Stirling*,

$$\ln n_1! \approx n_1 \ln n_1 - n_1, \quad (7)$$

tal que

$$\frac{\partial \ln n_1!}{\partial n_1} \approx \ln n_1 + 1 - 1 = \ln n_1 \quad (8)$$

e analogamente para a derivada de $\ln(N - n_1)!$. Daí tem-se

$$\left[\frac{\partial \ln P(n_1; N)}{\partial n_1} \right]_N \approx -\ln n_1 + \ln(N - n_1) + \ln p - \ln q. \quad (9)$$

Denote-se o valor de n_1 no máximo de P por n_1^* ; para encontrar-se este valor, iguala-se o lado direito de Eq.(9) a zero e obtém-se

$$(N - n_1^*)p = n_1^*q \quad (10)$$

ou, já que $q = 1 - p$

$$n_1^* = Np. \quad (11)$$

Se $p = q = 1/2$, então $n_1^* = N/2$, e o deslocamento absoluto m no máximo da distribuição de probabilidades é **zero** como esperado. Já que a distribuição é simétrica em volta do seu máximo, o valor médio de n_1 é igual a n_1^* . Ver-se-á que esta igualdade geralmente se preserva.

Para se certificar que o extremo obtido é um máximo, diferencie-se outra vez Eq.(9) para se obter a segunda derivada:

$$\left[\frac{\partial^2 \ln P(n_1; N)}{\partial n_1^2} \right]_N = -\frac{1}{n_1} - \frac{1}{N - n_1} \quad (12)$$

No ponto $n_1^* = Np$, esta derivada tem o valor

$$\left[\frac{\partial^2 \ln P(n_1; N)}{\partial n_1^2} \right]_{n_1=n_1^*} = -\frac{1}{Np} - \frac{1}{Nq} = -\frac{1}{Npq}; \quad (13)$$

sendo N , p e q grandezas positivas, a segunda derivada é negativa. Portanto a distribuição $P(n_1; N)$ tem um máximo em $n_1^* = Np$.

A a distribuição de probabilidades tem um pico estreito em volta do seu valor máximo. Se este é o caso, então a expansão em séries de *Taylor* em torno do máximo seria útil; assim escreve-se

$$\ln P(n_1; N) = \ln P(n_1^*; N) + (n_1 - n_1^*) \left(\frac{\partial \ln P}{\partial n_1} \right)_{n_1=n_1^*} + \frac{(n_1 - n_1^*)^2}{2} \left(\frac{\partial^2 \ln P}{\partial n_1^2} \right)_{n_1=n_1^*} + \dots \quad (14)$$

No máximo, $\left(\frac{\partial \ln P}{\partial n_1} \right)_{n_1=n_1^*}$ é zero, daí, até termos de segunda ordem inclusos, temos

$$P(n_1; N) = P(n_1^*; N) e^{-\frac{(n_1 - n_1^*)^2}{2Npq}}, \quad (15)$$

onde Eq.(13) foi usada para a avaliação da segunda derivada. Assim a distribuição de probabilidades é claramente da *forma gaussiana*.

Demanda-se que a distribuição de probabilidades $P(n_1; N)$ seja normalizada, quer dizer

$$\int_0^N P(n_1; N) dn_1 \approx \int_{-\infty}^{\infty} P(n_1; N) d(n_1 - n_1^*) = 1 \quad (16)$$

Aquí toma-se n , como sendo contínuo, muda-se a variável de integração para $n_1 - n_1^*$, e estende-se a integração por todos os valores de $n_1 - n_1^*$, já que se espera que o integrando seja zero em toda a região excepto na vizinhança de n_1^* . Realizando a integração tem-se

$$P(n_1^*; N) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(n_1 - n_1^*)^2}{2Npq}} d(n_1 - n_1^*) = 1 \quad (17)$$

Já que a integral aquí é da forma padrão $\left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2 x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha} \right)$, encontra-se a constante de normalização como sendo

$$P(n_1^*; N) = (2\pi Npq)^{-\frac{1}{2}}. \quad (18)$$

Pode-se agora avaliar o valor médio de n_1 , definido por

$$\langle n_1 \rangle \equiv \int_0^{N_1} n_1 P(n_1; n) dn_1. \quad (19)$$

Fazendo-se as mesmas aproximações que as de Eq.(16), obtém-se

$$\langle n_1 \rangle - n_1^* = (2\pi Npq)^{-\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} (n_1 - n_1^*) e^{-\frac{(n_1 - n_1^*)^2}{2Npq}} d(n_1 - n_1^*) = 0. \quad (20)$$

A integral "desaparece" já que ela é um produto de uma função ímpar e de uma função par de variável $n_1 - n_1^*$. Na medida em que Eq.(15) é válida, a média $\langle n_1 \rangle$ e o valor mais provável n_1^* são idênticos para quaisquer valores de p e q . Assim, o *Primeiro Momento* da distribuição de gaussiana - o desvio médio do máximo- é igual a zero; o *Segundo Momento*- o desvio médio quadrático- agora definido como:

$$\langle (\Delta n_1)^2 \rangle \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} (n_1 - n_1^*)^2 P(n_1; N) d(n_1 - n_1^*) \quad (21)$$

(onde $\Delta n_1 \equiv n_1 - n_1^*$ e $\langle \rangle$ indicam média), tem o valor

$$\langle (\Delta n_1)^2 \rangle \equiv (2\pi Npq)^{-\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} (n_1 - n_1^*)^2 e^{-\frac{(n_1 - n_1^*)^2}{2Npq}} d(n_1 - n_1^*) = Npq \quad (22)$$

Notar que o desvio médio quadrático aumenta linearmente com o número de passos no movimento aleatório; portanto, a sua raiz quadrática varia em $N^{1/2}$. Se reescrever-se a função de distribuição na forma

$$P(n_1; N) = (2\pi \langle (\Delta n_1)^2 \rangle)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{(n_1 - n_1^*)^2}{2\langle (\Delta n_1)^2 \rangle}} = (2\pi Npq)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{(n_1 - n_1^*)^2}{2Npq}}, \quad (23)$$

ver-se-á que a curva da distribuição se estreita com o aumento de N .

Para se fazer uma conexão do conceito de movimento aleatório com o processo de difusão, considere-se o seguinte problema: Imagine-se um meio unidimensional (uma linha como na Fig.2) e calcule-se a razão na qual as partículas se difundem ao longo dela. No instante $t = 0$ estejam todas as partículas na posição x_0 ; em outras palavras, a "concentração inicial" (número de partículas por unidade de percurso) é uma função δ ,

$$C(x, t) = C_0 \delta(x - x_0) \quad (24)$$

Começando em $t = 0$ o processo de difusão ocorre de acordo com a *Segunda Lei de Fick*²

$$\frac{\partial C(x;t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C(x;t)}{\partial x^2}, \quad (25)$$

com o coeficiente de difusão D . Uma solução da equação diferencial (25), como se pode verificar por diferenciação, é

$$C(x,t) = C_0 (4\pi Dt)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4Dt}}. \quad (26)$$

Esta solução particular satisfaz à condição inicial, Eq.(24). Isto quer dizer, quando $t \rightarrow 0$, a função $C(x;t)$ torna-se cada vez mais estreita no pico, mas a área debaixo da curva mantém-se constante :

$$\int_{-\infty}^{\infty} C(x;t) dx = C_0, \quad (\text{para todo } t) \quad (27)$$

tal que $\lim_{t \rightarrow 0} C(x;t) = C_0 \delta(x-x_0)$, por definição da função δ . Em qualquer instante de tempo a distribuição das partículas em difusão é gaussiana no espaço unidimensional e, a gaussiana vai-se alargando (tornando-se difusa) com o passar do tempo. Portanto, a posição média das partículas $\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x C(x;t) dx$, é x_0 em todos os instantes e, o *deslocamento médio quadrático* desta posição é

$$\langle (x-x_0)^2 \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} (x-x_0)^2 C(x;t) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} C(x;t) dx} = \int_{-\infty}^{\infty} (x-x_0)^2 \frac{1}{(4\pi Dt)^{\frac{1}{2}}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4Dt}} d(x-x_0) = 2Dt \quad (28)$$

Esta é a lei de difusão derivada primeiro por *Albert Einstein*. Está claro que Eqs.(22) e (28) são da mesma forma; elas descrevem também o mesmo processo. A difusão de partículas num meio ocorre

² Num sistema unidimensional, o fluxo de partículas através de um ponto x é

$$(\Gamma_n) = -D \frac{\partial C(x,t)}{\partial x},$$

enquanto que o fluxo em $x + \delta x$ é

$$(\Gamma_n)_{x+\delta x} = (\Gamma_n)_x + d_x \frac{\partial (\Gamma_n)_x}{\partial x} = (\Gamma_n)_x - D \frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2} dx$$

Mas a razão na qual a "concentração" entre x e $x + \delta x$ varia, é simplesmente a diferença entre estes dois fluxos (um dentro e outro fora), dividida pela distância δx . Assim, para $\delta x \rightarrow 0$ tem-se:

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = \lim_{\delta x \rightarrow 0} \frac{(\Gamma_n)_x - (\Gamma_n)_{x+\delta x}}{\delta x} = D \frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2}$$

devido a movimentos em direcções aleatórias, não correlacionados um com o outro depois de períodos correspondentes à várias colisões moleculares. No problema do "Random Walk", começa-se com probabilidade unitária na origem do sistema unidimensional de coordenadas e , procura-se a distribuição probabilística das posições depois de N passos. Para corresponder à intuição sobre a difusão num meio isotrópico, escolhem-se as probabilidades *a priori* p e q como sendo iguais. Assim, em média, tem-se $\langle n_1 \rangle = \langle n_2 \rangle = \frac{N}{2}$ e, daí $\langle m \rangle = \langle n_1 \rangle - \langle n_2 \rangle = 0$. O deslocamento médio da origem é zero. Contudo, para qualquer sequência de passos, o deslocamento absoluto da posição inicial pode não ser zero, sendo a distribuição de probabilidade dada por $P(n, ; N)$, Eq.(24). Pode-se alterar essa equação substituindo

$$n - n_1^* = n_1 - \frac{N}{2} = \frac{m}{2}, \quad (29)$$

tal que Eq.(22) se torna

$$\left\langle \left(\frac{m}{2} \right)^2 \right\rangle = Npq \quad \text{ou} \quad \langle m^2 \rangle = 4Npq. \quad (30)$$

Mas para passos constantes de tamanho α , o valor de m (o número absoluto de passos na direcção positiva) é simplesmente $\Delta x / \alpha$, onde Δx é a distância absoluta percorrida. Assim, num meio isotrópico ($p = q = 1/2$), o desvio médio quadrático para o problema do "Random Walk" é

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle = N\alpha^2 = \frac{\alpha^2 t}{\tau}, \quad (31)$$

onde τ é o intervalo de tempo entre os deslocamentos. Fazendo a identificação $D = \frac{\alpha^2}{\tau}$, encontra-se que as soluções da difusão e do "Random Walk" são idênticas. Eq.(28) relaciona o desvio médio quadrático duma partícula num instante t ao coeficiente de difusão D .

2.1.2. Modelo físico de "Random Walk"

Até aqui, tem-se dado um tratamento meramente estatístico do problema de "Random Walk". Um outro tipo de análise pode ser realizado com a aplicação de um modelo mais visual - O modelo físico.

Considere-se novamente o movimento de uma partícula *browniana*: Seja que no instante t a partícula se encontre na posição x , podendo efectuar saltos de comprimento α e duração τ , tanto para esquerda, com probabilidade q , como para a direita, com probabilidade p , Fig.4.

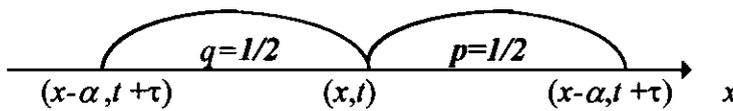


Fig.4

Saltos aleatórios de uma partícula Browniana

Fazendo uso do mesmo raciocínio, considere-se agora o caso de um conjunto (ensemble) de partículas de tal modo que

$$N = \int n(x, t) dx, \quad (32)$$

onde N é o número total de partículas e $n(x, t)$ é a densidade de número de partículas, i.e., o número de partículas na posição x , no instante t .

Seja que no instante t existam n partículas em cada uma das posições $(x - \alpha)$ e $(x + \alpha)$, Fig.5.

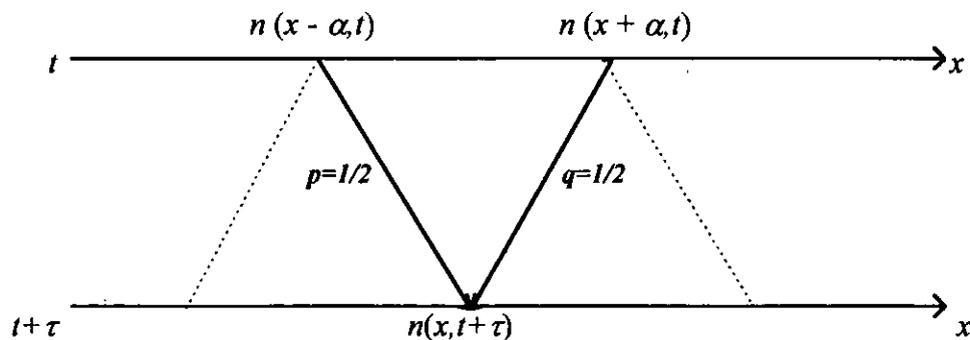


Fig.5

O número de partículas no ponto x no instante $t + \tau$ é a soma do número das partículas que vêm da esquerda e da direita desta posição.

A densidade de partículas no ponto x , depois do salto de duração τ de partículas vindas tanto da esquerda, $(x - \alpha)$, como da direita, $(x + \alpha)$, é dada por :

$$n(x, t + \tau) = pn(x - \alpha) + qn(x + \alpha, t). \quad (33)$$

Sendo que $p = q = 1/2$, então

$$n(x, t + \tau) = \frac{1}{2} [n(x + \alpha, t) + n(x - \alpha, t)]. \quad (34)$$

Seja $\rho(x, t)$ a distribuição de probabilidade, então:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x, t) dx = 1. \quad (35)$$

No nosso caso $\rho(x,t) = \frac{n(x,t)}{N}$ representa a densidade de probabilidade de encontrar uma partícula *browniana* no ponto (x,t) , ou melhor, a probabilidade de encontrar uma partícula *browniana* no intervalo $(x, x+dx)$ no instante t .

Portanto, por analogia à Eq.(33) tem-se

$$\rho(x,t+\tau) = \frac{1}{2} [\rho(x+\alpha,t) + \rho(x-\alpha,t)], \quad (36)$$

que é a equação básica deste modelo.

Procure-se agora a sua ligação com a equação de difusão, procedendo-se à consideração desta equação nos limites $\alpha \rightarrow 0$ e $\tau \rightarrow 0$. Decompondo $\rho(x,t+\tau)$ e $\rho(x \pm \alpha,t)$ em série até termos de segunda ordem, obtém-se :

$$\rho(x,t+\tau) \cong \rho(x,t) + \frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} \tau + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \rho(x,t)}{\partial t^2} \tau^2 + \dots, \quad (37)$$

$$\rho(x+\alpha,t) \cong \rho(x,t) + \frac{\partial \rho(x,t)}{\partial x} \alpha + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \rho(x,t)}{\partial x^2} \alpha^2 + \dots, \quad (38)$$

e

$$\rho(x-\alpha,t) \cong \rho(x,t) - \frac{\partial \rho(x,t)}{\partial x} \alpha + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \rho(x,t)}{\partial x^2} \alpha^2 + \dots. \quad (39)$$

Daí que, considerando τ muito maior que τ^2 , obtém-se

$$\rho(x,t) + \frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} \tau = \frac{1}{2} \left[\rho(x,t) + \frac{\partial \rho(x,t)}{\partial x} \alpha + \frac{\partial^2 \rho(x,t)}{\partial x^2} \frac{\alpha^2}{2} + \rho(x,t) - \frac{\partial \rho(x,t)}{\partial x} \alpha + \frac{\partial^2 \rho(x,t)}{\partial x^2} \frac{\alpha^2}{2} + \dots \right]$$

ou seja:

$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} = \frac{\alpha^2}{2\tau} \frac{\partial^2 \rho(x,t)}{\partial x^2}. \quad (40)$$

Tomando o limite quando $\alpha \rightarrow 0$ e $\tau \rightarrow 0$, a fórmula anterior toma a forma

$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho(x,t)}{\partial x^2}, \quad (41)$$

que é a equação de difusão e D é o coeficiente de difusão definido como

$$D = \lim_{\substack{\alpha \rightarrow 0 \\ \tau \rightarrow 0}} \frac{\alpha^2}{2\tau} \quad (42)$$

Esta definição, Eq.(42), pode facilmente ser usada em cálculos analíticos mas, já não se pode fazer o mesmo no caso de cálculos numéricos em computadores pois, até agora, não se conhece o significado físico de $\alpha \rightarrow 0$ e $\tau \rightarrow 0$. Por isso é preciso investigar a "equação básica" sem esta aproximação.

2.1.2.1. O método operacional da solução da equação básica

Considere-se um certo operador de deslocamento, T , que actua em relação à coordenada de uma função arbitrária $f(x)$ - Por definição,

$$T_{\alpha} f(x) = f(x + \alpha) \quad (43)$$

Sejam válidas as seguintes propriedades para o operador T :

$$T_{-\alpha} f(x) = f(x - \alpha) \quad (44)$$

$$T_{\alpha}^2 f(x) = T_{\alpha} T_{\alpha} f(x) = T_{\alpha} (T_{\alpha} f(x)) = T_{\alpha} f(x + \alpha) = f(x + 2\alpha) \quad (45)$$

$$T_{\alpha}^n f(x) = T_{n\alpha} f(x) = f(x + n\alpha) \quad (46)$$

$$T_{\alpha}^{-n} f(x) = f(x - n\alpha) \quad (47)$$

$$T_{\alpha} T_{-\alpha} f(x) = T_{\alpha} f(x - \alpha) = f(x) \Rightarrow T_{\alpha} T_{-\alpha} = 1 \Rightarrow T_{-\alpha} = T_{\alpha}^{-1} \quad (48)$$

$$T_{\alpha} T_{\beta} f(x) = T_{\alpha+\beta} f(x) = f[x + (\alpha + \beta)] = T_{\beta} T_{\alpha} f(x) \quad (\text{comutativos}) \quad (49)$$

Analogamente, agindo com o operador T sobre a função $\rho(x, t)$ tem-se:

$$T_{\alpha} \rho(x, t) = \rho(x + \alpha, t) \quad (50)$$

Do mesmo modo, pode-se introduzir um operador de deslocamento em relação ao tempo, T_{τ} com as mesmas propriedades que T_{α} . Então:

$$T_{\tau} \rho(x, t) = \rho(x, t + \tau), \quad (51)$$

portanto Eq.(36) pode ser representada como

$$T_{\tau} \rho(x, t) = \frac{1}{2} [T_{\alpha} \rho(x, t) + T_{-\alpha} \rho(x, t)] \quad \text{ou}$$

$$T_{\tau} \rho(x, t) = \frac{1}{2} [T_{\alpha} + T_{-\alpha}] \rho(x, t),$$

daí que

$$T_{\tau} = \frac{1}{2} [T_{\alpha} + T_{-\alpha}] \quad (52)$$

pois $\rho(x,t)$ é uma função arbitrária. Esta última equação representa o "Random Walk" no eixo infinito.

Considerem-se as mesmas propriedades, mas de uma forma um pouco diferente:

$$\rho(x,t+\tau) = \frac{1}{2}[T_{+\alpha} + T_{-\alpha}] \rho(x,t),$$

$$\rho(x,t+2\tau) = \frac{1}{2}[T_{+\alpha} + T_{-\alpha}] \rho(x,t+\tau) = \frac{1}{2^2}[T_{+\alpha} + T_{-\alpha}]^2 \rho(x,t),$$

$$\text{então, } \rho(x,t+n\tau) = T_{\tau}^n \rho(x,t) = \frac{1}{2^n}[T_{+\alpha} + T_{-\alpha}]^n \rho(x,t) \quad (53)$$

e, de acordo com Eq.(52) tem-se

$$T_{\tau}^n = \frac{1}{2^n}[T_{+\alpha} + T_{-\alpha}]^n. \quad (54)$$

Particularmente, $\rho(x,0) = \varphi(x)$ e,

$$T_{\tau}^n \rho(x,0) = \rho(x,n\tau), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (54)$$

Escolhendo $t = n\tau$; e tomando em conta Eq.(54), a solução geral $\rho(x,t)$ para x e t arbitrários será dada por:

$$\rho(x,t) = \rho(x,n\tau) = T_{\tau}^n \rho(x,0) = \frac{1}{2^n}[T_{+\alpha} + T_{-\alpha}]^n \varphi(x) \quad (55)$$

Considere-se agora a fórmula do binómio de Newton:

$$(a+b)^n = \sum_{m=0}^n C_n^m a^m b^{n-m} \quad (56)$$

Aplicando esta fórmula ao factor $\frac{1}{2^n}[T_{+\alpha} + T_{-\alpha}]^n$, tem-se:

$$\frac{1}{2^n}[T_{+\alpha} + T_{-\alpha}]^n = \frac{1}{2^n} \sum_{m=0}^n C_n^m T_{+\alpha}^m T_{-\alpha}^{n-m} \quad (57)$$

então

$$T_{\tau}^n = \frac{1}{2^n} \sum_{m=0}^n C_n^m T_{+\alpha}^m T_{-\alpha}^{n-m} \quad (58)$$

onde $C_n^m = n! / m!(n-m)!$ são coeficientes binomiais, sendo $0 < m < n$. Estes coeficientes existem tabelados e há métodos rápidos para o seu cálculo (por ex.: o Triângulo de Pascal).

Com a ajuda das propriedades do operador T , pode-se demonstrar que:

$$T_{-\alpha}^{n-m} = T_{\alpha}^{m-n} ; \quad (59)$$

$$T_{\alpha}^m T_{\alpha}^{m-n} = T_{\alpha}^{2m-n} ; \quad (60)$$

$$T_{\alpha}^n = \frac{1}{2^n} \sum_{m=0}^n C_n^m T_{\alpha}^{2m-n} ; \quad (61)$$

$$T_{\alpha}^n \rho(x,0) = \frac{1}{2^n} \sum_{m=0}^n C_n^m T_{\alpha}^{2m-n} \varphi(x) \quad \text{e, finalmente,}$$

$$\rho(x, n\tau) = \frac{1}{2^n} \sum_{m=0}^n C_n^m \varphi[x + (2m-n)\alpha] \quad (62)$$

Encontrou-se, deste modo, a solução para a densidade da distribuição. Usando esta fórmula podem-se calcular vários parâmetros concretos no estudo do fenómeno de difusão.

Para uma melhor disposição da Eq.(62) podem-se efectuar algumas operações simples sobre ela: Decompondo-se assintoticamente o factor $\frac{C_n^m}{2^n}$ com $n \rightarrow \infty$ e $m \rightarrow \infty$ obtem-se:

$$\frac{C_n^m}{2^n} \cong \sqrt{\frac{2}{\pi n}} e^{-\frac{(2m-n)^2}{2n}} \quad (63)$$

Substituindo-se $2m - n$ por $2k$, i.e., $2m - n = 2k$ e, conseqüentemente $m = (2k + n) / 2$, recebe-se:

$$\frac{C_n^{\frac{2k+n}{2}}}{2^n} \cong \sqrt{\frac{2}{\pi n}} e^{-\frac{2k^2}{n}} \quad (64)$$

Então, para $\rho(x, n\tau)$ tem-se:

$$\rho(x, n\tau) = \sqrt{\frac{2}{n\pi}} \sum_{k=-\frac{n}{2}}^{\frac{n}{2}} e^{-\frac{2k^2}{n}} \varphi(x + 2k\alpha) \quad (65)$$

Um procedimento comum quando se pretende passar de uma soma para integração, é multiplicar-se Eq.(65) por um incremento qualquer $\Delta k = 1$ (o seu valor não muda). Portanto,

Um procedimento comum quando se pretende passar de uma soma para integração, é multiplicar-se Eq.(65) por um incremento qualquer $\Delta k = 1$ (o seu valor não muda). Portanto,

$$\rho(x, n\tau) = \sqrt{\frac{2}{n\pi}} \sum_{k=-\frac{n}{2}}^{\frac{n}{2}} e^{-\frac{2k^2}{n}} \varphi(x + 2k\alpha) \Delta k \quad (66)$$

Seja $x + 2ka = \xi$; de onde $k = \frac{\xi - x}{2\alpha}$. Daí, no limite $n \rightarrow \infty$ o somatório passa para integração do modo seguinte:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{2}{n\pi}} \sum_{k=-\frac{n}{2}}^{\frac{n}{2}} e^{-\frac{2k^2}{n}} \varphi(x + 2k\alpha) \Delta k = \frac{1}{2\alpha} \sqrt{\frac{2}{n\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{(\xi-x)^2}{2\alpha^2 n}} \varphi(\xi) d\xi \quad (67)$$

Então

$$\rho(x, n\tau) = \frac{1}{\sqrt{2\alpha^2 n\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{(\xi-x)^2}{2\alpha^2 n}} \varphi(\xi) d\xi \quad (68)$$

Voltando ao caso $t = n\tau$; $n = t/\tau$, resulta que

$$\alpha^2 n = t \frac{\alpha^2}{\tau}. \quad (69)$$

Por definição, para que Eq.(68) seja a solução da equação de difusão é necessário que se verifique a igualdade $D = \frac{\alpha^2}{2\tau}$ e, portanto $\alpha^2 n = 2Dt$. Assim a solução do problema de Cauchy da equação de difusão para o eixo infinito,

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} & (t > 0, -\infty < x < +\infty) \\ \rho(x, 0) = \varphi(x) \end{cases}, \quad (70)$$

é:

$$\rho(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2Dt\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{(x-\xi)^2}{4Dt}} \varphi(\xi) d\xi \quad (71)$$

3. Metodologia

3.1. Equipamento utilizado

- Um computador AST™ da Award, com processador 486 DX, munido da versão 6.22 da MS-DOS e TURBO-PASCAL 6.0 da BORLAND INTERNATIONAL

3.2. Procedimentos

Na investigação numérica (montagem do programa no computador) do modelo físico de difusão unidimensional num meio infinito $\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}$ ($-\infty < x < +\infty, t > 0$), com distribuição inicial $\rho(x, 0) = \varphi(x)$ e solução geral Eq.(71) devem-se tomar os seguintes passos:

1. Escolher como distribuição inicial a considerar $\varphi(\xi) = \frac{e^{-\frac{\xi^2}{b^2}}}{b\sqrt{\pi}}$; (72)

2. Portanto introduzindo Eq.(72) em Eq.(71) e integrando, para comparação com os cálculos

numéricos, tem-se o processo "padrão" $\rho(x, t) = \frac{e^{-\frac{x^2}{b^2 + 4Dt}}}{\sqrt{\pi(b^2 + 4Dt)}}$; (73)

3. Escolher o processo físico a considerar. Por exemplo: a difusão do vapor de éter etílico no ar à 0°C e à pressão normal, $D = 8 \cdot 10^{-6} \frac{m^2}{s}$;

4. Avaliar o parâmetro b . Este parâmetro representa a largura da fonte (a distribuição inicial das moléculas de vapor de éter) na distância que o valor de $\varphi(x)$ é e (número de Euler) vezes menor que o seu valor máximo. Para esta avaliação pode-se usar a fórmula de Einstein $\overline{x^2} = 2Dt$ ou $\Delta x = \sqrt{x^2}$ (Eq.(28)). Usando o valor de D dado no ponto 3, pode-se construir a seguinte tabela:

Tabela 1. Deslocamento médio em função do tempo de difusão

t (s)	1	16	100	225	400	900
Δx (cm)	0,4	1,6	4,0	6,0	8,0	12,0

³ V. Kochkin, N.I, e Chirkévitch, M.G.(1986)-Prontuário de física elementar- pag.100. Moscovo, Editora Mir.

Nos cálculos numéricos não é possível realizar a condição $-\infty < x < \infty$. Por isso :

a) É preciso escolher um intervalo finito da região de difusão L_x no eixo ox ;

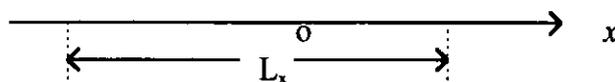


Fig.5
Intervalo finito no eixo de difusão infinito

b) No instante inicial ($t=0$), é claro que b deve ser menor que $L_x/2$

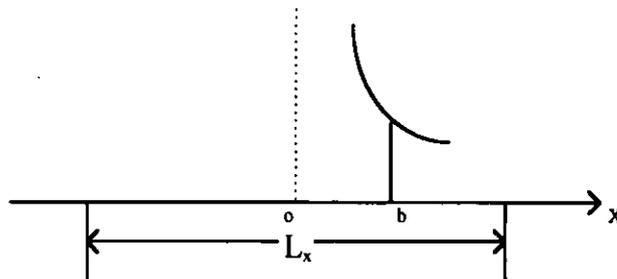


Fig.6
Largura da fonte no instante inicial.

c) Num instante arbitrário de tempo deve-se ter $b + \Delta x(t) < L_x/2$ (“condição de fronteira”)

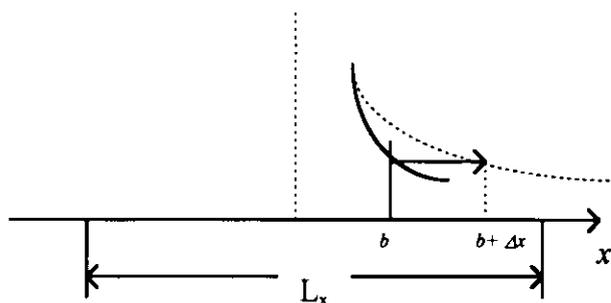


Fig.7
Largura da fonte num instante $t > 0$

Sendo que $\Delta x = \sqrt{2Dt}$, então $b + \sqrt{2Dt} < L_x/2$ ou $2Dt < \left(\frac{L_x}{2} - b\right)^2$. Daí:

$$t < \frac{\left(\frac{L_x}{2} - b\right)^2}{2D} \text{ ou melhor, } t < \frac{(L_x - 2b)^2}{8D} \quad (74)$$

Esta fórmula representa a condição de “duração de observação”. Para D , b e L_x dados, o tempo de observação não deve superar esse valor. Para elucidar, tome-se o exemplo de $D = 8 \cdot 10^{-6} \frac{m^2}{s}$ e $L_x = 1m$.

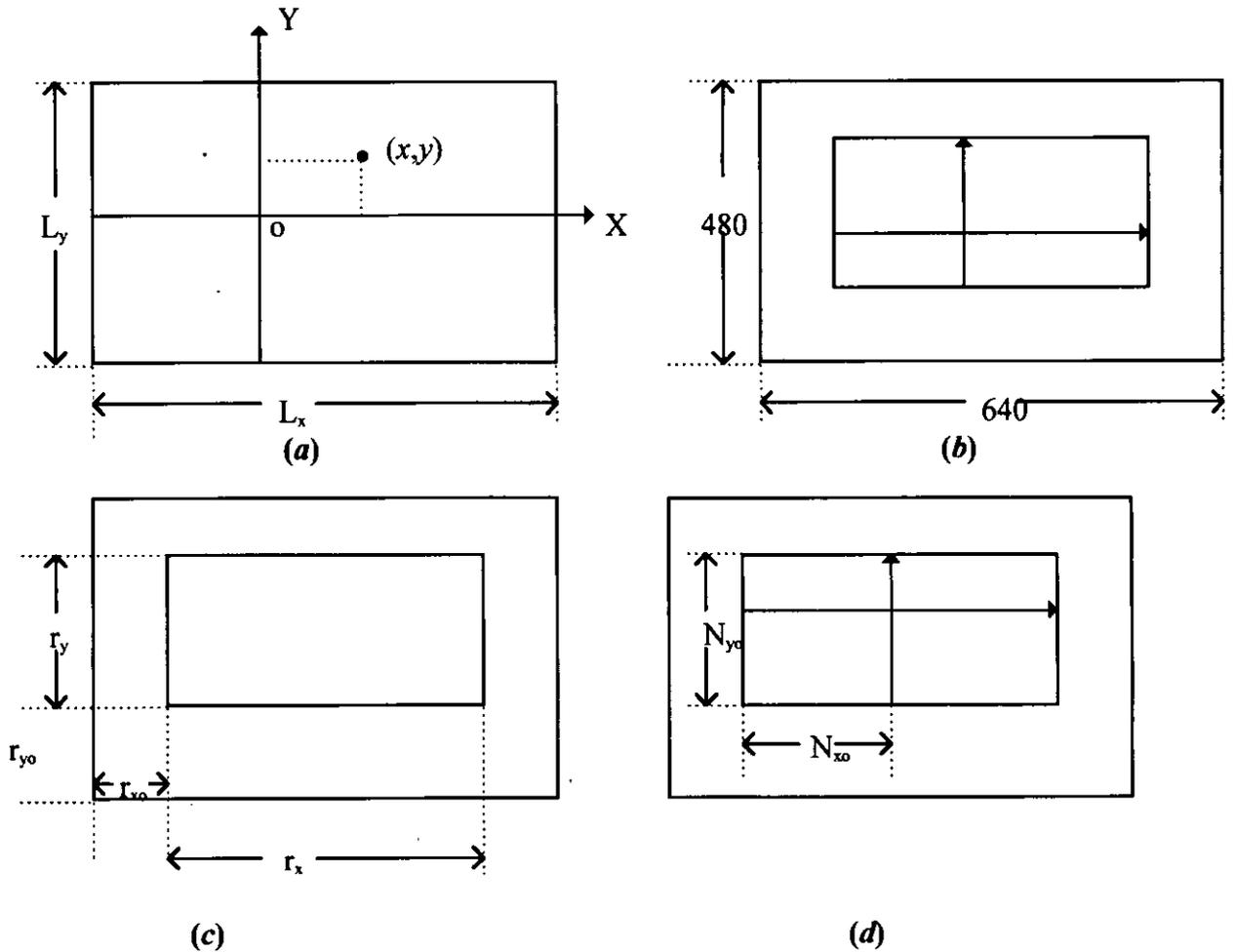
Tabela 2: Duração máxima de observação em função da largura da fonte

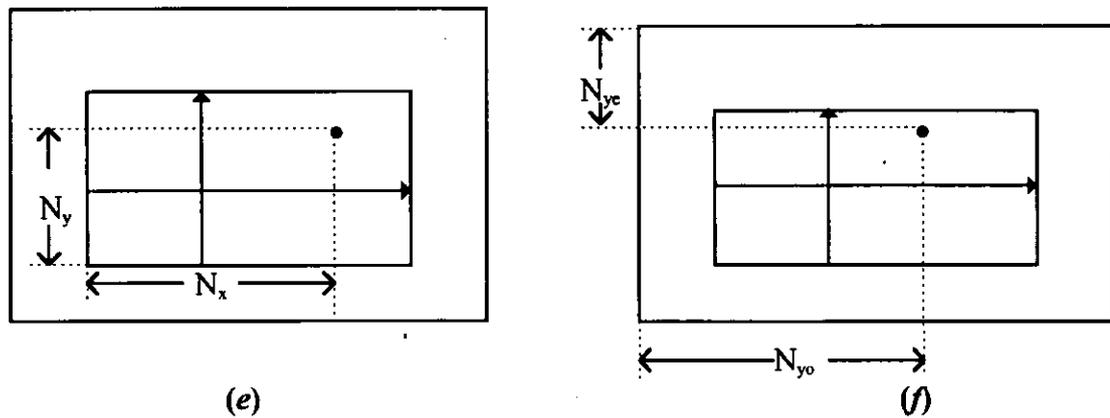
$b(\text{metro})$	0,01	0,05	0,30
$t(\text{min}) <$	250	211	42

6. Avaliar os parâmetros α e τ do modelo físico. Porque no modelo físico tem-se um movimento discreto com passo α , é necessário construir-se no intervalo L_x uma rede unidimensional com esse passo. Seja R_x o número total de segmentos entre os nós da rede, então:

$$\alpha = \frac{L_x}{R_x} \quad (75)$$

Da relação $D = \frac{\alpha^2}{2\tau}$, resulta $\tau = \frac{\alpha^2}{2Dt}$. Por exemplo: se $L_x = 1\text{m}$ e $R_x = 640$ (número de "pixels" no modo gráfico(2) de Turbo Pascal), $\alpha = 1,5625 \cdot 10^{-3}\text{m}$ e $\tau = 0,1526\text{s}$. Notar que R_x pode ser arbitrário e não ligado com o écran!!!



**Fig.6**

Diagramas de conversão de coordenadas de ecrã (pixels) em coordenadas reais (metros). (a) coordenadas no espaço real (m); (b) coordenadas no ecrã ("pixels"); (c) parte activa e inactiva do ecrã, segundo o modo gráfico a usar; (d) origem das coordenadas da parte activa do ecrã; (e) coordenadas do "pixel" na parte activa do ecrã e; (f) coordenadas do "pixel" em relação a todo o ecrã.

7. Converter as coordenadas do ecrã em coordenadas reais (SI). Da Fig.6 pode-se facilmente deduzir que :

$$x = \frac{(N_x - N_{x0})}{r_x} L_x \quad (75)$$

$$y = \frac{(N_y - N_{y0})}{r_y} L_y \quad (76)$$

8. Para cada "pixel" dentro da região limitada por Eq.(72), realizar inúmeros (p.ex.:500) saltos aleatórios para esquerda e direita;
9. Construir o novo gráfico de número de "pixels" em função da posição e tempo de difusão e, comparar com os resultados dados pela Eq.(73).

3.3. Resultados

No anexo II estão representados os gráficos e os resultados numéricos oferecidos pelo programa para vários ensaios de "Random Walk".

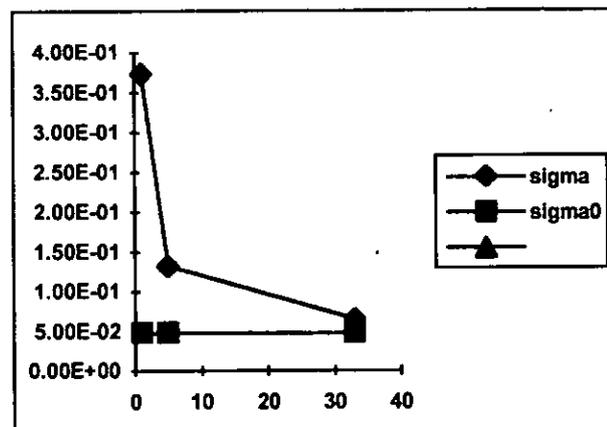
Escolheu-se uma precisão de 1% do valor previsto teoricamente e obteve-se a seguinte tabela de desvio padrão em função do número de ensaios:

Tabela 3: Desvio padrão dos resultados numéricos(σ (sigma)) em relação à 1% do valor previsto teoricamente (σ^0 (sigma0)) em função do número de ensaios (Nd)

Nd	1	5	33
σ (1/m)	2,87E-01	1,13E-01	5.45E-02

$$\sigma^0 = 4.76E-02 \text{ 1/m}$$

Gráfico 1. Demonstração gráfica da convergência dos dados da Tabela 3.



4. Discussão e conclusões

Sem ser necessária a imposição de alguma condição do tipo $\alpha \rightarrow 0$ e $\tau \rightarrow 0$, foi assim simulado pela primeira vez num computador, usando o modelo de "Random Walk", o processo de difusão no eixo infinito, para qualquer duração de salto. Com isto, acaba-se de se criar um método mais visual de explicação de um dos fenómenos de difícil modelação em Física Teórica.

A velocidade com que a simulação é efectuada depende apenas da velocidade do microprocessador disponível, podendo ainda ser mais rápida ou mais lenta de acordo com as

intenções do utilizador. Mesmo assim, um fenómeno que levaria horas a ser observado requere neste caso apenas de alguns segundos até minutos.

Para se comprovar a precisão deste modelo, efectuou-se a comparação do desvio padrão dos dados numéricos obtidos do programa de "Random Walk" com apenas 1% do valor previsto teoricamente (ponto 3) e verificou-se que com o aumento de número de ensaios de 'Random Walk', a coincidência entre os resultados previstos teoricamente (ponto 3) e os obtidos do programa é quase total, pondo-se deste modo em evidência que este modelo é um dos mais precisos na descrição dos fenómenos de difusão. As diminutas diferenças entre esses valores devem-se provavelmente ao facto de o gerador de números aleatórios não ser verdadeiramente aleatório mas, pseudo-aleatório por seguir um algoritmo previamente introduzido no microprocessador e, que repete os valores sempre que é inicializado.

5. Recomendações

Recomenda-se que seja realizado um estudo aprofundado de "Random Walk" para o caso de difusão na presença de campos e (ou) fronteiras (absorventes e reflectoras) ou ainda ambos, já que este tipo de condições adversas é muito comum na natureza. Deste modo, vai-se contribuir para uma melhor compreensão de fenómenos como a propagação das ondas térmicas no solo, a influência da fissão radioactiva na temperatura da crosta terrestre e a propagação da poluição na atmosfera, dentre outros fenómenos.

Devido às dificuldades que a Física Teórica enfrenta em explicar alguns fenómenos usando de meios simples e comuns, é urgente a existência de uma disciplina de Física Computacional nos cursos do Departamento de Física da UEM, leccionada por um perito nesta área, que, a par das já existentes sobre programação, vai dotar os estudantes de capacidade para a simulação e visualização dinâmica de processos descritos apenas teoricamente, contribuindo deste modo não só para uma melhor compreensão da Física mas também para atrair o interesse de muitos estudantes para esta área.

6. Literatura

- [1]. Berry, R. Stephen, Rice, Stuart A e Ross, John (1980). *Physical Chemistry*, pp 1095 - 1101. New York, Chichester, Brisbane, Toronto and Singapore, John Wiley & Sons.
- [2]. Brown, Aubrey I. e Marco, Salvatore M. (1958). *Introduction to Heat Transfer*, 3rd Edition, 332 pp, New York, Toronto and London, McGraw-Hill Book Company, Inc.
- [3]. Carslaw, H. S. e Jaeger, J.C. (1959). *Conduction of Heat in Solids*, 2nd Edition, 510 pp. Oxford, Clarendon Press .
- [4]. Cox, D. R. e Miller, H. D. (1965). *The Theory of Stochastic Processes*, pp 22 - 73. London, Methuen & CO LTD.
- [5]. DeVries, Paul L. (1994). *A First Course in Computational Physics*, 424 pp. New York, Chichester, Brisbane, Toronto and Singapore, John Wiley & Sons, Inc.
- [6]. Feller, William (1957). *An Intoduction to Probability Theory and Its Applications*, 2nd Edition, Vol. I, 461 pp. New York and London, John Wiley & Sons, Inc.
- [7]. Holmes, Barry. J. (1990). *Pascal Programming*, 2nd Edition, 455 pp. London, DP Publications Limited.
- [8]. Jakob, Max e Hawkins, A. George (1957). *Elements of Heat Transfer*, 3rd Edition, 317 pp. New York, John Wiley & Sons, Inc.
- [9]. Moore, Walter J. (1956). *Physical Chemistry*, 2nd Edition, pp 193 - 195. London, New York and Toronto, Longmans, Green & CO.
- [10]. Rakov, Yuri e Tembe H.(1992). *O método operacional no Modelo do Vagabundo Aleatório*, 6 pp. IV Jornadas de Engenharias e Ciências de Moçambique, Departamento de Física, UEM.
- [11]. Schneider, P. J. (1957). *Conduction Heat Transfer*, 395 pp. Reading, Massachusetts, Addison - Wesley Publishing Company, Inc.
-

7. ANEXOS

ANEXO I

PROGRAMA DE SIMULAÇÃO DE "RANDOM WALK" NO EIXO INFINITO

```
Program Random_Walk_Inf;
```

```
Uses
```

```
Graph,CRT;
```

```
const
```

```
  n = 500;           { Número de saltos }
  la = 1;           { comprimento do salto ( $\alpha$ ) }
  Lx = 1;           { m }
  b = 0.05;         { m }
  D = 8E-06;        { (m2)/s , coeficiente de difusão }
```

```
var
```

```
  Gd,Gm             : integer;
  i,j,k,il,jl       : integer;
  Nx,Ny,Nx0,Ny0,Nxm,Nym : integer;
  N0,Ne,Nr,Nd,dp     : integer;
  tau,t             : real;
  rx,ry,Ly,x,y,yr,sig,sig0 : real;
  c1,c2             : real;
  Ch                : char;
  Ar                : array[1..640] of word;
  Ari               : array[1..640] of word;
```

```
Procedure Disln1; { Exp }
```

```
Begin
```

```
  Ne:= 0;
  Nr:= GetMaxX;
  Ly:= 1/(b*sqrt(pi));
  rx:= GetMaxX + 1;
  ry:= GetMaxY - 100;
  for Nx:=0 to GetMaxX do
  begin
    x:=(Nx-Nx0)*Lx/rx;
    if sqrt(x/b) < 10 then y:= Ly*exp(-sqrt(x/b)) else y:= 0;
    Ny:= Round(y*ry/Ly);
    Ari[Nx]:= Ny;
  end;
```

```
End;{ Disln1 }
```

```
Procedure HQ; { hi2 }
```

```
Begin
```

```
  sig:= 0;
  sig0:= 0;
  Nx:= Nx0 - 80;
```

```

for i:= 1 to 40 do
begin
  Nx:= Nx + 4;
  x:= (Nx - Nx0)*Lx/rx;
  if sqrt(x)/c1 < 10 then y:= c2*exp(-sqrt(x)/c1) else y:= 0;
  yr:= Ar[Nx] div Nd;
  yr:= Ly*yr/ry;
  if y > 0.001 then dp:= Round(abs(y-yr)*100/y) else dp:= - 1;
  sig:= sig + sqrt(y-yr);
  sig0:= sig0 + sqrt(y/100);
end;
sig:= sqrt(sig/40);
sig0:= sqrt(sig0/40);
End; {HQ}

```

BEGIN

```

Gd := Detect; InitGraph(Gd, Gm, "");
if GraphResult <> grOk then Halt(1);
SetGraphMode(2);
DirectVideo:= false;

```

```

Nx0:= GetMaxX;
Nym:= GetMaxY;
Nx0:= GetMaxX div 2;
Ny0:= 0;
rx:= GetMaxX + 1;
tau:= sqrt(Lx)/(2*sqrt(rx)*D);
t:= tau*n;

```

```

for k:= 1 to 640 do Ar[k]:= 0;
for k:= 1 to 640 do Ari[k]:= 0;
DisIn1;

```

```

SetLineStyle(1,0,1);
Line(0,GetMaxY,GetMaxX,GetMaxY);
Line(Nx0,0,Nx0,GetMaxY);
for Nx:=0 to GetMaxX do
begin
  x:=(Nx-Nx0)*Lx/rx;
  if sqrt(x/b) < 10 then y:= Ly*exp(-sqrt(x/b)) else y:= 0;
  Ny:= Round(y*ry/Ly);
  if Ny > 1 then Circle(Nx,GetMaxY-Ny,1);
end;
Writeln(' t = 0 ');
Writeln(' b =',b:9,' m');
Writeln(' D =',D:9,' m');

```

```
Writeln(' Lx = ',Lx,' m');
Writeln(' Ly = ',Ly:9,' 1/m');
Readln;

Nd:= 0;
repeat
  Nd:= Nd + 1;
  ClearDevice;
  GoToXY(1,1);
  Writeln(' n = ',n);
  Writeln(' t = ',t:9,' s');
  Writeln(' Nd = ',Nd);
  for k:=Ne to Nr do
    begin
      if Ari[k] > 1 then PutPixel(k,GetMaxY-Ari[k],15);
    end;
  Randomize;
  N0:= Ne;
  repeat
    k:= N0;
    for i:= 1 to Ari[k] do
      begin
        Nx:= N0;
        for j:=1 to n do
          begin
            if Random < 0.5 then Nx:= Nx - la else Nx:= Nx + la;
          end;
          PutPixel(Nx,GetMaxY-i,15);
          if (Nx>0) and (Nx<640) then Ar[Nx]:= Ar[Nx] + 1;
        end;
        N0:= N0 + 1;
      until N0 = Nr;
    ClearDevice;
    SetLineStyle(0,0,1);
    for i:=1 to GetMaxX do
      begin
        if Ar[i] > 1 then Line(i,GetMaxY,i,GetMaxY - Ar[i] div Nd);
      end;
    Delay(20000);

    ClearDevice;
    for i:=1 to GetMaxX do
      begin
        if Ar[i] > 1 then PutPixel(i,GetMaxY - Ar[i] div Nd,15);
      end;
    Delay(20000);
```

```

until KeyPressed;

Ly:= 1/(b*sqrt(pi));
rx:= GetMaxX + 1;
ry:= GetMaxY - 100;
c1:= (sqr(b) + 4*D*t);
c2:= 1/sqrt(pi*c1);
SetLineStyle(1,0,1);
Line(0,GetMaxY,GetMaxX,GetMaxY);
Line(Nx0,0,Nx0,GetMaxY);
for Nx:=0 to GetMaxX do
begin
  x:=(Nx-Nx0)*Lx/rx;
  if sqr(x)/c1 < 10 then y:= c2*exp(-sqr(x)/c1) else y:= 0;
  Ny:= Round(y*ry/Ly);
  if Ny > 1 then PutPixel(Nx,GetMaxY-Ny,15);
end;

GoToXY(1,1);
Writeln(' ');
Writeln(' ');
Writeln(' n = ',n);
Writeln(' tau = ',tau:9, ' s');
Writeln(' la = ',la, ' pixel');
Writeln(' la = ',Lx/rx:9, ' m');
Writeln(' b = ',b:9, ' m');
Writeln(' D = ',D:9, ' m');
Writeln(' Lx = ',Lx, ' m');
Writeln(' ');
Writeln(' t = ',t:9, ' s');
Writeln(' Nd = ',Nd);
Readln;
CloseGraph;

Write(' Print numbers ? (Y/N)...');
Readln(Ch);
if UpCase(Ch) = 'Y' then
begin
  ClrScr;
  Writeln(' ');
  Write('x (m) ');
  Write('y (1/m) ');
  Write('yr (1/m) ');
  Writeln('(y - yr)/y % ');

  Nx:= Nx0 - 80;

```

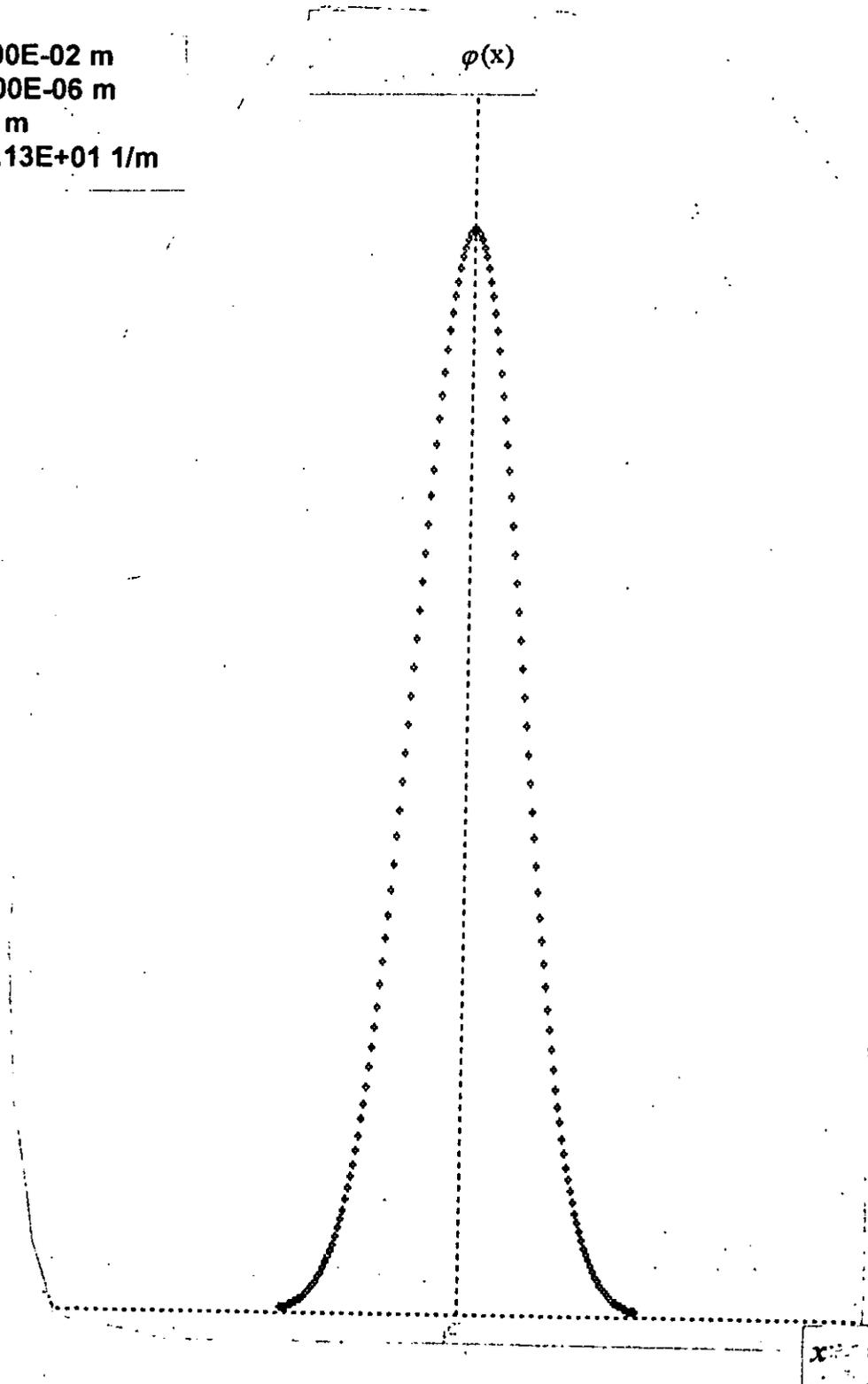
```
for i:= 1 to 20 do
begin
  Nx:= Nx + 8;
  x:= (Nx - Nx0)*Lx/rx;
  if sqrt(x)/c1 < 10 then y:= c2*exp(-sqrt(x)/c1) else y:= 0;
  yr:= Ar[Nx] div Nd;
  yr:= Ly*yr/ry;
  if y > 0.001 then dp:= Round(abs(y-yr)*100/y) else dp:= - 1;
  Write(x:9);
  Write('      ',y:9);
  Write('      ',yr:9);
  Writeln('      ',dp);
end;
HQ;
Write(' n = ',n);
Write('      t = ',t:9,' s');
Write('      Nd = ',Nd:2);
Writeln('      sigma =',sig:9,' 1/m');
Write('      ');
Write('      sigma0 =',sig0:9,' 1/m');
Readln;
end;
END.
```

ANEXO II

**GRÁFICOS E TABELAS: DISTRIBUIÇÃO INICIAL E DISTRIBUIÇÕES
FINAIS EM FUNÇÃO DO NÚMERO DE ENSAIOS (Nd)**

Distribuição Inicial

$t = 0$
 $b = 5.00E-02$ m
 $D = 8.00E-06$ m²/s
 $L_x = 1$ m
 $L_y = 1.13E+01$ 1/m



n = 500
tau = 1.53E-01 s
la = 1 pixel
la = 1.56E-03 m
b = 5.00E-02 m
D = 8.00E-06 (m²)/s
Lx = 1 m
t = 7.63E+01 s
Nd = 1

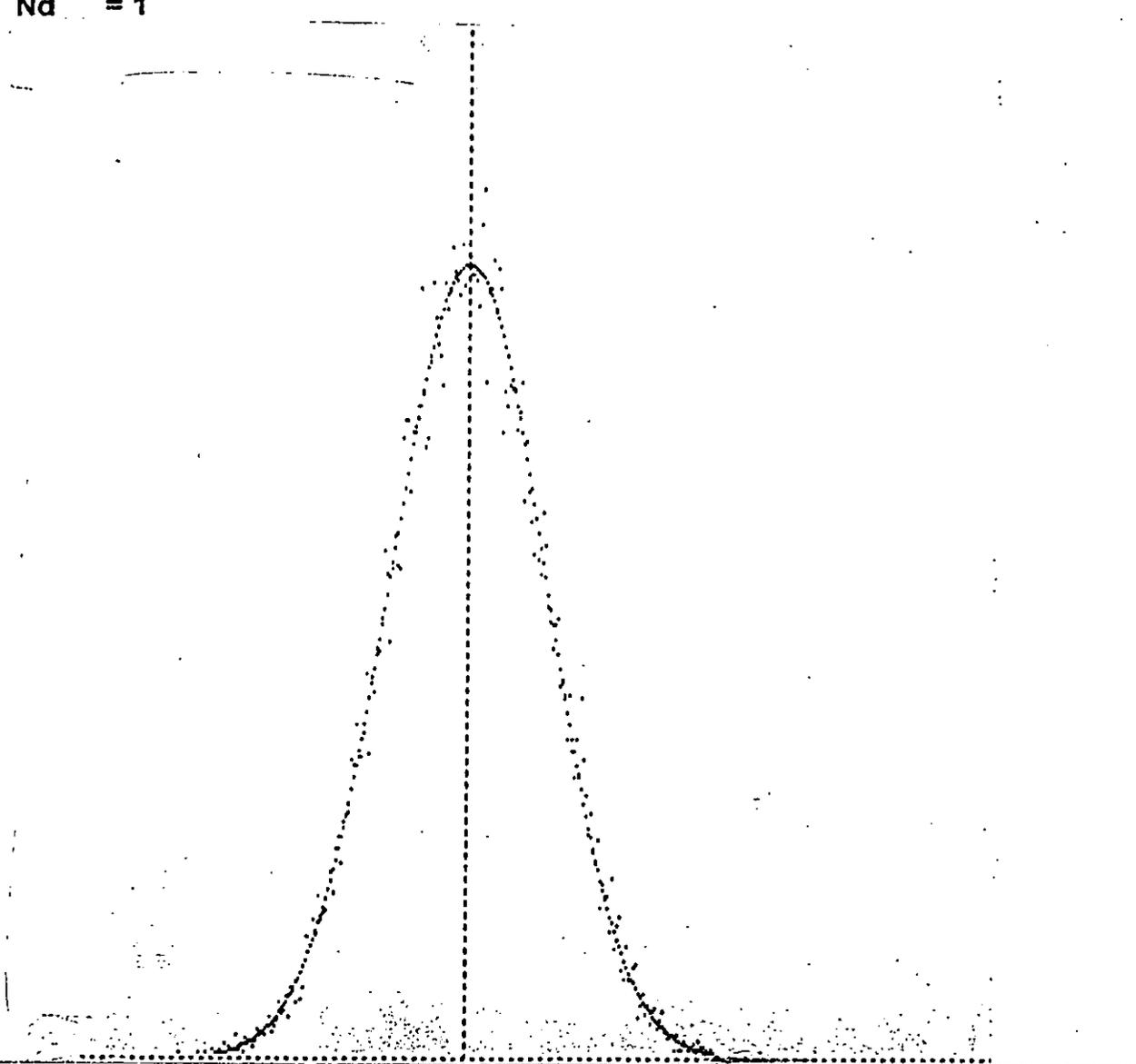
 $\rho(x,t)$ 

Tabela II-1 : Desvio padrão para 1 ensaio

x (m)	y (1/m)	Yr (1/m)	(Y - Yr)/Y	σ
-1.13E-01	6.20E-01	6.55E-01	6	6
-1.00E-01	1.06E+00	1.04E+00	2	2
-8.75E-02	1.70E+00	1.70E+00	0	0
-7.50E-02	2.57E+00	2.56E+00	0	0
-6.25E-02	3.64E+00	4.47E+00	23	23
-5.00E-02	4.84E+00	4.70E+00	3	3
-3.75E-02	6.04E+00	6.28E+00	4	4
-2.50E-02	7.07E+00	6.97E+00	1	1
-1.25E-02	7.78E+00	7.06E+00	9	9
0.00E+00	8.03E+00	7.92E+00	1	1
1.25E-02	7.78E+00	7.86E+00	1	1
2.50E-02	7.07E+00	6.88E+00	3	3
3.75E-02	6.04E+00	5.48E+00	9	9
5.00E-02	4.84E+00	5.03E+00	4	4
6.25E-02	3.64E+00	3.45E+00	5	5
7.50E-02	2.57E+00	2.41E+00	6	6
8.75E-02	1.70E+00	1.94E+00	14	14
1.00E-01	1.06E+00	9.53E-01	10	10
1.13E-01	6.20E-01	6.55E-01	6	6
1.25E-01	3.40E-01	3.87E-01	14	14
n = 500	t = 7.63E+01 s	Nd = 1		

sigma = 2.87E-01 1/m
 sigma0 = 4.76E-02 1/m

n = 500
tau = 1.53E-01 s
la = 1 pixel
la = 1.56E-03 m
b = 5.00E-02 m
D = 8.00E-06 (m²)/s
Lx = 1 m
t = 7.63E+01 s
Nd = 5

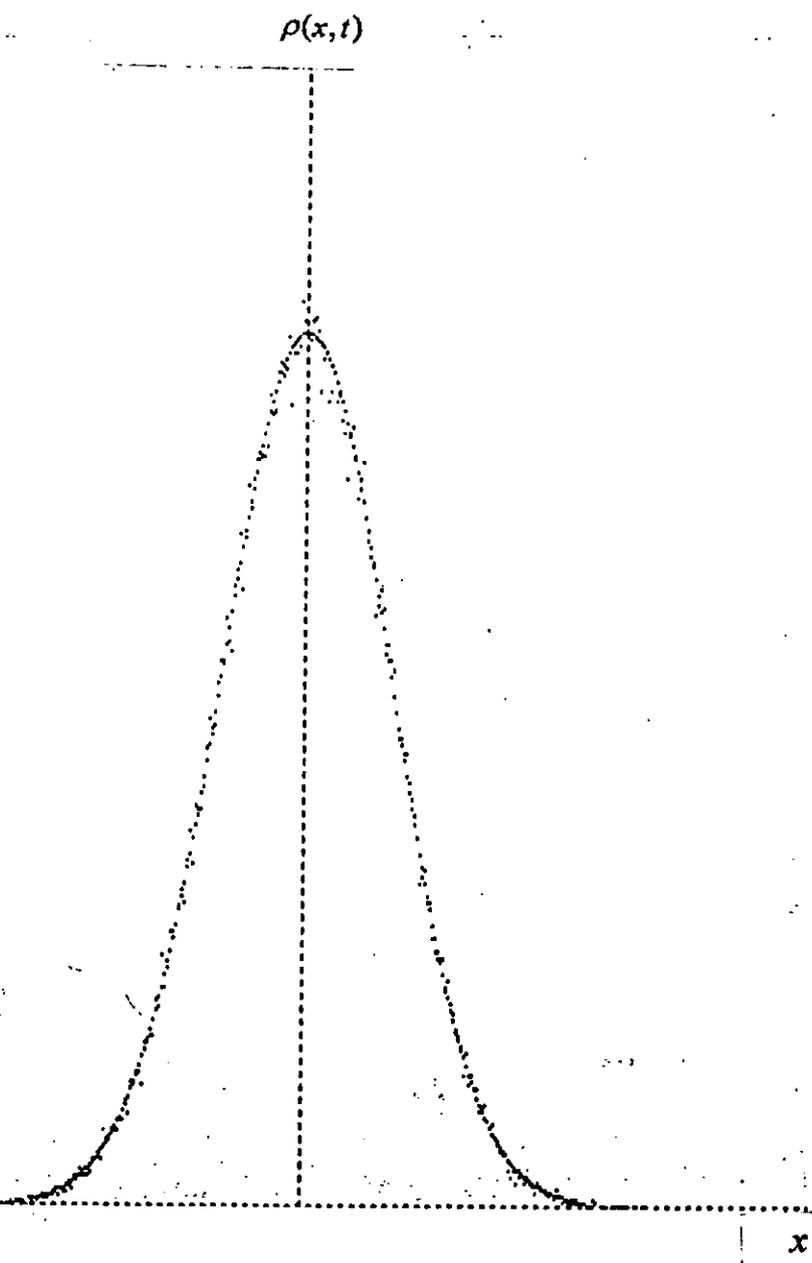
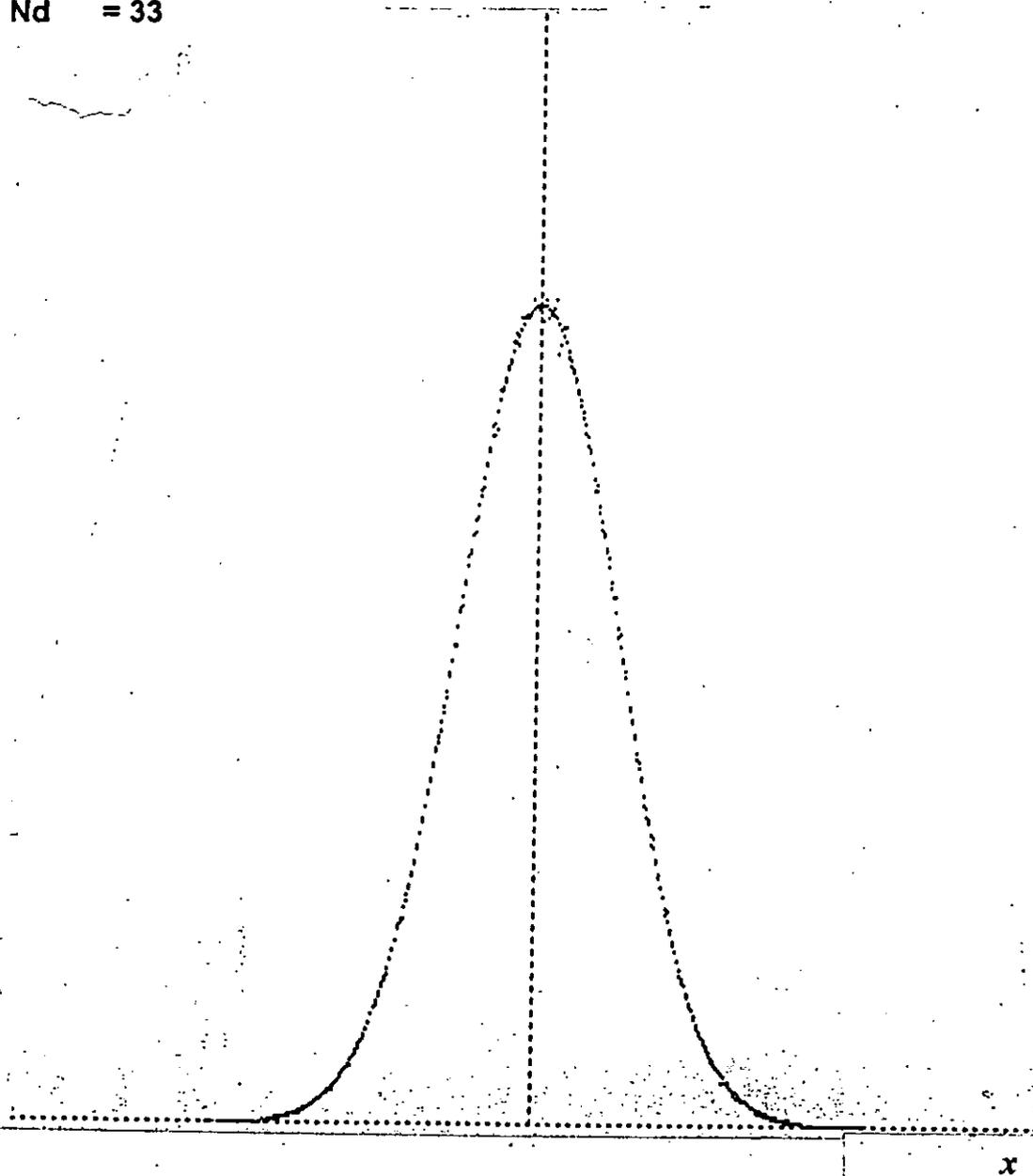


Tabela II-2 : Desvio padrão para 5 ensaios

x (m)	Y (1/m)	YI (1/m)	(Y - YI)/Y
-1.13E-01	6.20E-01	4.47E-01	28
-1.00E-01	1.06E+00	1.19E+00	12
-8.75E-02	1.70E+00	1.76E+00	3
-7.50E-02	2.57E+00	2.56E+00	0
-6.25E-02	3.64E+00	3.42E+00	6
-5.00E-02	4.84E+00	4.85E+00	0
-3.75E-02	6.04E+00	6.22E+00	3
-2.50E-02	7.07E+00	7.20E+00	2
-1.25E-02	7.78E+00	7.74E+00	0
0.00E+00	8.03E+00	8.07E+00	1
1.25E-02	7.78E+00	7.71E+00	1
2.50E-02	7.07E+00	6.94E+00	2
3.75E-02	6.04E+00	6.07E+00	1
5.00E-02	4.84E+00	4.76E+00	2
6.25E-02	3.64E+00	3.69E+00	1
7.50E-02	2.57E+00	2.71E+00	5
8.75E-02	1.70E+00	1.76E+00	3
1.00E-01	1.06E+00	1.10E+00	4
1.13E-01	6.20E-01	5.66E-01	9
1.25E-01	3.40E-01	3.27E-01	4
n = 500	t = 7.63E+01 s	Nd = 5	
			sigma = 1.13E-01 1/m
			sigma0 = 4.76E-02 1/m

$n = 500$
 $\tau = 1.53E-01 \text{ s}$
 $l_a = 1 \text{ pixel}$
 $l_a = 1.56E-03 \text{ m}$
 $b = 5.00E-02 \text{ m}$
 $D = 8.00E-06 \text{ (m}^2\text{)/s}$
 $L_x = 1 \text{ m}$
 $t = 7.63E+01 \text{ s}$
 $N_d = 33$

 $\rho(x,t)$ 

0.85

Tabela II-3 : Desvio padrão para 33 ensaios

x. (m)	Y (1/m)	Yr (1/m)	(Y - Yr)/Y %
-1.13E-01	6.20E-01	6.25E-01	1
-1.00E-01	1.06E+00	9.82E-01	7
-8.75E-02	1.70E+00	1.70E+00	0
-7.50E-02	2.57E+00	2.62E+00	2
-6.25E-02	3.64E+00	3.63E+00	0
-5.00E-02	4.84E+00	4.79E+00	1
-3.75E-02	6.04E+00	5.98E+00	1
-2.50E-02	7.07E+00	7.12E+00	1
-1.25E-02	7.78E+00	7.86E+00	1
0.00E+00	8.03E+00	8.01E+00	0
1.25E-02	7.78E+00	7.71E+00	1
2.50E-02	7.07E+00	7.12E+00	1
3.75E-02	6.04E+00	6.10E+00	1
5.00E-02	4.84E+00	4.82E+00	0
6.25E-02	3.64E+00	3.66E+00	1
7.50E-02	2.57E+00	2.62E+00	2
8.75E-02	1.70E+00	1.67E+00	2
1.00E-01	1.06E+00	1.10E+00	4
1.13E-01	6.20E-01	5.95E-01	4
1.25E-01	3.40E-01	3.57E-01	5
n = 500	t = 7.63E+01 s	Nd = 33	

sigma = 5.45E-02 1/m
sigma0 = 4.76E-02 1/m