

Caracterização de Propriedades Materiais Através da Análise do Movimento Browniano

Supervisor: Prof. Marcel Parolin Jackowski

Aluno: Luiz Fernando Oliveira Corte Real

17 de junho de 2008

1 Introdução

Movimento browniano é o tipo de movimento realizado por uma partícula imersa num fluido, desconsiderando-se as correntes deste. É composto de translações e rotações, e seu caminho, teoricamente, não tem tangente em nenhum ponto; a cada instante de tempo, a direção de deslocamento muda.

A base teórica do movimento é principalmente devido a um artigo de Einstein, publicado em 1905 [1]. Nele, o cientista previu o movimento de partículas suspensas em um líquido baseado na teoria cinética molecular e, utilizando mecânica estatística, desenvolveu uma fórmula para o coeficiente de difusão das partículas em movimento browniano. Com isso, relacionou o movimento browniano com propriedades materiais do fluido onde ele ocorre.

Atualmente, a ressonância magnética (RM) de difusão [2] possibilita a determinação do coeficiente de difusão de materiais, mas não suas propriedades físicas. Com base no coeficiente de difusão e com dados da simulação do movimento browniano em um certo meio, é possível estimar as propriedades físicas do material em análise na ressonância de forma não-invasiva.

2 Objetivos

O primeiro objetivo da pesquisa será desenvolver um *software* capaz de simular o movimento browniano de materiais arbitrários, dados parâmetros como peso molecular, concentração, temperatura, dentre outros. Este *software* deverá ser capaz de simular o movimento com restrições físicas arbitrárias, como restringi-lo ao interior de uma esfera, um cubo ou a uma superfície, e deverá ser possível visualizar a simulação em tempo real.

Com a simulação, os objetivos são determinar o coeficiente de difusão em diferentes pontos no interior da estrutura, validando o cálculo dos coeficientes pelo *scanner* de ressonância magnética, e relacionar o coeficiente de difusão com a viscosidade do material e, conseqüentemente, com seu módulo de Young.

3 Materiais e métodos

3.1 Física

Para derivar o coeficiente de difusão do material com base na simulação, serão utilizadas a primeira lei de Fick e a equação para o deslocamento quadrático médio de Einstein.

A primeira lei de Fick relaciona o fluxo de partículas J com o gradiente molar de concentração $\nabla\phi$: $J = -D\nabla\phi$, onde D representa o coeficiente de difusão.

Já a equação de Einstein relaciona o deslocamento quadrático médio $\langle x^2 \rangle$ com o coeficiente de difusão D e o tempo t decorrido desde o estado inicial do sistema: $\langle x^2 \rangle = 6Dt$.

Com base nos dados obtidos e no coeficiente de difusão calculado, será aplicada a lei de Stokes-Einstein para derivar a viscosidade do material. Esta lei, juntamente com a primeira lei de Fick, permite derivar a seguinte relação entre o coeficiente de difusão e a viscosidade η do meio: $D = \frac{kT}{6\pi\eta a}$, onde T é a temperatura e k é a constante de Boltzmann.

Para gerar um estado inicial compatível com a realidade, será utilizada a distribuição de Maxwell [3] para estimar um módulo de velocidade inicial para cada molécula com base na temperatura fornecida.

A distribuição de Maxwell é dada por $n = 4\pi N e^{-\frac{mv^2}{2kT}} v^2 (\frac{m}{2\pi kT})^{1.5}$, onde n é o número de moléculas esperado para a temperatura T numa velocidade v , N é o número total de moléculas do meio considerado, m é a massa de cada partícula e k é a constante de Boltzmann.

Como a distribuição de Maxwell fornece o número de moléculas numa determinada velocidade, para estimar a velocidade de uma molécula é necessário calcular o inverso desta distribuição e integrá-lo. Como esta função não admite uma inversa explícita, é necessário fazer tanto a inversão como a integração de modo numérico.

3.2 Simulação

Para simular o movimento browniano, será desenvolvido um programa em C++, utilizando as bibliotecas GTK [4], VTK [5] e ODE [6]. Será possível determinar os parâmetros numéricos da simulação através da interface, bem como o meio de difusão, que poderá ser definido por um programa de modelagem tridimensional. Com base nos dados fornecidos, será feita a simulação do movimento, que será exibida em tempo real.

4 Resultados preliminares

Atualmente, o programa está em fase inicial de desenvolvimento. Já é possível simular o movimento browniano de partículas esféricas dentro de um cubo ou uma esfera. O programa conta com uma interface básica, que permite definir o meio de difusão e suas propriedades físicas, o número de partículas, seu raio, sua cor de visualização (antes e após uma colisão com outra molécula) e o tempo de simulação. Também é possível escolher desenhar ou não as trajetórias de cada molécula. Uma imagem do programa em funcionamento pode ser vista na Figura 1.

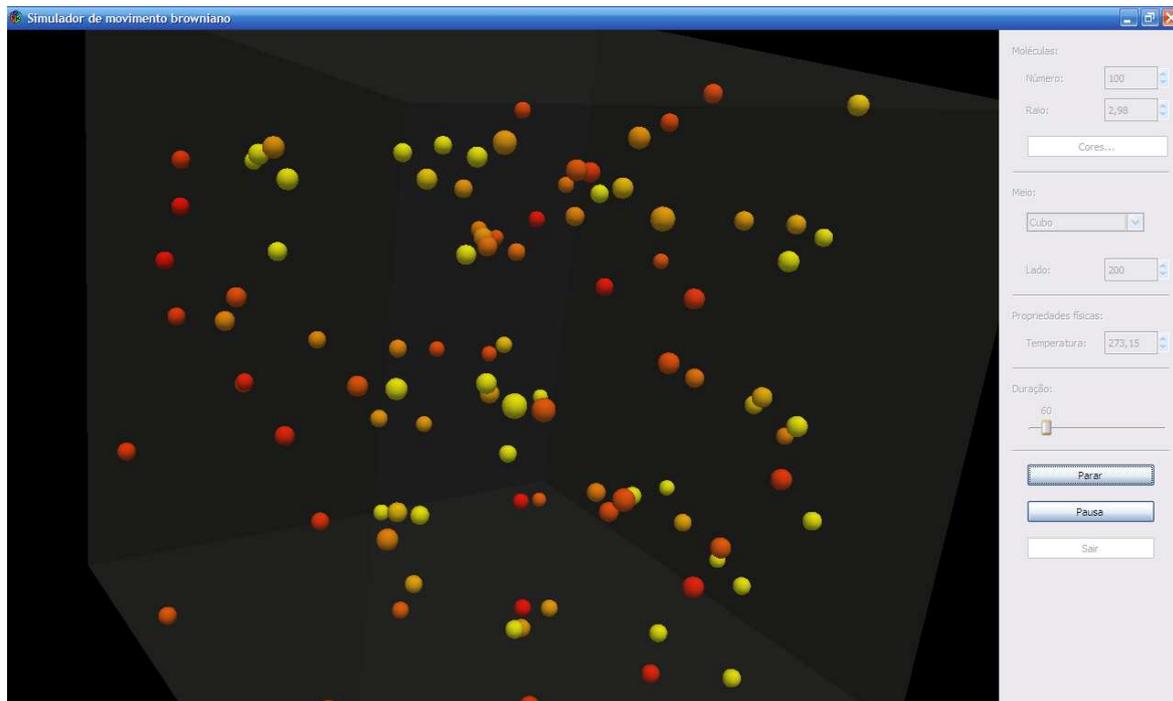


Figura 1: Tela do programa executando uma simulação de movimentação molecular. A variação da cor de uma molécula mostra o tempo decorrido desde a última colisão dela com alguma outra (quanto mais vermelho, mais recente).

5 Plano de trabalho

A partir do que foi feito, deseja-se:

1. Implementar o movimento browniano sem restrições
2. Implementar restrições
3. Estimar propriedades materiais
4. Validar simulação com imagens de RM de difusão

Imagens RM de difusão serão cedidas pelo Instituto de Radiologia do Hospital das Clínicas de SP (InRAD-HC), através da colaboração com o Prof. Edson Amaro Júnior.

Para a validação serão utilizados “phantoms” constituídos de gel PVA (álcool polivinil), cujas propriedades mecânicas podem ser customizadas. Isto se dá por meio do ajuste do número de ciclos de congelamento/aquecimento e também manipulando o grau de hidrólise do gel inicial. Estes “phantoms” serão úteis para validar os resultados da simulação, uma vez que eles emitem sinal de RM.

5.1 Cronograma esperado

Para cumprir o plano de trabalho, é necessário implementar as seguintes funcionalidades:

1. Coleta e visualização de estatísticas da simulação
2. Simulação com diferentes tipos de moléculas
3. Difusão em meios arbitrários

O cronograma previsto para sua implementação é:

1. Junho e Julho de 2008
2. Julho e Agosto de 2008
3. Agosto, Setembro e Outubro de 2008

Além da implementação de funcionalidades, é necessária a análise dos dados obtidos da simulação, que deverá ocorrer entre Outubro e Novembro de 2008.

6 Estrutura esperada da monografia

Espera-se que a monografia tenha a seguinte estrutura para a parte técnica:

- **Introdução:** descrição do problema abordado e suas motivações; comentários sobre as dificuldades para solucioná-lo.
- **Conceitos e tecnologias estudadas:** descrição do movimento browniano e das ferramentas que já foram e que ainda serão utilizadas para implementar a simulação.
- **Atividades realizadas:** relatório da produção e da refatoração do código e do estudo dos conceitos envolvidos no problema.
- **Resultados e produtos obtidos:** apresentação do produto final através de telas capturadas e diagramas UML; análise dos resultados da simulação realizada.
- **Conclusões:** comentários sobre o programa produzido e os resultados obtidos.

Referências

- [1] EINSTEIN, A. Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen. *Ann. Phys.* 17, p. 549-560, 1905.
- [2] LE BIHAN, D. *et. al.* Imaging of diffusion and microcirculation with gradient sensitization: design, strategy, and significance. *J Magn Reson Imaging*, 1:7-28, 1991.
- [3] BERTULANI, C. A. *Teoria Cinética dos Gases*. 2008. Disponível em: <http://www.if.ufrj.br/teaching/fis2/teoria_cinetica/teoria_cinetica.html>. Acesso em: 10 abril 2008.

- [4] KRAUSE, A. *Foundations of GTK+ Development: Expert's Voice in Open Source*. Berkeley: Apress, 2007.
- [5] KITWARE INC. *The VTK's User's Guide, Version 4.4*. New York, 2004.
- [6] SMITH, R. *Open Dynamics Engine: v0.5 User Guide*. 2006. Disponível em: <<http://ode.org/ode-latest-userguide.pdf>>. Acesso em: 6 março 2008.