

# Caracterização de Propriedades Materiais Através da Análise do Movimento Browniano

Luiz Fernando Oliveira Corte Real

Supervisor: Prof. Dr. Marcel Parolin Jackowski  
Instituto de Matemática e Estatística  
Universidade de São Paulo

17 de Novembro de 2008

- 1 Introdução
  - Movimento Browniano
  - Difusão
  - Estimação de Propriedades Materiais
  
- 2 Desenvolvimento
  - Arquitetura
  - Bibliotecas Utilizadas
  
- 3 Resultados
  - Eficiência
  - Qualidade
  
- 4 Futuro

# O que é?

- Agitação molecular

# O que é?

- Agitação molecular
- Depende de tamanho, massa e forma das moléculas

# O que é?

- Agitação molecular
- Depende de tamanho, massa e forma das moléculas
- Extremamente irregular

# O que é?

- Agitação molecular
- Depende de tamanho, massa e forma das moléculas
- Extremamente irregular
- Origem da difusão

# Difusão e Medicina

- Diagnóstico por meio de DW-MRI (Diffusion-weighted Magnetic Resonance Imaging)

# Difusão e Medicina

- Diagnóstico por meio de DW-MRI (Diffusion-weighted Magnetic Resonance Imaging)
- DW-MRI permite medir coeficiente de difusão



# Difusão e Medicina

- Diagnóstico por meio de DW-MRI (Diffusion-weighted Magnetic Resonance Imaging)
- DW-MRI permite medir coeficiente de difusão
  - Pouca precisão

# Difusão e Medicina

- Diagnóstico por meio de DW-MRI (Diffusion-weighted Magnetic Resonance Imaging)
- DW-MRI permite medir coeficiente de difusão
  - Pouca precisão
  - Não dá para estimar propriedades materiais

# Difusão e Medicina

- Diagnóstico por meio de DW-MRI (Diffusion-weighted Magnetic Resonance Imaging)
- DW-MRI permite medir coeficiente de difusão
  - Pouca precisão
  - Não dá para estimar propriedades materiais
- Com maior precisão:
  - Melhor diagnóstico

# Difusão e Medicina

- Diagnóstico por meio de DW-MRI (Diffusion-weighted Magnetic Resonance Imaging)
- DW-MRI permite medir coeficiente de difusão
  - Pouca precisão
  - Não dá para estimar propriedades materiais
- Com maior precisão:
  - Melhor diagnóstico
  - Validação de teorias

# Difusão e Medicina

- Diagnóstico por meio de DW-MRI (Diffusion-weighted Magnetic Resonance Imaging)
- DW-MRI permite medir coeficiente de difusão
  - Pouca precisão
  - Não dá para estimar propriedades materiais
- Com maior precisão:
  - Melhor diagnóstico
  - Validação de teorias
  - Novos métodos de diagnóstico

# Coeficiente de difusão

- Pode ser estimado a partir do movimento browniano!

# Coeficiente de difusão

- Pode ser estimado a partir do movimento browniano!
- Primeira lei de Fick:

$$J = -D\nabla\phi \quad (1)$$

# Coeficiente de difusão

- Pode ser estimado a partir do movimento browniano!
- Primeira lei de Fick:

$$J = -D\nabla\phi \quad (1)$$

- Equação de Einstein:

$$\langle x^2 \rangle = 6Dt \quad (2)$$



# Equação de Stokes-Einstein

$$D = \frac{kT}{6\pi\eta a} \quad (3)$$

# Equação de Stokes-Einstein

$$D = \frac{kT}{6\pi\eta a} \quad (3)$$

- Permite estimar viscosidade ( $\eta$ ) a partir do coeficiente de difusão

# Equação de Stokes-Einstein

$$D = \frac{kT}{6\pi\eta a} \quad (3)$$

- Permite estimar viscosidade ( $\eta$ ) a partir do coeficiente de difusão
- Viscosidade  $\Rightarrow$  Elasticidade

# Arquitetura

- Orientação a objetos

# Arquitetura

- Orientação a objetos
- Padrões de projeto
  - *Abstract Factory*
  - *Observer*
  - *Model-View-Controller*

# Práticas de Desenvolvimento

- Influência de XP (eXtreme Programming)

# Práticas de Desenvolvimento

- Influência de XP (eXtreme Programming)
- Testes unitários

# Práticas de Desenvolvimento

- Influência de XP (eXtreme Programming)
- Testes unitários
- Projeto incremental



# Bibliotecas

- GTK: Interface gráfica
- VTK: Visualização tridimensional
- vtkmml: Integração entre GTK e VTK

# Bibliotecas

- GTK: Interface gráfica
- VTK: Visualização tridimensional
- vtkmm: Integração entre GTK e VTK
- GTKmm: Orientação a objetos para o GTK

# Bibliotecas

- GTK: Interface gráfica
- VTK: Visualização tridimensional
- vtkmm: Integração entre GTK e VTK
- GTKmm: Orientação a objetos para o GTK
- CppUnit: Testes unitários

# Bibliotecas

- GTK: Interface gráfica
- VTK: Visualização tridimensional
- vtkmm: Integração entre GTK e VTK
- GTKmm: Orientação a objetos para o GTK
- CppUnit: Testes unitários
- mtrand: Geração de números pseudo-aleatórios

# Bibliotecas

- GTK: Interface gráfica
- VTK: Visualização tridimensional
- vtkmm: Integração entre GTK e VTK
- GTKmm: Orientação a objetos para o GTK
- CppUnit: Testes unitários
- mtrand: Geração de números pseudo-aleatórios
- Open Dynamics Engine (ODE): Dinâmica newtoniana

# Execução

- Simulação em “tempo real”

# Execução

- Simulação em “tempo real”
- Até 200 moléculas ao mesmo tempo

# Execução

- Simulação em “tempo real”
- Até 200 moléculas ao mesmo tempo
- Desenho de trajetórias ativado



# Modelo

- Moléculas esféricas rígidas

# Modelo

- Moléculas esféricas rígidas
- Colisão rígida perfeitamente elástica

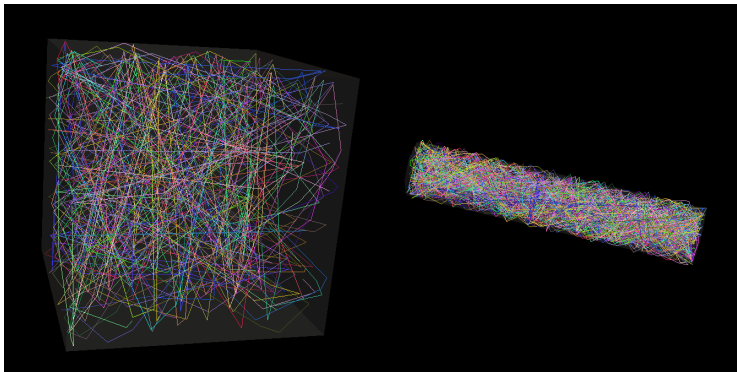
# Modelo

- Moléculas esféricas rígidas
- Colisão rígida perfeitamente elástica
- Ausência de forças inter e intra-moleculares

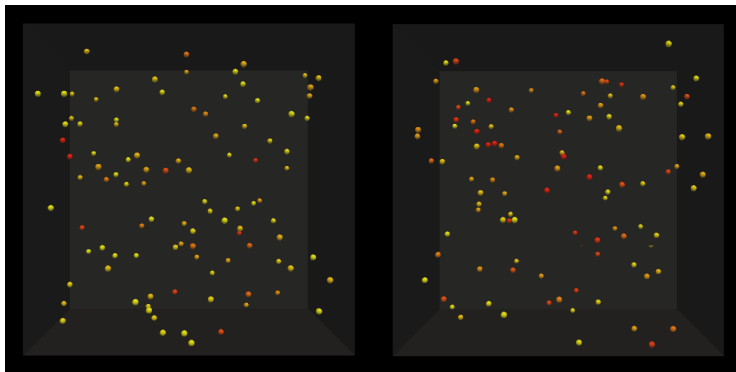
# Modelo

- Moléculas esféricas rígidas
- Colisão rígida perfeitamente elástica
- Ausência de forças inter e intra-moleculares
- Ausência de forças externas

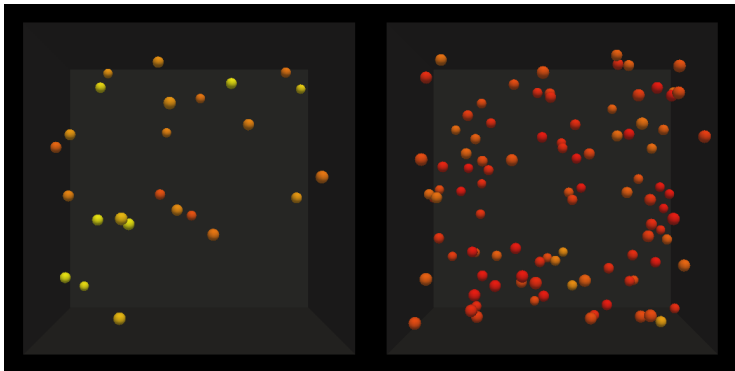
## Mas...



# Mas...



Mas...



# Software

- Suporte a diferentes tipos de molécula



## Software

- Suporte a diferentes tipos de molécula
- Ambientes de difusão arbitrários

## Software

- Suporte a diferentes tipos de molécula
- Ambientes de difusão arbitrários
- Armazenamento de parâmetros de simulação

## Software

- Suporte a diferentes tipos de molécula
- Ambientes de difusão arbitrários
- Armazenamento de parâmetros de simulação
- Internacionalização

# Modelo

- Forças inter-moleculares
  - Potencial de Lennard-Jones

# Modelo

- Forças inter-moleculares
  - Potencial de Lennard-Jones
- Forças intra-moleculares
  - Força de Coulomb

# Modelo

- Forças inter-moleculares
  - Potencial de Lennard-Jones
- Forças intra-moleculares
  - Força de Coulomb
- Validação do modelo

# Modelo

- Forças inter-moleculares
  - Potencial de Lennard-Jones
- Forças intra-moleculares
  - Força de Coulomb
- Validação do modelo
  - Validação para autodifusão da água

# Modelo

- Forças inter-moleculares
  - Potencial de Lennard-Jones
- Forças intra-moleculares
  - Força de Coulomb
- Validação do modelo
  - Validação para autodifusão da água
  - Validação por meio de valores obtidos com DW-MRI



# Modelo

- Forças inter-moleculares
  - Potencial de Lennard-Jones
- Forças intra-moleculares
  - Força de Coulomb
- Validação do modelo
  - Validação para autodifusão da água
  - Validação por meio de valores obtidos com DW-MRI
- Estimação de propriedades materiais

# Agradecimentos

Renato Borges (Instituto de Física - USP)

# Agradecimentos

Renato Borges (Instituto de Física - USP)

Choukri Mekkaoui (Yale University - EUA)

# Agradecimentos

Renato Borges (Instituto de Física - USP)

Choukri Mekkaoui (Yale University - EUA)

CNPq