SOLUÇÕES PARA A EQUAÇÃO DE DIFUSÃO NÃO LINEAR NA PRESENÇA DE FORÇAS EXTERNAS

Dara Marin (PIBIC), Ervin Kaminski Lenzi (Orientador), e-mail: ervinklenzi@gmail.com.

Universidade Estadual de Ponta Grossa/Departamento de física.
Física (1.05.00.00-6), Física Estatística e Termodinâmica (1.05.01.04-5)

Palavras-chave: equação de difusão, equação de Fokker-Planck, difusão não linear.

Resumo

Através da observação do movimento desordenado e incessante que grãos de pólen realizavam quando flutuavam sobre a água, o botânico Robert Brown descobriu o que mais tarde passou a ser conhecido como movimento Browniano, um marco que deu início ao estudo de caminhantes aleatórios e processos difusivos. Devido ao grande número de aplicações relacionadas com este fenômeno, torna-se interessante o estudo aprofundado das equações usadas na descrição deste. Assim, estudamos casos da equação de difusão envolvendo termos não lineares, que mudam completamente a configuração e distribuição do sistema ao longo do tempo, destoando da familiar solução Gaussiana encontrada para sistemas descritos por processos tipicamente Markovianos.

Introdução

O estudo dos processos difusivos teve início através de observações realizadas pelo botânico Robert Brown em 1827. Ele percebeu que quando partículas de pólen estavam suspensas em água, estas realizavam um movimento contínuo, desordenado e incessante.

Outro cientista, chamado Gouy também estudou o movimento Browniano, e chegou às seguintes conclusões (COFFEY; KALMYKOV,2004):

- O movimento é muito irregular;
- As partículas sofrem movimentos de rotação e translação e a trajetória aparenta não ter tangente;
- O movimento nunca cessa;
- As partículas movem-se independentemente, mesmo quando estão muito próximas umas das outras;
- Quanto menor as partículas, mais movimento estas realizam;
- A composição das partículas não afeta o movimento;
- Quanto menos viscoso o fluído, mais ativo é o movimento realizado pelas partículas;
- Quanto maior a temperatura, mais intenso é o movimento;

Uma explicação satisfatória para este fenômeno foi somente dada por A. Einstein, em 1905. Einstein mostrou que tal movimento era dado devido a interações moleculares do líquido com as pequenas partículas de pólen e tinha como característica o deslocamento quadrático médio em relação à origem ser proporcional ao tempo, ou seja, $< (x - < x >)^2 > \sim t$, indicando um processo Markoviano. Processos regidos por essa característica caracterizam o que

conhecemos como difusão usual, situações que diferem deste comportamento nos conduzem a uma difusão anômala.

Revisão da literatura

Fenômenos difusivos são processos nos quais há transporte de matéria de uma parte de um sistema para outra devido a interações moleculares de natureza aleatória. (CRANK, 1975).

Um exemplo de processo difusivo é dado por gotas de corante sendo despejadas na água. Após certo tempo, devido à interação entre as moléculas do corante e da água, o corante encontra-se igualmente distribuído por todo o recipiente, alcançando o equilíbrio.

Estudando o movimento Browniano de forma minuciosa, Einstein, em 1905, conseguiu chegar a uma equação que descrevia como as partículas se moveriam no meio e, embora não fosse possível determinar para onde exatamente as partículas estavam indo, era possível determinar seu deslocamento médio, ou seja, o quanto se afastavam da origem.

Einstein também observou que tal fenômeno se tratava de um processo difusivo, dessa forma, a equação encontrada por ele levou o nome de equação da difusão e se apresenta na seguinte forma:

$$\frac{\partial f(x,t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 f(x,t)}{\partial x^2} \tag{1}$$

Onde D é o coeficiente de difusão e f é a função que mostra como a concentração da substância se distribui no espaço e no tempo.

Resultados e Discussão

A equação da difusão generalizada para quaisquer coordenadas é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\boldsymbol{r},t) = D\nabla^2\rho(\boldsymbol{r},t), \tag{2}$$

onde ρ é a densidade da substância que está sofrendo o processo de difusão e D é o coeficiente de difusão (característica do meio).

Com base nisso, alguns casos especiais envolvendo equações não lineares tem sido estudados. Termos de fontes externas também foram incorporados. O primeiro caso de interesse foi dado por uma equação da difusão modificada apenas por uma potência ν, de forma que a equação não é mais linear:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x,t) = D\frac{\partial^2}{\partial x^2}\rho^{\nu}(x,t) \tag{3}$$

Para resolver a equação (3) para $\rho(x,t)$, vamos supor que a solução tenha a forma de uma distribuição de Tsallis (Tsallis,1996)

$$\rho(x,t) = \frac{1}{Z(t)}(1-(1-q)\beta(t)x^2)^{\frac{1}{1-q}}\ , \tag{4}$$

com as funções $\beta(t)$ e $Z(t)$ sendo funções genéricas a serem determinadas. Particularmente, para o caso em que temos uma condição inicial do tipo $\rho(x,0) = \delta(x)$, encontramos que

$$Z(t) = \left(\frac{1}{C_1 t(q+3)}\right)^{\frac{1}{q-3}} \quad e \quad \beta(t) = \frac{Z(t)^{1-q}}{2Dt(q-3)(q-2)}\ , \tag{5}$$

Outro caso estudado é baseado na equação de Fokker-Planck linear com o termo de força:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x,t) = -\frac{\partial}{\partial x}[F(x,t)\rho(x,t)] + D\frac{\partial^2}{\partial x^2}\rho(x,t)\ . \tag{6}$$

O termo de força considerado se refere à uma força do tipo restauradora dada por $F(x,t) = -k(t)x$ que atua sobre o sistema. Supõem-se solução na forma

$$\rho(x,t) = \frac{1}{Z(t)}\exp(-\beta(t)x^2) \ . \qquad (7)$$

Observando que para este caso a solução tem a forma de uma distribuição de Boltzmann – Gibbs. A solução encontrada foi:

$$\beta(t) = \frac{2ke^{2k(t+c)}}{1+4De^{2k(t+c)}} \quad e \quad Z(t) = e^{-kt}j\left(4De^{2k(t+c)}+1\right)^{\frac{1}{2}} \qquad (8)$$

onde *C* e *j* são constantes a serem determinadas através de condições iniciais.

Outra situação de interesse estudada é um caso onde ρ depende, além de x e t, de um fator v associado à velocidade:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x,v,t) = -v\frac{\partial}{\partial x}\rho(x,v,t) - \frac{F(x)}{m}\frac{\partial}{\partial v}\rho(x,v,t) + \gamma\frac{\partial}{\partial v}[v\rho(x,v,t)] + D\frac{\partial^2}{\partial v^2}[\rho^{\nu}(x,v,t)\,] \ . \qquad (9)$$

Supomos uma solução na forma

$$\rho(x,v,t) = \frac{1}{Z(t)}(1-(1-q)(\beta_1(t)v^2+\beta_2(t)vx+\beta_3(t)x^2)^{\frac{1}{1-q}} \ . \qquad (10)$$

Substituindo a equação (10) na equação (9) e realizando alguns cálculos, chegamos a um sistema de equações diferenciais parciais acoplado:

$$\begin{aligned} -\frac{\partial\beta_1}{\partial t} &= -\beta_2 + 2\gamma\beta_1 - D(4Z^{q-1}\beta_1^2)(2-q) \\ \frac{\partial\beta_2}{\partial t} &= -2\beta_3 + \frac{2K(t)\beta_1}{m} + \gamma\beta_2 - D(8Z^{q-1}\beta_1\beta_2)(2-q) \\ \frac{\partial\beta_3}{\partial t} &= \frac{K(t)\beta_2}{m} - D(Z^{q-1}\beta_2^2)(2-q) \\ \frac{1}{Z}\frac{dZ}{dt} &= -\gamma + D(2-q)(2\beta_1)Z^{q-1} \end{aligned} \qquad (11)$$

Encontrar uma solução analítica para este sistema de equações é desafiador e métodos computacionais devem ser utilizados caso a forma final da solução para os fatores β e Z sejam necessários.

Outro caso de interesse estudado é dado pela equação

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x,t) = -\frac{\partial}{\partial x}\{k_\alpha x|x|^{\alpha-1}\rho(x,t)^{\gamma}\} + D\frac{\partial^2}{\partial x^2}[\rho(x,t)]^{\nu} \ , \qquad (12)$$

cuja solução pode der do tipo

$$\rho(x,t) = \frac{1}{\Phi(t)}P(z) \qquad (13)$$

com $z = x/\Phi(t)$.

Substituindo a equação (13) na equação (12), após alguns cálculos é possível mostrar que a equação acima pode ser simplificada nas seguintes equações:

$$\begin{aligned} -k\frac{d}{dz}\left(zP(z)\right) &= D\frac{d^2}{dz^2}\left(P^{\nu}(z)\right) - k\nu\frac{d}{dz}\left(z|z|^{\alpha-1}P^{\gamma}(z)\right). \\ \Phi^{\nu}(t)\frac{d}{dt}\Phi(t) &= k. \end{aligned} \qquad (14)$$

onde temos um vínculo entre os expoentes presente na equação para que a equação (14) seja verificada. Um destes vínculos implica em $\gamma = 1+\nu+\alpha$ e $\gamma = \nu$, que nos leva a

$$-kz = \frac{\nu D}{\nu - 1}\frac{d}{dz}(P(z))^{\nu-1} - kz|z|^{-2}(P(z))^{\nu-1}. \quad (15)$$

Métodos matemáticos podem ser aplicados para resolver a equação (15), nos dando como solução

$$P(z) = |z|^{\frac{k_\alpha}{D\nu}}\left(1 - \frac{k(\nu-1)}{2D\nu - k\nu + k}|z|^{2-\frac{k_\alpha}{D\nu}(\nu-1)}\right)^{\frac{1}{\nu-1}} . \quad (16)$$

Outro o vínculo utilizado foi $\gamma = 1 + \nu + \alpha$ e $\gamma = 1$, resultando

$$-kzP(z) = D\frac{d}{dz}(P(z))^{\nu} - kz|z|^{-1-\nu}P(z) \quad , \quad (17)$$

A forma final da solução encontrada é:

$$P(z) = \left[1 - (\nu-1)\left(\frac{k}{2D\nu}z^2 + \frac{k_\alpha}{D\nu}ln_\nu z\right)\right]^{\frac{1}{\nu-1}}. \quad (18)$$

com $ln_\nu z = (z^{\nu-1} - 1)/(\nu - 1)$.

Conclusões

A descoberta do movimento Browniano foi, por si só, uma grande descoberta, mas a mente aguçada de cientistas de renome, como Albert Einstein, estabeleceu uma conexão de tal fenômeno com processos chamados difusivos.

A descrição matemática de fenômenos difusivos é dada por equações diferenciais parciais, que podem conter termos de força externa, não linearidade, entre outros, de forma que nem sempre soluções analíticas possam ser encontradas, devido à forma altamente complexa que tais equações podem assumir, envolvendo muitas vezes sistemas de equações acopladas.

Diversos casos de difusão foram estudados durante o projeto, principalmente os casos governados por equações de Fokker-Planck não lineares. Para resolver tais equações, foram supostas soluções que obedecessem a uma distribuição de Tsallis e, em alguns casos, alguns vínculos precisaram ser estabelecidos para que soluções analíticas fossem encontradas. Para cada vínculo estabelecido, um novo caso, originado da mesma equação pôde ser estudado.

Agradecimentos

Ao CNPq pelo suporte financeiro.

Referências

CRANK, John et al. **The mathematics of diffusion**. Oxford university press, 1979.

COFFEY, William T.; KALMYKOV, Yuri P. **The Langevin equation: with applications to stochastic problems in physics, chemistry and electrical engineering**. 2004.

MARIN, D. et al. A nonlinear Fokker–Planck equation approach for interacting systems: Anomalous diffusion and Tsallis statistics. **Physics Letters A**, v. 382, n. 29, p. 1903-1907, 2018.

RISKEN, Hannes. Fokker-planck equation. In: **The Fokker-Planck Equation**. Springer, Berlin, Heidelberg, 1996. p. 63-95.

TSALLIS, Constantino; BUKMAN, Dirk Jan. Anomalous diffusion in the presence of external forces: Exact time-dependent solutions and their thermostatistical basis. **Physical Review E**, v. 54, n. 3, p. R2197, 1996.