EQUAÇÕES DE DIFUSÃO: EXTENSÕES E SOLUÇÕES

Lucas Beraldo Bueno (PIC/UEM), Ervin Kaminski Lenzi (Orientador). E-mail: ervinklenzi@gmail.com

Universidade Estadual de Maringá, Centro de Ciências Exatas, Maringá, PR.

Área e subárea do conhecimento: Física Geral / Física Estatística e Termodinâmica

Palavras-chave: equação de Fokker–Planck; difusão anômala; movimento intermitente.

RESUMO

Este trabalho apresenta uma análise de modelos de difusão e de algumas de suas extensões, a partir da equação de Fokker–Planck para o movimento browniano e avançando para processos sujeitos a confinamento, alternância entre estados difusivos e direcionados e memória temporal. As transformadas de Fourier e de Laplace são empregadas para obter propagadores, expressões para os momentos e comportamentos assintóticos. São discutidos quatro casos: difusão livre com coeficiente constante, difusão com coeficiente dependente do tempo, processo de Ornstein–Uhlenbeck e transporte intermitente com um estado difusivo e dois estados direcionados. Em seguida, o modelo intermitente é generalizado por meio da derivada fracionária temporal de Caputo. Para a dinâmica ordinária, demonstra-se que o aumento do parâmetro associado ao transporte direcionado amplia o coeficiente de difusão efetivo, mas não altera o caráter assintoticamente normal do processo. Na generalização fracionária, o segundo momento obedece à lei de potência de expoente α, com $0 < \alpha < 1$, o que caracteriza subdifusão.

INTRODUÇÃO

Em 1801, o botânico escocês Robert Brown integrou uma expedição à Austrália com o objetivo de estudar e catalogar a flora da região. Anos mais tarde, em 1827, ao examinar ao microscópio partículas contidas em grãos de pólen suspensos em água, Brown observou um movimento contínuo, irregular e aparentemente aleatório (BROWN, 1828). Ele verificou posteriormente que partículas provenientes de materiais orgânicos e inorgânicos apresentavam comportamento semelhante, afastando a hipótese de que o fenômeno estivesse necessariamente associado à atividade vital (BROWN, 1828). Em 1905, Albert Einstein desenvolveu uma descrição estatística do movimento de partículas microscópicas suspensas em um fluido (EINSTEIN, 1905). Em sua abordagem, o deslocamento observado resulta do efeito cumulativo das colisões entre a partícula suspensa e as moléculas do meio.

A construção matemática do movimento browniano foi formalizada por Norbert Wiener em 1923 (RISKEN, 1996). Posteriormente, Uhlenbeck e Ornstein investigaram processos brownianos com relaxação e forças restauradoras (RISKEN, 1996). Esses desenvolvimentos contribuíram para a consolidação das equações de Langevin e de Fokker–Planck como ferramentas centrais no

estudo de processos estocásticos (MÉNDEZ et al., 2014).
O objetivo deste trabalho é analisar, de forma progressiva, a difusão livre: $\partial_t \rho = D\partial_x^2 \rho$ (RISKEN, 1996; MÉNDEZ et al., 2014), a difusão com coeficiente dependente do tempo: $\partial_t \rho = D(t)\partial_x^2 \rho$ com $D(t) = D(t/t_0)^2$ (RISKEN, 1996), o processo de Ornstein–Uhlenbeck: $\partial_t \rho = D\partial_x^2 \rho + k\partial_x(x\rho)$ (RISKEN, 1996) e um modelo intermitente composto por um estado difusivo e dois estados direcionados (MÉNDEZ et al., 2014):

$$\partial_t \rho_d = D\partial_x^2 \rho_d - \lambda_1 \rho_d + \lambda_R \rho_R + \lambda_L \rho_L \ ,$$
$$\partial_t \rho_R = -v\partial_x \rho_R + (\lambda_1/2)\rho_d - \lambda_R \rho_R \ ,$$
$$\partial_t \rho_L = \ \ v\partial_x \rho_L + (\lambda_1/2)\rho_d - \lambda_L \rho_L \ .$$

Também é estudada uma generalização temporal fracionária do modelo intermitente, formulada com a derivada de Caputo, isto é, $\partial_t(\mathrm{L}) \to \partial_t^\alpha(\mathrm{L})$, com

$$\partial_t^\alpha \rho(x,t) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \int_0^t dt' \frac{1}{(t-t')^{\alpha-n+1}} \partial_{t'} \rho(x,t')$$

com $n-1 < \alpha < n$ (EVANGELISTA e LENZI, 2018). A análise enfatiza a normalização, os momentos, os limites assintóticos, a consistência dimensional e a interpretação física das figuras.

MATERIAIS E MÉTODOS

Para a implementação da pesquisa, realizou-se um levantamento do conteúdo bibliográfico e da teoria a ser utilizada, com o objetivo de estabelecer suporte teórico para conhecer os métodos de solução das equações de difusão e suas extensões. As principais ferramentas matemáticas utilizadas foram as transformadas de Fourier e de Laplace, suas inversas, e as derivadas parciais e fracionárias. Particularmente, durante o processo de obtenção da solução consideramos como condição inicial $\rho(x,0) = \delta(x)$ e como condição de contorno que $\rho(\pm\infty, t) = 0$. Para o caso em que temos um estado difusivo e dois direcionados, consideramos a condição inicial dada por $\rho_d(x,0) = \delta(x)$ e $\rho_L(x,0) = \rho_R(x,0) = 0$. Como condição de contorno usamos $\rho_d(\pm\infty, t) = 0$ e $\rho_L(\pm\infty, t) = \rho_R(\pm\infty, t) = 0$.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Com a análise das equações de difusão, foi possível evidenciar como cada termo altera o comportamento e evolução da distribuição.
No caso da difusão com termo difusivo dependente do tempo, é possível notar como o expoente em t afeta a distribuição da densidade de probabilidade na Figura 1. O comportamento do deslocamento quadrático médio também é influenciado por esta dependência temporal, levando a um comportamento que desvia do caso usual, que é proporcional ao tempo. Para o processo de

Ornstein–Uhlenbeck, temos a presença de uma força externa proporcional a posição que nos conduz a uma solução estacionária para tempos longos, como consequência de um deslocamento quadrático que tende para uma constante neste mesmo limite.

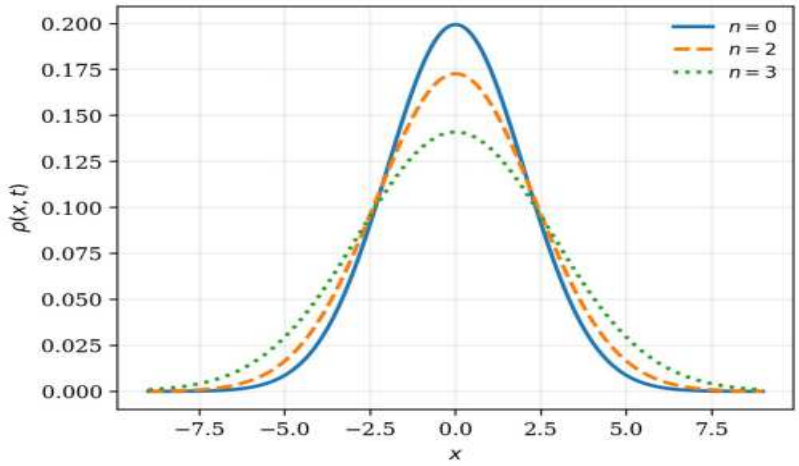


Figura 1 – Densidade de probabilidade para $D(t) = t^n$ e t = 2. O expoente do segundo momento é n+1

Cada expoente n modifica a forma da distribuição. Para n=0, observa-se uma maior concentração da distribuição em torno da posição central, acompanhada por um espalhamento mais lento. Já para n=2, a concentração na posição inicial é menor, uma vez que a distribuição se espalha mais rapidamente. Quando analisamos o transporte intermitente fracionário, observamos como a ordem fracionária altera a classe de transporte e o coeficiente direcionado modifica predominantemente a amplitude. Tal diferença é observada na Figura 2, comparando um modelo comum e um subdifusivo. Este gráfico também mostra a evolução temporal do espalhamento da distribuição. À medida que o tempo aumenta, observa-se um crescimento dessa grandeza, indicando que a distribuição se torna progressivamente mais dispersa.

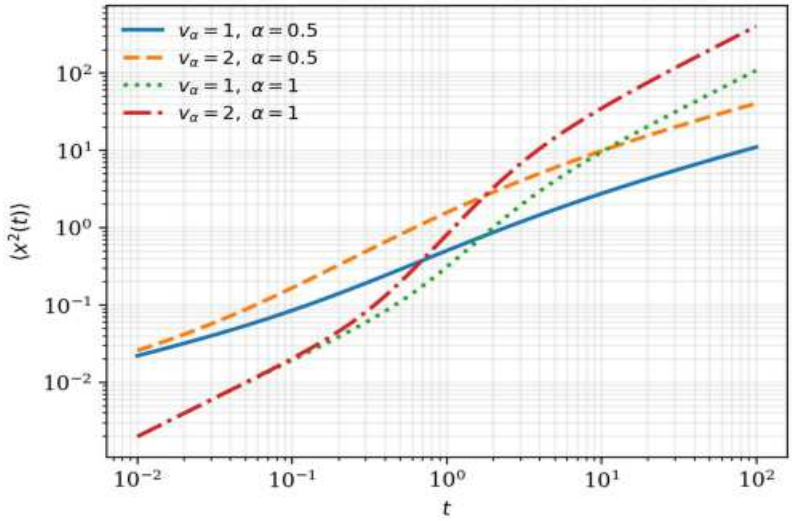


Figura 2 – Comparação adimensional entre o modelo ordinário (α = 1) e o modelo subdifusivo (α = 1/2), para Dα = 0,1 ; λ = 1 e dois valores do coeficiente direcionado.

CONCLUSÕES

Ao longo do trabalho desenvolvido investigamos diferentes aspectos da equação de difusão levando em conta diferentes cenários. Começamos por considerar a equação de difusão usual, depois incorporamos uma dependência temporal no coeficiente de difusão em forma de lei de potência, o qual nos leva a uma difusão anômala de acordo com a dependência temporal considerada. No caso de uma força externa com uma dependência linear com a posição temos o processo de Ornstein–Uhlenbeck com a distribuição estacionária governada por um comportamento Gaussiano. Depois do estudo destas equações consideramos o caso em que temos um processo intermitente e por fim consideramos a presença de derivadas de ordem não inteira, ou seja, fracionárias que estão conectadas a difusão anômala. De modo geral, as transformadas integrais, a análise de momentos e o cálculo fracionário fornecem uma estrutura consistente para estudar processos estocásticos com difusão, confinamento, alternância de estados e memória.

REFERÊNCIAS

BROWN, Robert. XXVII. A brief account of microscopical observations made in the months of June, July and August 1827, on the particles contained in the pollen of plants; and on the general existence of active molecules in organic and inorganic bodies. **The Philosophical Magazine**, London, v. 4, n. 21, p. 161-173, 1828. DOI: https://doi.org/10.1080/14786442808674769.

EINSTEIN, Albert. Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen. **Annalen der Physik**, v. 322, n. 8, p. 549-560, 1905. DOI: https://doi.org/10.1002/andp.19053220806.

EVANGELISTA, Luiz Roberto; LENZI, Ervin Kaminski. **Fractional diffusion equations and anomalous diffusion**. Cambridge: Cambridge University Press, 2018. DOI: https://doi.org/10.1017/9781316534649.

MÉNDEZ, Vicenç; CAMPOS, Daniel; BARTUMEUS, Frederic. **Stochastic foundations in movement ecology: anomalous diffusion, front propagation and random searches**. Berlin; Heidelberg: Springer, 2014. DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-642-39010-4.

RISKEN, Hannes. **The Fokker-Planck equation: methods of solution and applications**. 2. ed. Berlin; Heidelberg: Springer, 1996. DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-642-61544-3.