2020-1, "STATPHYS", AULA 20

OBJETIVO: DISCUTIR ASPECTOS GERAIS DE PROCESSOS DIFUSIVOS

ONDE ESTAMOS: 2. PROCESSOS ESTOCÁSTICOS, 2.5 PROCESSOS DE DIFUSÃO

* (CONT.) DISTRIBUIÇÕES TÉRMICAS

→ VIMOS QUE, PARA $v_0 = 0$,

$$v_n = \sqrt{\Gamma}\,.\,\sqrt{\Delta t} \sum_{i=0}^{n-1} a^{n-1-i} \eta_i ,$$

$$x_n = \Delta t \sum_{i=1}^{n-1} v_i \quad (\text{PARA } x_0 = 0)$$

E QUE

$$x_n = \Delta t \sqrt{\Gamma} \sqrt{\Delta t} \sum_{j=0}^{n-2} \frac{1 - a^{n-j-1}}{1-a} \eta_j ,$$

ONDE $a = 1 - \gamma \Delta t$.

ORA,

$$X_n = \frac{\sqrt{\Gamma}}{\gamma}\sqrt{\Delta t}\,\Big\{\underbrace{\sum_{j=0}^{n-2}(1-a^{n-j-1})\xi_j}_{X \sim N(\mu,\sigma^2)}\Big\}.$$

$\mu = 0$

$\hookrightarrow \mathbb{V}(\xi_j) = 1$

$$\sigma^2 = \sum_{j=0}^{n-2}(1-a^{n-j-1})^2$$

$$= \sum_{k=0}^{n-2}(1-a^{k+1})^2 = \sum_{k=0}^{n-2}(1-2a^{k+1}+a^{2k+2}) =$$

$$= (n-1) - 2a\,\frac{1-a^{n-1}}{1-a} + a^2\,\frac{1-(a^2)^{n-1}}{1-a^2}$$

$$\sum_{k=0}^{t} q^k = \frac{1-q^{t+1}}{1-q}$$

E A VARIÂNCIA DE X_n SERÁ

$$\mathbb{V}(X_n) = \frac{\Gamma\Delta t}{\gamma^2}\sigma^2 = \frac{\Gamma}{\gamma^2}\left[\frac{1-a}{\gamma}(-2a)\frac{1-a^{n-1}}{1-a} + \right.$$

$$\left. + \frac{1-a}{\gamma}a^2\,\frac{1-(a^2)^{n-1}}{1-a^2} + \Delta t\,(n-1)\right] \longrightarrow$$

$$\longrightarrow \frac{\Gamma}{\gamma^2}\left\{t - \frac{2}{\gamma}(1-e^{-\gamma t}) + \frac{1}{2\gamma}(1-e^{-2\gamma t})\right\}$$

$a^n \to e^{-\gamma t}$

PARA LONGOS TEMPOS,

$$x_n \sim N\left(0, \frac{\Gamma}{\gamma^2} t\right),$$

$$\boxed{\rho_{x_n}(x) = \sqrt{\frac{\gamma^2}{2\pi\Gamma t}} \cdot e^{-x^2/\frac{2\Gamma t}{\gamma^2}}}$$

$$\downarrow$$

$\rho(x,t)$ SOLUÇÃO DA EQ. DE DIFUSÃO!

$$\rho_t = -\frac{1}{2t}\rho + \frac{x^2\gamma^2}{2\Gamma t^2}\rho$$

$$\begin{aligned}
\rho_{xx} &= \partial_x\left\{\frac{-x\gamma^2}{\Gamma t}\rho\right\} \\
&= -\frac{\gamma^2}{\Gamma t}\left\{\rho + x\left[-\frac{x\gamma^2}{\Gamma t}\rho\right]\right\} \\
&= \frac{2\gamma^2}{\Gamma}\left\{-\frac{1}{2t}\rho + \frac{x^2\gamma^2}{2\Gamma t^2}\rho\right\} \\
&= \frac{2\gamma^2}{\Gamma}\rho_t
\end{aligned}$$

OU $\boxed{\rho_t = \frac{D}{2}\rho_{xx}}$, ONDE $\boxed{D = \frac{\Gamma}{\gamma^2}}$ É A CONSTANTE DE DIFUSÃO.

TÍNHAMOS VISTO ESTA EQUAÇÃO COMO UM "LIMITE DO CONTÍNUO" DO PASSEIO ALEATÓRIO UNIDIMENSIONAL, QUANDO

$$\boxed{\frac{(\Delta x)^2}{\Delta t} \to D}.$$

(VER p. 8-6)

HÁ POUCO (VER 19-4), VIA EQUIPARTIÇÃO DA ENERGIA, VIMOS QUE

$$\boxed{\Gamma = \frac{2\gamma k_B T}{M}}, \quad (1)$$

FLUTUAÇÃO

DISSIPAÇÃO

QUE É A MAIS SIMPLES RELAÇÃO DE FLUTUAÇÃO-DISSIPAÇÃO. ASSIM, PELA LEI DE STOKES PARA O ATRITO DE UM FLUIDO DE VISCOSIDADE η SOBRE UMA PARTÍCULA ESFÉRICA DE RAIO r,

$$\boxed{\gamma = \frac{6\pi\eta r}{M}}, \quad (2)$$

AMBIENTE + PARTÍCULA

AMBIENTE, APENAS

PARTÍCULA

FICA CLARO QUE CADA UMA DAS CONSTANTES Γ, γ E D, RELACIONADAS POR

$$\boxed{D = \frac{\Gamma}{\gamma^2}}, \quad (3)$$

→ p. 20-3

EXPRESSAM CARACTERÍSTICAS DE UM <u>CERTO TIPO DE PARTÍCULA EM UM CERTO MEIO</u>,

(2) EM (1)

$$\boxed{\Gamma = 12\pi\,(\eta K_B T)\,\frac{r}{M^2}} \quad (4)$$

E

AMBIENTE

PARTÍCULA

$$\boxed{D = \frac{1}{3\pi}\left(\frac{K_B T}{\eta}\right)\frac{1}{r}}.$$

(2) E (4) EM (3)

PARA FECHAR A AULA, RETORNEMOS À <u>MATEMÁTICA</u> DA DIFUSÃO. COMO OBTER A SOLUÇÃO A PARTIR DE

$$\boxed{\rho_t = \frac{D}{2}\rho_{xx}}, \quad \text{COM} \quad \boxed{\rho(x,0) = \delta(x)}\,?$$

NA TRANSFORMADA DE FOURIER, USAREMOS A CONVENÇÃO

$$\tilde{f}(k,t) = [\mathcal{F}(f)](k,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x,t)\, e^{ikx}\, dx$$

COM INVERSA

$$f(x,t) = [\mathcal{F}^{-1}(\tilde{f})](x,t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(k,t)\, e^{-ikx}\, dk,$$

POIS LEMBRAMOS QUE

$$\mathcal{F}\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\, e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(x-\mu)^2}\right) = e^{i\mu k - \frac{\sigma^2 k^2}{2}}.$$

ALÉM DISSO, SE $f(x,t) \xrightarrow{x \to \pm\infty} 0$,

$$\mathcal{F}(f_x) = ik\,\mathcal{F}(f) = ik\,\tilde{f}(k,t).$$

ASSIM,

$$\rho_t = \frac{D}{2}\rho_{xx} \overset{\mathcal{F}}{\Longrightarrow} \tilde{\rho}_t = \underbrace{\frac{D}{2}(ik)^2}_{\text{SEM } t\,!!!}\tilde{\rho} \overset{\int dt}{\Longrightarrow}$$

$$\Rightarrow \boxed{\tilde{\rho}(k,t) = CTE(k) \,.\, e^{-Dtk^2/2}}$$

COMO $CTE(k) = \tilde{\rho}(k,0) = \mathcal{F}(\rho(x,0))$

$$= \mathcal{F}(\delta(x)) = 1,$$

$$\rho(x,t) = \mathcal{F}^{-1}(\tilde{\rho}) = \mathcal{F}^{-1}\left(e^{-Dtk^2/2}\right) =$$

$$= \mathcal{F}^{-1}\mathcal{F}\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi Dt}}\, e^{-x^2/2Dt}\right).$$