DIFUSÃO DE PARTÍCULAS ATIVAS ESPALHANDO-SE EM DOIS FLUXOS SIMULTÂNEOS

Luiz Bevilacqua

Janeiro 2019

Nos slides que se seguem apresentamos uma breve descrição de um novo processo de difusão que se diferencia do processo clássico por admitir dois fluxos concomitantes.

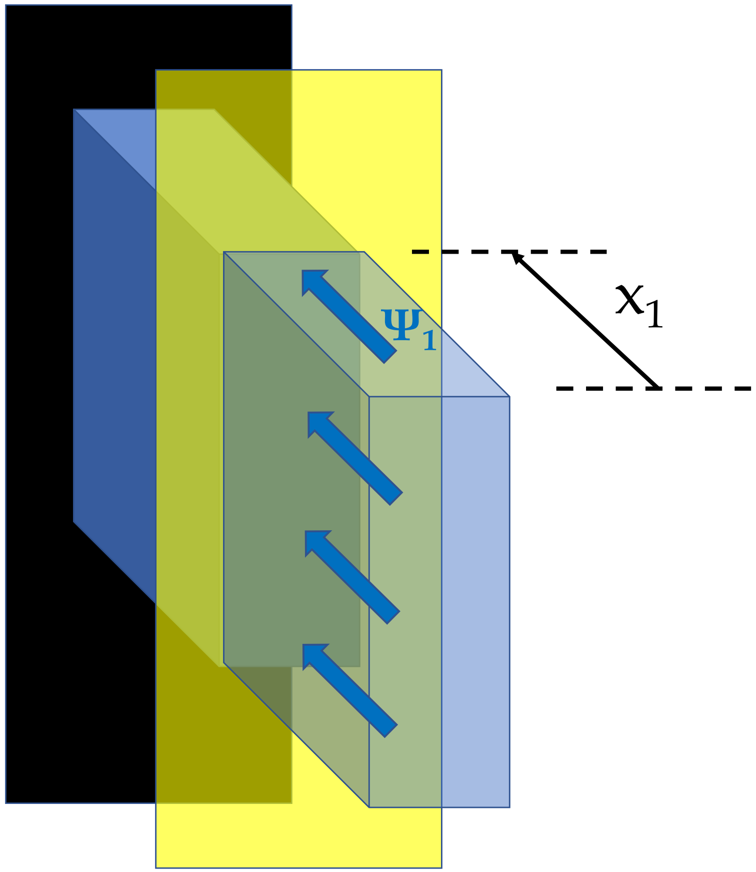
Uma fração das partículas movimenta-se de acordo com as leis clássicas e a fração complementar obedece a uma nova lei.

Ainda não temos verificações experimentais dada à recente apresentação da nova teoria, mas intuitivamente uma aplicação plausível é a de fluxo de capitais.

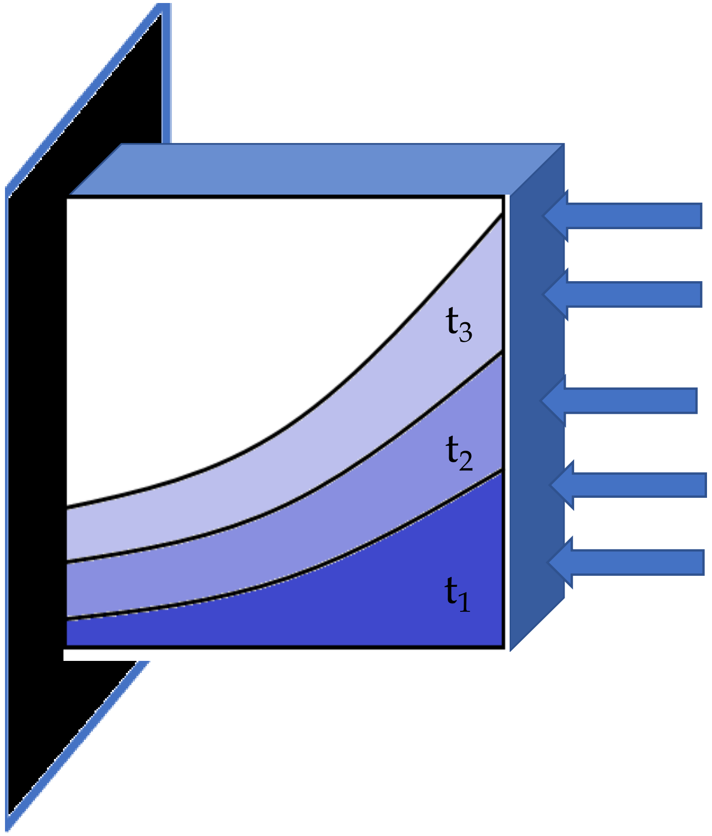
Difusão é o processo pelo qual um conjunto de partículas espalha-se em um determinado meio. A teoria clássica, estabelecida em fins do século XIX e início do século passado admite que as partículas movem-se no meio suporte estimuladas por um potencial de força que gera um fluxo da forma:

$$\Psi_1\left(x_1\right) = Df_1\left(q\left(x_1\right)\right) \quad \text{(massa/tempo)}$$

O fluxo Ψ_1 representa a massa de partículas que passa por uma determinada secção $x=x_1$ por unidade de tempo. O fluxo é proporcional a uma constante D característica da interação meio-partículas e $f_1(q)$ é uma função da densidade de partículas q. *E*ssa função foi proposta por Fick e a determinação do parâmetro D, denominado coeficiente de difusão, foi feita por Einstein e por Smoluchowski independentemente no inicio do século XX.



$$\Psi_1(x_1) = Df_1(q(x_1)) \quad \text{(massa/tempo)}$$



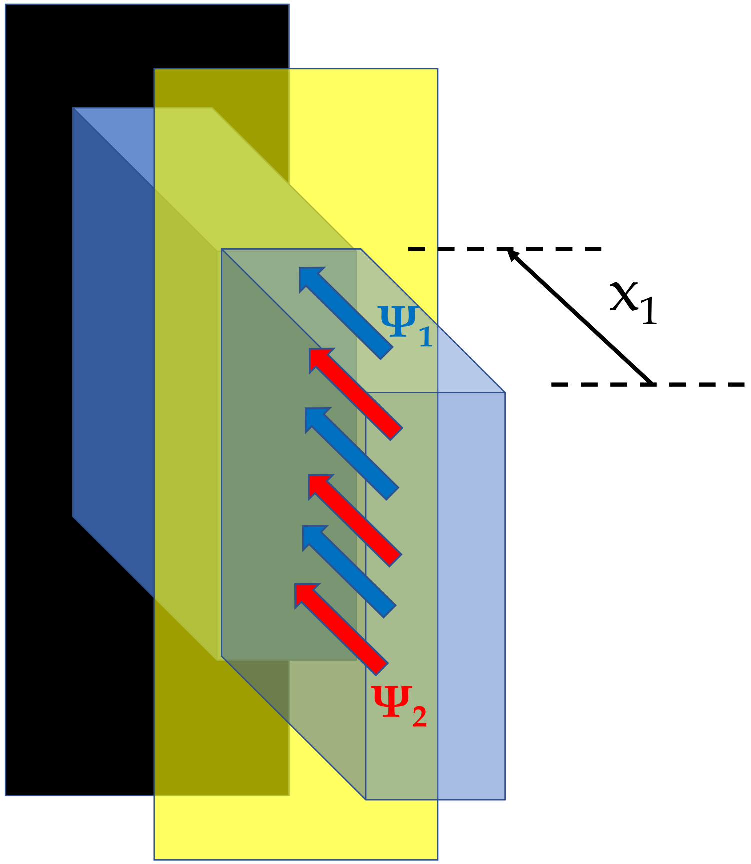
Evolução do conteúdo no tempo t_1,t_2,t_3

Teoria Clássica – Fluxo Único

A teoria da difusão com o modelo de Fick é porém limitada a um único tipo de fenômeno de dispersão. É no entanto possível imaginar que em alguns casos certas partículas sensíveis a perturbações externas sejam capazes de se movimentar segundo uma lei diferente daquela proposta por Fick. Ou ainda que algumas partículas mudem de estado e passem a se mover estimuladas por potenciais diferentes do clássico.

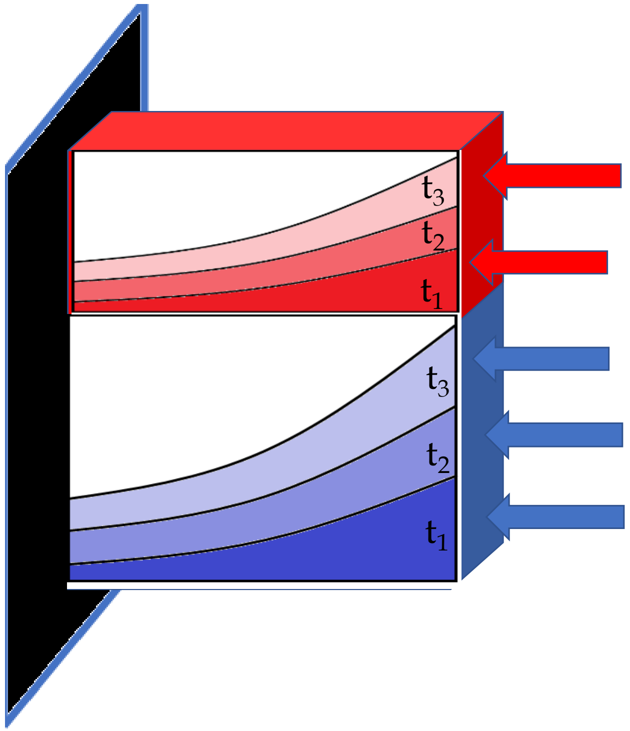
Assim é que o fenômeno de difusão dentro de um contexto mais geral deve admitir que uma determinada fração de partículas β evolui segundo a lei de Fick com fluxo Ψ_1 e a fração complementar (1-β) obedece a uma outra lei Ψ_2. É possível mostrar que a partir de processos de distribuição mais gerais surge um fluxo secundário cuja expressão é dada por:

$$\Psi_2\left(x_1\right) = R\beta\, f_2\left(q\left(x_1\right)\right) \quad \text{(massa/tempo)}$$



$$\Psi_2(x_1) = R\beta f_2(q(x_1)) \quad \text{(massa/tempo)}$$

$$\Psi_1(x_1) = Df_1(q(x_1)) \quad \text{(massa/tempo)}$$

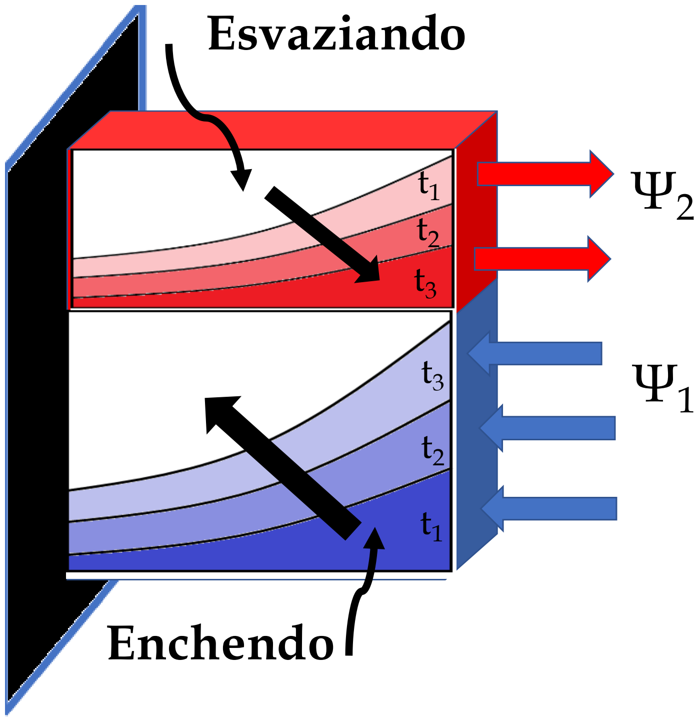


Evolução do conteúdo no tempo t_1,t_2,t_3 para os dois fluxos

Teoria com fluxo duplo

Na nova definição de fluxo, a que chamamos de secundário, aparece uma constante R denominada coeficiente de reatividade e uma nova função $f_2(q)$. É importante considerar que esse novo fluxo existe se e só se o fluxo primário Ψ_1 existir, uma vez que o coeficiente de partição β multiplica a expressão do fluxo secundário. Isto é, para que o fluxo secundário seja diferente de zero é necessário que β>0 e portanto que hajam partículas no estado principal.

$$\Psi_2\left(x_1\right) = R\cancel{\beta} f_2\left(q\left(x_1\right)\right) \quad \text{(massa/tempo)}$$



Os fluxos primário e secundário podem estar em fase (mesma direção) ou em oposição de fase (direções opostas). Portanto um determinado meio com fluxo bloqueado em uma extremidade e sujeito a ação de fluxos primário e secundário na outra extremidade em direções opostas pode estar enchendo ou esvaziando em função da direção e intensidade dos fluxos.

Para fins de completar a formulação incluímos abaixo as equações que regem os dois processos.

Processo clássico, Fick:

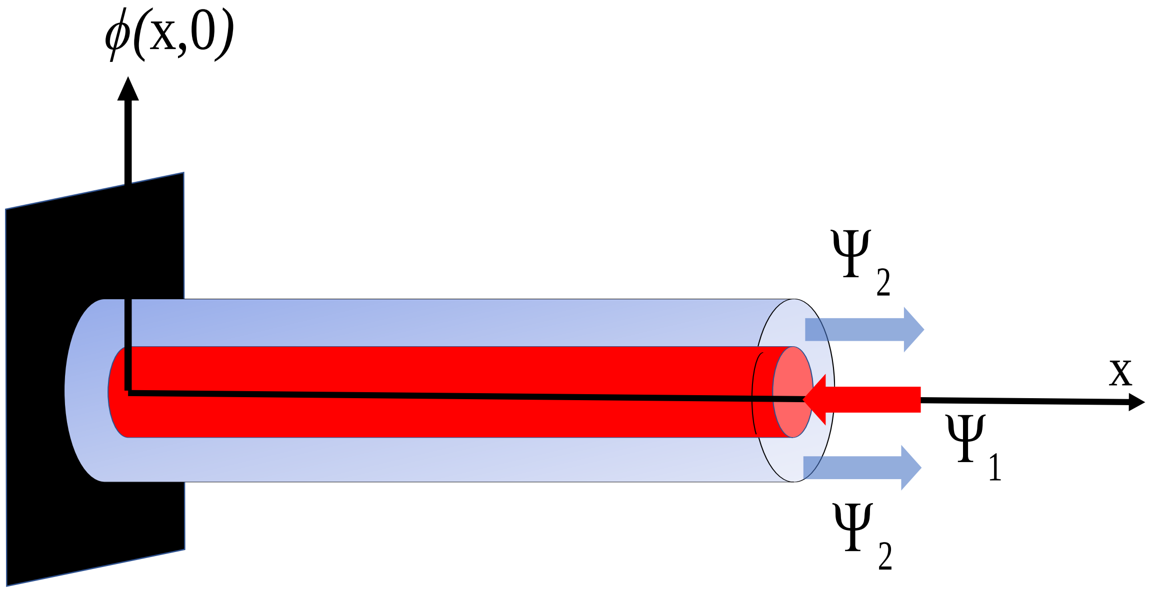
$$\frac{\partial q}{\partial t} = D\frac{\partial^2 q}{\partial x^2} \quad \text{onde} \quad \Psi_1 = -D\frac{\partial q}{\partial x}$$

Processo bi-fluxo, a nova equação:

$$\frac{\partial q}{\partial t} = \beta D\frac{\partial^2 q}{\partial x^2} - \beta(1-\beta)R\frac{\partial^4 q}{\partial x^4} \quad \text{onde} \quad \Psi_2 = R\beta\frac{\partial^3 q}{\partial x^3} \quad \text{e} \quad \Psi_1 = -D\frac{\partial q}{\partial x}$$

<u>Note que o fluxo primário depende do coeficiente de difusão D enquanto que o fluxo secundário depende de R e β e só existe se o fluxo primário estiver presente. Essa característica da nova teoria admite portanto que haja migração de partículas entre os dois estados. Fluxo único só é possível com o processo de Fick</u>

As aplicações do novo modelo são muitas mas ainda pouco exploradas. Com a finalidade de mostrar alguns comportamentos previstos pela nova teoria e que são em parte intuitivos vamos considerar o caso de fluxo de capital. De fato o movimento a que está sujeito o capital em uma pequena empresa, por exemplo, claramente pode ser dividido em duas fases, a fração que sai para adquirir insumos e bens de produção e a fração que entra originada pela venda de produtos.

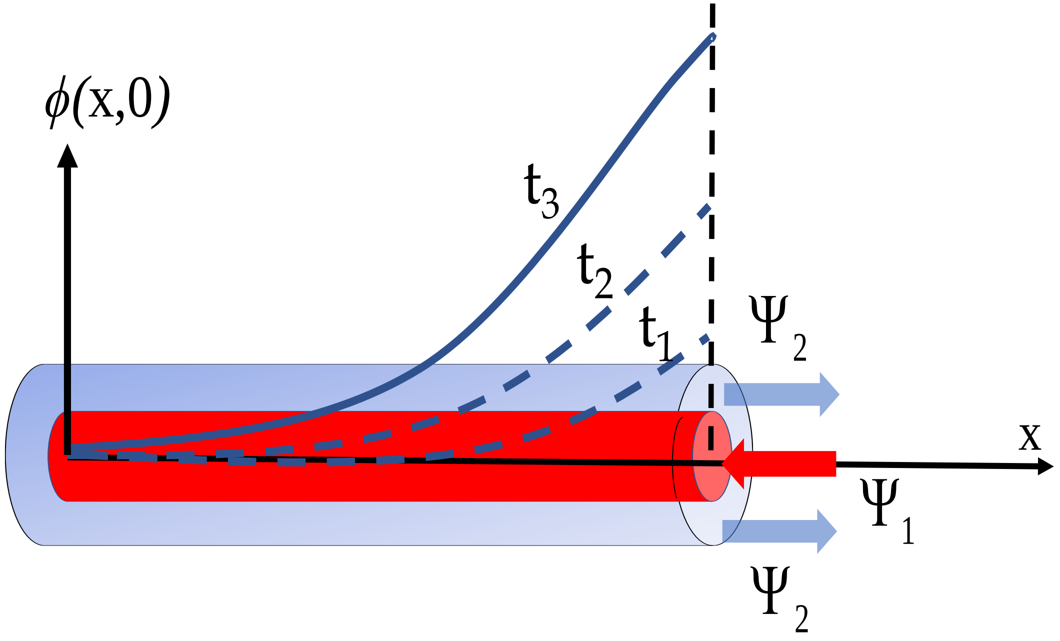


Pode-se considerar que de fato o capital, total em cada secção da cadeia está dividido em duas fases, uma fruto da venda e outra associada às obrigações de compra. Na realidade é o mesmo capital em fases diferentes que podem se comunicar.

A fração β está associada à entrada e o complemento (1- β) à saída.

Se considerarmos o modelo de fluxo duplo para simular a evolução de capital em uma cadeia simples obtém-se soluções da forma:

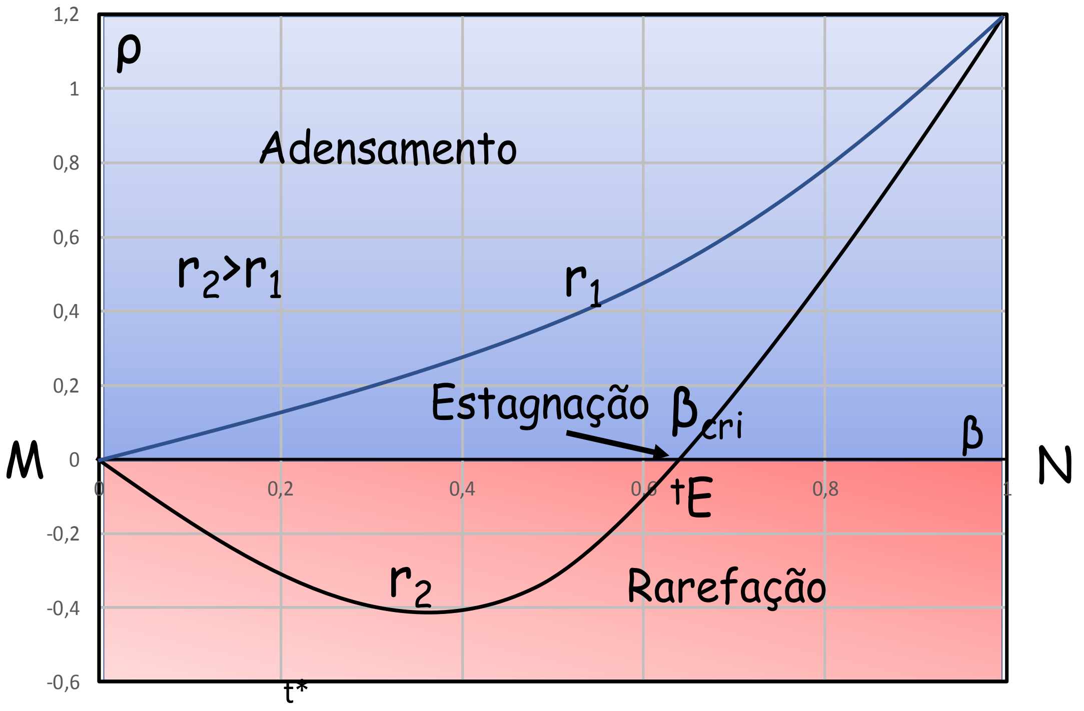
$$\phi(x,t) = \phi_0 e^{\rho t} g(x)$$



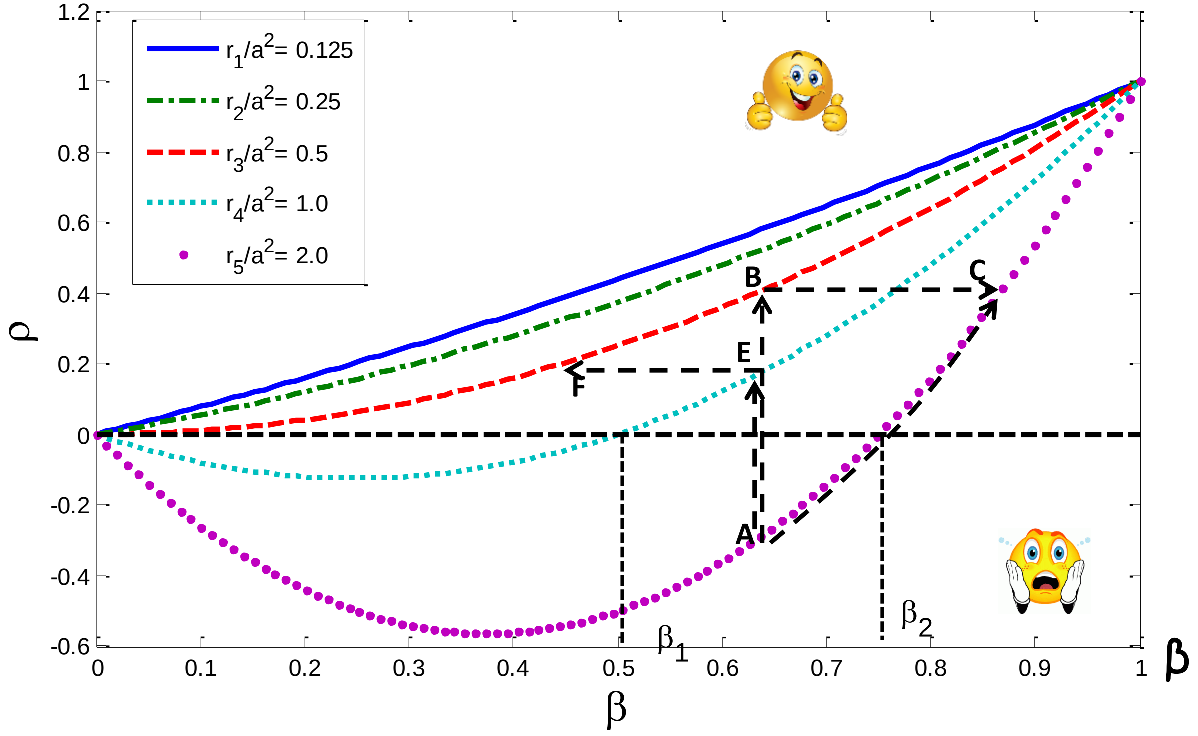
Claramente a evolução do conteúdo depende do valor do parâmetro ρ. Se ρ for positivo o volume de moeda no interior da cadeia produtiva cresce, isto é, há acumulo de capital. Se ρ for negativo a função $e^{\rho t}$ diminui ao longo do tempo e o conteúdo se reduz refletindo perdas continuadas. Se ρ=0 a situação permanece estagnada, não há nem expansão nem encolhimento da economia.

O parâmetro ρ é uma função de D, R e β, $\rho = g(\rho, R, D)$

O gráfico abaixo representa a variação do parâmetro de evolução ρ em função da partição β para dois valores de r=R/D. Se ρ for positivo a economia cresce, se negativo decresce. Se ρ=0 a economia está estagnada.

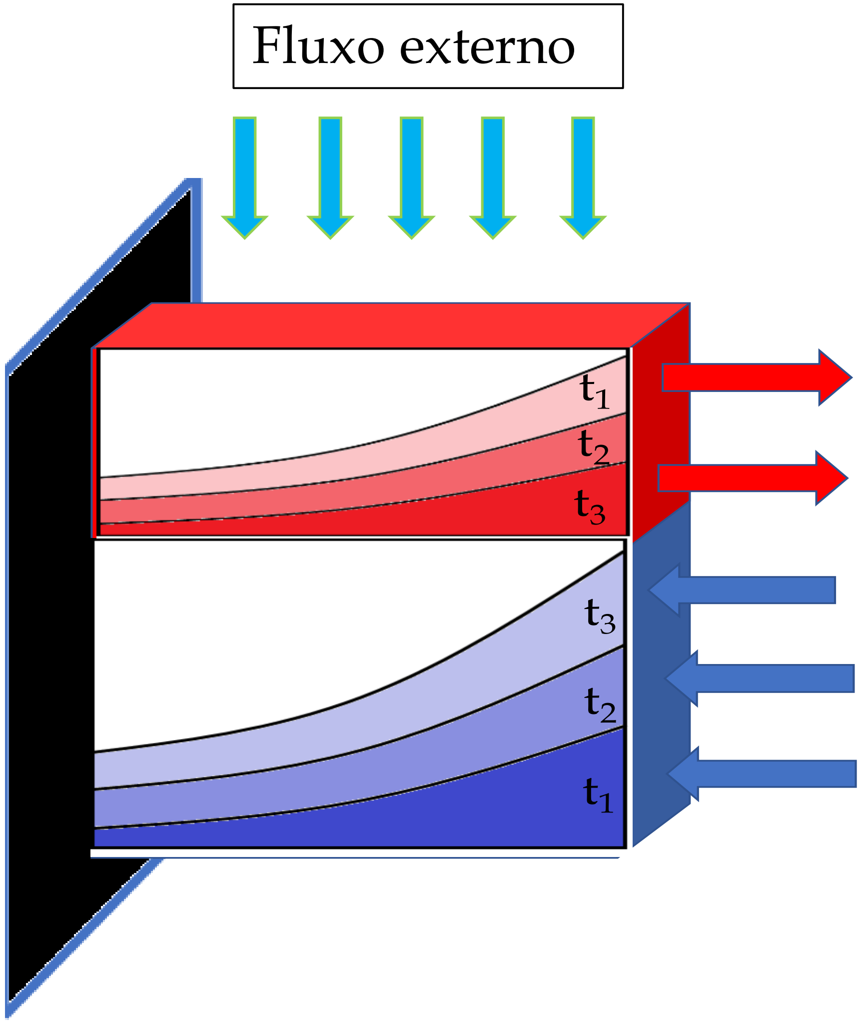


Portanto a região acima do eixo horizontal MN (ρ > 0) está associada à uma economia de crescimento e a região abaixo de MN (ρ < 0) corresponde a uma situação de encolhimento econômico. Pontos sobre MN (ρ = 0) correspondem a estagnação. Note que para determinados valores de r ($r=r_2$) a economia pode estar em fase crescente ou decrescente em função da partição β.



Note que o fluxo secundário (saída de capital, compras) é função de R e portanto de r (com D fixo). Para valores pequenos de r, gastos moderados, $r/a^2 < 0.5$ a economia permanece crescente e a curva permanece acima de MN para todo β. Para r grande o crescimento fica condicionado ao valor de β e só é positivo para β grande, isto é considerável fluxo para o interior do sistema.

Sair da situação incômoda do ponto A de rarefação para uma posição favorável de adensamento pode ser feito de vários modos como mostram as trajetórias indicadas na figura. Pode-se manter a relação de partição de capitais β e diminuir a taxa de fluxo de saída reduzindo r ou manter a taxa de fluxo de saída r e aumentar a relação de partição de capitais β.



As previsões do modelo, quando se adiciona uma fonte externa uniforme em toda a extensão da cadeia proporcional à densidade de fluxo de saída, são curiosas. Se a velocidade de fluxo de saída controlada por r for moderada, a solução permanece na região de adensamento. Mas, para valores grandes de r, a solução passa por regiões de rarefação que podem ser bastante extensas.

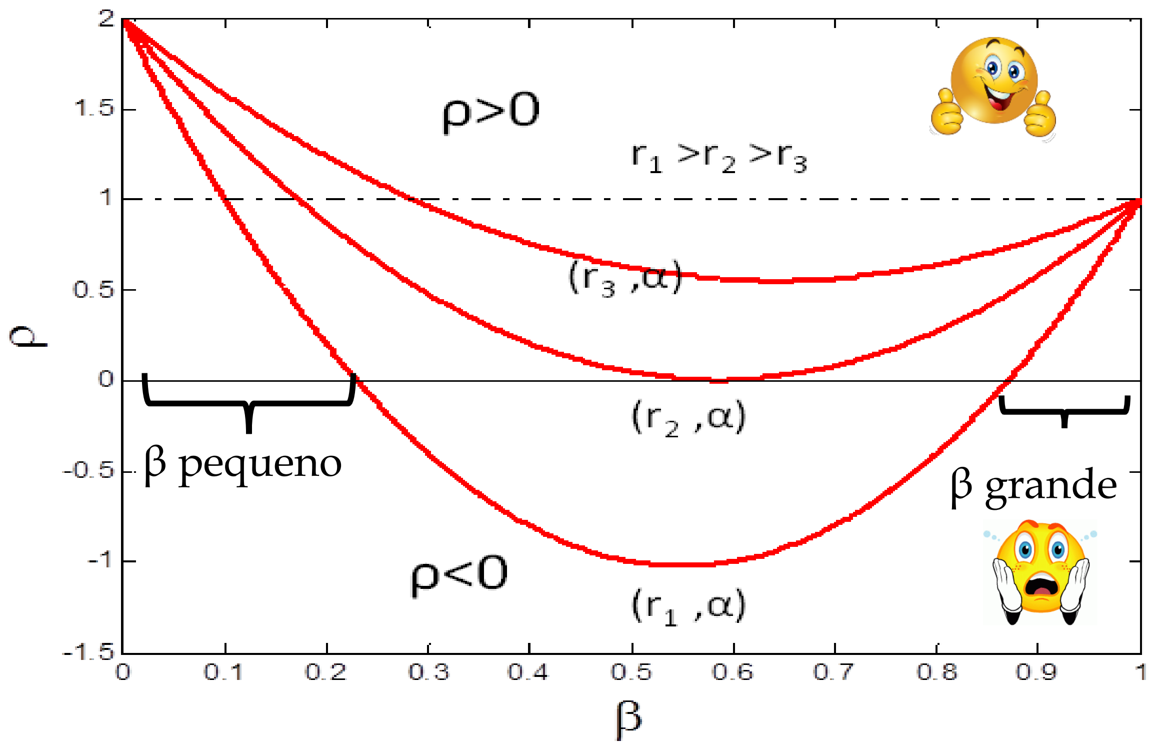
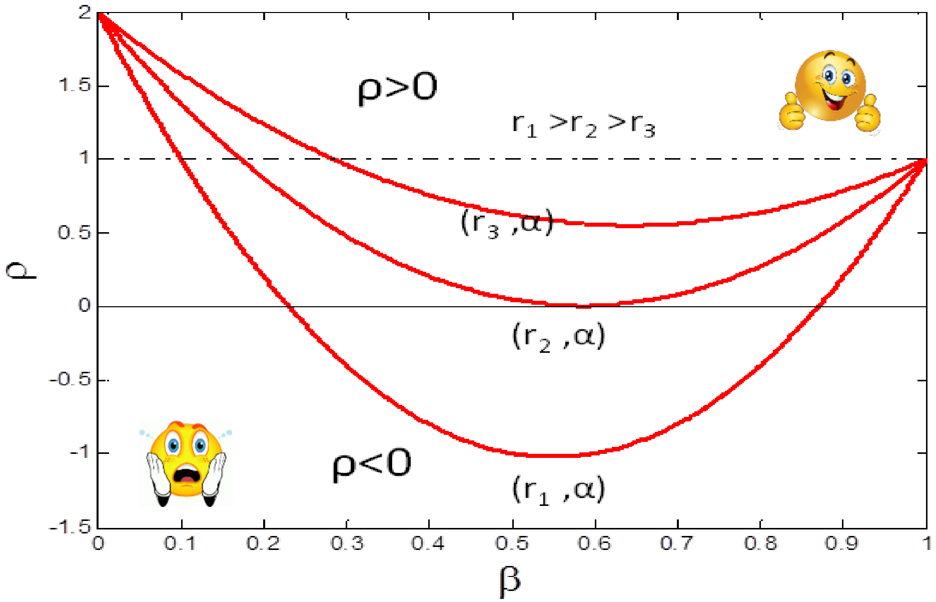
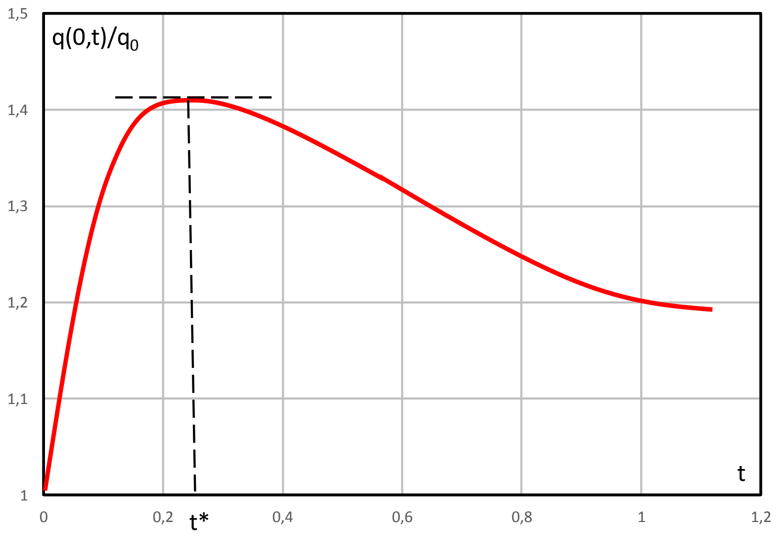


Fig.9. Influence of the parameter r on the evolution of an economic chain for a given source α=2.0. r_1 = 10, r_2 =5.8, r_3 =3.5.

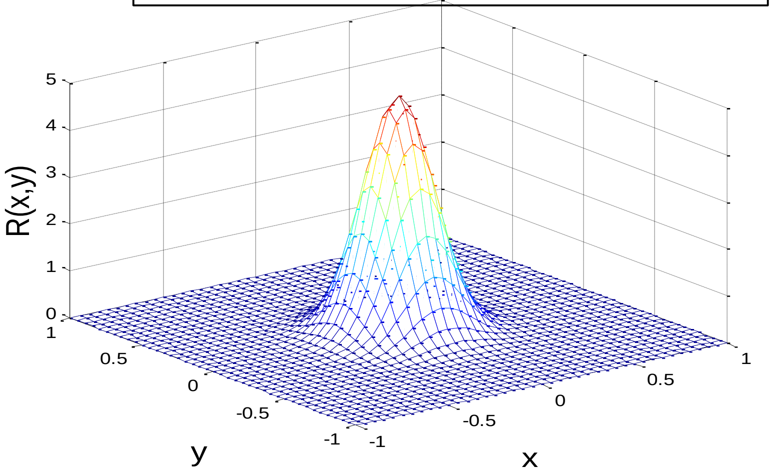
Nesse caso, r grande, as situações mais favoráveis acontecem para relações de partição β ou muito baixas ou altas. Isto é, ou quando a entrada de capital é alta ou baixa. Valores médios são desfavoráveis. Isto significa que quando a velocidade de compras é muito grandes (fluxo de saída), r grande, a economia só cresce para grande volume de vendas β>>0 ou para baixos volume de vendas β<< 1.

Assim empréstimos externos só são efetivos se a taxa de evasão de recursos para compras externas ou para outros fins for moderada. Num sistema industrial isso significa que o progresso da economia depende de estímulo a produção de insumos internos , progresso tecnológico. Portanto, para se ficar em situação confortável de economia crescente, a taxa de fluxo externo deve ser moderada, condicionando o crescimento a uma forte política de desenvolvimento independente. Essa foi a opção dos EUA no início do século passado para enfrentar a ameaça do domínio externo no auge da revolução industrial. (Ver discurso de C. Elliot, Reitor de Harvard)





Coeficiente de reatividade R>0 restrito à região central.



Outro resultado interessante desse modelo obtém-se com regiões apresentando anisotropias. Suponha uma região definida no plano com uma distribuição inicial exponencial $q(x,y,0)= q_0\exp[-k(x^2+y^2)]$ o máximo na origem (ponto central do domínio). Quando $R= R(z)$ e $z\epsilon\{z_0, z_0+\delta)$, $z=(x^2+y^2)^{1/2}$, representa a presença da resistividade em uma região restrita do meio, pode ocorrer uma concentração inicial em torno da região perturbada antes de haver dispersão, como mostra a figura ao lado. Isto é, a concentração aumenta inicialmente antes de diminuir. Em certas circunstâncias esse comportamento pode ser encontrado em dinâmica populacional.

É interessante o comentário de Ian Stewart sobre a equação de Black&Scholes que é uma equação de difusão com fluxo único, uma derivação da teoria clássica.

Ian Stewart, "The mathematical equation that caused the banks to crash", The Black-Scholes equation was the mathematical justification for the trading that plunged the world's banks into catastrophe, **The Observer,** Mathematics, Sun 12 Feb 2012 .

A equação proposta aqui de fato deve ser mais consistente para simular comportamentos socioeconômicos complexos.

É ainda possível mostrar que a nova teoria pode ser expandida para sistemas multi-fluxos encapsulados, isto é, o fluxo n existe se e só se os anteriores,
n-1, n-2,...1 existirem. A dificuldade é que a equação fundamental inclui derivadas da ordem 2n , $\partial^{2n}q/\partial x^{2n}$, tornando o problema mais difícil.

Leitores interessados em maiores detalhes poderão obtê-los nas referência abaixo.

Bevilacqua, L. , Galeão, A. C. N. R. , Pietrobon-Costa, F. **A new analytical formulation of retention effects on particle diffusion processes**, Anais da Academia Brasileira de Ciências (2011) 83(4): 1443-1464(Annals of the Brazilian Academy of Sciences), Printed version ISSN 0001-3765 / Online version ISSN 1678-2690

Bevilacqua, Luiz, Galeão, Augusto C. N. R, Simas J.G., Rio Doce, A.P. **A new theory for anomalous diffusion with a bimodal flux distribution**, J Braz. Soc. Mech. Sci. Eng. (2013) 35:431–440, DOI 10.1007/s40430-013-0041-y

Silva, L. G., Knupp, D. C., Bevilacqua, L., Galeão, A. C. N. R. e Silva Neto, A. J. **Formulação e Solução de um Problema Inverso de Difusão Anômala com Técnicas Estocásticas**, *Ciência e Natura*, Santa Maria, v. 36 Ed. Especial, 2014, p. 82–96

Bevilacqua, L., Jiang, M.,Silva Neto,A. **An Evolutionary Model of Bi-Flux Diffusion Processes,** *J. Braz. Soc. Mech. Sci. &Eng,* vol. 38, n 5, (2016) 1421-1432, ISSN 1678-5878

Maosheng Jiang, Luiz Bevilacqua, Antonio J. Silva Neto, Augusto C.N.Rodrigues Galeão, Jiang Zhu, **Bi-flux theory applied to the dispersion of particles in anisotropic substratum**, Applied Mathematical Modelling, 64 (2018) 121-134

Comentários e colaborações são bem-vindos

bevilacqua@coc.ufrj.br