Violação de causalidade na equação de difusão

- Vamos examinar a equação de difusão de novo
$$\partial_t \rho(t,x) = D\partial_x^2 \rho(t,x)$$
- Vamos agora fazer a transformada de Fourer em t e x.
$$\rho(t,x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{i\omega t - ikx}\tilde{\rho}(\omega,k)$$
- Note que usamos sinais opostos para ω e k. O sinal é arbitrário, e significa que trocamos a definição da transformada com a transformada inversa.
- Neste caso, é comum porque o exponencial com sinais opostos $e^{i\omega t - ikx}$ é uma onda plana com momento k. I.e., com $\omega > 0$ e $k > 0$ é uma onda plana que se move para a direita (na direção x positiva). Com $k < 0$, a onda tem direção negativa.
- Então, a relação inversa fica
$$\tilde{\rho}(\omega,k) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dxdt e^{-i\omega t + ikx}\tilde{\rho}(t,x)$$

Violação de causalidade na equação de difusão

- Assim, da equação de difusão

$$\partial_t \rho(t,x) = D\partial_x^2 \rho(t,x)$$
$$\partial_t \rho(t,x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega\, dk\, i\,\omega\, e^{i\omega t - ikx}\tilde{\rho}(\omega,k)$$
$$\partial_x^2 \rho(t,x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega\, dk\,(-k^2)e^{i\omega t - ikx}\tilde{\rho}(\omega,k)$$

- Em Fourier,

$$\implies i\omega\tilde{\rho}(\omega,k) = -k^2 D\tilde{\rho}(\omega,k) \qquad \implies \omega = \omega_{\text{difusão}}(k) = ik^2 D$$

- Esse modo é bem diferente do vimos na equação da onda onde a mesma análise leva

$$0 = \frac{\partial_t^2}{c^2}u(t,x) - \partial_x^2 u(t,x) \qquad \implies 0 = \left(\frac{-\omega^2}{c^2} + k^2\right)\tilde{u}(\omega,k)$$
$$\implies \omega_{\text{onda}}(k) = ck$$

Violação de causalidade na equação de difusão

- Enquanto a velocidade de grupo

$$v_g(k) = \left|\frac{d\omega}{dk}(k)\right|$$

para a equação de onda leva

$$v_g^{(\text{onda})}(k) = \frac{d\omega_{\text{onda}}}{dk}(k) = c$$

- É constante em k!
- Para a equação de difusão, obtemos

$$v_g^{(\text{difusão})}(k) = \frac{d\omega_{\text{difusão}}}{dk}(k) = 2kD$$

- Cresce com k!

Violação de causalidade na equação de difusão

- Assim, enquanto que na equação de onda a $v_g^{(\text{onda})}(k) = c =$ constante (no caso da luz $c =$ a velocidade da luz), para a equação de difusão vemos que a velocidade de grupo aumenta com k e assim, para modos onde k é suficientemente grande, vemos que $v_g^{(\text{difusão})}(k)$ pode ser tão grande quanto se queira (inclusive maior que a velocidade da luz!!)

$$\lim_{k\to\infty} v_g^{(\text{difusão})}(k) \to \infty.$$

- Isso leva a uma violação da causalidade relativística!
- Isso poderia ser visto no problema do sal. Como naquele caso.

$$\tilde{\rho}(t,k) \sim e^{-k^2 Dt}$$

(uma gaussiana)

- Em princípio, modos com $k \gg 1$ contribuem, embora de forma diminuta.

Violação de causalidade na equação de difusão

- Essa violação de causalidade, no sentido de que informação (mediada pela $v_g(k)$) pode ser propagado com velocidade infinita, é apenas um reflexo de nossa aproximação — i.e., a lei de Fick, usada na derivação da equação de difusão.
- De fato, se você lembrar bem, nós derivamos essa equação a partir da equação da continuidade

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot \vec{J} = 0$$

que é sempre correta se a quantidade é de fato conservada.
- O problema vem da nossa hipótese de que a lei de Fick

$$\vec{J} = -D \vec{\nabla} \rho$$

é válida até para distâncias muito curtas (ou modos de Fourier com $k \gg 1$).
- De fato, a lei de Fick é geralmente válida para descrever fenômenos que variam muito lentamente no espaço e no tempo.

Violação de causalidade na equação de difusão

- Para ilustrar isso, vamos pegar a transformada de Fourier da lei de Fick (em 1 dimensão)

$$J(t,x) = -D_0 \partial_x \rho(t,x) \qquad \Longrightarrow \quad \tilde{J}(\omega,k) = +ikD_0 \tilde{\rho}(\omega,k)$$

  com $D_0 > 0$ um constante.

- A versão generalizada da Lei de Fick seria algo com uma "constante" de difusão que depende do espaço e do tempo

$$J(t,x) = -\int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} dx' D(t-t', x-x') \partial_{x'} \rho(t',x')$$

- Pelo teorema da convolução $\quad J(\omega,k) = ikD(\omega,k)\tilde{\rho}(\omega,k)$ onde agora, dizemos que $\quad \lim_{\omega,k\to 0} D(\omega,k) = D_0 = \text{constante}$

- Assim, a lei de Fick é apenas o primeiro termo da serie de Taylor em $\omega, k = 0$ da função difusão $D(\omega,k)$. Assim, a lei de Fick, usada na derivação da equação de difusão, só é valida para ω, k pequeno ~ 0.

Violação de causalidade na equação de difusão

- Assim, o fato de que encontramos violação de causalidade na equação de difusão não é um "problema" pois o que ocorreu foi que usamos a equação (derivada para descrever fenômenos que variam lentamente no tempo e espaço) para entender modos que estão relacionados com física definida com ω e k muito grandes.
- O que de fato ocorre é que da nossa lei de Fick generalizada

$$\tilde{J}(\omega, k) = ikD(\omega, k)\tilde{\rho}(\omega, k)$$

e jogando isso no Fourier da equação da continuidade

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \partial_x J &= 0 \\ \Longrightarrow \quad i\omega\tilde{\rho}(\omega, k) - ik\tilde{J}(\omega, k) &= 0 \\ \Longrightarrow \quad i\omega\tilde{\rho}(\omega, k) - ik\left[ikD(\omega, k)\tilde{\rho}(\omega, k)\right] &= 0 \end{aligned}$$

o que implica em

$$i\omega + k^2 D(\omega, k) = 0$$

$$\omega = \omega(k) = ik^2 D(\omega, k)$$

Violação de causalidade na equação de difusão

- $\omega(k) = ik^2 D(\omega, k)$
- A velocidade de grupo agora é

$$v_g(k) = \left|\frac{d[k^2 D(\omega, k)]}{dk}\right| = \left|2kD(\omega, k) + k^2 \frac{d}{dk} D(\omega, k)\right|$$

  e se $D(\omega, k)$ for para zero suficientemente rápido pra $k \to \infty$, podemos "consertar" a situação e ter sempre $v_t(k)$ finito para todo k.
- Note que como

$$\lim_{\omega, k \to 0} D(\omega, k) = D_0,$$

  nossa "equação da difusão generalizada" se comporta como a equação de difusão tradicional quando $k \to 0$. Ou seja, para longas distâncias e longos intervalos de tempo temos difusão e para fenômenos que envolvem variações rápidas no tempo e espaço (i.e., onde $\omega, k >> 1$), algo diferente de difusão ocorre.

Equação de Maxwell-Cattaneo

- Um exemplo é a equação de Maxwell-Cattaneo:
- Nesse caso, começamos como sempre como equação da continuidade

$$\partial_t \rho(t, x) + \partial_x J(t, x) = 0$$

- mas agora a $J(t, x)$ não é dada pela "lei de Fick". Ele é determinado pela equação diferencial parcial

$$\tau_0 \partial_t J(t, x) + J(t, x) = -D_0 \partial_x \rho(t, x)$$

onde $\tau_0 > 0, D_0 > 0$. τ_0 é chamado de tempo de relaxação pois de fato ele mede quanto tempo leva em média para que $J(t, x)$ alcance sua solução assintótica (dada pela lei de Fick) quando $t/\tau_0 >> 1$

$$\lim_{\frac{t}{\tau_0} >> 1} J(t, x) \simeq -D_0 \partial_x \rho(t, x)$$

- Agora, para determinar a equação nova para $\rho(t, x)$ voltamos para a equação da continuidade

$$\partial_t \rho + \partial_x J = 0$$

Equação de Maxwell-Cattaneo

- Agora, para determinar a equação nova para $\rho(t,x)$ voltamos para a equação da continuidade $\qquad \partial_t \rho + \partial_x J = 0$
  e aplicamos ∂_t em tudo pra encontrar

$$\partial_t^2 \rho + \partial_t \partial_x J = 0$$

- Agora, já que

$$\partial_t \partial_x J = \partial_x \partial_t J$$

e

$$\tau_0 \partial_t J = -J - D_0 \partial_x \rho$$

vemos que

$$\partial_t \partial_x J = \partial_x \partial_t J = -\partial_x \frac{J + D_0 \partial_x \rho}{\tau_0} = -\frac{\partial_x J}{\tau_0} - \frac{D_0}{\tau_0} \partial_x^2 \rho.$$

- Assim,

$$\partial_t^2 \rho + \partial_t \partial_x J = 0 \qquad \Longrightarrow \partial_t^2 \rho - \frac{1}{\tau_0} \partial J - \frac{D_0}{\tau_0} \partial_x^2 \rho = 0$$

Equação de Maxwell-Cattaneo

- $\partial_t^2 \rho - \frac{1}{\tau_0}\partial J - \frac{D_0}{\tau_0}\partial_x^2 \rho = 0$
- Mas, pela equação de continuidade sabemos que

$$\partial_x J = -\partial_t \rho$$

e assim vemos que

$$\partial_t^2 \rho + \frac{1}{\tau_0}\partial_t \rho - \frac{D_0}{\tau_0}\partial_x^2 \rho = 0$$

ou

$$\tau_0 \partial_t^2 \rho + \partial_t \rho - D_0 \partial_x^2 \rho = 0$$

- Essa é a equação de Maxwell-Cattaneo (ou do Telegrafista)
- Veja agora que interessante: Se $\rho(t, x)$ variar muito pouco no tempo, i.e., se

$$|\partial_t \rho| \gg \left|\tau_0 \partial_t^2 \rho\right|,$$

nesse caso recuperamos a equação de difusão.

Equação de Maxwell-Cattaneo

- $\partial_t^2 \rho + \frac{1}{\tau_0}\partial_t \rho - \frac{D_0}{\tau_0}\partial_x^2 \rho = 0$
- Se $\rho(t,x)$ variar muito pouco no tempo, i.e., se $|\partial_t \rho| \gg \left|\tau_0 \partial_t^2 \rho\right|$, nesse caso recuperamos a equação de difusão.
- Alternativamente, se $\rho(t,x)$ variar muito no tempo e espaço

$$|\partial_t \rho| \ll \left|\tau_0 \partial_t^2 \rho\right| ,$$

acabamos aproximadamente com

$$\tau_0 \partial_t^2 \rho - D_0 \partial_x^2 \rho = 0$$

ou

$$\frac{1}{c^2}\partial_t^2 \rho - \partial_x^2 \rho = 0$$

- É a equação de onda para $\rho(t,x)$ com velocidade de propagação dada por $c = \sqrt{\frac{D_0}{\tau_0}}$, que pode ser menor que a velocidade da luz se τ_0 (que não é $= 0$) for grande o suficiente.

Equação de Maxwell-Cattaneo

- $\partial_t^2 \rho + \frac{1}{\tau_0}\partial_t \rho - \frac{D_0}{\tau_0}\partial_x^2 \rho = 0$
- De fato, tomando o Fourier da equação de Maxwell-Cattaneu obtemos

$$\left(-\omega^2 \tau_0 + i\omega + k^2 D_0\right) \tilde{\rho}(\omega, k) = 0$$

ou , a equação que define o modo $\omega = \omega(k)$

$$0 = -\omega^2(k)\tau_0 + i\omega(k) + k^2 D_0 \implies \omega(k) = \frac{i \mp i\sqrt{1 - 4k^2 D_0 \tau_0}}{2\tau_0}$$

- Quando $k \to 0$,

$$\omega(k) = \frac{i}{2\tau_0} \mp \frac{i}{2\tau_0}\left(1 - 2k^2 D_0 \tau_0\right) = \begin{cases} ik^2 D_0 & \to \text{ difusão} \\ \frac{i}{\tau_0} + O(k^2) & \to \text{ modo não-hidro.} \end{cases}$$

- Então, $\lim_{k\to 0} v_g(k) = 2kD_0$, o que é OK.
- Quando $k \to \infty$, $\quad \omega(k) = \pm k\sqrt{\frac{D_0}{\tau_0}} \implies \lim_{k\to\infty} v_g(k) = \sqrt{\frac{D_0}{\tau_0}}$

que é finito, como havíamos antecipado.

Equação de Maxwell-Cattaneo

- Assim, vimos como "resolver" o problema da propagação infinita da equação de difusão ao custo da introdução de uma nova quantidade (*o tempo de relaxação* τ_0).
- Para fluidos, pode-se mostrar que o τ_0 é basicamente o tempo que leva para que uma molécula no gás colida com a outra (*tempo livre médio*). A difusão do ar e outras substâncias em geral do nosso cotidiano tem $\tau_0 \sim 10^{-6}$ segundos e assim, em situações usuais onde a densidade $\rho(t, x)$ não varia muito no tempo, nós nunca "vemos" essa quantidade τ_0 e a equação de difusão "padrão" é uma boa aproximação.
- Em fluidos *relativísticos* (onde a densidade ou a velocidade do fluido é da ordem da velocidade da luz) esse τ_0 é importante.