

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

Isabel Tamara Pedron

Estudos em Difusão Anômala

*Tese de Doutorado submetida ao
Departamento de Física da Uni-
versidade Estadual de Maringá.*

ORIENTADOR: Prof. Dr. Renio dos Santos Mendes

Maringá
2003

A todos os meus familiares

Agradecimentos

A Renio dos Santos Mendes, pela orientação dedicada e competente.

A Ervin Kaminski Lenzi e, especialmente, a Luís Carlos Malacarne, pela colaboração.

Aos colegas de pós-graduação, pela amizade e companheirismo nesta jornada.

A toda a minha família, em particular a minha mãe, pelo apoio constante. Muito obrigada por tudo.

Ao Lucas, por compreender as constantes ausências. Ou talvez não ...

À Universidade Estadual do Oeste do Paraná, campus de Marechal Cândido Rondon.

À CAPES, pelo suporte financeiro.

A todos que, de uma forma ou de outra, colaboraram para o bom êxito deste trabalho.

Sumário

Resumo	7
Abstract	8
1 Introdução	9
2 A difusão usual e a equação de Fokker-Planck	15
2.1 A difusão usual	15
2.2 A equação de Fokker-Planck	17
2.3 Solução da equação de difusão (Fokker-Planck)	20
2.3.1 Solução usual	21
2.3.2 Solução usando <i>ansatz</i>	22
2.3.3 Solução da equação de difusão com termo de fonte	22
2.3.4 Solução com termo de arraste linear	23
2.3.5 Solução com termo de arraste linear utilizando <i>ansatz</i>	25
2.4 Estado estacionário	26
2.5 Equilíbrio	27
3 Uma equação não linear para difusão anômala	30
3.1 A equação de difusão anômala correlacionada	30
3.2 Difusão turbulenta: a equação de Richardson	32
3.3 A difusão em fractais	32
3.4 A equação de difusão anômala generalizada	34
3.5 Solução unificando lei de potência e exponencial alongada	35

3.5.1	Em busca do <i>ansatz</i>	35
3.5.2	Uma solução exata	38
3.5.3	O deslocamento quadrático médio	38
3.5.4	A solução tipo fonte puntual	42
4	Equação de difusão anômala não linear com termo de fonte e de arraste	43
4.1	A equação com termo de fonte e de arraste	43
4.2	Equação não linear com termo de fonte dependente do tempo	45
4.3	Exemplos com fontes	46
4.3.1	Fonte constante	46
4.3.2	Fonte com termo de potência geral	49
4.4	Presença de forças externas	50
4.5	Solução estacionária	51
4.6	Equilíbrio e mecânica estatística não extensiva	53
5	Equação não linear N-dimensional com coeficientes dependentes do tempo	57
5.1	Equação linear com coeficientes dependentes do tempo	58
5.2	Equação não linear com coeficientes dependentes do tempo	61
5.3	Comportamentos difusivos devido à dependência temporal nos coeficientes	63
6	A equação logarítmica de difusão	69
6.1	Equação logarítmica de difusão	69
6.2	Presença de forças externas	71
6.3	Equação logarítmica com termo de fonte	72
6.4	Caso estacionário	72
6.5	Unificação das equações de difusão em meios porosos e logarítmica	73
7	A equação de Fokker-Planck não linear fracionária	75
7.1	Difusão anômala e equações fracionárias	76

7.2	Equação de Fokker-Planck não linear	77
7.3	Derivadas fracionárias	79
7.4	Equação de Fokker-Planck não linear fracionária	82
7.4.1	O arraste $F = -k_1x$	83
7.4.2	O arraste $F = -k_1x + k_\gamma x x ^{\gamma-1}$	84
8	Conclusão	87

Resumo

Este trabalho versa sobre difusão anômala, especificamente a proposição e solução exata de um conjunto de equações não lineares de difusão. Tais equações trazem não linearidades, dependência espacial no coeficiente de difusão, dependência temporal nos coeficientes da equação, derivadas fracionárias e uma combinação desses elementos. Primeiramente, é incorporado um coeficiente de difusão com dependência espacial, $D \propto r^{-\theta}$, numa equação tipo Fokker-Planck não linear em dimensão fractal. Sua solução é uma gaussiana generalizada que unifica o comportamento tipo lei de potência e exponencial alongada. Também são incluídos na equação um arraste linear e um termo de fonte, sendo que este último pode acentuar o caráter sub(super)difusivo na presença da não linearidade. No caso estacionário, a solução é tal que maximiza a entropia de Tsallis. Além disso, a combinação dos índices que caracterizam não linearidade e dependência espacial pode levar à subdifusão, superdifusão ou mesmo difusão usual. Por outro lado, ao se considerar uma equação não linear, uma escolha conveniente na dependência temporal dos coeficientes também conduz a esses processos. Neste caso, equações não lineares com solução não gaussiana podem conduzir à difusão usual, da mesma forma que surgem anomalias em processos descritos por equações lineares e solução gaussiana. Nessa linha de generalizações, emerge, em um novo contexto, a equação logarítmica de difusão, que é unificada com a equação de difusão anômala correlacionada (equação de difusão em meios porosos). Por fim, a introdução de uma derivada fracionária espacial em uma equação do tipo Fokker-Planck não linear com dependência espacial no coeficiente de difusão e um arraste mais geral representa mais um passo na generalização dessas equações. Assim, o espectro de possibilidades na descrição de processos difusivos anômalos é largamente ampliado quando os casos acima são levados em conta.

Abstract

This work concerns the anomalous diffusion, specifically the proposition and the exact solution of a collection of non-linear diffusion equations. Such equations present non-linearities, spatial dependence in the diffusion coefficient, temporal dependence in the equation coefficients, fractional derivatives and a mix of these elements. First of all, a diffusion coefficient is incorporated with spatial dependence, $D \propto r^{-\theta}$, in a Fokker-Planck non-linear equation in a fractal dimension. Its solution is a generalized gaussian which unifies the power-law and stretched exponential behaviors. Furthermore, linear drift and source term are included in the equation, where the latter enhances the sub(super)diffusive character in the presence of the non-linearity. In the stationary case, the solution is the one that maximizes the Tsallis entropy. In addition, the combination of the index that characterizes non-linearity and spatial dependence may conduct to subdiffusion, superdiffusion or even usual diffusion. On the other hand, when a non-linear equation is considered, a convenient choice of the temporal coefficients also conduct to these processes. In this case, non-linear equations with non-gaussian solutions may conduct to the usual diffusion, analogous as anomalies arise in processes described by linear equations and gaussian solutions. In this line of generalizations, in a new context, the logarithmic diffusion equation appears, which is unified with the correlated anomalous diffusion equation. Finally, the introduction of the fractional spatial derivative in a Fokker-Planck non-linear equation with spatial dependence in the diffusion coefficient and a more general drift is another step in the generalization of these equations. Thus, when the above cases are taken into account, the spectrum of possibilities in the description of the anomalous diffusion processes is enlarged.

Capítulo 1

Introdução

Neste trabalho é desenvolvido um estudo sobre difusão anômala, especificamente a investigação de um conjunto de equações de difusão não lineares e suas respectivas soluções. Nesta investigação são levadas em conta não linearidades, dependência espacial no coeficiente de difusão, dependência temporal nos coeficientes da equação, derivadas fracionárias e uma mistura desses elementos. A difusão anômala é um tema muito amplo, por isso, vamos situar os tópicos desenvolvidos neste trabalho partindo da difusão usual.

A difusão é um fenômeno muito comum na natureza e, em geral, ocorre quando um sistema encaminha-se para o estado de equilíbrio. Portanto é de importância fundamental em processos físicos, químicos e biológicos. Em um processo de difusão num conjunto de elementos que se movem - energia, momento linear, átomos, moléculas, produtos químicos, células, animais, etc. - cada elemento realiza uma trajetória "randômica". Como resultado desse movimento individual altamente irregular, o conjunto se difunde. Num nível macroscópico, este comportamento coletivo, contrastando com o movimento individual microscópico, apresenta grande regularidade e segue leis dinâmicas bem definidas.

A formulação estocástica destes fenômenos de transporte em termos de um caminho aleatório, bem como a descrição através da equação de difusão são dois conceitos fundamentais na teoria de difusão em geral. Além disso, a dependência linear no crescimento temporal do deslocamento quadrático médio, $\langle x^2(t) \rangle \propto t$,

ou, de forma equivalente, da variância (quando $\langle x \rangle \neq 0$), é uma característica do movimento browniano e, portanto, da difusão usual. Como tal, é uma consequência direta do teorema do limite central e da natureza markoviana do processo estocástico subjacente [1].

Em contraste, a difusão anômala, em geral, tem como característica o crescimento não linear da variância no decorrer do tempo, ou seja, a difusão será considerada anômala se houver desvio no comportamento enunciado no parágrafo anterior. Um marco no estudo da difusão anômala é o tratado de Richardson sobre difusão turbulenta, de 1926 [2]. Já no contexto da teoria de transportes, esse tipo de difusão tem sido mais largamente estudado desde o final da década de 60. A difusão anômala tem atraído a atenção de muitos pesquisadores nos últimos anos e, graças a sua universalidade na natureza, é alvo de numerosos estudos tanto teóricos quanto experimentais. Em particular, ela joga um papel fundamental na análise de uma grande classe de sistemas tais como difusão em plasmas [3], difusão em fluidos turbulentos [4, 5], transporte de fluidos em meios porosos [6], difusão em fractais [7], difusão anômala em superfícies líquidas [8] e análise de histogramas de batidas do coração em indivíduos saudáveis [9], entre outros sistemas físicos.

Na descrição do comportamento anômalo, o crescimento da variância pode ser do tipo lei de potência

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \propto t^\eta, \quad (1.1)$$

ou apresentar outro padrão, como o crescimento logarítmico por exemplo. Sob essa classificação, quando $\eta > 1$, temos um processo superdifusivo, $\eta < 1$, um processo subdifusivo e $\eta = 1$ descreve uma difusão normal. Micelas CTAB dissolvidas em água salgada [10, 11], dinâmica caótica devido a vôos e aprisionamento [12, 13] e difusão anômala em fluidos girantes bidimensionais [14, 15] são exemplos nos quais aparecem processos superdifusivos. O mesmo comportamento tem sido observado em movimentos bacterianos [16], em transporte em plasma turbulento [17] e mesmo no padrão de vôo de um albatroz [18], além da referida difusão turbulenta de Richardson, entre outros sistemas. O regime subdifusivo se apresenta no transporte de portadores de carga em semicondutores amorfos [19, 20], difusometria NMR em

percolados [21], transporte em geometrias fractais [22, 23], na dinâmica de uma conta em uma rede polimérica [24, 25], entre outros exemplos.

Numa difusão anômala, a variância pode não ser finita, por exemplo, a do tipo Lévy, embora apresente um índice bem definido que caracteriza o comportamento anômalo. Diferentemente desta, a difusão anômala correlacionada pode apresentar um segundo momento finito, por exemplo, a descrição do transporte em meios porosos. Além disso, o mecanismo que dá origem à difusão anômala pode diferir, dependendo do sistema físico. Nesse sentido, alguns fatores podem induzir a manifestações atípicas nos fenômenos de transportes, como não homogeneidade no meio onde ocorre a difusão e desordem geométrica, a exemplo da que surge em estrutura fractal. Esses fatores podem ter dois tipos de efeitos nas propriedades de difusão:

- Podem afetar apenas o valor dos coeficientes de transporte (constante de difusão, por exemplo) quando comparados com sistemas ordenados.
- Podem alterar de várias formas as leis do movimento browniano (crescimento não linear no tempo do deslocamento quadrático médio é um caso típico).

É nesse segundo efeito que se localiza a difusão anômala. Partindo do fato de que as leis usuais do movimento browniano estão vinculadas ao teorema do limite central da teoria de probabilidades, a sua forma usual pode falhar quando a difusão anômala ocorre. Em particular, as manifestações anômalas causadas ou por distribuições largas (nas quais podem, inclusive, divergir o primeiro e o segundo momentos), ou por correlações de longo alcance, são significativas. Esses mecanismos estatísticos podem estar presentes *a priori* no problema e conduzidos por alguma razão física subjacente (por exemplo, correlações de longo alcance no campo de velocidades de um fluido turbulento), sendo assim induzidos pela própria dinâmica do sistema. Um exemplo claro advém da difusão anômala do tipo Lévy, que se apóia na validade do teorema do limite central generalizado, de Lévy-Gnedenko, que tem como forma estável as distribuições de Lévy [26].

Cada uma das situações apresentadas nos parágrafos anteriores pode ser caracterizada por equações de difusão em um contexto termoestatístico, seja ele descrito pela mecânica estatística usual ou pela mecânica estatística não extensiva. Para

descrever a difusão do tipo Lévy podemos utilizar uma equação de difusão com derivadas fracionárias [27] e suas soluções são as distribuições de Lévy. Para a difusão anômala correlacionada, tem sido aplicada com sucesso uma equação de difusão não linear do tipo Fokker-Planck [6, 28, 29, 30, 31].

Uma característica interessante da equação de Fokker-Planck não linear é que soluções estacionárias, e algumas soluções particulares dependentes do tempo, são tais que maximizam a entropia proposta por Tsallis. A conexão entre o formalismo de Tsallis [32, 33] e esta equação foi primeiro apontada por Plastino e Plastino [28]. Os resultados deste trabalho foram ampliados por Tsallis e Bukman [31], os quais consideraram uma força externa mais geral, bem como uma generalização da equação. Uma dinâmica microscópica fenomenológica dando origem a esse tipo de equação é apresentada em [34], bem como equações generalizando o caso de difusão com coeficiente constante em [35]. A termoestatística generalizada, baseada na entropia não extensiva de Tsallis, aparenta ser um ambiente natural tanto para a difusão anômala correlacionada como para a difusão anômala do tipo Lévy [36, 37, 38, 39]. Nesse contexto, a não linearidade da equação de Fokker-Planck associada, no caso da difusão anômala correlacionada, pode ser conectada ao índice entrópico q da entropia de Tsallis e às respectivas distribuições generalizadas.

Cabe mencionar que caminhadas aleatórias, equação mestra e equações generalizadas de Langevin podem ser relacionadas à difusão anômala correlacionada e de Lévy. Entretanto, o emprego de equações diferenciais parciais à descrição da difusão anômala proporciona um tratamento mais simples quando temos campos externos aplicados ao sistema, mantendo, de forma geral, todas as propriedades presentes nos formalismos acima. Empregaremos neste trabalho, essencialmente, equações de difusão.

É possível simular o comportamento anômalo da difusão através de generalizações da equação de difusão ordinária. Primeiramente isso pode ser feito introduzindo uma dependência temporal ou espacial apropriada nos coeficientes desta equação. Num segundo momento, a introdução de derivadas fracionárias e não linearidades conduz à generalizações da equação de difusão e a uma ampla classe de processos difusivos. Esses procedimentos serão empregados no desenvolvimento deste estudo.

A estrutura deste trabalho está distribuída como segue. No capítulo 2 são apresentadas as equações de difusão e de Fokker-Planck usuais, no qual delineamos os principais pontos que serão generalizados nos capítulos subseqüentes. São apresentadas as soluções para as equações contendo apenas o termo difusivo, bem como incluindo termo de fonte e de arraste. Neste último caso, é revisto o exemplo com uma força harmônica presente, no conhecido processo de Orstein-Uhlenbeck. A solução estacionária da equação de Fokker-Planck também é apresentada, especificamente representada pela distribuição de Boltzmann. Concluindo o capítulo, uma conexão entre esta distribuição e a mecânica estatística usual de equilíbrio é estabelecida através da maximização da entropia de Boltzmann-Gibbs.

No terceiro capítulo é proposta uma equação de difusão anômala não linear [40]. Essa equação, ao considerar uma dependência espacial no coeficiente de difusão e uma dimensão fractal, unifica a equação de difusão anômala correlacionada (equação de difusão em meios porosos), a equação de difusão de Richardson e a equação de difusão anômala em fractais de O'Shaughnessy-Procaccia. A solução é encontrada interpolando os comportamentos do tipo lei de potência e exponencial alongada. Chega-se, portanto, a uma gaussiana generalizada que exhibe comportamentos difusivos peculiares.

O capítulo 4 traz a incorporação, na equação proposta no capítulo anterior, de termos de fonte e de arraste [41]. Contrastando com o único tipo de solução obtida no capítulo 3, neste capítulo expomos três classes de soluções: a dependente do tempo que envolve forças externas, a com termo de fonte e a estacionária. Quando possível, as soluções encontradas são conectadas à mecânica estatística não extensiva através da maximização da entropia de Tsallis.

Uma equação de Fokker-Planck não linear N -dimensional com dependência temporal nos coeficientes é proposta no quinto capítulo [42]. Uma ampla classe de comportamentos difusivos é verificada a partir de escolhas apropriadas na dependência temporal de tais coeficientes. Em geral, comportamentos difusivos anômalos são descritos por distribuições não gaussianas, porém veremos a possibilidade de outros padrões nesta descrição, quando parâmetros dependentes do tempo são introduzidos. Verifica-se, assim, como a dependência temporal nos coeficientes conduz a

comportamentos difusivos anômalos.

No capítulo 6, investiga-se uma equação logarítmica de difusão, obtendo-se soluções análogas às do capítulo 4. Essa equação pode ser vista como uma alternativa para o caso limite em que o expoente que caracteriza a não linearidade do termo difusivo, na equação de difusão anômala correlacionada, tende a zero. Neste caso, as soluções não estacionárias apresentadas são do tipo lorentziana. Além disso, estabelecemos uma unificação da equação logarítmica com a equação de difusão anômala correlacionada, gerando um cenário único para ambas.

O capítulo 7 apresenta uma equação de Fokker-Planck não linear com derivada fracionária (espacial), a qual inclui também uma dependência espacial no coeficiente de difusão [43]. As soluções são obtidas levando em conta um termo de arraste que, em certo sentido, amplia o arraste linear apresentado nos capítulos 4 e 5. Também é feita uma breve exposição do cálculo envolvendo derivadas fracionárias.

Cabe ressaltar que a exposição deste manuscrito, que é de caráter eminentemente teórico, é tal que coloca em perspectiva crescente o grau de generalização das equações envolvidas. Apresentamos, por fim, no capítulo 8, as considerações finais.

Capítulo 2

A difusão usual e a equação de Fokker-Planck

A difusão de partículas pode ser estudada considerando-se a trajetória devido às forças externas e às advindas das outras partículas. Numa boa aproximação, essas últimas trazem um efeito aleatório. Assim, temos equações que envolvem grandezas aleatórias. Tais equações são, em geral, denominadas equações de Langevin. Alternativamente, podemos focar o comportamento médio das grandezas relevantes através do estudo de suas probabilidades. Nesse caso, a equação que descreve a evolução das próprias probabilidades é a equação de Fokker-Planck. Relacionada a esta equação, iniciaremos a apresentação deste capítulo de revisão com a equação de difusão e, posteriormente, investigaremos suas soluções, incluindo casos com força externa e termo de fonte. Obteremos a equação de Fokker-Planck, também apresentando exemplos com força externa linear e o caso estacionário.

2.1 A difusão usual

A descrição da difusão envolve um modelo matemático baseado em uma hipótese fundamental ou "lei". Existem duas escolhas comuns para tal lei [44]. A mais usual, conhecida como lei de Fick da difusão, utiliza um coeficiente de difusão e é a lei

que geralmente é citada na descrição da difusão. A outra escolha, a qual não tem um nome formal, envolve um coeficiente de transferência de massa. A opção pela lei de Fick leva a descrições comuns na física, físico-química e biologia, e é a empregada neste trabalho. Por outro lado, a segunda escolha resulta em correlações desenvolvidas explicitamente em engenharia química e usadas implicitamente na cinética química e em medicina.

Seja ρ a densidade do elemento que se difunde e \mathbf{J} a densidade de corrente (quantidade da substância que atravessa uma unidade de área normal à direção de fluxo, por unidade de tempo). Em termos desta grandeza, uma grande parte dos fenômenos de difusão obedece à seguinte lei linear, a anunciada lei de Fick:

$$\mathbf{J} = -D\nabla\rho \quad (2.1)$$

com $\rho = \rho(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{r} = (x_1, x_2, x_3)$ e D sendo o coeficiente de difusão ou difusividade, o qual dependerá das propriedades do meio. Esse coeficiente pode ser expresso por uma matriz, no caso geral anisotrópico, pois meios anisotrópicos têm propriedades de difusão diferentes em diferentes direções. Entretanto iremos considerar aqui apenas o caso isotrópico (D é um número real positivo). O coeficiente de difusão indica o quão rápida a quantidade medida por ρ difunde-se de regiões de altas concentrações para regiões de baixas concentrações. Por outro lado, o sinal negativo combinado com o gradiente na lei de Fick diz que a difusão tende a ocorrer da região de maior densidade para a de menor densidade.

Vamos considerar que a substância difundida não é nem absorvida nem emitida pelo meio. Então a lei de conservação para esta substância implica uma equação de continuidade

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0. \quad (2.2)$$

Combinando essas duas equações, chegamos à equação de difusão

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = D\nabla^2\rho. \quad (2.3)$$

Se o sistema estiver sob a ação de uma força externa, ou arraste, a densidade de corrente é

$$\mathbf{J} = -D\nabla\rho + \mu\mathbf{F}\rho, \quad (2.4)$$

com μ representando a mobilidade. A equação de difusão com arraste é então escrita como

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \nabla^2 \rho - \mu \nabla \cdot (\mathbf{F} \rho). \quad (2.5)$$

A equação de difusão também é modificada se for possível a substância ser criada (emitida) ou destruída (absorvida). Neste caso, a equação de continuidade é

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = \delta, \quad (2.6)$$

na qual δ é a densidade da fonte, onde $\delta > 0$ e $\delta < 0$ estão associados à criação e absorção de substância, respectivamente. Portanto, a correspondente equação de difusão, não-homogênea, é dada por

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \nabla^2 \rho + \delta. \quad (2.7)$$

Evidentemente, podemos ter os diversos fenômenos ocorrendo simultaneamente, sendo descritos pela equação

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \nabla^2 \rho - \mu \nabla \cdot (\mathbf{F} \rho) + \delta. \quad (2.8)$$

2.2 A equação de Fokker-Planck

Consideremos agora o movimento de uma partícula de massa m imersa num líquido. Neste caso, a solução completa do sistema macroscópico consistiria na solução de todas as equações microscópicas do sistema. Como não podemos, geralmente, fazer isso, usamos a descrição estocástica, isto é, descrevemos o sistema por meio de variáveis macroscópicas, as quais flutuam de forma estocástica. Com uma boa aproximação, a partícula está sujeita a uma força viscosa, que suporemos proporcional a sua velocidade, e à forças $F_a(t)$, de caráter aleatório, devidas ao impacto da partícula com as moléculas do líquido [45]. Vamos levar em conta, também, que ela está sujeita a uma força externa, $F(x)$. Por simplicidade, enfoquemos um movimento unidimensional ao longo do eixo x . A equação de movimento é escrita como

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = F(x) - \eta \frac{dx}{dt} + F_a(t), \quad (2.9)$$

com η , uma constante positiva, representando o coeficiente de atrito, uma medida da interação da partícula com seu meio. Para os casos em que a massa da partícula é desprezível, essa equação resulta em

$$\frac{dx}{dt} = f(x) + \zeta(t) , \quad (2.10)$$

na qual $f(x) = F(x)/\eta = \mu F(x)$ e $\zeta(t) = F_a(t)/\eta$. A força aleatória possui as propriedades

$$\begin{aligned} \langle \zeta(t) \rangle &= 0 \\ \langle \zeta(t)\zeta(t') \rangle &= \Gamma\delta(t-t') , \end{aligned} \quad (2.11)$$

isto é, as variáveis $\zeta(t)$ e $\zeta(t')$ são independentes para $t \neq t'$ e, em média, nulas. A equação (2.10), suplementada pelas propriedades em (2.11), é um exemplo de equação de Langevin. Esta é uma equação diferencial de natureza estocástica (aleatória).

Com base na Eq. (2.10) vamos encontrar a densidade de probabilidade $\rho(x, t, x_0)$ de que a solução esteja entre x e $x + dx$, no instante de tempo t , quando $x = x_0$ no instante inicial $t = t_0$. Para tal, e com procedimento análogo ao desenvolvido em [46], vamos discretizar t em intervalos τ e denotar por x_n a posição da partícula no instante $t = n\tau$. A equação de Langevin é então aproximada por

$$x_{n+1} = x_n + \tau f(x_n) + \sqrt{\tau\Gamma}\xi_n , \quad (2.12)$$

com $\xi_n = \sqrt{\tau/\Gamma}\zeta_n$. Com isso $\delta(t-t') \rightarrow \delta_{nn'}/\tau$, de modo que $\langle \xi_n \rangle = 0$ e $\langle \xi_n \xi_{n'} \rangle = \delta_{nn'}$.

Seja $\rho_n = \rho(x_n)$ a distribuição de probabilidades da variável x_n e $g_n(k)$ a correspondente função característica dada por

$$g_n(k) = \langle e^{ikx_n} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx_n} \rho_n dx_n , \quad (2.13)$$

de forma que

$$g_{n+1}(k) = \langle e^{ikx_{n+1}} \rangle = \langle e^{ik[x_n + \tau f(x_n) + \sqrt{\tau\Gamma}\xi_n]} \rangle. \quad (2.14)$$

Nas integrações subseqüentes os limites de integração serão omitidos.

Como x_n e ξ_n são independentes, podemos escrever

$$g_{n+1}(k) = \langle e^{ik[x_n + \tau f(x_n)]} \rangle \langle e^{ik\sqrt{\tau\Gamma}\xi_n} \rangle . \quad (2.15)$$

A partir desse resultado, vamos obter a expansão de $g_{n+1}(k)$ em τ , mantendo apenas termos de primeira ordem. Para tal, aplicamos

$$\langle e^{ikx_n} e^{ik\tau f(x_n)} \rangle \approx \langle e^{ikx_n} \rangle + ik\tau \langle e^{ikx_n} f(x_n) \rangle \quad (2.16)$$

e

$$\langle e^{ik\sqrt{\tau\Gamma}\xi_n} \rangle \approx \langle 1 + ik\sqrt{\tau\Gamma}\xi_n + \frac{(ik\sqrt{\tau\Gamma}\xi_n)^2}{2!} \rangle = 1 - \frac{1}{2}k^2\tau\Gamma . \quad (2.17)$$

Tais resultados conduzem a

$$g_{n+1}(k) \approx g_n(k) + \tau \left(ik \langle e^{ikx_n} f(x_n) \rangle - \frac{1}{2}k^2\Gamma g_n(k) \right) . \quad (2.18)$$

Por outro lado, temos que

$$ik \langle e^{ikx_n} f(x_n) \rangle = ik \int e^{ikx_n} f(x_n) \rho_n dx_n = - \int e^{ikx_n} \frac{d}{dx_n} [f(x_n) \rho_n] dx_n , \quad (2.19)$$

sendo que realizamos uma integração por partes e consideramos as condições de contorno naturais $\rho_n(\pm\infty) = 0$. De maneira análoga, obtemos, após uma dupla integração por partes,

$$-k^2 g_n(k) = (ik)^2 \int e^{ikx_n} \rho_n dx_n = \int e^{ikx_n} \frac{d^2 \rho_n}{dx_n^2} dx_n , \quad (2.20)$$

e a expressão (2.18) é reescrita como

$$\begin{aligned} \int e^{ikx_{n+1}} \rho_{n+1} dx_{n+1} - \int e^{ikx_n} \rho_n dx_n = & - \tau \int e^{ikx_n} \frac{d}{dx_n} [f(x_n) \rho_n] dx_n \\ & + \frac{\tau\Gamma}{2} \int e^{ikx_n} \frac{d^2 \rho_n}{dx_n^2} dx_n , \end{aligned} \quad (2.21)$$

ou, ainda,

$$\int e^{ikx_n} \left\{ \frac{\rho_{n+1} - \rho_n}{\tau} + \frac{d}{dx} [f(x_n) \rho_n] - \frac{\Gamma}{2} \frac{d^2 \rho_n}{dx_n^2} \right\} dx_n = 0 . \quad (2.22)$$

Isto implica

$$\frac{\rho_{n+1} - \rho_n}{\tau} = \frac{\Gamma}{2} \frac{d^2 \rho_n}{dx_n^2} - \frac{d}{dx} [f(x_n) \rho_n] . \quad (2.23)$$

Tomando o limite $\tau \rightarrow 0$ e reescrevendo ρ_n como $\rho(x, t)$ e $f(x_n)$ como $f(x, t)$, somos conduzidos a

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = \frac{\Gamma}{2} \frac{\partial^2 \rho(x, t)}{\partial x^2} - \frac{\partial}{\partial x} [f(x, t) \rho(x, t)], \quad (2.24)$$

ou, de forma geral, com $D = \Gamma/2$,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \nabla^2 \rho - \mu \nabla \cdot (\mathbf{F} \rho). \quad (2.25)$$

Esta equação é denominada equação de Fokker-Planck (EFP) e é a equação de evolução temporal da densidade de probabilidades $\rho(x, t)$. Note-se que esta equação tem a mesma estrutura da equação de difusão. Devido a essa semelhança, tomaremos a liberdade de empregar em vários contextos as denominações equação de Fokker-Planck e equação de difusão indistintamente. Enfatizamos, além disso, que a resolução da EFP leva a funções distribuição, a partir das quais qualquer média de variáveis macroscópicas pode ser encontrada por integração. Esta equação não apenas descreve propriedades estacionárias, mas também a dinâmica dos sistemas, se a solução dependente do tempo apropriada é usada.

2.3 Solução da equação de difusão (Fokker-Planck)

A solução da equação de difusão pode ser efetuada através de procedimentos usuais utilizados na resolução de equações diferenciais parciais. Em particular, um procedimento possível seria considerar *a priori* alguma classe de soluções factíveis. Poderíamos, neste caso, propor um tipo de solução, ou *ansatz*, e, substituindo-o na equação, obter a sua forma exata para que se verificasse a solução. Empregaremos sistematicamente este método em capítulos posteriores. Entretanto, com o objetivo de motivar a escolha do *ansatz*, iniciaremos a busca de soluções empregando outros métodos. Como ilustração, apresentaremos difusão sem termo de fonte e sem força externa, com fonte proporcional à densidade e com força linear. Estes exemplos serão generalizados em outros capítulos.

2.3.1 Solução usual

A solução da equação de difusão (2.3) pode ser levada a efeito através da transformada de Fourier,

$$\tilde{\rho}(\mathbf{k}, t) = \int \rho(\mathbf{r}, t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d^N \mathbf{r}, \quad (2.26)$$

sendo os limites de integração $-\infty$ e ∞ para cada integral. Por sua vez, usando a Eq. (2.3), notamos que

$$\frac{d\tilde{\rho}(\mathbf{k}, t)}{dt} = -Dk^2 \tilde{\rho}(\mathbf{k}, t), \quad (2.27)$$

com $k^2 = k_1^2 + k_2^2 + \dots + k_N^2$. Temos assim,

$$\tilde{\rho}(\mathbf{k}, t) = \tilde{\rho}(\mathbf{k}, 0) e^{-Dk^2 t} \quad (2.28)$$

e, pela transformada inversa,

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \int \tilde{\rho}(\mathbf{k}, t) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \frac{d^N \mathbf{k}}{2\pi^N} = \int G(\mathbf{r}' - \mathbf{r}, t) f(\mathbf{r}') d^N \mathbf{r}'. \quad (2.29)$$

Aqui, $f(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r}, 0)$ é a condição inicial e

$$G(\mathbf{r}' - \mathbf{r}, t) = \int e^{-Dtk^2 + i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}' - \mathbf{r})} \frac{d^N \mathbf{k}}{2\pi^N} = \frac{1}{(4\pi Dt)^{N/2}} e^{-\frac{1}{4Dt} |\mathbf{r}' - \mathbf{r}|^2} \quad (2.30)$$

é a função de Green da equação de difusão.

Vamos considerar uma solução tipo fonte puntual, ou seja, $f(\mathbf{r}) = \rho_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, que representa toda a substância concentrada em \mathbf{r}' no instante inicial. Então, $\rho(\mathbf{r}, t)$ assume a forma da função de Green:

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \frac{\rho_0}{(4\pi Dt)^{N/2}} e^{-\frac{1}{4Dt} |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2}. \quad (2.31)$$

Igualmente interessante é supor uma condição inicial do tipo gaussiana, isto é, $f(\mathbf{r}) = \rho'_0 e^{-\alpha |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2}$. Isso nos conduz à solução

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \frac{\rho'_0}{(1 + 4\alpha Dt)^{N/2}} \exp \left[-\frac{\alpha}{1 + 4\alpha Dt} |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2 \right], \quad (2.32)$$

que fornece também uma solução gaussiana com o tempo transladado, pois $\alpha/(1 + 4\alpha Dt) = 1/[4D(t + t_0)]$ com $t_0 = 1/(4D\alpha)$.

2.3.2 Solução usando *ansatz*

Como ilustração para o procedimento de encontrar uma solução via *ansatz*, vamos propor para a Eq. (2.3) uma solução gaussiana genérica, ou seja,

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \frac{e^{-\beta(t)|\mathbf{r}|^2}}{Z(t)} . \quad (2.33)$$

Aqui, sem perda de generalidade e para simplificar a notação, consideramos $\mathbf{r}' = 0$. O *ansatz* (2.33), quando substituído na equação da difusão, leva às equações

$$\begin{aligned} \frac{d\beta(t)}{dt} &= -4D[\beta(t)]^2 \\ \frac{1}{Z(t)} \frac{dZ(t)}{dt} &= 2DN\beta(t) , \end{aligned} \quad (2.34)$$

cujas soluções podem ser escritas como

$$\beta(t) = \frac{1}{4Dt} \quad \text{e} \quad Z(t) = Ct^{N/2} , \quad (2.35)$$

ao tomarmos como condição inicial $\rho(\mathbf{r}, 0) \propto \delta(\mathbf{r})$. Usando a condição de normalização $\int \rho(\mathbf{r}, t) d^N \mathbf{r} = \rho_0$, obtemos $C = (4\pi d)^{N/2} / \rho_0$. Substituindo estes valores em (2.33), reobtemos (2.31). Analogamente, se fosse substituído t por $t + t_0$ em (2.35) chegaríamos à solução (2.32).

É possível calcular agora, por exemplo, o deslocamento quadrático médio, comumente empregado para classificar o tipo de difusão,

$$\langle |\mathbf{r}|^2 \rangle = \frac{\int |\mathbf{r}|^2 \rho(\mathbf{r}, t) d^N \mathbf{r}}{\int \rho(\mathbf{r}, t) d^N \mathbf{r}} = 2NDt . \quad (2.36)$$

Essa dependência linear do deslocamento quadrático médio com o tempo, e portanto, da variância, é a marca registrada da difusão usual ou normal. *Desvios deste comportamento indicam a presença de difusão anômala*, como estudaremos ao longo deste trabalho.

2.3.3 Solução da equação de difusão com termo de fonte

Vamos tratar agora da solução da equação de difusão com um termo de fonte δ , um sorvedouro, por exemplo, assumindo que este termo seja proporcional à densi-

dade. Nesse caso, teríamos $\delta = -\alpha(t)\rho(\mathbf{r}, t)$, se $\alpha(t) > 0$ e, conseqüentemente,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D\nabla^2 \rho - \alpha(t)\rho. \quad (2.37)$$

Se ignorássemos o termo difusivo, a Eq. (2.37) seria escrita como

$$\frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial t} = -\alpha(t)\tilde{\rho}, \quad (2.38)$$

com solução $\tilde{\rho} = \rho_0 \exp[-\int_0^t \alpha(t')dt']$. Esse resultado sugere, para a solução da equação com termo de fonte, a forma

$$\rho(\mathbf{r}, t) = e^{-\int_0^t \alpha(t')dt'} \hat{\rho}(\mathbf{r}, t), \quad (2.39)$$

que, substituída na Eq. (2.37), conduz a

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = D\nabla^2 \hat{\rho}. \quad (2.40)$$

A solução desta equação já foi verificada anteriormente, portanto,

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \frac{\rho_0}{(4\pi Dt)^{N/2}} e^{-\int_0^t \alpha(t')dt'} e^{-\frac{1}{4Dt}|\mathbf{r}|^2}, \quad (2.41)$$

se empregarmos a solução (2.31) para $\hat{\rho}$, com a condição inicial $\rho(\vec{r}, 0) = \rho_0\delta(\vec{r})$.

2.3.4 Solução com termo de arraste linear

Em um exemplo muito conhecido, denominado processo de Ornstein-Uhlenbeck [47], as partículas estão sujeitas a um potencial harmônico, implicando um termo de arraste linear $\mathbf{F} = -\gamma\mathbf{r}$, com γ constante. Em uma dimensão, a equação de Fokker-Planck correspondente é

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \gamma \frac{\partial}{\partial x}(x\rho) + D \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}. \quad (2.42)$$

Aqui, empregaremos uma condição inicial concentrada num ponto, ou seja,

$$\rho(x, 0) = \delta(x - x_0). \quad (2.43)$$

Em contraste com o exemplo anterior, usamos $x_0 \neq 0$ para frisar que neste caso as diversas posições não são equivalentes. Além disso, usamos $\rho_0 = 1$.

A solução da Eq. (2.42) é encontrada mais facilmente se for realizada uma transformada de Fourier com respeito a x [45], isto é,

$$\rho(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} \tilde{\rho}(k, t) dk, \quad (2.44)$$

com

$$\tilde{\rho}(k, t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \rho(x, t) dx. \quad (2.45)$$

Para a transformada é obtida, então, a equação

$$\frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial t} = -\gamma k \frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial k} - Dk^2 \tilde{\rho}, \quad (2.46)$$

onde ocorrem apenas derivadas de primeira ordem. A condição inicial para a transformada de Fourier, tendo em vista (2.43), é

$$\tilde{\rho}(k, 0) = e^{ikx_0}. \quad (2.47)$$

Para resolver a Eq. (2.46) vamos introduzir a função

$$\tilde{\rho}(k, t) = \exp \left[\sum_{n=1}^{\infty} a_n(t) k^n \right], \quad (2.48)$$

a qual, substituída em (2.46), conduz a

$$\sum_{n=1}^{\infty} k^n \left(\frac{da_n}{dt} + \gamma n a_n \right) + Dk^2 = 0. \quad (2.49)$$

Para $n = 1$, temos a equação

$$\frac{da_1}{dt} + \gamma a_1 = 0$$

com solução

$$a_1(t) = a_1(0) e^{-\gamma t}. \quad (2.50)$$

Para $n = 2$, a correspondente equação é dada por

$$\frac{da_2}{dt} + \gamma 2a_2 + D = 0$$

e apresenta como solução

$$a_2(t) = -\frac{D}{2\gamma} (1 - e^{-2\gamma t}) + a_2(0) e^{-2\gamma t}. \quad (2.51)$$

As equações diferenciais para $n \geq 3$ têm a forma

$$\frac{da_n}{dt} + \gamma n a_n = 0 \quad \text{com} \quad a_n(t) = a_n(0)e^{-n\gamma t}. \quad (2.52)$$

Comparando (2.47) com (2.48), verificamos que $a_1(0) = ix_0$ e $a_n(0) = 0$ para $n \geq 2$. Então,

$$\tilde{\rho}(k, t) = e^{a_1(t)k + a_2(t)k^2} \quad (2.53)$$

e, realizando a transformada inversa (2.44), constatamos que

$$\rho(x, t) = \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi D(1 - e^{-2\gamma t})}} \exp \left[-\gamma \frac{(x - x_0 e^{-\gamma t})^2}{2D(1 - e^{-2\gamma t})} \right]. \quad (2.54)$$

Vamos supor agora que nosso processo tem como condição inicial

$$\rho(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{\pi\alpha}} \exp \left[-\frac{(x - x_0)^2}{\alpha} \right], \quad (2.55)$$

de maneira que, no limite $\alpha \rightarrow 0$, temos $\rho(x, 0) = \delta(x - x_0)$. Por sua vez, esta condição inicial tem como transformada de Fourier

$$\tilde{\rho}(k, 0) = e^{-(\alpha k^2)/4 + ikx_0}. \quad (2.56)$$

Portanto, ao compararmos essa última expressão com (2.48), verificamos que $a_1(0) = ix_0$, $a_2(0) = -\alpha/4$ e $a_n(0) = 0$ para $n \geq 3$. Finalmente, efetuando (2.44), obtemos

$$\rho(x, t) = \sqrt{\frac{\gamma}{\pi[2D - (2D - \alpha\gamma)e^{-2\gamma t}]}} \exp \left[-\gamma \frac{(x - x_0 e^{-\gamma t})^2}{2D - (2D - \alpha\gamma)e^{-2\gamma t}} \right]. \quad (2.57)$$

2.3.5 Solução com termo de arraste linear utilizando *ansatz*

Analogamente ao procedimento empregado para a equação de difusão sem força externa, podemos propor uma forma de solução para a equação (2.42). Isto é, escolheremos nosso *ansatz* como

$$\rho(x, t) = \frac{e^{-\beta(t)(x-x_c(t))^2}}{Z(t)}, \quad (2.58)$$

o qual, substituído em (2.42), conduz às equações

$$\frac{d\beta}{dt} = 2\beta\gamma - 4D\beta^2 \quad (2.59)$$

$$\frac{d\beta}{dt} + \frac{\beta}{x_c} \frac{dx_c}{dt} = \beta\gamma - 4D\beta^2 \quad (2.60)$$

$$x_0^2 \frac{d\beta}{dt} + 2\beta x_c \frac{dx_c}{dt} + \frac{1}{Z} \frac{dZ}{dt} = -\gamma + 2D\beta - 4Dx_c^2\beta. \quad (2.61)$$

De (2.59) e (2.60) temos

$$\frac{1}{x_c} \frac{dx_c}{dt} = -\gamma \quad \text{e} \quad x_c(t) = x_0 e^{-\gamma t}. \quad (2.62)$$

A solução da Eq. (2.59) é dada por

$$\beta(t) = \frac{\gamma}{2D + C e^{-2\gamma t}}, \quad (2.63)$$

com $C = (\gamma - 2D\beta_0)/\beta_0$, quando a condição inicial for $\beta(0) = \beta_0$, e $C = -2D$ para a condição inicial localizada. Além disso, a substituição de (2.60) em (2.61) implica

$$\frac{1}{Z} \frac{dZ}{dt} = -\gamma + 2D\beta,$$

cuja solução, com $Z(0) = Z_0$ e $\beta(0) = \beta_0$, pode ser escrita como

$$Z(t) = Z_0 \sqrt{\frac{2D\beta_0 - (2D\beta_0 - \gamma)e^{-2\gamma t}}{\gamma}}. \quad (2.64)$$

2.4 Estado estacionário

Diferentemente das soluções dependentes do tempo, para as quais levamos em conta forças específicas, vamos verificar de que maneira pode ser obtida a solução estacionária da equação de Fokker-Planck (2.25), no caso em que a força não depende explicitamente do tempo e advém de uma energia potencial [46]. Com esse objetivo, escrevemos essa equação como

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, t), \quad (2.65)$$

com $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ dada por

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \mu \mathbf{F}(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}, t) - D \nabla \rho(\mathbf{r}, t). \quad (2.66)$$

Na forma (2.65), a equação de Fokker-Planck é uma equação de continuidade, sendo $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ a densidade de corrente de probabilidade e $\rho(\mathbf{r}, t)$ a densidade de probabilidade, que deve estar normalizada em qualquer instante, isto é,

$$\int \rho(\mathbf{r}, t) d^N \mathbf{r} = 1. \quad (2.67)$$

Além disso, trataremos aqui somente do caso em que a corrente de probabilidade, num contorno de uma dada região, se anula para qualquer instante t . No caso unidimensional, isto conduz a $J(a,t) = J(b,t) = 0$, com a e b caracterizando o contorno do intervalo.

No regime estacionário, a densidade de probabilidade é independente de t , de modo que a corrente de probabilidade também será independente de t , tendo em vista a Eq. (2.66). No caso unidimensional, a corrente de probabilidade será também independente de x , pois o lado esquerdo da Eq. (2.65) se anula. Mas, como ela é nula nos extremos do intervalo, ela também deve ser nula em todo o intervalo. Assim como no caso unidimensional, usaremos a distribuição estacionária $\rho(\mathbf{r})$ satisfazendo a equação

$$\mu\mathbf{F}(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}) - D\nabla\rho(\mathbf{r}) = 0, \quad (2.68)$$

da qual

$$\nabla \ln \rho(\mathbf{r}) = \frac{\mu}{D}\mathbf{F}(\mathbf{r}). \quad (2.69)$$

Denotando por $V(\mathbf{r})$ o potencial correspondente à força $\mathbf{F}(\mathbf{r})$, isto é, $\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\nabla V(\mathbf{r})$, temos

$$\ln \rho(\mathbf{r}) = -\frac{\mu}{D}V(\mathbf{r}) + B \quad (2.70)$$

e, portanto,

$$\rho(\mathbf{r}) = Ae^{-\frac{\mu}{D}V(\mathbf{r})}, \quad (2.71)$$

sendo $A = \exp(B)$ uma constante de normalização.

2.5 Equilíbrio

Segundo a termoestatística, em qualquer estado final de equilíbrio termodinâmico a entropia deve ser máxima. Esse postulado de maximização está intimamente ligado a uma questão fundamental: a estabilidade térmica da matéria. Matematicamente, tal postulado conduz a um princípio variacional que dá origem a vários desdobramentos. Em particular, as probabilidades relativas aos diversos estados de um sistema são tais que maximizam sua entropia.

Nesse contexto, a entropia de Boltzmann-Gibbs,

$$S = -k_B \sum_{i=1}^W p_i \ln p_i, \quad (2.72)$$

ocupa um papel fundamental na mecânica estatística (usual), sendo $\{p_i\}$ as probabilidades associadas aos W estados acessíveis ao sistema e k_B a constante de Boltzmann. Passemos à maximização de $S(p_i)$ em relação ao conjunto $\{p_i\}$, respeitando os vínculos

$$U = \sum_{i=1}^W \epsilon_i p_i \quad \text{e} \quad 1 = \sum_{i=1}^W p_i, \quad (2.73)$$

onde ϵ_i é o valor particular da energia correspondente ao i -ésimo estado acessível e U a energia média.

Utilizando o método dos multiplicadores de Lagrange, construímos a função auxiliar,

$$\Phi(p_i) = -k_B \sum_{i=1}^W p_i \ln p_i + \lambda \left(1 - \sum_{i=1}^W p_i \right) + \beta \left(U - \sum_{i=1}^W \epsilon_i p_i \right), \quad (2.74)$$

e a extremizamos em relação a p_i . Com esse procedimento,

$$\frac{\partial \Phi(p_i)}{\partial p_j} = -(\ln p_j + 1 + \lambda + \beta \epsilon_j) = 0,$$

que, por sua vez, implica a distribuição de Boltzmann

$$p_i = \frac{e^{-\beta \epsilon_i}}{Z}, \quad (2.75)$$

na qual $\beta = 1/k_B T$, sendo T a temperatura e $Z = \sum_{i=1}^W \exp(-\beta \epsilon_i)$ a função de partição do sistema.

Seja agora um conjunto de s partículas de massa m , imersas num meio, suficientemente distantes umas das outras e evoluindo segundo a dinâmica clássica. Nesse caso, a energia do conjunto é, com boa aproximação, $H = \sum_{i=1}^s [\mathbf{p}_i^2/(2m) + V(\mathbf{r}_i)]$, sendo $V(\mathbf{r}_i)$ a energia potencial relacionada com a força externa sobre a partícula. Assim, a distribuição de probabilidade para a posição de uma partícula, $p(\mathbf{r})$, é encontrada integrando-se nos momentos e $s - 1$ vetores posição, ou seja,

$$p(\mathbf{r}) \propto e^{-\frac{1}{k_B T} V(\mathbf{r})} . \quad (2.76)$$

Sendo a difusão uma forma de transporte e, portanto, inerentemente um processo fora do equilíbrio, espera-se que para tempos suficientemente longos o sistema atinja um estado de equilíbrio termodinâmico com o meio. Nesse estado, as partículas que se difundem e o meio mantêm uma troca balanceada de momentum e energia, sustentando o movimento irregular das partículas. Quando esta situação é atingida, deve existir uma conexão entre os parâmetros que caracterizam o equilíbrio termodinâmico e a dinâmica das partículas. Pelo exposto, vemos que os resultados (2.71) e (2.76) devem corresponder à mesma situação física, isto é, a distribuição de probabilidade estacionária (2.71) deve coincidir com a de Boltzmann (2.76). Isso ocorre somente se a igualdade $D = \mu k_B T$ for satisfeita, relação essa estabelecida por Einstein.

Capítulo 3

Uma equação não linear para difusão anômala

Para sistemas que apresentam difusão anômala, esta é geralmente associada a distribuições espaço-temporais não gaussianas, por exemplo, lei de potência ou exponencial alongada. Nesta estrutura, é possível incorporar, de uma forma unificada, esses dois comportamentos, o que nos permite descrever uma extensa classe de processos difusivos. O presente capítulo é dedicado a encontrar tal descrição unificada [40], e nossa investigação se concentra justamente numa difusão anômala correlacionada. Tal difusão é regida por uma equação não linear com uma dependência espacial no coeficiente de difusão. Além disso, esta equação permite investigar situações que envolvem dimensões espaciais não inteiras (fractais).

3.1 A equação de difusão anômala correlacionada

Distribuições tipo lei de potência ou exponencial alongada surgem naturalmente como soluções de generalizações da equação de difusão (2.3) N -dimensional. A equação não linear

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \nabla^2 \rho^\nu \tag{3.1}$$

é exatamente uma destas generalizações, onde ν é um parâmetro real. Também conhecida como equação de difusão em meios porosos [48], esta equação tem sido empregada para modelar difusão em meios porosos [6], em plasmas [3] e em dispersão espacial de populações biológicas [49]. Além disso, essa equação admite outras importantes aplicações físicas tais como percolação de gases através de meios porosos ($\nu \geq 2$) [50], filmes líquidos finos espalhando-se sob gravidade ($\nu = 4$) [51], alguns fenômenos de auto-organização [52], entre outras (veja Ref. [31] e referências incluídas). De um ponto de vista formal, citamos ainda a conexão com a termoestatística não extensiva de Tsallis [28, 31, 34, 35].

Para ilustrar como a Eq. (3.1) pode ser obtida, consideremos brevemente um gás ideal fluindo isentropicamente em um meio poroso homogêneo. Como bem colocado em [48], o fluxo é governado pelas leis:

- Equação de estado:

$$p = p_0 \rho^a , \quad (3.2)$$

onde $p = p(\mathbf{r}, t)$ é a pressão, $\rho = \rho(\mathbf{r}, t)$ é a densidade, $a \in [1, \infty)$ e $p_0 \in \mathfrak{R}^+$ são constantes.

- Conservação da massa em meios porosos:

$$\eta \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 , \quad (3.3)$$

onde $\mathbf{v} = \mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ é o vetor velocidade e $\eta \in \mathfrak{R}^+$ é a porosidade do meio.

- Lei de Darcy:

$$\sigma \mathbf{v} = -k \nabla p , \quad (3.4)$$

onde $\sigma \in \mathfrak{R}^+$ é a viscosidade do gás e $k \in \mathfrak{R}^+$ é a permeabilidade do meio.

Eliminando p e \mathbf{v} das equações acima, encontramos

$$\frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial t} = \nabla^2 \tilde{\rho}^m , \quad (3.5)$$

com $m = 1 + a \geq 2$. A quantidade $\tilde{\rho}$ representa uma densidade escalada e, portanto, é natural assumir que $\tilde{\rho} \geq 0$.

3.2 Difusão turbulenta: a equação de Richardson

Outro importante tipo de difusão anômala, em um espaço tridimensional, está relacionado à difusão turbulenta na atmosfera. Uma contribuição pioneira para entender este fenômeno é o já mencionado trabalho de Richardson [2]. Ele afirmou a necessidade de se considerar uma difusão relativa, ou seja, o afastamento relativo de duas partículas colocadas inicialmente próximas, ao invés de difusão de partícula única. Além disso, compilando um grande conjunto de dados experimentais, notou que a difusividade relativa de duas partículas cresce com a distância interpartículas. Denotando a distância interpartícula por r , Richardson sugeriu que a difusão relativa poderia ser descrita pela equação de difusão generalizada

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \cdot (K \nabla \rho), \quad (3.6)$$

ρ representando a probabilidade de que um par de partículas que foram soltas inicialmente juntas, na origem de um sistema de coordenadas, tenham uma separação interpartículas $r = |\mathbf{r}|$ no instante t . Aqui, $K \propto r^{4/3}$ é a lei indicada por Richardson, a qual foi modificada por Hentshel e Procaccia, sob o argumento de que a difusividade é afetada pela natureza fractal da turbulência [53, 54].

3.3 A difusão em fractais

Seja, em um caso mais geral, a Eq. (3.6) em um espaço d -dimensional com $K \propto r^{-\theta}$, onde θ é um parâmetro real. Então, $\nabla \cdot (K \nabla)$ é proporcional a $r^{-(d-1)} \frac{\partial}{\partial r} r^{d-1-\theta} \frac{\partial}{\partial r} + A/r^{2-\theta}$ (A é um operador, dependendo das variáveis angulares) e, conseqüentemente,

$$\tilde{\Delta} \equiv r^{-(d-1)} \frac{\partial}{\partial r} r^{d-1-\theta} \frac{\partial}{\partial r} \quad (3.7)$$

é a parte radial a ser considerada no estudo de soluções com simetria esférica da Eq. (3.6). Dada a forma do operador $\tilde{\Delta}$, não existem restrições quanto aos possíveis valores que d pode assumir. Dessa forma, d pode ser interpretada como uma dimensão fractal embebida em um espaço N -dimensional. Neste contexto, obtemos

a equação de O'Shaughnessy-Procaccia,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D\tilde{\Delta}\rho, \quad (3.8)$$

a qual tem sido usada para estudar difusão em fractais [55, 56].

Para esclarecer a razão do uso da Eq. (3.8) na investigação de difusão em fractais apresentaremos sucintamente a obtenção dessa equação, tomando como base as referências [55, 56]. Neste sentido, seja $m(r, t)dr$ a probabilidade de encontrar uma partícula se difundindo entre as camadas esféricas de raio r e $r + dr$ de um objeto fractal. A conservação de probabilidade implica

$$\frac{\partial m(r, t)}{\partial t} = \frac{\partial J(r, t)}{\partial r}. \quad (3.9)$$

Aqui $J(r, t)$ é a corrente radial líquida através da camada.

Definimos a densidade de probabilidade por sítio, $\rho(r, t)$, como

$$\rho(r, t) = \frac{m(r, t)}{N(r)}, \quad (3.10)$$

sendo $N(r)$ o número de sítios pertencentes ao fractal na camada de raio r , por unidade de comprimento. Além disso, temos para a corrente de probabilidade

$$J(r, t) = \sigma(r) \frac{\partial \rho(r, t)}{\partial r}, \quad (3.11)$$

com $\sigma(r)$ representando uma condutividade. Definimos também a condutividade por sítio:

$$K(r) = \frac{\sigma(r)}{N(r)}. \quad (3.12)$$

Note-se que a probabilidade de encontrar a partícula, como função de r num instante t em um substrato fractal, pode ser uma função altamente irregular. Identificamos, então, o perfil da densidade $\rho(r, t)$ com um envelope suave desta função e, portanto, trabalharemos aqui sempre com funções suaves.

Na Eq. (3.12), $N(r)$ é determinado impondo que o número de sítios de uma bola de raio L seja igual a L^d . Isso significa que $N(r) = a_d r^{d-1}$, sendo a_d uma constante. Substituindo este resultado, (3.10), (3.11) e (3.12) em (3.9) obtemos

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{1}{r^{d-1}} \frac{\partial}{\partial r} \left[K(r) r^{d-1} \frac{\partial \rho}{\partial r} \right]. \quad (3.13)$$

Uma possibilidade para calcular $K(r)$ é explorar a equivalência do problema de condutividade elétrica estacionária e o problema de difusão estacionária. Com este propósito, considera-se um potencial ϕ fixo na origem e um potencial nulo na camada r . A resistência total é $R(r) = \phi/J$. Assumindo que $R(r)$ escala como $R(r) \sim r^\alpha$, então a condutividade na camada r é $\sigma(r) \sim (\partial R/\partial r)^{-1} \sim r^{1-\alpha}$. Assim, $K(r) \sim r^{1-d}\sigma(r) \sim r^{2-\alpha-d}$, ou $K(r) = Kr^{-\theta}$ com $\theta = d + \alpha - 2$. Nessa perspectiva, o índice θ reflete a anomalia na condutividade, a qual deriva da maneira anômala como são combinados os condutores para formar uma rede fractal.

3.4 A equação de difusão anômala generalizada

Com o objetivo de ampliar a discussão com respeito à difusão anômala, vamos propor uma equação que apresenta simultaneamente a dependência espacial na difusividade e a não linearidade no termo difusivo. Essa perspectiva unificadora dá origem a novos comportamentos, os quais serão descritos por uma solução exata que interpola uma lei de potência com uma exponencial alongada. Neste sentido, vamos aqui propor a equação

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \cdot (K \nabla \rho^\nu), \quad (3.14)$$

como uma unificação das Eqs. (3.1) e (3.6). De fato, a Eq. (3.14) reduz-se a uma difusão anômala correlacionada (3.1) se $K = D$, e à equação de Richardson (3.6) se $\nu = 1$ e $K \propto r^{4/3}$. Além disso, podemos avançar mais em nossa generalização se centrarmos nossa atenção na equação radial

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \tilde{\Delta} \rho^\nu, \quad (3.15)$$

na qual empregamos $K \propto r^{-\theta}$. O uso dessa equação, ao invés da Eq. (3.14), permite-nos analisar casos com d não inteiro e, a exemplo da equação de O'Shaughnessy-Procaccia, relacionar d com uma dimensão fractal. Neste sentido, na discussão que segue, iremos considerar d como um parâmetro real não negativo, sendo a Eq. (3.15) a equação que norteia este capítulo [40].

3.5 Solução unificando lei de potência e exponencial alongada

Da mesma forma como foi utilizado um *ansatz* na solução da equação de difusão usual, no capítulo 2, empregaremos tal procedimento para obter uma solução exata para a Eq. (3.15).

3.5.1 Em busca do *ansatz*

Visando motivar tal *ansatz* lembremos as correspondentes soluções tipo fonte para a equação de difusão usual (2.3), a equação para meios porosos (3.1) e a equação de O'Shaughnessy-Procaccia (3.8). Retornemos, inicialmente, à Eq. (2.3), em que, numa primeira aproximação, poderíamos desconsiderar a dependência espacial e escrevê-la como

$$\frac{d\tilde{\rho}}{dt} = -\alpha\tilde{\rho}, \quad (3.16)$$

onde substituímos $\nabla^2\rho$ por $-\alpha\tilde{\rho}$. Sua solução é

$$\tilde{\rho}(t) = \tilde{\rho}_0 e^{-\alpha t}, \quad (3.17)$$

se $\tilde{\rho}(0) = \tilde{\rho}_0$. Vimos, porém, no capítulo 2, que a solução de (2.3) é da forma

$$\rho(r, t) = \frac{1}{Z(t)} e^{-\beta(t)r^2}. \quad (3.18)$$

O que gostaríamos de ressaltar neste momento é a presença da exponencial como ponto em comum entre as soluções (3.17) e (3.18).

De modo análogo, a equação (3.1) pode grosseiramente ser aproximada por

$$\frac{d\tilde{\rho}}{dt} = -\lambda\tilde{\rho}^q, \quad (3.19)$$

cujas solução é

$$\tilde{\rho}(t) = \tilde{\rho}_0 [1 - (1 - q)\tilde{\rho}_0^{q-1}\lambda t]^{1/(1-q)}, \quad (3.20)$$

com $\tilde{\rho}(0) = \tilde{\rho}_0$. Aqui, e nas discussões subseqüentes, deve-se supor que $[1 - (1 - q)x]^{1/(1-q)}$ é nulo, se $1 - (1 - q)x < 0$. Isto evita que $[1 - (1 - q)x]^{1/(1-q)}$ possa

assumir valores imaginários quando se considera q genérico. Além disso, destacamos que $[1 - (1 - q)x]^{1/(1-q)}$ é uma generalização da exponencial, pois no limite $q \rightarrow 1$ recaímos na exponencial usual $\exp(-x)$.

Uma comparação entre as equações (3.17) e (3.20) sugere que a solução para a Eq. (3.1) deve ser tal que

$$\rho(r, t) = \frac{1}{Z_1(t)} [1 - (1 - q) \beta_1(t) r^2]^{1/(1-q)}, \quad (3.21)$$

pois essa é a análoga de (3.18), com a exponencial substituída pela sua generalização. De fato, essa é a solução para a Eq. (3.1) [28, 31, 34, 35], na qual $q = 2 - \nu$, $Z_1(t) \propto t^{d/[2+d(1-q)]}$ e $\beta_1(t) \propto t^{-2/[2+d(1-q)]}$. Neste ponto, ressaltamos alguns aspectos vinculados à solução (3.21). A depender do valor de q , verifica-se a forma curta ou longa da cauda da Eq. (3.21), quando comparada com a difusão usual (limite $q \rightarrow 1$). Quando $q < 1$, temos $\rho(r, t) = 0$ para $1 - (1 - q)\beta_1(t)r^2 < 0$, dando o comportamento de cauda curta para $\rho(r, t)$. Por outro lado, quando $q > 1$, o comportamento assintótico tipo lei de potência para a solução (3.21), $r^{-2/(q-1)}$, mostra que $\rho(r, t)$ é uma função de cauda longa. Esse comportamento da cauda curta ou longa para $\rho(r, t)$ reflete-se diretamente no deslocamento quadrático médio, conduzindo a $\langle r^2 \rangle \propto t^{2/[2+d(1-q)]}$. Novamente, comparada com a difusão usual, $q = 1$, temos uma superdifusão (subdifusão) para $q > 1$ ($q < 1$).

Seguindo as motivações apresentadas para as soluções das equações (2.3) e (3.1), aproximaremos a equação (3.8) por

$$\frac{d\tilde{\rho}}{dt} = -\alpha r^\theta \tilde{\rho}, \quad (3.22)$$

considerando r^θ constante. A solução é a exponencial $\tilde{\rho} = \tilde{\rho}_0 \exp[-\alpha t r^\theta]$. Daí, analogamente aos casos anteriores, a solução fundamental da Eq. (3.8) deve ser da forma

$$\rho(r, t) = \frac{1}{Z_2(t)} e^{-\beta_2(t) r^{\theta+2}}. \quad (3.23)$$

Realmente, este *ansatz* substituído em (3.8) leva a $Z_2(t) \propto t^{d/(\theta+2)}$ e $\beta_2(t) \propto t^{-1}$, apresentando um comportamento de cauda curta (longa) para $\theta > 0$ ($\theta < 0$) [55, 56]. Por outro lado, o comportamento para o deslocamento quadrático médio é $\langle r^2 \rangle \propto$

$t^{2/(\theta+2)}$. Logo, para $\theta > 0$ ($\theta < 0$) temos um regime subdifusivo (superdifusivo). Identificamos, desta maneira, θ como o expoente da difusão anômala e $K(r) = K_0 r^{-\theta}$ como uma lei escalante.

Note-se que as Eqs. (3.18), (3.21) e (3.23) podem ser interpoladas se empregarmos uma função gaussiana generalizada, isto é, $G_{(q,\lambda)}(x) \equiv [1 - (1 - q)|x|^\lambda]^{1/(1-q)}$. Com essa perspectiva, nosso *ansatz* para resolver a Eq. (3.15) é

$$\rho(r, t) = \frac{1}{Z(t)} [1 - (1 - q)\beta(t)r^\lambda]^{1/(1-q)}, \quad (3.24)$$

se $1 - (1 - q)\beta(t)r^\lambda \geq 0$ ou $\rho(r, t) = 0$ se a desigualdade for invertida. As funções $\beta(t)$ e $Z(t)$ devem ser determinadas, sendo q e λ parâmetros reais. Na figura (3.1), é ilustrado o comportamento da função $G(q, \lambda)$ para $\lambda = 2$, a q -gaussiana, e valores típicos de q .

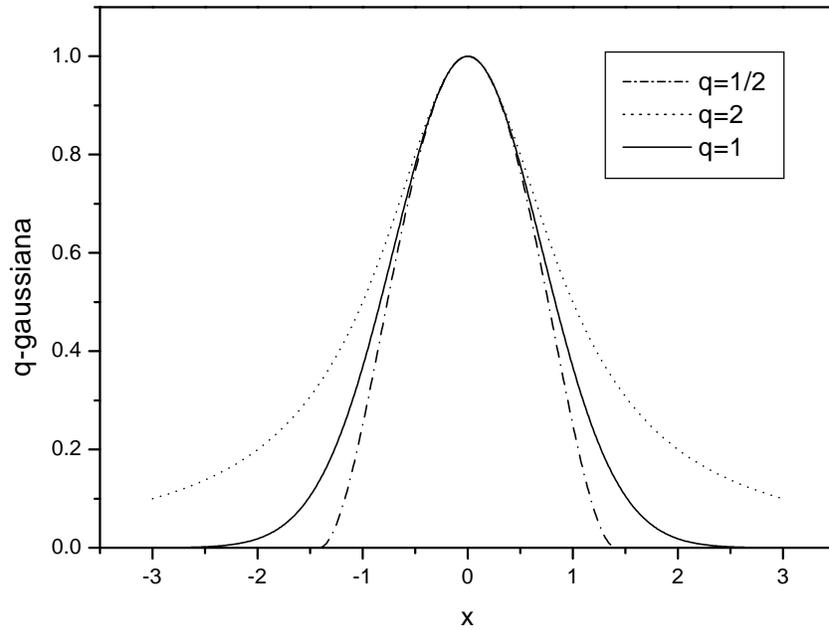


Figura 3.1: A função gaussiana generalizada para valores típicos de q . Em $q = 1$ temos a gaussiana usual e $q = 2$ recai na lorentziana.

3.5.2 Uma solução exata

Substituindo o *ansatz* (3.24) na Eq. (3.15), verificamos que $\beta(t)$ e $Z(t)$, com $\lambda = 2 + \theta$ e $q = 2 - \nu$, obedecem às equações

$$\begin{aligned}\frac{dZ(t)}{dt} &= D\lambda(2 - q)d\beta(t)[Z(t)]^q \\ \frac{d\beta(t)}{dt} &= -D\lambda^2(2 - q)[\beta(t)]^2[Z(t)]^{q-1},\end{aligned}\quad (3.25)$$

de onde obtemos

$$\frac{1}{\beta} \frac{d\beta}{dt} = \frac{-\lambda}{d} \frac{1}{Z} \frac{dZ}{dt}.$$

Isso significa que a relação $\beta Z^{\lambda/d} = \beta_0 Z_0^{\lambda/d}$ é independente do tempo.

As equações (3.25) podem ser desacopladas e expressas como

$$\begin{aligned}\frac{dZ(t)}{dt} &= D\lambda(2 - q)d\beta_0 Z_0^{\lambda/d} [Z(t)]^{q-\lambda/d} \\ \frac{d\beta(t)}{dt} &= -D\lambda^2(2 - q)(\beta_0^{d/\lambda} Z_0) [\beta(t)]^{2-d/\lambda(q-1)}.\end{aligned}\quad (3.26)$$

As soluções são

$$\beta(t) = \beta_0 [1 + At]^{-\lambda/[\lambda+d(1-q)]} \quad (3.27)$$

e

$$Z(t) = Z_0 [1 + At]^{d/[\lambda+d(1-q)]}, \quad (3.28)$$

com

$$A = D\lambda(2 - q)[\lambda + d(1 - q)]\beta_0 Z_0^{q-1}, \quad (3.29)$$

$\beta_0 = \beta(0)$ e $Z_0 = Z(0)$.

3.5.3 O deslocamento quadrático médio

A partir da solução (3.24), o valor médio para uma função genérica $f(r)$ pode ser calculado. Em particular, o valor médio para r^σ é dado por

$$\langle r^\sigma \rangle = \frac{\int_0^\infty r^\sigma \rho(r, t) r^{d-1} dr}{\int_0^\infty \rho(r, t) r^{d-1} dr} = C_\sigma \beta^{-\sigma/\lambda}, \quad (3.30)$$

com

$$C_\sigma = \frac{\Gamma(\frac{\sigma+d}{\lambda})}{\Gamma(\frac{d}{\lambda})} \begin{cases} \frac{\Gamma(\frac{1}{1-q} + \frac{d}{\lambda} + 1)}{(1-q)^{\sigma/\lambda} \Gamma(\frac{\sigma+d}{\lambda} + \frac{1}{1-q} + 1)} & q < 1 \\ \frac{\Gamma(\frac{1}{q-1} - \frac{d+\sigma}{\lambda})}{(q-1)^{\sigma/\lambda} \Gamma(\frac{1}{q-1} - \frac{d}{\lambda})} & q > 1. \end{cases} \quad (3.31)$$

Observe que a existência de $\langle r^\sigma \rangle$ impõe restrições sobre os parâmetros : $\lambda + d(1-q) > \sigma(q-1)$ e $\lambda > 0 (\theta > -2)$. Mais ainda, a restrição $q < 2 (\nu > 0)$ é necessária para $\rho(r, t)$ ser real, e pode ser verificada a partir das equações (3.27), (3.28) e (3.29) quando t é longo. No que segue, assumimos que os parâmetros obedecem às restrições acima.

Um caso particular importante de $\langle r^\sigma \rangle$ é o deslocamento quadrático médio, $\langle r^2 \rangle$, pois tal valor médio é comumente empregado para classificar processos de difusão. Tomando-se $\sigma = 2$ nas Eqs. (3.30) e (3.31), temos

$$\langle r^2 \rangle = C_2 \beta_0^{-2/\lambda} [1 + At]^{2/[\lambda + d(1-q)]}. \quad (3.32)$$

Como conseqüência, $\langle r^2 \rangle \sim t^{2/[2+\theta+d(\nu-1)]}$ para t suficientemente longo. É fácil verificar que $\theta = d(1-\nu)$ descreve uma difusão normal ($\langle r^2 \rangle \propto t$), mesmo quando $\theta \neq 0$ e $\nu \neq 1$. De fato, existe uma competição entre θ e ν , de tal forma que o regime de difusão anômala induzido por $\theta \neq 0$ é compensado por um conveniente com $\nu \neq 1$. Além disso, essa competição leva a um processo subdifusivo quando $\theta > d(1-\nu)$ e a um superdifusivo quando $\theta < d(1-\nu)$. Essa classificação é ilustrada na Fig. (3.2) para $d = 3$.

No que segue, discutimos uma conseqüência da classificação acima na forma de ρ . A partir da solução (3.21), para meios porosos, e da solução (3.23), para difusão em fractais, podemos ver que o regime superdifusivo (subdifusivo) é associado à longa (curta) cauda de $\rho(r, t)$, quando comparado com a gaussiana usual. Porém, esta conexão não é válida em geral para nossa solução. Para ilustrar a relação entre regime de difusão e comportamento da cauda de $\rho(r, t)$, consideremos a Fig. (3.3). Nesta figura, representamos $\rho(r, t)$ dado por Eq. (3.24) versus r para alguns valores de θ e ν , sujeitos à restrição $\theta = d(1-\nu)$ (a linha de difusão ‘normal’ indicada na Fig. (3.2)). Neste caso, observamos comportamentos de cauda curta e longa, quando comparados com a gaussiana.

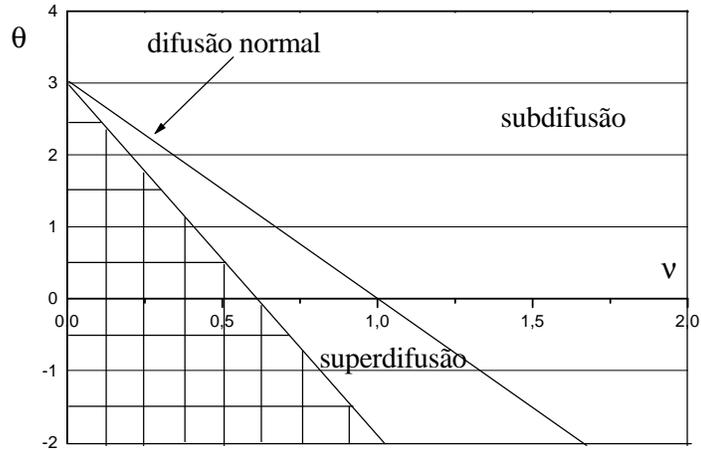


Figura 3.2: O diagrama indica o regime difusivo relacionado às Eqs. (3.15) e (3.24) em termos de seus parâmetros adimensionais θ e ν para $d = 3$. Usando $\langle r^2 \rangle \propto t^{2/[\theta+2+d(\nu-1)]}$, classificamos os regimes subdifusivo ($\theta > (1 - \nu)d$), normal ($\theta = (1 - \nu)d$) e superdifusivo ($\theta < (1 - \nu)d$). A região assinalada à esquerda refere-se a valores de parâmetros onde $\langle r^2 \rangle$ diverge.

Um ponto de vista alternativo para verificar o quanto a solução desvia-se da solução usual é analisar o decaimento de $\rho(0, t)$. Em outras palavras, a forma como a solução decresce em seu ponto central informa seu desvio da difusão normal. No nosso caso, as Eqs. (3.24), (3.27) e (3.28) fornecem $\rho(0, t) \sim t^{-d/[2+\theta+d(\nu-1)]}$ para $t \gg 1/A$, em contraste com $\rho(0, t) \sim t^{-d/2}$, verificada na difusão usual ($\theta = 0$ e $\nu = 1$).

É digno de nota também que a Eq. (3.24) recupera a solução gaussiana temporalmente transladada (2.32):

$$\rho(r, t) = \frac{\rho_0}{[4\pi D(t_0 + t)]^{d/2}} e^{-\frac{r^2}{4D(t_0+t)}}. \quad (3.33)$$

De fato, as Eqs. (3.27) e (3.28) podem ser respectivamente escritas como

$$\beta(t) = \tilde{A}(t_0 + t)^{-\lambda/[\lambda+d(1-q)]} \quad (3.34)$$

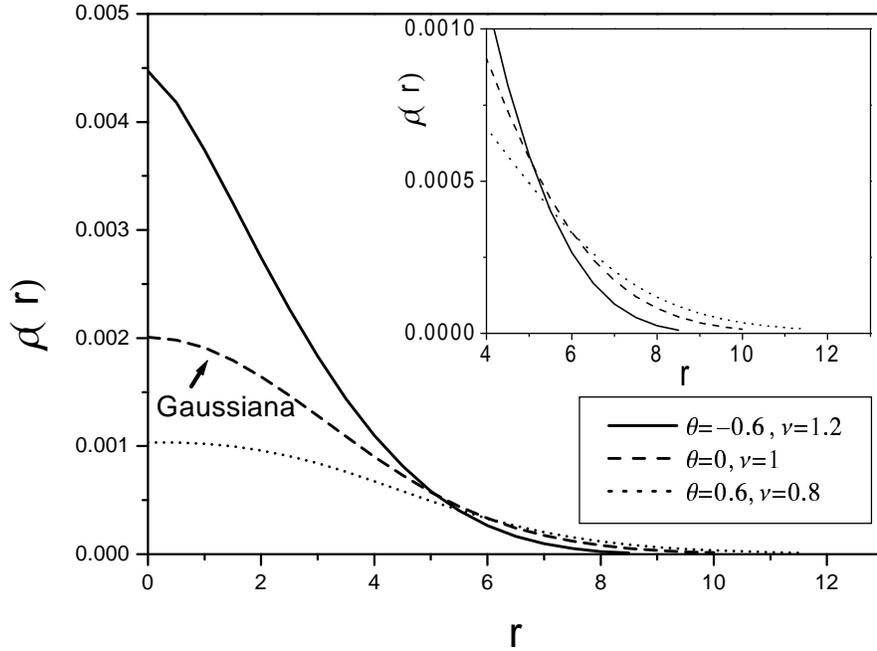


Figura 3.3: Considerando a difusão normal, $\theta = (1 - \nu)d$, a forma de $\rho(r, t)$ ilustrada em três casos: cauda curta ($\theta = -0.6$ e $\nu = 1.2$), gaussiana ($\theta = 0$ e $\nu = 1$) e cauda longa ($\theta = 0.6$ e $\nu = 0.8$). Gráfico inserido: detalhe do comportamento da cauda nos três casos acima. A constante de normalização ρ_0 é considerada adimensional; então, ρ é dada em unidades de r^{-d} e D em unidades de $r^{\theta+2-d(1-\nu)}t^{-1}$, com r e t sendo medidos em unidades de distância e tempo, respectivamente. É usado $\rho(r, t)$ na forma (3.24) com $\beta(t)$, $Z(t)$ e ρ_0 dados em (3.34), (3.35) e (3.36). Neste exemplo, adota-se $d = 3$, $D = 1$, $\rho_0 = 1$, $t = 0$ e $t_0 = 5$.

e

$$Z(t) = \tilde{B}(t_0 + t)^{d/[\lambda+d(1-q)]}, \quad (3.35)$$

com $\tilde{A} = \beta_0 A^{-\lambda/[\lambda+d(1-q)]}$, $\tilde{B} = Z_0 A^{d/[\lambda+d(1-q)]}$ e $t_0 = 1/A$. Assim, a solução (3.24) pode ser escrita em termos de um tempo transladado e a normalização representada por

$$\rho_0 = \Omega_d \int \rho(r, t) r^{d-1} dr = \Omega_d (Z_0 \beta_0^{d/\lambda})^{-1} \tilde{G}, \quad (3.36)$$

com $\Omega_d = 2\pi^{d/2}/\Gamma(d/2)$ o ângulo sólido em um espaço d -dimensional e

$$\tilde{G} = \frac{1}{\lambda} \Gamma\left(\frac{d}{\lambda}\right) \begin{cases} \frac{\Gamma(\frac{1}{q-1} - \frac{d}{\lambda})}{(q-1)^{\frac{d}{\lambda}} \Gamma(\frac{1}{q-1})} & (q > 1) \\ \frac{\Gamma(\frac{1}{1-q} + 1)}{(1-q)^{\frac{d}{\lambda}} \Gamma(\frac{d}{\lambda} + \frac{1}{1-q} + 1)} & (q < 1) \end{cases} \quad (3.37)$$

Em particular, a Eq. (3.33) é obtida de (3.24) com $\beta(t)$ e $Z(t)$ dado acima no limite $q \rightarrow 1$ ($\nu \rightarrow 1$) e $\lambda \rightarrow 2$ ($\theta \rightarrow 0$).

3.5.4 A solução tipo fonte puntual

Por fim, enfatizamos a possibilidade de obter a solução tipo fonte puntual a partir das equações diferenciais não lineares (3.26), que leva às Eqs. (2.31), (3.21) e (3.23) como casos limites da Eq. (3.24). Nesse caso, devemos considerar $t_0 \rightarrow 0$ em (3.34) e (3.35), que corresponde a $A \rightarrow \infty$. Com esse procedimento temos

$$\beta(t) = \mathcal{A} t^{-\frac{\lambda}{\lambda+d(1-q)}} \quad \text{e} \quad Z(t) = \mathcal{B} t^{\frac{d}{\lambda+d(1-q)}}, \quad (3.38)$$

onde

$$\begin{aligned} \mathcal{A} &= \left\{ g^{q-1} \left[D\lambda(2-q)(\lambda + d(1-q)) \right] \right\}^{-\frac{\lambda}{\lambda+d(1-q)}} \\ \mathcal{B} &= \left\{ g \left[D\lambda(2-q)(\lambda + d(1-q)) \right]^{\frac{d}{\lambda}} \right\}^{\frac{\lambda}{\lambda+d(1-q)}}, \end{aligned} \quad (3.39)$$

com $g = \tilde{G}\Omega_d/\rho_0$, \tilde{G} dado por (3.37). A condição de normalização pode apenas ser satisfeita se $\lambda > 0$ e $\lambda + d(1-q) > 0$. Dessas desigualdades sobre os parâmetros q e λ , verificamos que os expoentes em $\beta(t)$ e $Z(t)$ são respectivamente negativo e positivo. A restrição $q < 2$ continua necessária para $\rho(r, t)$ ser real.

Capítulo 4

Equação de difusão anômala não linear com termo de fonte e de arraste

Neste capítulo, investigamos uma classe de soluções para a equação de Fokker-Planck não-linear introduzida no capítulo anterior, na presença de um termo de fonte e com termo de arraste, bem como a solução estacionária quando um termo de arraste independente do tempo está presente [41]. Aqui, é ampliado substancialmente o conjunto de exemplos com solução exata relacionados ao tipo de difusão previamente apresentado. Espera-se, assim, que os resultados obtidos sirvam de base para possíveis aplicações fenomenológicas.

4.1 A equação com termo de fonte e de arraste

Vamos considerar aqui uma grande classe de difusão anômala, nominadamente aquelas associadas com a equação N -dimensional não linear

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \nabla \cdot \{K \nabla [\rho(\mathbf{r}, t)]^\nu\} - \nabla \cdot [\mu \mathbf{F}(\mathbf{r}, t) \rho(\mathbf{r}, t)] - \alpha(t) \rho(\mathbf{r}, t), \quad (4.1)$$

com $K = Dr^{-\theta}$. Ainda mais, $\nu, \mu > 0$, θ e $D > 0$ são parâmetros reais e $\alpha(t)$ é uma fonte dependente do tempo. Quando $\alpha(t) = 0$ a diferença entre a equação tipo Fokker-Planck (4.1) e a usual (2.25) é que o termo de difusão depende de uma potência de $\rho(\mathbf{r}, t)$ e o coeficiente de difusão tem uma dependência espacial. A Eq. (4.1) para $\theta = 0$ e $\alpha(t) = 0$ tem a forma

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = D \nabla^2 [\rho(\mathbf{r}, t)]^\nu - \nabla \cdot [\mu \mathbf{F}(\mathbf{r}, t) \rho(\mathbf{r}, t)] \quad (4.2)$$

e é a já mencionada equação de difusão em meios porosos, isto é, representa a Eq. (3.1) na presença de força externa.

Um outro tipo de difusão anômala emerge da Eq. (4.1) quando $\nu = 1$, $\alpha(t) = 0$, $\theta = -4/3$ e $\mathbf{F}(\mathbf{r}, t) = 0$. Neste caso, temos a Eq. (3.6), que foi relacionada com a difusão turbulenta na atmosfera. Além disso, quando $\nu = 1$, $\alpha(t) = 0$, $\mathbf{F}(\mathbf{r}, t) = 0$ e em um contexto fractal, a Eq. (4.1) torna-se a equação de O'Shaughnessy-Procaccia (3.8).

De maneira geral, a Eq. (4.1) pode também ser empregada em um contexto fractal, quando soluções esféricas simétricas são consideradas e $\nabla \cdot K \nabla$ é reescrito como $\tilde{\Delta}$, isto é,

$$\tilde{\Delta} \equiv r^{-(d-1)} \frac{\partial}{\partial r} r^{d-1-\theta} \frac{\partial}{\partial r} \quad (4.3)$$

conforme definido em (3.7). Dessa forma, a Eq. (4.1) interpola todos os casos acima, fornecendo, portanto, um cenário rico para ser explorado.

Outra possível generalização da equação de Fokker-Planck é

$$\frac{\partial [\rho(\mathbf{r}, t)]^\eta}{\partial t} = \nabla \cdot \{K \nabla [\rho(\mathbf{r}, t)]^\nu\} - \nabla \cdot \{\mu \mathbf{F}(\mathbf{r}, t) [\rho(\mathbf{r}, t)]^\eta\} - \alpha(t) [\rho(\mathbf{r}, t)]^\eta. \quad (4.4)$$

Essa equação, com K e α constantes, é discutida na Ref. [57] (veja também a Ref. [31]). Note-se também que Eq. (4.4) reduz-se a Eq. (4.1) quando substituimos $[\rho(r, t)]^\eta$ por $\bar{\rho}(r, t)$. Não apresentaremos detalhes sobre estas possibilidades porque suas soluções podem ser diretamente obtidas da Eq. (4.1) usando tal identificação.

4.2 Equação não linear com termo de fonte dependente do tempo

Difusão não linear com absorção surge em muitas áreas da ciência [58, 59, 60, 61]. Engenharia, biofísica, física do estado sólido e reatores apresentam muitos exemplos com este enfoque. Esta seção é dedicada à análise da equação de Fokker-Planck generalizada apresentada na introdução com um termo de fonte. Seja então a equação não linear (4.1). O termo de fonte presente pode ser removido através da mudança na solução idêntica àquela apresentada em (2.39):

$$\rho(\mathbf{r}, t) = e^{(-\int_0^t \alpha(t') dt')} \hat{\rho}(\mathbf{r}, t). \quad (4.5)$$

Com essa transformação $\hat{\rho}(\mathbf{r}, t)$ obedece à equação

$$\frac{\partial \hat{\rho}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \nabla \cdot \{ \hat{K} \nabla [\hat{\rho}(\mathbf{r}, t)]^\nu \} - \nabla \cdot [\mu \mathbf{F}(\mathbf{r}, t) \hat{\rho}(\mathbf{r}, t)], \quad (4.6)$$

com $\hat{K}(t) = K \exp \left[(1 - \nu) \int_0^t \alpha(t') dt' \right]$. Então, a Eq. (4.6) tem a mesma forma da equação correspondente sem o termo de fonte, mas com uma dependência temporal no coeficiente de difusão \hat{K} . Observe que esta dependência temporal é induzida pelo termo não linear ρ^ν , desaparecendo com $\nu = 1$.

Para investigar uma difusão anômala não linear com um termo de fonte e dimensão não inteira d , iniciemos considerando a equação

$$\frac{\partial \rho(r, t)}{\partial t} = D \tilde{\Delta} [\rho(r, t)]^\nu - \alpha(t) \rho(r, t) \quad (4.7)$$

ao invés da Eq. (4.1). Momentaneamente omitimos o termo de arraste e fizemos $K = Dr^{-\theta}$. A vantagem de estudar uma equação envolvendo $\tilde{\Delta}$ em vez de $\nabla \cdot (K \nabla)$ está no fato de que ela pode ser empregada em casos de dimensão não inteira, ampliando as possibilidades de aplicação. A presença de força externa será considerada na seção 4.4.

Para eliminar o termo de fonte na última equação, vamos proceder analogamente ao último parágrafo. Somos conduzidos a

$$\frac{\partial \hat{\rho}(r, t)}{\partial t} = \tilde{D} \tilde{\Delta} [\hat{\rho}(r, t)]^\nu, \quad (4.8)$$

com $\tilde{D}(t) = D \exp \left[(1 - \nu) \int_0^t \alpha(t') dt' \right]$. Agora, redefinimos a variável temporal introduzindo um tempo efetivo τ , definido por

$$\tau(t) = \int_0^t \tilde{D}(t') dt', \quad (4.9)$$

e a Eq. (4.8) pode ser reescrita como

$$\frac{\partial \hat{\rho}(r, \tau)}{\partial \tau} = \tilde{\Delta}[\hat{\rho}(r, \tau)]^\nu. \quad (4.10)$$

Uma solução dessa equação foi apresentada e discutida no capítulo 3. Ela é dada pelas Eqs. (3.24), (3.27) e (3.28). Portanto, empregando $D = 1$ e com t substituído por τ nestas equações, chegamos à solução de (4.7)

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \frac{[1 - (1 - q)\beta(\tau(t))r^\lambda]^{1/(1-q)}}{Z(\tau(t))} \exp \left[\left(- \int_0^t \alpha(t') dt' \right) \right], \quad (4.11)$$

se $1 - (1 - q)\beta(\tau(t))r^\lambda \geq 0$ e $\rho(r, t) = 0$, se $1 - (1 - q)\beta(\tau(t))r^\lambda < 0$.

4.3 Exemplos com fontes

Para entender mais profundamente a relevância do termo de fonte na equação de difusão anômala, aplicamos o procedimento geral prévio para estudar alguns casos específicos. Nesse contexto, a situação a investigar mais simples é quando $\alpha(t) = \alpha_0$, sendo α_0 uma constante. Também analisaremos um termo de fonte mais genérico com $\alpha(t) = \alpha_n t^n$.

4.3.1 Fonte constante

Levando em conta a Eq.(4.7), analisamos o caso $\alpha(t) = \alpha_0$. O tempo efetivo, Eq. (4.9), é dado por

$$\tau(t) = D \frac{\exp[(1 - \nu)\alpha_0 t] - 1}{(1 - \nu)\alpha_0}, \quad (4.12)$$

exibindo três diferentes comportamentos. Para $(1 - \nu)\alpha_0 < 0$ ele corre exponencialmente para $\tau_\infty = D/[(\nu - 1)\alpha_0]$, isto é, ocorre uma estabilização no processo difusivo. Para $(1 - \nu)\alpha_0 > 0$, existe um crescimento exponencial levando a

$\tau(t) \approx D \exp[(1 - \nu)\alpha_0 t] / [(1 - \nu)\alpha_0]$ quando t é longo. É interessante lembrar que esses dois tipos de comportamento surgem devido à não linearidade da equação de difusão. Por fim, temos $\tau = Dt$ quando $\nu = 1$ ($q = 1$), isto é, quando a Eq. (4.7) torna-se linear.

A partir da Eq.(4.11), verificamos que

$$\rho(r, t) = e^{-\alpha_0 t} \frac{[1 - (1 - q)\beta(\tau(t))r^\lambda]^{1/(1-q)}}{Z(\tau(t))}, \quad (4.13)$$

sendo usadas as Eqs. (3.27) e (3.28) com t substituído por τ , ou seja,

$$\beta(\tau(t)) = \beta_0 \left(1 + A \frac{\exp[(1 - \nu)\alpha_0 t] - 1}{(1 - \nu)\alpha_0} \right)^{-\lambda/[\lambda+d(1-q)]} \quad (4.14)$$

e

$$Z(\tau(t)) = Z_0 \left(1 + A \frac{\exp[(1 - \nu)\alpha_0 t] - 1}{(1 - \nu)\alpha_0} \right)^{d/[\lambda+d(1-q)]}. \quad (4.15)$$

Quando $(1 - \nu)\alpha_0 < 0$, temos para longo t

$$\rho(r, t) \approx e^{-\alpha_0 t} \frac{[1 - (1 - q)\beta_\infty r^\lambda]^{1/(1-q)}}{Z_\infty}, \quad (4.16)$$

onde

$$\beta_\infty = \beta_0 \{1 + A / [(\nu - 1)\alpha_0]\}^{-\lambda/[\lambda+d(1-q)]} \quad (4.17)$$

e

$$Z_\infty = Z_0 \{1 + A / [(\nu - 1)\alpha_0]\}^{d/[\lambda+d(1-q)]}. \quad (4.18)$$

Isso significa que $\rho(r, t)$ decai (cresce) exponencialmente no tempo quando $\alpha_0 > 0$ ($\alpha_0 < 0$) e é espacialmente limitado para $q < 1$, ou seja, $\rho(r, t) = 0$ se $r^\lambda \geq 1/[(1 - q)\beta_\infty]$. Em contraste, o comportamento espacial assintótico tipo lei de potência,

$$\rho(r, t) \sim r^{\lambda/(1-q)} \quad (4.19)$$

surge para t suficientemente longo tanto para $(1 - \nu)\alpha_0 < 0$ como para $(1 - \nu)\alpha_0 > 0$. Por outro lado, quando $\nu = 1$, observa-se que

$$\rho(r, t) \sim t^{-d/\lambda} \exp[-\alpha_0 t - r^\lambda / (D\lambda^2 t)]. \quad (4.20)$$

Vamos focalizar a atenção agora no deslocamento quadrático médio. A substituição do tempo efetivo (4.12) na Eq. (3.32) leva a

$$\langle r^2 \rangle = C_2 \beta_0^{-2/\lambda} \left[1 + A \frac{e^{(1-\nu)\alpha_0 t} - 1}{(1-\nu)\alpha_0} \right]^{2/[\lambda+d(1-q)]}. \quad (4.21)$$

Observe que o termo multiplicativo em (4.5) é cancelado no cálculo do valor médio. Por outro lado, o comportamento de $\langle r^2 \rangle$ para tempos grandes leva a um crescimento exponencial quando $(1-\nu)\alpha_0 > 0$. Interessante notar que, quando $(1-\nu)\alpha_0 < 0$, $\langle r^2 \rangle$ converge para um valor assintótico. Para $\nu = 1$, emerge $\langle r^2 \rangle \sim t^{2/\lambda}$, isto é, quando $\nu = 1$, o deslocamento quadrático médio não é afetado pelo termo de fonte constante. Esses resultados mostram que a presença de um termo de fonte tem um papel relevante no processo difusivo quando $\nu \neq 1$. Em particular, a presença de um termo de fonte acentua o carácter subdifusivo ($q < 1$) ou superdifusivo ($q > 1$) do processo, quando comparado ao comportamento sem termo de fonte, conforme observado na figura (4.1).

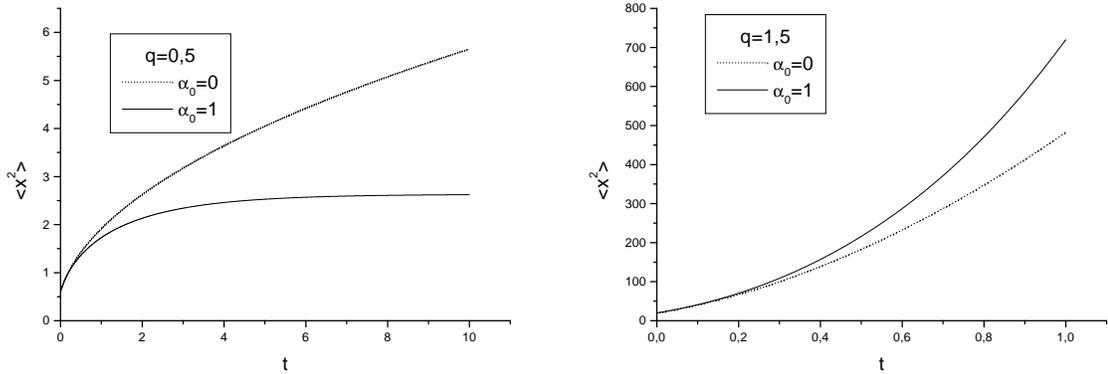


Figura 4.1: A presença do termo de fonte acentua o carácter subdifusivo (superdifusivo) do processo. Neste exemplo $\theta = 0,6$, $d = 3$ e $\beta_0 = 1$.

4.3.2 Fonte com termo de potência geral

Passemos agora à análise do caso mais geral correspondente a um termo de fonte $\alpha(t) = \alpha_n t^n$, onde α_n e n são constantes. O tempo efetivo relacionado, $\tau_n(t)$, é

$$\tau_n(t) = \int_{t_0}^t D \exp \left[\frac{(1-\nu)\alpha_n}{n+1} (t'^{n+1} - t_0^{n+1}) \right] dt', \quad (4.22)$$

sendo t_0 um corte usado para evitar divergência quando $n \leq -1$ e $(1-\nu)\alpha_n/(n+1) > 0$. Para $n > -1$, temos

$$\tau_n(t) = D \frac{1}{n+1} \left(-\frac{\alpha_n(1-\nu)}{1+n} \right)^{-1/(1+n)} \left[\Gamma \left(\frac{1}{1+n} \right) - \Gamma \left(\frac{1}{1+n}, \frac{\alpha_n(\nu-1)t^{1+n}}{1+n} \right) \right], \quad (4.23)$$

no qual foi empregado $t_0 = 0$. Aqui, $\Gamma(c)$ é a função gama e $\Gamma(c, x)$ é a função gama incompleta, definida como

$$\Gamma(c, x) = \int_x^\infty t^{c-1} e^{-t} dt, \quad (4.24)$$

que se reduz à função gama usual quando $x = 0$ e cujo comportamento assintótico é dado por $\Gamma(c, x) \approx x^{c-1} \exp(-x)$.

Utilizando o comportamento assintótico para $\Gamma(c, x)$, obtemos, para $n > -1$ e longo t , $\tau_n \sim t^{-n} \exp[-\alpha_n(\nu-1)t^{1+n}/(1+n)]$. Para $n = -1$, temos $\tau_{-1}(t) \sim t^{\alpha_{-1}(1-\nu)+1}$ e para $n < -1$ verificamos que $\tau_n(t) \sim t$. Considerando o comportamento assintótico para o deslocamento quadrático médio, $\langle r^2 \rangle \sim \tau_n^{2/[\lambda+d(1-q)]}$, identificamos dois comportamentos diferentes quando $n > -1$: o deslocamento quadrático médio atinge um valor limite se $\alpha_n(\nu-1) > 0$, e, cresce exponencialmente, se $\alpha_n(\nu-1) < 0$. Para $n = -1$ seu valor evolui com $t^{2[1-(1-q)\alpha_{-1}]/[\lambda+d(1-q)]}$. Finalmente, para $n < -1$, constata-se-se que $\langle r^2 \rangle \sim t^{2/[\lambda+d(1-q)]}$.

Como vimos, a dependência temporal em $\alpha(t)$ conduziu a uma variedade de comportamentos no processo difusivo. Uma discussão que ilustra a riqueza de resultados que surge quando se considera a dependência temporal nos parâmetros de uma equação de difusão é tratada no próximo capítulo.

4.4 Presença de forças externas

Direcionemos nossa atenção agora para analisar a equação de Fokker-Planck radial generalizada com um termo de arraste. Tomamos a Eq. (4.7) com uma força radial externa adicionada e $\alpha(t) = 0$, isto é,

$$\frac{\partial \rho(r, t)}{\partial t} = D\tilde{\Delta}[\rho(r, t)]^\nu - \frac{1}{r^{d-1}} \frac{\partial}{\partial r} [r^{d-1} F(r) \rho(r, t)] . \quad (4.25)$$

Sem perda de generalidade, colocamos μ igual a um. Nesta seção, estaremos considerando o caso específico de uma partícula movendo-se em um potencial esférico $V(r) = kr^2/2$, que pode ser tratado analiticamente. Então, $r = 0$ é uma posição de equilíbrio estável para k positivo, e $r = 0$ é uma posição de equilíbrio instável para k negativo. A Eq. (4.25), com este potencial, corresponde a um processo de Ornstein-Uhlenbeck no caso particular de $\theta = 0$ e $\nu = 1$.

Utilizando novamente o ansatz (3.24) na Eq. (4.25), verifica-se que $Z(t)$ e $\beta(t)$ obedecem às equações

$$\frac{1}{Z} \frac{dZ}{dt} = D\nu\lambda\beta Z^{q-1} - kd \quad (4.26)$$

e

$$\frac{1}{\beta} \frac{d\beta}{dt} = -D\nu\lambda^2\beta Z^{q-1} + k\lambda. \quad (4.27)$$

As soluções para estas duas equações não lineares acopladas são

$$Z(t) = Z_0 \left[1 + \frac{1}{k} (D\nu\lambda\beta_0 Z_0^{q-1} - k) (1 - e^{-k[\lambda+d(1-q)]t}) \right]^{d/[\lambda+d(1-q)]} \quad (4.28)$$

e

$$\beta(t) = \beta_0 \left[1 + \frac{1}{k} (D\nu\lambda\beta_0 Z_0^{q-1} - k) (1 - e^{-k[\lambda+d(1-q)]t}) \right]^{-\lambda/[\lambda+d(1-q)]}, \quad (4.29)$$

com condições iniciais $Z(0) = Z_0$ e $\beta(0) = \beta_0$. Desde que $\lambda + d(1 - q) > 0$, para k positivo temos uma solução estacionária para tempo longo e $\langle r^2 \rangle$, calculado a partir de (3.30), converge para um valor constante. Sob as mesmas condições, quando $k < 0$, não existe estado estacionário e $\langle r^2 \rangle$ cresce exponencialmente para t longo.

Neste ponto, podemos apreciar o quão geral são os resultados que emergem a partir da Eq. (4.1), pois a partir deles, outros disponíveis na literatura são apresentados como casos particulares. Por exemplo, nossa solução com $\theta = 0$ corresponde à obtida por Tsallis e Bukman [31] para o caso unidimensional quando $\langle x \rangle = 0$. Acentuamos, também, que a equação de O’Shaughnessy-Procaccia, Eq. (3.8), quando uma força externa $F(r) = -kr$ é incorporada, é um caso especial de nossos resultados se tomarmos $\nu = 1$.

Antes de concluir esta seção envolvendo forças externas, notemos que, na presença de um termo de fonte, $-\alpha(t)\rho$, um procedimento similar, como o apresentado na seção anterior, pode ser empregado, levando à Eq. (4.25) com D substituído por $\tilde{D}(t)$. Por exemplo, as Eqs. (4.26) e (4.27) devem ser solucionados com $\tilde{D}(t)$ ao invés de D para obter a solução gaussiana generalizada, quando a força externa for linear em r .

4.5 Solução estacionária

Podemos estender o estudo sobre equação tipo Fokker-Planck, investigando soluções estacionárias. Isto será feito com base no capítulo 2, no qual verificou-se que a equação de Fokker-Planck usual tem uma solução estacionária que corresponde à distribuição canônica de Boltzmann, $P \propto \exp(-\beta V)$. Nesse sentido, analogamente à Eq. (2.66), podemos considerar a densidade de corrente de probabilidade

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \mu \mathbf{F}(\mathbf{r})\rho - D \nabla[\rho(\mathbf{r}, t)]^\nu . \quad (4.30)$$

Com esta densidade de corrente, a equação de difusão para meios porosos (4.2) pode ser escrita como uma equação de continuidade e suas soluções estacionárias, ($\partial\rho/\partial t = 0$), são obtidas a partir dessa equação. Procedendo como na seção 2.4, empregamos

$$\mathbf{J} = cte , \quad (4.31)$$

onde é assumida a condição de contorno

$$\rho \rightarrow 0 \quad \text{para} \quad r \rightarrow \pm\infty . \quad (4.32)$$

As Eqs. (4.31) e (4.32), juntamente com a equação de continuidade, conduzem a $\mathbf{J} = 0$ e, portanto, a

$$\nabla \rho^\nu - \frac{\mu}{D} \mathbf{F} \rho = 0. \quad (4.33)$$

Fazemos, nesta última equação, a substituição $\rho^\nu = \phi$ e efetuamos a integração

$$\phi(\mathbf{r}) = \left[\left(1 - \frac{1}{\nu} \right) \left(-\frac{\mu}{D} V(\mathbf{r}) + C \right) \right]^{\nu/(\nu-1)}. \quad (4.34)$$

Considerando que $V(0) = 0$, $\rho(0) = \rho_0$ e levando em conta que $\nu = 2 - q$, verificamos que

$$\rho(\mathbf{r}) = \rho_0 [1 - (1 - q)\beta V(\mathbf{r})]^{1/(1-q)}, \quad (4.35)$$

se $1 - (1 - q)\beta V(\mathbf{r}) \geq 0$, e $\rho(\mathbf{r}) = 0$, se $1 - (1 - q)\beta V(\mathbf{r}) < 0$. Aqui $\beta = \mu \rho_0^{q-1} / [(2 - q)D]$ e $\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\nabla V(\mathbf{r})$. Note que $\beta > 0$ para $q < 2$.

Passemos agora à equação de Fokker-Planck generalizada

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \nabla \cdot \{K(\mathbf{r}) \nabla [\rho(\mathbf{r}, t)]^\nu\} - \nabla \cdot [\mu(\mathbf{r}) \mathbf{F}(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}, t)]. \quad (4.36)$$

Utilizando um procedimento semelhante ao desenvolvido anteriormente, obtemos a solução estacionária desta equação, a qual generaliza a Eq. (4.35), isto é,

$$\rho(\mathbf{r}) = \rho_0 [1 - (1 - q)\beta' V_{eff}(\mathbf{r})]^{1/(1-q)}, \quad (4.37)$$

se $1 - (1 - q)\beta' V_{eff} \geq 0$, e $\rho(r) = 0$, se $1 - (1 - q)\beta' V_{eff} < 0$, com $\beta' = \rho_0^{q-1} / (2 - q)$. Foi introduzido aqui o potencial efetivo

$$V_{eff}(\mathbf{r}) = \int \frac{\mu(\mathbf{r})}{K(\mathbf{r})} \nabla V(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r}. \quad (4.38)$$

Note-se que $[\mu(\mathbf{r})/K(\mathbf{r})] \nabla V(\mathbf{r})$ deve ser escrito como um gradiente para se verificar um potencial efetivo no caso N -dimensional. Em particular, para um exemplo tridimensional, isso implica que $\nabla[\mu(\mathbf{r})/K(\mathbf{r})] \times \nabla V(\mathbf{r}) = 0$. Esta condição pode ser facilmente levada a efeito se tomarmos $\mu = \mu(r)$, $K = K(r)$ e $V = V(r)$. Dessa forma, a Eq.(4.37) é reescrita como

$$\rho(r) = \rho_0 [1 - (1 - q)\beta' V_{eff}(r)]^{1/(1-q)}, \quad (4.39)$$

com $V_{eff}(r) = \int \frac{\mu(r)}{K(r)} \frac{dV(r)}{dr} dr$. Seguindo o desenvolvimento exposto na seção prévia, ressaltamos que a solução estacionária (4.39) permanece verdadeira para dimensão não-inteira arbitrária. Para o caso unidimensional, a solução (4.37) foi apresentada na Ref. [35].

Como veremos a seguir, as soluções estacionárias (4.35) e (4.37) são tais que maximizam a entropia de Tsallis.

4.6 Equilíbrio e mecânica estatística não extensiva

O formalismo de Boltzmann-Gibbs pode falhar, em particular, quando os sistemas incluem forças de longo alcance. Um caminho teórico para ampliar o limite de validade desta termoestatística tem sido traçado tomando como base a entropia de Tsallis [32, 62]:

$$S_q = k \frac{1 - \sum_{i=1}^W (p_i)^q}{q - 1} \quad (q \in \mathfrak{R}). \quad (4.40)$$

O conjunto $\{p_i\}$ representa as probabilidades dos W estados do sistema e k é o análogo da constante de Boltzmann. No limite $q \rightarrow 1$, verifica-se que S_q reduz-se à entropia de Boltzmann-Gibbs (2.72). Por sua vez, a não extensividade da entropia de Tsallis fica evidente na regra de (pseudo)aditividade

$$\frac{S_q^{(A \cup B)}}{k} = \frac{S_q^{(A)}}{k} + \frac{S_q^{(B)}}{k} + (1 - q) \frac{S_q^{(A)}}{k} \frac{S_q^{(B)}}{k}, \quad (4.41)$$

sendo A e B dois sistemas independentes. O índice entrópico q caracteriza o grau de não extensividade da entropia de Tsallis. Em particular, quando $q \rightarrow 1$, a extensividade natural da entropia de Boltzmann-Gibbs é recuperada.

Vamos, a seguir, maximizar (4.40) sob os vínculos [32, 33]

$$1 = \sum_{i=1}^W p_i \quad \text{e} \quad U_q = \sum_{i=1}^W \epsilon_i (p_i)^q. \quad (4.42)$$

Seguindo o mesmo procedimento empregado no capítulo 2, para a maximização da entropia de Boltzmann-Gibbs, escrevemos

$$\psi(p_i) = k \frac{1 - \sum_{i=1}^W (p_i)^q}{q - 1} + \lambda_1 \left(1 - \sum_{i=1}^W p_i \right) + \lambda_2 \left(U_q - \sum_{i=1}^W \epsilon_i (p_i)^q \right)$$

e

$$\frac{\partial \psi(p_i)}{\partial p_j} = \frac{qp_j^{q-1}}{q-1} - \lambda_1 - \lambda_2 \epsilon_j qp_j^{q-1} = 0,$$

onde λ_1 e λ_2 são os multiplicadores de Lagrange. A solução dessa equação conduz à distribuição canônica de Tsallis

$$p_i = \frac{1}{Z_q} [1 - (1-q)\beta\epsilon_i]^{1/(1-q)}, \quad (4.43)$$

na qual $Z_q = \sum_{i=1}^W [1 - (1-q)\beta\epsilon_i]^{1/(1-q)}$ é a função de partição generalizada e $\beta = \lambda_2 = 1/(kT^*)$ com T^* sendo a temperatura generalizada. Essa distribuição recupera a distribuição de Boltzmann quando $q \rightarrow 1$. Por outro lado, a dependência em relação à energia obedece uma lei de potência ao invés da exponencial usual, para $\epsilon_i \gg 1/\beta$ e $q > 1$. Além disso, para $q < 1$ a função apresenta um corte (probabilidades nulas para níveis de energia altos o suficiente para produzir um valor negativo na expressão $[1 - (1-q)\beta\epsilon_i]$).

Para mostrar que (4.35) e (4.37) maximizam a entropia de Tsallis, vamos estendê-la para o caso contínuo

$$S_q = \frac{1 - \int \rho^q d\mathbf{r}}{q-1} \quad (4.44)$$

e maximizá-la sujeita aos vínculos

$$\langle V_{eff} \rangle = \int V_{eff} \rho^q d\mathbf{r} \quad \text{e} \quad \int \rho d\mathbf{r} = 1.$$

Temos que

$$\frac{\delta}{\delta \rho} \left[S_q + \beta \left(\langle V_{eff} \rangle - \int V_{eff} \rho^q d\mathbf{r} \right) + \alpha \left(1 - \int \rho d\mathbf{r} \right) \right] = 0,$$

que conduz a

$$\rho = \frac{1}{Z_q} [1 - (1-q)\beta V_{eff}]^{1/(1-q)}, \quad (4.45)$$

com $Z_q = \int [1 - (1-q)\beta V_{eff}]^{1/(1-q)} d\mathbf{r}$.

A comparação de (4.37) com (4.45) mostra que a distribuição estacionária é igual àquela obtida através da maximização da entropia de Tsallis, fazendo a identificação de β e β' . Esses resultados generalizam aquele alcançado para o estado estacionário da equação de difusão usual e a distribuição de Boltzmann (seção 2.5).

A forma do segundo vínculo em (4.42) sugere uma estrutura para o cálculo do valor médio generalizado de um observável genérico: $\langle O \rangle_q \equiv \sum_{i=1}^W O_i p_i^q$. Essa forma de cálculo, porém, tem o inconveniente de apresentar um resultado inesperado para o valor médio da unidade, $\langle 1 \rangle_q = \sum_i p_i^q \neq 1$, como se a não extensividade da entropia implicasse um efetivo ganho ou perda de norma. Além disso, a distribuição (4.43) não é invariante através de uma translação uniforme do espectro de energia $\{\epsilon_i\}$, ou seja, os resultados termodinâmicos dependem da escolha da origem das energias. Na prática, pode ser escolhido $\epsilon_0 = 0$ como o estado fundamental de referência.

Esses aspectos indesejados podem ser contornados com outra possível escolha para o segundo vínculo em (4.42), o qual é assumido como [63]

$$\tilde{U}_q = \sum_{i=1}^W \epsilon_i P_i \quad \text{com} \quad P_i = \frac{p_i^q}{\sum_{j=1}^W p_j^q}, \quad (4.46)$$

de forma que $\sum_{i=1}^W P_i = 1$.

A otimização da entropia leva agora a

$$\tilde{p}_i = \frac{1}{\tilde{Z}_q} \left[1 - (1-q)\beta \frac{(\epsilon_i - \tilde{U}_q)}{\sum_{j=1}^W (\tilde{p}_j)^q} \right]^{1/(1-q)}, \quad (4.47)$$

com $\tilde{Z}_q = \sum_{i=1}^W [1 - (1-q)\beta(\epsilon_i - \tilde{U}_q) / \sum_{j=1}^W (\tilde{p}_j)^q]^{1/(1-q)}$. Se for adicionado um valor constante ϵ_0 a todo o conjunto $\{\epsilon_i\}$, \tilde{U}_q torna-se então $\tilde{U}_q + \epsilon_0$. Isso deixa invariante o conjunto de probabilidades $\{p_i\}$ sob uma translação no espectro de energia e, portanto, todas as quantidades termodinâmicas. Além disso, calculando-se o valor médio na forma $\langle\langle O \rangle\rangle_q \equiv \sum_i O_i P_i$, a norma é preservada, uma vez que $\langle\langle 1 \rangle\rangle_q = 1$ para qualquer q .

Pode-se notar que, fatorando no numerador e no denominador a quantidade $[1 + (1-q)\beta\tilde{U}_q / \sum_{i=1}^W (\tilde{p}_i)^q]^{1/(1-q)}$, na Eq. (4.47), chegamos à relação

$$\tilde{p}_i = \frac{[1 - (1-q)\tilde{\beta}\epsilon_i]^{1/(1-q)}}{\sum_{i=1}^W [1 - (1-q)\tilde{\beta}\epsilon_i]^{1/(1-q)}} \quad (4.48)$$

com β e $\tilde{\beta}$ relacionados por

$$\tilde{\beta} = \frac{\beta}{\sum_{i=1}^W (\tilde{p}_i)^q + (1-q)\beta\tilde{U}_q}. \quad (4.49)$$

Comparando (4.43),(4.48) e (4.49), verificamos que $\tilde{p}_i(\beta) = p_i(\tilde{\beta})$. Então os desenvolvimentos obtidos com a escolha do vínculo (4.42) podem ser adaptados para incorporar a escolha (4.46). Por fim, fica claro que, se usarmos esses resultados, verificamos que (4.35) e (4.37) são distribuições de probabilidade que maximizam a entropia de Tsallis, quando o vínculo normalizado (4.46) é empregado.

Capítulo 5

Equação não linear N -dimensional com coeficientes dependentes do tempo

Uma equação de Fokker-Planck não linear (equação de difusão para meios porosos) N -dimensional é investigada, considerando a dependência temporal dos coeficientes, onde uma força de arraste e termos de fonte estão presentes [42]. Exibimos a solução exata, baseada na função gaussiana generalizada relacionada à estatística de Tsalis. A partir desta solução, uma rica classe de comportamentos difusivos anômalos, inclusive o normal, podem surgir com uma escolha apropriada na dependência temporal dos coeficientes. Esses resultados indicam que as possíveis anomalias em processos difusivos podem aparecer como consequência de diferentes causas. Este capítulo contém, essencialmente, os principais resultados obtidos nas Refs. [28, 31, 64], incluindo [65] como caso especial.

5.1 Equação linear com coeficientes dependentes do tempo

Como ficou explícito nos capítulos anteriores, é usual identificar um processo de difusão normal por um crescimento linear no tempo da variância $\sigma^2 \equiv \langle (\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)^2 \rangle$, e outras dependências temporais em σ^2 são geralmente atribuídas à difusão anômala. Em nosso estudo, verificamos uma grande classe de processos difusivos anômalos que incluem os casos superdifusivo, subdifusivo, exponencialmente difusivo e localizado.

Apresentaremos, inicialmente, o estudo do movimento browniano de uma partícula a qual está sujeita a um potencial harmônico dependente do tempo $U(x, t) \sim k(t)x^2$, seguindo em parte o desenvolvimento apresentado em [65]. Deve estar claro que podem ser considerados valores positivos e negativos de $k(t)$, de forma que, para valores positivos de $k(t)$, a posição $x = 0$ é de equilíbrio estável, enquanto que para $k(t) < 0$ a posição $x = 0$ é de equilíbrio instável.

A equação de Fokker-Planck unidimensional associada ao processo é a equação linear

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial x} [k(t)x\rho], \quad (5.1)$$

sendo que o caso $k(t) = cte$ corresponde ao processo de Ornstein-Uhlenbeck descrito no capítulo 2.

No que segue, poderíamos usar diretamente a equação (5.1), porém optamos por empregar, inicialmente, a equação de Langevin correspondente. A equação de Langevin relacionada ao processo em questão é dada por

$$\frac{dx}{dt} + k(t)x = \xi(t), \quad (5.2)$$

onde $\xi(t)$ é a força estocástica de Langevin com média nula, $\langle \xi(t) \rangle = 0$, e a função de correlação dada por $\langle \xi(t_1)\xi(t_2) \rangle = 2D\delta(t_2 - t_1)$. Essa última equação tem como solução

$$x(t) = M(t) \left[x_0 + \int_0^t \frac{\xi(t')}{M(t')} dt' \right], \quad (5.3)$$

com $x_0 = x(0)$ e $M(t) = \exp[-\int_0^t k(t')dt']$. Todos os momentos podem agora ser

calculados. Em particular, obtemos

$$\langle x(t) \rangle = \langle x_0 M(t) \rangle + M(t) \int_0^t \frac{\langle \xi(t') \rangle}{M(t')} dt' = x_0 M(t) \quad (5.4)$$

e

$$\langle x^2(t) \rangle = x_0^2 M^2(t) + M^2(t) \int_0^t \frac{2D}{M^2(t')} dt'. \quad (5.5)$$

Com esses resultados, verificamos que

$$\sigma^2(t) = \langle x^2(t) \rangle - \langle x(t) \rangle^2 = 2DM^2(t) \int_0^t \frac{1}{M^2(t')} dt'. \quad (5.6)$$

A partir do cálculo dos momentos de ordem superior, conclui-se que o processo descrito pela equação (5.2) é gaussiano.

Gaussiana também é a solução de (5.1), proposta como

$$\rho(x, t) = \frac{1}{Z(t)} e^{-\beta(t)[x-x_0(t)]^2}, \quad (5.7)$$

sendo que $\beta(t)$, $Z(t)$ e $x_0(t)$ obedecem às equações (2.59), (2.60) e (2.61) com $\gamma = k(t)$. As correspondentes soluções são agora dadas por:

$$x_0(t) = x_0 e^{-\int_0^t k(t') dt'} \quad (5.8)$$

$$\beta(t) = \beta_0 [1 - 2f(t)]^{-1} \quad (5.9)$$

$$Z(t) = Z_0 [1 - 2f(t)]^{1/2}. \quad (5.10)$$

A função $f(t)$ tem a forma

$$f(t) = e^{-2\int_0^t k(t') dt'} \left[\int_0^t [k(t') - 2D\beta_0] e^{2\int_0^{t'} k(t'') dt''} dt' \right]. \quad (5.11)$$

Vamos restringir nossa atenção, momentaneamente, para o caso em que o termo de arraste apresenta comportamento temporal do tipo

$$k(t) \sim kt^{-b}$$

para grandes valores de t e analisar o processo para diversos valores de k e b .

Quando $k = 0$, $\dot{x} = \xi(t)$ descreve um processo de Wiener, com a variância crescendo linearmente com o tempo, $\sigma(t) \sim t$.

Para $b = 0$, temos que $k(t) = k$ e $\dot{x} + kx = \xi(t)$ descreve um processo de Ornstein-Uhlenbeck. Como consequência, $\sigma^2 = D/k(1 - e^{-2kt})$. Quando $k > 0$, chega-se a um estado gaussiano estacionário, pois $\sigma^2 \sim D/k$. Quando $k < 0$, recaímos em $\sigma^2 \sim \exp(2|k|t)$ e a variância cresce assintoticamente de forma exponencial.

Para valores de b tais que $b > 1$, constatamos que

$$\sigma^2 = 2De^{2k\frac{t^{1-b}}{b-1}} \int_0^t e^{2k\frac{t'^{1-b}}{1-b}} dt' \sim 2Dt,$$

ou seja, o processo é difusivo e a variância cresce linearmente com o tempo para qualquer valor de k . Este resultado é esperado uma vez que, para tempos suficientemente longos, o termo de arraste contendo $k(t)$ tende a zero e um processo de Wiener emerge.

Na região com $b = 1$, usaremos $k(t) = k/t$, de maneira que $M(t) = (t/t_0)^{-2k}$ e a Eq. (5.6) conduz a

$$\sigma^2 = 2D \left(\frac{t_0}{t}\right)^{2k} \int_0^t \left(\frac{t'}{t_0}\right)^{2k} dt' = \frac{2D}{2k+1}t$$

para $k > -1/2$, ou seja, temos um comportamento linearmente difusivo. Para $k = -1/2$, verificamos que

$$\sigma^2 = 2Dt \int_{t_0}^t t'^{-1} dt' \sim t \ln t$$

e, finalmente, para $k < -1/2$, obtemos $\sigma^2 \sim t^{2|k|}$. O parâmetro t_0 foi introduzido para controlar a divergência de integrais.

Quando b assume valores no intervalo $0 < b < 1$, segue que

$$\begin{aligned} \sigma^2 &= 2De^{-2k\frac{t^{1-b}}{1-b}} \int_0^t e^{2k\frac{t'^{1-b}}{1-b}} dt' \\ &= 2De^{-2k\frac{t^{1-b}}{1-b}} C \left[-\Gamma\left(\frac{1}{1-b}\right) + \Gamma\left(\frac{1}{1-b}, \frac{2kt^{1-b}}{b-1}\right) \right] \\ &\approx e^{-2k\frac{t^{1-b}}{1-b}} + t^b, \end{aligned} \tag{5.12}$$

onde utilizamos a forma assintótica da função gama incompleta. Assim, quando $k > 0$ a variância cresce como $\sigma^2 \sim t^b$, num característico processo subdifusivo. Se $k < 0$, a variância cresce como uma exponencial alongada

$$\sigma^2 \sim e^{2|k|\frac{t^{1-b}}{1-b}}. \tag{5.13}$$

Para $b < 0$, o termo de arraste apresenta uma contribuição que cresce com o tempo e eventualmente pode divergir. Observamos também dois regimes dependendo do sinal de k . Para $k < 0$, a variância cresce essencialmente da mesma forma que (5.13), ou seja, mais que exponencialmente difusivo. No caso de $k > 0$, temos $\sigma^2 \sim 1/t^{|b|}$, decrescendo como uma lei de potência. Este comportamento pode ser interpretado como o apresentado por uma partícula browniana movendo-se num potencial dependente do tempo, o qual conduz a uma localização da partícula no ponto $x = 0$.

Analisando os resultados acima, podemos concluir que, na presença de coeficientes dependentes do tempo, um processo gaussiano não implica necessariamente uma difusão usual, ou, em outras palavras, uma variedade de regimes difusivos anômalos podem surgir mesmo para um processo descrito por uma distribuição gaussiana.

5.2 Equação não linear com coeficientes dependentes do tempo

Investigaremos agora uma grande classe de difusão anômala oriunda da equação de Fokker-Planck não linear N -dimensional

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) = \mathcal{D}(t) \nabla^2 [\rho(\mathbf{r}, t)]^\nu - \nabla \cdot [\mathbf{F}(\mathbf{r}, t) \rho(\mathbf{r}, t)] - \alpha(t) \rho(\mathbf{r}, t), \quad (5.14)$$

na qual incorporamos a dependência temporal na força externa

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{k}_1(t) + k_2(t) \mathbf{r}, \quad (5.15)$$

no coeficiente de difusão $\mathcal{D}(t)$ e no termo de fonte $\alpha(t)$. Em particular, considera-se o caso onde o termo independente de \mathbf{r} , em $\mathbf{F}(\mathbf{r}, t)$, pode ser tomado com diferentes componentes. Esta situação é útil, por exemplo, para estudar difusão na presença do campo gravitacional [$\mathbf{k}_1 = (0, 0, k_{1z})$].

De maneira análoga ao procedimento desenvolvido nos capítulos 2 e 4, o termo de fonte na Eq.(5.14) pode ser removido através da mudança na solução na forma

(4.5). Assim, $\hat{\rho}(\mathbf{r}, t)$ obedece à equação

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}(\mathbf{r}, t) = D(t) \nabla^2 [\hat{\rho}(\mathbf{r}, t)]^\nu - \nabla \cdot [\mathbf{F}(\mathbf{r}, t) \hat{\rho}(\mathbf{r}, t)], \quad (5.16)$$

com $D(t) = \mathcal{D}(t) \exp \left[(1 - \nu) \int_0^t \alpha(t') dt' \right]$. A dependência temporal adicional no coeficiente de difusão desaparece no caso linear, ou seja, quando $\nu = 1$.

Seguindo a sistemática deste trabalho, obteremos uma solução exata para a Eq. (5.16), com a força externa dada pela Eq. (5.15), empregando o *ansatz*

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{Z(t)} \left[1 - (1 - q)\beta(t) (\mathbf{r} - \mathbf{r}_0(t))^2 \right]^{1/(1-q)}, \quad (5.17)$$

se $1 - (1 - q)\beta(t)(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)^2 \geq 0$, e $\hat{\rho}(\mathbf{r}, t) = 0$, se $1 - (1 - q)\beta(t)(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)^2 < 0$ (a condição de corte). Segue que a Eq. (5.17) é uma solução da Eq. (5.16), quando $\nu = 2 - q$ e as funções $\beta(t)$, $Z(t)$, $\mathbf{r}_0(t) = \sum_{i=1}^N x_{0i}(t) \mathbf{e}_i$ são regidas pelo seguinte sistema de equações:

$$\frac{1}{Z} \frac{dZ}{dt} = 2(2 - q)ND\beta Z^{-1+q} - Nk_2, \quad (5.18)$$

$$\frac{1}{\beta} \frac{d\beta}{dt} = -4(2 - q)DZ^{-1+q}\beta + 2k_2 \quad (5.19)$$

e

$$\frac{dx_{0i}}{dt} = k_{1i} - k_2 x_{0i}. \quad (5.20)$$

As Eqs. (5.18) e (5.19) são não lineares. Por sua vez, a Eq. (5.20) é linear e independente de $\beta(t)$ e $Z(t)$, sendo que $k_{1i}(t)$ não aparece nas equações diferenciais não lineares acopladas para $\beta(t)$ e $Z(t)$. Além disso, o termo espacialmente independente na força externa apenas afeta a dependência temporal de x_{0i} . Assim, a Eq. (5.20) leva a

$$x_{0i}(t) = e^{-\tilde{M}(t)} \left[x_{0i}(0) + \int_0^t k_{1i}(t') e^{\tilde{M}(t')} dt' \right], \quad (5.21)$$

com $\tilde{M}(t) = \int_0^t k_2(t') dt'$. Por exemplo, em um espaço tridimensional com a presença de um potencial harmônico isotrópico independente do tempo e sob a ação de um campo gravitacional, isto é, $k_2(t) = k_2 = cte$, $k_{1x} = k_{1y} = 0$ e $k_{1z}(t) = k_1 = cte$, temos $x_0(t) = x_0(0)e^{-k_2 t}$, $y_0(t) = y_0(0)e^{-k_2 t}$ e

$$z_0(t) = \left[z_0(0) + \frac{k_1}{k_2} (e^{k_2 t} - 1) \right] e^{-k_2 t}. \quad (5.22)$$

A solução para as equações não lineares acopladas para $Z(t)$ e $\beta(t)$, Eqs. (5.18) e (5.19), com $\beta(0) = \beta_0$ e $Z(0) = Z_0$, é dada por

$$Z(t) = Z_0 \left[1 - \frac{c_1}{N} f(t) \right]^{N/c_1} \quad (5.23)$$

e

$$\beta(t) = \beta_0 \left[1 - \frac{c_1}{N} f(t) \right]^{-2/c_1}, \quad (5.24)$$

onde

$$c_1 = 2 + N(1 - q) \quad (5.25)$$

e

$$f(t) = e^{-c_1 \tilde{M}(t)} \int_0^t \left[Nk_2(t') - 2N(2 - q)\beta_0 Z_0^{q-1} D(t') \right] e^{c_1 \tilde{M}(t')} dt'. \quad (5.26)$$

5.3 Comportamentos difusivos devido à dependência temporal nos coeficientes

Analisaremos, como uma ilustração, um conjunto representativo de comportamentos anômalos no regime assintótico, levando em conta algumas dependências específicas nos coeficientes. Nesta direção, das Eqs. (4.5) e (5.17), investigamos o comportamento assintótico temporal da variância

$$\sigma^2 = \frac{\int (\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)^2 \hat{\rho}(\mathbf{r}, t) d^N \mathbf{r}}{\int \hat{\rho}(\mathbf{r}, t) d^N \mathbf{r}} = C(q, N) \beta^{-1}. \quad (5.27)$$

Aqui, $C(q, N)$ é uma constante dependendo apenas de q e N . É importante ressaltar que a convergência da integral para $q > 1$ em σ^2 impõe uma restrição sobre os parâmetros: $2 + N(1 - q) > 2(q - 1)$. Isso implica que c_1 , definido em (5.25), é uma constante positiva para todos os valores de q .

Retornemos ao caso sem termo de fonte, porém com o coeficiente de difusão constante e com a dependência temporal da força harmônica externa dada por $k_2(t) = k t^{-b}$. Da Eq. (5.26), verificamos que

$$f(t) \sim \left[1 - e^{-c_1 k t^{1-b}/(1-b)}\right] + \left[c_2 e^{-c_1 k t^{1-b}/(1-b)} - c_3 t^b\right] \quad (5.28)$$

para $b < 1$ e longo t , onde c_2 e c_3 são constantes as quais dependem de N, k, q e b . Para $b = 1$, temos

$$f(t) \sim -t^{-c_1 k} - c_2 t^{-c_1 k} (t^{1+c_1 k} - 1)/(1 + c_1 k), \quad (5.29)$$

e, finalmente, para $b > 1$,

$$f(t) \sim -t. \quad (5.30)$$

Usando estes casos limites no deslocamento quadrático médio (5.27), com $\beta(t)$ dado em (5.24), vários comportamentos assintóticos podem ser analisados. Resumimos na Tab. (5.1) os possíveis comportamentos relacionados aos resultados acima. Quando restringimos nossa análise ao caso unidimensional linear ($\nu = 1$), essa difusão com arraste controlado recupera os resultados apresentados na seção 1 deste capítulo.

Consideremos agora a equação de difusão não linear sem fonte e sem força externa linear ($k_2(t) = 0$), mas com a dependência temporal do coeficiente de difusão dado por $D(t) = \mathcal{D}(t) = D_0 t^d$. Neste caso, para longo t , a Eq. (5.26) leva a

$$f(t) \sim -t^{d+1}. \quad (5.31)$$

Desde que $\sigma^2 \sim |f(t)|^{2/[2+N(1-a)]}$, existe uma competição entre os parâmetros q e d para definir os regimes difusivos. A Tab. (5.2) contém um resumo destes regimes.

Outra situação possível é tomar a equação de difusão não linear com uma fonte dependente do tempo, $\alpha(t) = \alpha_0 t^a$, com coeficiente de difusão independente do tempo, $\mathcal{D}(t) = D_0$, e sem força externa linear, $k_2(t) = 0$. Para $\nu = 1$ ($q = 1$), o termo de fonte não afeta o regime difusivo. Por outro lado, para $\nu \neq 1$ ($q \neq 1$) e longo t , a Eq. (5.26) fornece

$$f(t) \sim -t^a \exp\left[\frac{(q-1)\alpha_0 t^{1+a}}{1+a}\right] \quad (5.32)$$

quando $a > -1$. Para $a = -1$, temos

$$f(t) \sim -t^{(q-1)\alpha_0+1} \quad (5.33)$$

b	k	$\sigma^2(t)$	descrição
b	$k = 0$	t^{2/c_1}	c_1 -difusivo ¹
$b = 0$	$k > 0$	$(1 - e^{-c_1 kt})^{2/c_1}$	Ornstein-Uhlenbeck
$b = 0$	$k < 0$	$e^{2 k t}$	exponencialmente difusivo
$0 < b < 1$	$k > 0$	t^{2b/c_1}	c_1 -difusivo ²
$0 < b < 1$	$k < 0$	$e^{2 k t^{1-b}}$	menos que exponencialmente difusivo
$b < 0$	$k > 0$	$1/t^{2 b /c_1}$	localizado
$b < 0$	$k < 0$	$e^{2 k t^{1-b}}$	mais que exponencialmente difusivo
$b = 1$	$k > -1/c_1$	t^{2/c_1}	c_1 -difusivo ¹
$b = 1$	$k = -1/c_1$	$(t \ln t)^{2/c_1}$	log divergente
$b = 1$	$k < -1/c_1$	$t^{2 k }$	superdifusivo
$b > 1$	k	t^{2/c_1}	c_1 -difusivo ¹

Tabela 5.1: Comportamento para tempo longo de σ^2 para $\alpha(t) = 0$, $D(t) = \mathcal{D}(t) = D_0$ e $k_2(t) = kt^{-b}$, onde $c_1 = 2 + N(1 - q) > 0$. ¹O processo é superdifusivo para $c_1 < 2$, normal para $c_1 = 2$ e subdifusivo para $c_1 > 2$. ²O processo é superdifusivo para $c_1 < 2b$, normal para $c_1 = 2b$ e subdifusivo para $c_1 > 2b$.

d	q	$\sigma^2(t)$	descrição
$d = 0$	$q = 1$	t	normal
$d = 0$	$q < 1$	$t^{2/[2+N(1-q)]}$	subdifusivo
$d = 0$	$q > 1$	$t^{2/[2+N(1-q)]}$	superdifusivo
$d < 0$	$q = 1$	$t^{1- d }$	subdifusivo
$d > 0$	$q = 1$	t^{1+d}	superdifusivo
$d > N(1 - q)/2$	q	$t^{2(1+d)/[2+N(1-q)]}$	superdifusivo
$d < N(1 - q)/2$	q	$t^{2(1+d)/[2+N(1-q)]}$	subdifusivo

Tabela 5.2: Comportamento assintótico de $\sigma^2 \sim |f(t)|^{2/c_1}$ para $\alpha(t) = 0$, $D(t) = \mathcal{D}(t) = D_0 t^d$ e $k_2(t) = 0$, com $c_1 = 2 + N(1 - q) > 0$.

e, para $a < -1$, a Eq. (5.26) reduz-se a

$$f(t) \sim -t. \quad (5.34)$$

A Tab. (5.3) apresenta um sumário dos comportamentos descritos acima. Para concluir as observações sobre a difusão anômala induzida pelos coeficientes dependentes do tempo, reforçamos que a investigação de uma mais complexa dependência temporal dos coeficientes pode ser reduzida à análise da Eq. (5.26).

Tomando como referência a análise da variância, os resultados acima indicam que a anomalia em processos difusivos pode aparecer como consequência de diferentes causas. Em particular, a combinação de não linearidade e dependência temporal nos coeficientes pode levar à difusão normal (crescimento linear no tempo do deslocamento quadrático médio). Assim, mesmo processos descritos por distribuições não-gaussianas podem levar a esse tipo de difusão. Esse fato implica que a difusão normal, em geral, não pode ser associada com o perfil gaussiano da distribuição $\rho(\mathbf{r}, t)$, isto é, o crescimento linear da variância não necessariamente significa que estamos na presença de difusão ordinária. Indicamos, na figura (5.1), as diversas possibilidades relacionadas a diferentes processos difusivos.

α_0	a	$\sigma^2(t)$	descrição
$(q-1)\alpha_0 < 0$	$a = 0$	$\left(\frac{e^{(q-1)\alpha_0 t} - 1}{(q-1)\alpha_0}\right)^{2/c_1}$	estacionário
$(q-1)\alpha_0 > 0$	$a = 0$	$\left(\frac{e^{(q-1)\alpha_0 t} - 1}{(q-1)\alpha_0}\right)^{2/c_1}$	exponencialmente difusivo
α_0	$a = -1$	$t^{2[(q-1)\alpha_0 - 1]/c_1}$	c_1 -difusivo ³
			menos que
$(q-1)\alpha_0 > 0$	$-1 < a < 0$	$e^{\frac{2[(q-1)\alpha_0]t^{1+a}}{c_1(1+a)}}$	exponencialmente difusivo
$(q-1)\alpha_0 < 0$	$-1 < a < 0$	$t^{2 a /c_1}$	c_1 -difusivo ⁴
			mais que
$(q-1)\alpha_0 > 0$	$a > 0$	$e^{\frac{2[(q-1)\alpha_0]t^{1+a}}{c_1(1+a)}}$	exponencialmente difusivo
$(q-1)\alpha_0 < 0$	$a > 0$	t^{-2a/c_1}	localizado
α_0	$a < -1$	t^{2/c_1}	c_1 -difusivo ⁵

Tabela 5.3: Comportamento assintótico de $\sigma^2 \sim |f(t)|^{2/c_1}$, quando $\alpha(t) = \alpha_0 t^a$, $\mathcal{D}(t) = D_0$ e $k_2(t) = 0$, com $c_1 = 2 + N(1 - q) > 0$. ³O processo é superdifusivo para $c_1 < 2[(q-1)\alpha_0 - 1]$, normal para $c_1 = 2[(q-1)\alpha_0 - 1]$ e subdifusivo para $c_1 > 2[(q-1)\alpha_0 - 1]$. ⁴O processo é superdifusivo para $c_1 < 2|a|$, normal para $c_1 = 2|a|$ e subdifusivo para $c_1 > 2|a|$. ⁵O processo é superdifusivo para $c_1 < 2$, normal para $c_1 = 2$ e subdifusivo para $c_1 > 2$.

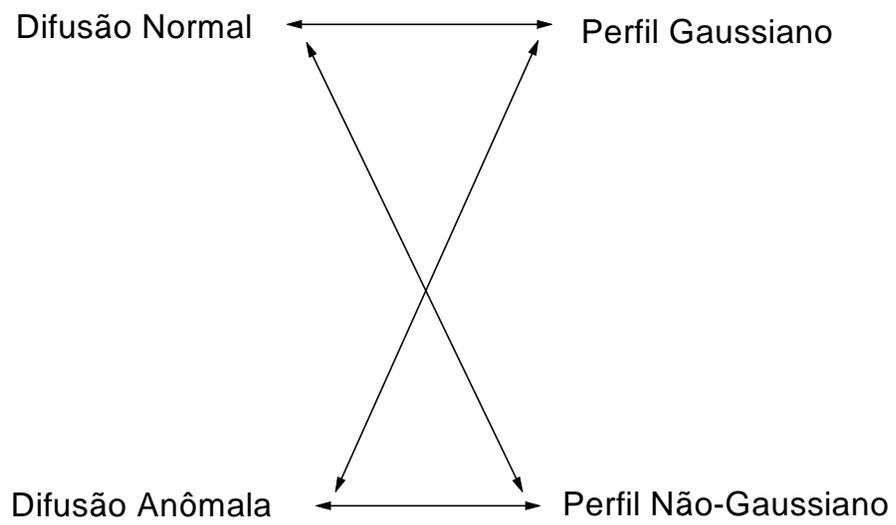


Figura 5.1: As possíveis correlações entre regimes difusivos e tipos de processo.

Capítulo 6

A equação logarítmica de difusão

Neste capítulo, estudaremos a equação de difusão que apresenta a forma logarítmica no seu termo difusivo. Essa equação surge como um possível caso limite da equação de Fokker-Planck não linear, justamente quando a potência do termo não linear tende a zero. As soluções exatas são obtidas através de um *ansatz* lorentziano e enfatizando a presença de força externa e termo de fonte. Apresentaremos também uma equação de difusão generalizada que unifica a equação logarítmica e a equação de difusão em meios porosos, incluindo o caso com dimensão fractal.

6.1 Equação logarítmica de difusão

Temos estudado, no decorrer deste trabalho, equações de difusão generalizada nas quais a não linearidade é incorporada no termo difusivo. Para motivar nossa discussão, vamos considerar inicialmente a equação de difusão em meios porosos (3.1),

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \nabla^2 \rho^\nu, \quad (6.1)$$

cuja solução é a gaussiana generalizada (3.21),

$$\rho(r, t) = \frac{1}{Z(t)} [1 - (1 - q) \beta(t) r^2]^{\frac{1}{1-q}}. \quad (6.2)$$

Relembramos que esta solução, assim como as equações para $\beta(t)$ e $Z(t)$, foram obtidas considerando a relação $q = 2 - \nu$. E o que acontece quando $q = 2$? É

evidente que, neste caso, o lado direito da equação (6.1) se anula em qualquer tempo e (6.2) deixa de ser sua solução. Porém (6.2), para $q = 2$, recai numa importante função conhecida: a lorentziana. Surge então uma questão instigante: qual deve ser a forma da equação de difusão não linear cuja solução é uma lorentziana?

Visto que $\ln x$ decai mais lentamente que qualquer potência x^r , quando r tende a zero positivamente, somos induzidos a sugerir a substituição de ρ^ν por $\ln \rho$ na Eq. (6.1) para $\nu \rightarrow 0$. Com essa perspectiva, entra em cena a equação logarítmica da difusão:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} \ln \rho. \quad (6.3)$$

Verifica-se, diretamente, que essa equação não linear apresenta como solução a lorentziana

$$\rho(x, t) = \frac{1}{Z(t)} \frac{1}{[1 + \beta(t)x^2]}. \quad (6.4)$$

Igualmente ao procedido em capítulos anteriores, a substituição de (6.4) em (6.3) mostra que as funções $\beta(t)$ e $Z(t)$ obedecem às equações

$$\frac{1}{Z^2} \frac{dZ}{dt} = 2D\beta \quad (6.5)$$

$$\frac{1}{Z^2} \frac{dZ}{dt} + \frac{1}{\beta Z} \frac{d\beta}{dt} = -2D\beta. \quad (6.6)$$

Elas podem ser desacopladas levando-se em conta que a relação $Z\beta^{1/2} = Z_0\beta_0^{1/2}$ é válida para qualquer tempo. As suas soluções são dadas por

$$\beta(t) = \beta_0(1 + 2D\beta_0 Z_0 t)^{-2} \quad (6.7)$$

e

$$Z(t) = Z_0(1 + 2D\beta_0 Z_0 t). \quad (6.8)$$

É interessante ressaltar que a partir da lorentziana não podemos atingir um valor finito para a variância. Esse fato, também característico das distribuições de Lévy, indica que a equação logarítmica está associada a regimes superdifusivos.

Para o caso N -dimensional, a Eq. (6.3) assume a forma

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \nabla^2 \ln \rho, \quad (6.9)$$

com $\nabla^2 = \sum_{i=1}^N \partial^2 / \partial x_i^2$ e cuja solução lorentziana, $\rho(|\mathbf{x}|, t)$, contém

$$\beta(t) = \beta_0 [1 - 2(N-2)D\beta_0 Z_0 t]^{2/(N-2)} \quad (6.10)$$

e

$$Z(t) = Z_0 [1 - 2(N-2)D\beta_0 Z_0 t]^{N/(2-N)}. \quad (6.11)$$

6.2 Presença de forças externas

Analisemos agora a Eq. (6.3) na descrição de um processo que inclui um termo de arraste (força externa) do tipo $F(x)$, ou seja,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} \ln \rho - \frac{\partial}{\partial x} (F\rho), \quad (6.12)$$

sendo a mobilidade μ considerada igual a unidade.

Para o caso $F(x) = k_1 - k_2 x$, a Eq. (6.12) apresenta como solução a lorentziana deslocada

$$\rho(x, t) = \frac{1}{Z(t)} \frac{1}{[1 + \beta(t)(x - x_0(t))^2]}. \quad (6.13)$$

De fato, com desenvolvimento análogo ao da seção prévia, assim como de capítulos anteriores, temos que $\beta(t)$, $Z(t)$ e $x_0(t)$ satisfazem às equações:

$$\frac{dx_0}{dt} = k_1 - k_2 x_0 \quad (6.14)$$

$$\frac{1}{\beta} \frac{d\beta}{dt} = -4D\beta Z + 2k_2 \quad (6.15)$$

$$\frac{1}{Z} \frac{dZ}{dt} = 2D\beta Z - k_2. \quad (6.16)$$

A Eq. (6.14) é independente do índice que caracteriza a não linearidade da equação de difusão, portanto ela ocorre tanto na equação de difusão usual quanto na de meios porosos ($\nu \neq 1$) (veja (5.20)). Conseqüentemente, a solução de (6.14) é do tipo (5.22), isto é,

$$x_0(t) = \left[x_0(0) + \frac{k_1}{k_2} (e^{k_2 t} - 1) \right] e^{-k_2 t}. \quad (6.17)$$

Por sua vez, as soluções de (6.15) e (6.16) são dadas por

$$\beta(t) = \beta_0 [1 - g(t)]^{-2} \quad (6.18)$$

e

$$Z(t) = Z_0 [1 - g(t)], \quad (6.19)$$

onde

$$g(t) = \left[\frac{(k_2 - 2D\beta_0 Z_0)}{k_2} (e^{k_2 t} - 1) \right] e^{-k_2 t} \quad (6.20)$$

com $g(0) = 0$.

6.3 Equação logarítmica com termo de fonte

Na presença de um termo de fonte, a equação (6.3) é escrita como

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} \ln \rho - \alpha(t) \rho. \quad (6.21)$$

Procedendo-se analogamente ao desenvolvimento da seção (4.2), fazemos uma mudança na solução e uma redefinição na variável temporal. Então, a solução de (6.21) é

$$\rho(x, t) = \frac{1}{Z(\tau(t))[1 + \beta(\tau(t))x^2]} \exp\left(-\int_0^t \alpha(t') dt'\right), \quad (6.22)$$

com $\beta(\tau(t))$ e $Z(\tau(t))$ dados por (6.7) e (6.8), nas quais $D = 1$ e t é substituído por $\tau(t) = \int_0^t \tilde{D}(t') dt'$, com $\tilde{D}(t) = D \exp\left(\int_0^t \alpha(t') dt'\right)$. A extensão para o caso N -dimensional de (6.22) é verificada empregando-se (6.10) e (6.11).

6.4 Caso estacionário

Aqui, podemos definir a densidade de corrente de probabilidade

$$J = F\rho - D \frac{\partial \ln \rho}{\partial x} \quad (6.23)$$

de maneira tal que a Eq. (6.12) representa uma equação de continuidade:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = 0. \quad (6.24)$$

No caso estacionário, $dJ/dx = 0$, o que implica $J = cte = 0$, uma vez que estamos aplicando a condição de contorno do tipo refletora, ou seja, queremos que

a corrente se anule no infinito. Esse fato nos permite escrever, levando em conta que $F = -dV/dx$,

$$\frac{d \ln \rho}{dx} = -\frac{1}{D} \frac{dV}{dx} \rho \quad (6.25)$$

cuja solução é dada por

$$\rho = \frac{1}{1 + \beta V}, \quad (6.26)$$

onde foi considerado $V(0) = 0$, $\beta = \rho_0/D$ e $\rho(0) = \rho_0 = 1$. Observe-se que a forma (6.26) é mantida na vertente N -dimensional.

A solução (6.26) é o caso $q = 2$ da exponencial generalizada

$$\rho = [1 - (1 - q)\beta V]^{1/(1-q)}, \quad (6.27)$$

a qual, por sua vez, recupera a distribuição de Boltzmann no limite $q \rightarrow 1$. Além disso, lembrando que a distribuição de Boltzmann é solução estacionária no caso de difusão usual, (6.26) é a sua análoga para a equação logarítmica de difusão.

6.5 Unificação das equações de difusão em meios porosos e logarítmica

A unificação das equações (6.1) e (6.3) será efetuada considerando a definição da função logarítmica generalizada, o q -logaritmo, dada por

$$\ln_q x = \frac{x^{1-q} - 1}{1 - q}. \quad (6.28)$$

Assim, a equação unificadora proposta neste trabalho tem a estrutura

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \bar{D} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \ln_{q-1} \rho, \quad (6.29)$$

e é evidente que, quando $q \rightarrow 2$, a função \ln_1 recupera a função logarítmica. Para $q = 2 - \nu \neq 2$, temos que $\ln_{q-1} = (\rho^\nu - 1)/\nu$ e a Eq. (6.29) recai na equação de difusão em meios porosos (6.1) com $D = \bar{D}/\nu$.

Analogamente a (6.29), podemos considerar a equação unificada radial levando em conta a dependência espacial no coeficiente de difusão, $r^{-\theta}$, e uma dimensão não

inteira d , associada a uma dimensão fractal. Isso feito, ampliamos o domínio de aplicabilidade da Eq. (3.15) e temos

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \bar{D} \tilde{\Delta} \ln_{q-1} \rho, \quad (6.30)$$

com $\tilde{\Delta}$ dado por (3.7). O *ansatz* (3.24),

$$\rho(r, t) = \frac{1}{Z(t)} \left[1 - (1 - q) \beta(t) r^\lambda \right]^{\frac{1}{1-q}}, \quad (6.31)$$

permanece válido e, substituído na Eq. (6.30), conduz às equações

$$\begin{aligned} \frac{dZ(t)}{dt} &= \bar{D} \lambda d \beta(t) Z^q(t) \\ \frac{d\beta(t)}{dt} &= -\bar{D} \lambda^2 \beta^2(t) Z^{q-1}(t). \end{aligned} \quad (6.32)$$

Desacopladas as equações e resolvidas, as soluções são dadas por (3.27) e (3.28) com $A = \bar{D} \lambda [\lambda + d(1 - q)] \beta_0 Z_0^{q-1}$, $\beta_0 = \beta(0)$ e $Z_0 = Z(0)$.

Com essas soluções, o fator $(2 - q)$, que fazia com que a solução da equação de difusão anômala generalizada (3.15) se tornasse trivial em $q = 2$, desaparece nesta construção e obtemos a "lorentziana", alongada se $\lambda < 2$ e curta se $\lambda > 2$. De fato, para $q = 2$, a solução é dada por

$$\rho(r, t) = \frac{1}{Z(t)} \left[\frac{1}{1 + \beta(t) r^\lambda} \right], \quad (6.33)$$

com

$$\beta(t) = \beta_0 [1 + At]^{-\lambda/[\lambda-d]} \quad \text{e} \quad Z(t) = Z_0 [1 + At]^{d/[\lambda-d]}. \quad (6.34)$$

A partir das generalizações apresentadas nesta seção é de se conjecturar que uma equação de difusão não linear, que contenha ρ^ν , pode ser estendida para $\nu = 0$, ao substituírmos ρ^ν por $\ln_{q-1} \rho$, com $q = 2 - \nu$.

Capítulo 7

A equação de Fokker-Planck não linear fracionária

O comportamento de uma difusão anômala pode ser simulado generalizando a equação de difusão ordinária, bem como introduzindo uma dependência temporal ou espacial apropriada nos coeficientes desta equação, como vimos ao longo deste trabalho. Assim, na generalização da equação de difusão é possível introduzir não linearidades, derivadas fracionárias ou ainda uma mistura de ambas. Tendo em vista tais aspectos, dedicamos este capítulo justamente à investigação das características que emergem da combinação entre não linearidades, dependência espacial no coeficiente de difusão e derivada fracionária, sendo esta última o ingrediente novo aqui explorado. Mais precisamente, é centrado o foco na equação não linear fracionária do tipo Fokker-Planck [43]:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ D(x) \frac{\partial^{\mu-1}}{\partial x^{\mu-1}} [\rho(x, t)]^\nu - F(x)\rho(x, t) \right\}, \quad (7.1)$$

onde $\nu, \mu \in \mathcal{R}$, $D(x) \propto |x|^{-\theta}$ é um coeficiente de difusão (adimensional) ($\theta \in \mathcal{R}$) e $F(x) = -dV(x)/dx$ é uma força externa (adimensional) associada ao potencial $V(x)$. Essa análise envolve várias extensões dos casos apresentados nos capítulos anteriores, em particular, pelo emprego de uma força externa $F = -k_1x + \bar{k}_\gamma x|x|^{\gamma-1}$.

7.1 Difusão anômala e equações fracionárias

A lei de Fick é extensivamente usada como um modelo para a descrição da difusão usual. Ela representa a mais simples relação fenomenológica entre o fluxo e o gradiente da função densidade. Assim, a difusão usual é descrita por um modelo local, ou seja, a pequenas escalas de tempo a evolução da função densidade em uma dada posição é afetada apenas por pontos próximos no espaço. Em alguns casos, porém, essa suposição não se aplica, levando a inconsistências na definição do coeficiente de difusão [66]. Dito de outra forma, mesmo em pequenas escalas de tempo, a evolução da função densidade em uma dada posição pode ser afetada por pontos distantes no espaço, caso, por exemplo, do transporte turbulento na camada limite convectiva [67].

Uma ferramenta que pode ser usada para descrever esta última classe de fenômenos é baseada no cálculo fracionário, no qual operadores diferenciais não locais podem ser empregados para levar em conta as correlações espaciais. Este procedimento, que leva a equações de difusão fracionárias, tem sido amplamente investigado para descrever difusão anômala [68]. Estas equações de difusão fracionárias são freqüentemente consideradas como um procedimento alternativo para modelos de caminhada aleatória com tempo contínuo, equações de Langevin generalizadas ou equações mestra generalizadas. Assim, equações de difusão fracionárias, ou equações de Fokker-Planck fracionárias, têm sido consideradas por diversos autores com diferentes propósitos. Por exemplo, equações com derivadas fracionárias temporais [69, 70], com derivadas fracionárias espaciais [71, 72, 73] e equações com derivadas fracionárias tanto espaciais quanto temporais [74, 75, 76].

Um exemplo típico de equação de difusão fracionária espacial é dado por

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x, t) = K_\mu \frac{\partial^\mu}{\partial |x|^\mu}\rho(x, t), \quad (7.2)$$

que tem como solução as distribuições de Lévy

$$L_\mu(|x|, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp[-ikx - K_\mu |k|^\mu t], \quad (7.3)$$

sendo K_μ uma constante. Como foi apresentado no capítulo 1, tais distribuições não possuem segundo momento finito e caracterizam a difusão anômala do tipo

Lévy. Além disso, uma distribuição de Lévy satisfaz o teorema do limite central generalizado de Lévy-Gnedenko. Quanto à derivada fracionária, estamos usando a definição de Riemann-Liouville [77]. Também trabalharemos com o eixo x positivo empregando simetria para estender os resultados para o eixo real completo (em outras palavras, isto equivale a trabalhar com $\partial^{\mu-1}/\partial|x|^{\mu-1}$).

Como indicada previamente, a Eq. (7.1) pode ser usada para descrever uma ampla classe de processos de difusão anômala, visto que ela contém, como um caso particular, a equação para meios porosos, superdifusão de Lévy, bem como uma mistura de ambas. Por exemplo, para $\mu = 2$ e $\nu = 1$, a Eq. (7.1) recupera a equação de Fokker-Planck usual com um termo de arraste. O caso particular $F(x) = 0$, $D(x) = cte$, $\mu = 2$ e ν arbitrário foi considerado por Spohn [6]. O caso $\mu = 2$ foi também estudado com detalhes ao longo deste trabalho, porém com $F(x) \neq 0$ e com D apresentando dependência espacial. O caso $\mu < 2$ com $F(x) = 0$ e $D = cte$ foi tratado em [73].

7.2 Equação de Fokker-Planck não linear

Em contraste com a introdução de *ansatz* específico para resolver equações de difusão, como nos capítulos anteriores, vamos considerar um procedimento mais unificador. Neste sentido, é interessante notar que os resultados apresentados anteriormente podem essencialmente ser obtidos usando-se soluções escaladas do tipo

$$\rho(x, t) = \frac{1}{\Phi(t)} \tilde{\rho} \left[\frac{x}{\Phi(t)} \right] \quad (7.4)$$

para resolver a Eq.(7.1). Procedimento similar tem sido empregado, por exemplo, em [78, 79]. Via de regra, o preço que se paga com a introdução desse *ansatz* é ter que resolver uma equação diferencial a mais, que pode ser não linear.

Para ilustrar esse último procedimento, vamos substituir a Eq.(7.4) na Eq.(7.1), com $\mu = 2$, $F(x) = 0$ e $D(x) = \mathcal{D} = cte$. Assim,

$$-\frac{\dot{\Phi}(t)}{\Phi(t)^2} \frac{d}{dz} [z \tilde{\rho}(z)] = \frac{d}{dz} \left\{ \frac{\mathcal{D}}{\Phi(t)^{2+\nu}} \frac{d}{dz} [\tilde{\rho}(z)]^\nu \right\} , \quad (7.5)$$

sendo $z = x/\Phi(t)$. A seguir, eliminamos a dependência temporal explícita na Eq. (7.5) escolhendo

$$[\Phi(t)]^\nu \frac{d}{dt} \Phi(t) = k, \quad (7.6)$$

k é uma constante. Então, a Eq. (7.6), substituída na Eq. (7.5), conduz a

$$-k \left[\frac{d}{dz} z \tilde{\rho}(z) \right] = \frac{d}{dz} \left\{ \mathcal{D} \frac{d}{dz} [\tilde{\rho}(z)]^\nu \right\}. \quad (7.7)$$

A Eq. (7.6) tem como solução

$$\Phi(t) = \Phi_0 [1 + (1 + \nu)\Phi_0^{1-\nu} kt]^{1/(1+\nu)}, \quad (7.8)$$

se $\Phi_0 = \Phi(0) \neq 0$ e

$$\Phi(t) = [(1 + \nu)kt]^{1/(1+\nu)}, \quad (7.9)$$

se $\Phi(0) = 0$ para $\nu > -1$. Por outro lado, integrando uma vez a Eq. (7.7), obtemos

$$-kz\tilde{\rho}(z) = D \frac{d}{dz} [\tilde{\rho}(z)]^\nu + C. \quad (7.10)$$

Finalmente, escolhendo $C = 0$, temos uma solução dessa equação

$$\rho(x, t) = \frac{1}{\Phi(t)} \exp_q \left[-\frac{k}{2\mathcal{D}\nu} \left(\frac{x}{\Phi(t)} \right)^2 \right], \quad (7.11)$$

com $q = 2 - \nu$ e $\exp_q(x) \equiv [1 + (1 - q)x]^{1/(1-q)}$ sendo a função q -exponencial. Este resultado corresponde essencialmente a (3.21) para uma dimensão. Observe-se que a constante k pode ser fixada a partir da condição de normalização, $\int_{-\infty}^{\infty} dx \rho(x, t) = 1$.

De maneira geral, a normalização de ρ é independente do tempo. De fato, se a equação (7.1) for escrita na forma $\partial\rho/\partial t = \partial\mathcal{J}/\partial x$ e se assumirmos as condições de contorno $\mathcal{J}(\pm\infty, t) \rightarrow 0$, pode-se mostrar que $\int_{-\infty}^{\infty} dx \rho(x, t)$ é uma constante de movimento.

Retornemos à Eq. (7.1) com $F = -k_1 x + \bar{k}_\gamma x |x|^{\gamma-1}$ ($k_1 \neq \bar{k}_\gamma$) e $D(x) = \mathcal{D}|x|^{-\theta}$ ($\theta \in \mathcal{R}$). Esta forma de arraste não apresenta o termo constante e tem um termo extra que mantém o caráter ímpar da força, quando comparado aos casos estudados anteriormente. Inicialmente, será direcionada a discussão para o caso $\mu = 2$. Empregando a Eq. (7.4) para $\rho(x, t)$, a Eq. (7.1) reduz-se a

$$-\frac{\dot{\Phi}(t)}{\Phi(t)^2} \frac{d}{dz} [z\tilde{\rho}(z)] = \frac{d}{dz} \left\{ \frac{z^{-\theta}\mathcal{D}}{\Phi(t)^{2+\nu+\theta}} \frac{d}{dz} [\tilde{\rho}(z)]^\nu + \left[\frac{zk_1}{\Phi(t)} - \frac{z^\gamma \bar{k}_\gamma}{\Phi(t)^{2-\gamma}} \right] \tilde{\rho}(z) \right\}. \quad (7.12)$$

A seguir, desacopla-se a dependência em t e em z na Eq. (7.12), como foi levado a efeito na Eq. (7.5), via Eq. (7.6). Isso pode ser realizado quando $\gamma + \theta + \nu = 0$. Se esta condição for satisfeita, verificamos que

$$\frac{\dot{\Phi}(t)}{\Phi(t)^2} + \frac{k_1}{\Phi(t)} = \frac{k'}{\Phi(t)^{2+\nu+\theta}} \quad (7.13)$$

e

$$-k' \left[\frac{d}{dz} z \tilde{\rho}(z) \right] = \frac{d}{dz} \left\{ \mathcal{D}z^{-\theta} \frac{d}{dz} [\tilde{\rho}(z)]^\nu - k_\gamma z^\gamma \tilde{\rho}(z) \right\}, \quad (7.14)$$

sendo k' é uma constante que desempenha um papel análogo a k na Eq. (7.7) e que pode ser determinada através da normalização.

Seguindo as etapas de cálculo de (7.6) e (7.7), obtemos as soluções das equações (7.13) e (7.14), generalizando os resultados do exemplo anterior. Ou seja, somos conduzidos a

$$\Phi(t) = \left[\frac{k'}{k_1} (1 - e^{-(1+\nu+\theta)k_1 t}) \right]^{1/(1+\nu+\theta)}, \quad (7.15)$$

quando $\phi(0) = 0$ e

$$\rho(x, t) = \frac{1}{\Phi(t)} \exp_q \left[-\frac{1}{\mathcal{D}\nu} \left(\frac{k'}{2 + \theta} \left(\frac{|x|}{\Phi(t)} \right)^{2+\theta} - k_\gamma \ln_{2-q} \left(\frac{|x|}{\Phi(t)} \right) \right) \right]. \quad (7.16)$$

Aqui, $\ln_q x \equiv (x^{1-q} - 1)/(1 - q)$ é a função q -logaritmo (que é a função inversa da função q -exponencial), já utilizada no capítulo 6. Observe-se que, nos resultados acima, para o caso $\mu = 2$, a solução analítica (7.16) leva em conta os aspectos fractal e não linear, uma vez que existe uma dependência espacial no coeficiente de difusão ($\theta \neq 0$) e um termo não linear ($\nu \neq 1$). Convém ressaltar, também, que ela contém resultados apresentados em [6, 28, 31, 40, 55, 41, 79, 80] como casos particulares. Além disso, esse exemplo reduz-se ao caso do processo de Rayleigh [81] no limite $q \rightarrow 1$ e $\theta = 0$.

7.3 Derivadas fracionárias

Faremos aqui uma breve exposição de alguns resultados envolvendo derivadas fracionárias, os quais serão utilizados na investigação do caso $\mu \neq 2$ em (7.1). Uma apresentação mais completa pode ser encontrada em [77].

Existem diferentes definições para derivadas fracionárias que estão de uma forma ou de outra adaptadas às várias características do contexto no qual elas serão empregadas. Em física, a derivada fracionária de Riemann-Liouville é mais comumente utilizada. Sua definição remonta à fórmula de Cauchy para integrais múltiplas

$${}_0I_x^n f(x) = \int_0^x dx_1 \dots \int_0^{x_{n-1}} dx_n f(x_n) = \frac{1}{(n-1)!} \int_0^x dt \frac{f(t)}{(x-t)^{1-n}}. \quad (7.17)$$

Substituindo o fatorial pela função gama de Euler, podemos generalizar a fórmula introduzindo o expoente fracionário, como segue

$${}_0I_x^\alpha f(x) \equiv \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^x dt \frac{f(t)}{(x-t)^{1-\alpha}}. \quad (7.18)$$

Essa expressão é denominada integral fracionária de Riemann-Liouville. A derivada fracionária é então definida como uma derivada ordinária da integral de ordem fracionária:

$$\begin{aligned} {}_0D_x^\alpha f(x) &\equiv \frac{d^\alpha}{dx^\alpha} f(x) = \frac{d^n}{dx^n} {}_0I_x^{n-\alpha} f(x) \\ &= \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \frac{d^n}{dx^n} \int_0^x dt \frac{f(t)}{(x-t)^{1+\alpha-n}} \quad (n-1 \leq \alpha < n). \end{aligned} \quad (7.19)$$

Antes de apresentarmos a regra de derivadas fracionárias para o produto de duas funções, consideremos um exemplo. Ele é a aplicação da definição acima para a função x^p :

$${}_0D_x^\alpha x^p = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \frac{d^n}{dx^n} \int_0^x \frac{t^p}{(x-t)^{1+\alpha-n}} dt. \quad (7.20)$$

Substituindo t/x por u , esta integral pode ser escrita na forma padrão da função beta

$$\begin{aligned} {}_0D_x^\alpha x^p &= \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \frac{d^n}{dx^n} x^{p-\alpha+n} \int_0^1 u^p (1-u)^{-1-\alpha+n} du \\ &= \frac{\Gamma(p+1)}{\Gamma(p-\alpha+n+1)} \frac{d^n}{dx^n} x^{p-\alpha+n}. \end{aligned} \quad (7.21)$$

Agora, utilizamos a fórmula clássica

$$\frac{d^n x^p}{dx^n} = p(p-1)\dots(p-n+1)x^{p-n} = \frac{\Gamma(p+1)}{\Gamma(p-n+1)} x^{p-n} \quad (7.22)$$

e obtemos

$${}_0D_x^\alpha x^p = \frac{\Gamma(p+1)}{\Gamma(p-\alpha+1)} x^{p-\alpha}. \quad (7.23)$$

É interessante notar que o resultado exato (7.23) corresponde a, simplesmente, substituir em (7.22) o número inteiro positivo n pelo real α .

A diferenciação de um produto de duas funções, um resultado familiar no cálculo elementar, é estabelecida pela regra de Leibniz:

$$\frac{d^n}{dx^n}[fg] = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} \frac{d^{n-k}f}{dx^{n-k}} \frac{d^k g}{dx^k} \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (7.24)$$

A soma finita em (7.24) valeria igualmente se fosse estendida até ∞ , pois em

$$\binom{n}{k} = \frac{n!}{k!(n-k)!} = \frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(k+1)\Gamma(n-k+1)} \quad (7.25)$$

temos que $|\Gamma(k-n+1)| \rightarrow \infty$, se $k > n$ com k inteiro positivo. Por outro lado, com base na integração por partes, é verificada a seguinte regra do produto para integrais

$$\frac{d^{-n}}{dx^{-n}}[fg] = \sum_{k=0}^{\infty} \binom{-n}{k} \frac{d^{-n-k}f}{dx^{-n-k}} \frac{d^k g}{dx^k} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (7.26)$$

com a notação

$$\frac{d^{-1}f}{dx^{-1}} \equiv \int_0^x dx_0 f(x_0), \quad \frac{d^{-2}f}{dx^{-2}} \equiv \int_0^x dx_1 \int_0^{x_1} dx_0 f(x_0), \dots \quad (7.27)$$

Então, para ordens arbitrárias de diferenciação a regra do produto é generalizada como

$${}_0D_x^\alpha[f(x)g(x)] = \sum_{n=0}^{\infty} \binom{\alpha}{n} {}_0D_x^{\alpha-n}[f(x)] {}_0D_x^n[g(x)]. \quad (7.28)$$

Como ilustração e objetivando futuras aplicações, vamos utilizar a última regra para a função $x^\alpha(a+bx)^\beta$ [73]:

$$\begin{aligned} {}_0D_x^\mu[x^\alpha(a+bx)^\beta] &= \sum_{n=0}^{\infty} \binom{\mu}{n} {}_0D_x^{\mu-n}[x^\alpha] {}_0D_x^n[(a+bx)^\beta] \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \binom{\mu}{n} \frac{\Gamma(\alpha+1)x^{\alpha-\mu+n}}{\Gamma(\alpha+1-\mu+n)} \frac{\Gamma(\beta+1)}{\Gamma(\beta+1+n)} b^n (a+bx)^{\beta-n}. \end{aligned} \quad (7.29)$$

Nesse procedimento, aplicamos diretamente o resultado (7.23) e o fato de que

$${}_0D_x^n[(a+bx)^\beta] = \frac{d^n}{dx^n}(a+bx)^\beta = \frac{\Gamma(\beta+1)}{\Gamma(\beta+1+n)}b^n(a+bx)^{\beta-n}. \quad (7.30)$$

Se ocorre em (7.29) $\alpha + \beta + 1 = \mu$, obtemos uma forma simples para esta série:

$$\begin{aligned} {}_0D_x^\mu[x^\alpha(a+bx)^\beta] &= \frac{\Gamma(\alpha+1)}{\Gamma(\alpha-\mu+1)}x^{\alpha-\mu}(a+bx)^{-\alpha-1}\sum_{n=0}^{\infty}\binom{\mu}{n}(-bx)^n(a+bx)^{\mu-n} \\ &= a^\mu\frac{\Gamma(\alpha+1)}{\Gamma(\alpha-\mu+1)}x^{\alpha-\mu}(a+bx)^{\beta-\mu}, \end{aligned} \quad (7.31)$$

onde também foi usada a propriedade da função gama $\Gamma(z)\Gamma(1-z) = \pi/\text{sen}\pi z$.

7.4 Equação de Fokker-Planck não linear fracionária

Estamos agora em condições de estender a discussão anterior ($\mu = 2$), investigando a Eq. (7.1) no caso $\mu \neq 2$. Sem perda de generalidade, será considerado $\mathcal{D} = 1$. A substituição da Eq. (7.4) na Eq. (7.1) conduz a

$$-\frac{\dot{\Phi}(t)}{\Phi(t)^2}\frac{d}{dz}[z\tilde{\rho}(z)] = \frac{d}{dz}\left\{\frac{z^{-\theta}}{\Phi(t)^{\theta+\mu+\nu}}\frac{d^{\mu-1}}{dz^{\mu-1}}[\tilde{\rho}(z)]^\nu + \left[\frac{zk_1}{\Phi(t)} - \frac{z^\gamma\bar{k}_\gamma}{\Phi(t)^{2-\gamma}}\right]\tilde{\rho}(z)\right\} \quad (7.32)$$

Por sua vez, a imposição de

$$\frac{\dot{\Phi}(t)}{\Phi(t)^2} + \frac{k_1}{\Phi(t)} = -\frac{\bar{k}'}{\Phi(t)^{\nu+\theta+\mu}} \quad (7.33)$$

desacopla a dependência em t e z , com \bar{k}' sendo uma constante arbitrária, e leva a

$$\bar{k}'\frac{d}{dz}[z\tilde{\rho}(z)] = \frac{d}{dz}\left\{z^{-\theta}\frac{d^{\mu-1}}{dz^{\mu-1}}[\tilde{\rho}(z)]^\nu - k_\gamma z^\gamma\tilde{\rho}(z)\right\}, \quad (7.34)$$

com $\gamma = -\theta - \nu - \mu + 2$.

Segue de (7.33) que

$$\Phi(t) = \left\{\bar{k}_2 e^{-(\mu+\nu+\theta-1)k_1 t} - \frac{\bar{k}'}{k_1} [1 - e^{-(\mu+\nu+\theta-1)k_1 t}]\right\}^{\frac{1}{\nu+\mu+\theta-1}}, \quad (7.35)$$

na qual \bar{k}_2 é outra constante arbitrária. Se $\bar{k}_2 = 0$, temos $\Phi(0) = 0$ para $\nu + \mu + \theta > 1$, recuperando a Eq. (7.15) quando $\mu \rightarrow 2$.

Uma integração de (7.34) fornece para $\tilde{\rho}(z)$ a equação

$$\bar{k}' z \tilde{\rho}(z) = z^{-\theta} \frac{d^{\mu-1}}{dz^{\mu-1}} [\tilde{\rho}(z)]^\nu - k_\gamma z^\gamma \tilde{\rho}(z) + \mathcal{C} , \quad (7.36)$$

sendo \mathcal{C} outra constante arbitrária. A seguir, vamos orientar a discussão focalizando duas situações para a Eq.(7.36). A primeira delas é caracterizada por um arraste linear, $F = -k_1 x$. Na segunda, será considerado o arraste $F = -k_1 x + k_\gamma x |x|^{\gamma-1}$, para valores particulares de μ .

7.4.1 O arraste $F = -k_1 x$

Iniciemos a discussão explorando a Eq. (7.36) com $k_1 \neq 0$ e $k_\gamma = 0$, ou seja,

$$\frac{d^{\mu-1}}{dz^{\mu-1}} [\tilde{\rho}(z)]^\nu = \bar{k}' z^{\theta+1} \tilde{\rho}(z) + \mathcal{C} . \quad (7.37)$$

Para resolvê-la, podemos utilizar o procedimento empregado em [73]. Escolhemos então $\tilde{\rho}(z)$ como

$$\tilde{\rho}(z) = Az^{\alpha/\nu} (1 + bz)^{\beta/\nu} = \bar{z}^{\alpha/\nu} (1 + \bar{b}\bar{z})^{\beta/\nu} \quad (7.38)$$

onde $\bar{z} = A^{\nu/\alpha}$ e $\bar{b} = bA^{-\nu/\alpha}$. Considerando (7.31), juntamente com o resultado geral [79, 80]

$$\frac{d^\mu}{dx^\mu} \mathcal{G}(cx) = c^\mu \frac{d^\mu}{d\bar{z}^\mu} \mathcal{G}(\bar{z}) \quad (\mu \in \mathcal{R}, \bar{z} = cx), \quad (7.39)$$

propriedade que vale não apenas para derivadas ordinárias, mas também para os operadores fracionários em geral, verificamos que

$$\frac{d^{\mu-1}}{dz^{\mu-1}} [\tilde{\rho}(z)^\nu] = A^\nu \frac{\Gamma(\alpha + 1)}{\Gamma(\alpha - \nu + 2)} (1 + bz)^{\beta-\nu+1} . \quad (7.40)$$

Substituindo este resultado em (7.37), com $\mathcal{C} = 0$, e levando em conta que os expoentes de z , assim como os de $(a + bz)$, devem ser iguais, concluímos que

$$\nu = \frac{2 - \mu}{1 + \mu + \theta}, \quad (7.41)$$

$$\alpha = \frac{(2 - \mu)(\theta + \mu)}{1 - 2\mu - \theta}, \quad (7.42)$$

$$\beta = -\frac{2 - 3\mu + \mu^2}{1 - 2\mu - \theta}. \quad (7.43)$$

Assim, temos

$$\rho(x, t) = \frac{A}{\Phi(t)} \left[\frac{z^{(\mu+\theta)(1+\mu+\theta)}}{(1+bz)^{(1-\mu)(1+\mu+\theta)}} \right]^{\frac{1}{1-2\mu-\theta}}, \quad (7.44)$$

com $\Phi(t)$ dado por Eq.(7.35), $z \equiv x/\Phi(t)$ e

$$A = \left[\bar{k}' \frac{\Gamma(-\beta)}{\Gamma(\alpha+1)} \right]^{\frac{1+\mu+\theta}{1-2\mu-\theta}}. \quad (7.45)$$

A Eq. (7.44) reduz-se àquela obtida em [80] na ausência de arraste.

A presença de um termo de fonte, $\alpha\rho$ ($\alpha = cte$), no lado direito da Eq. (7.1), modifica a Eq. (7.35), porém não afeta a forma de ρ , Eq. (7.37). De fato, usando $\rho = \hat{\rho} \exp(\alpha t)$, como em capítulos anteriores, e, para $\hat{\rho}$ o *ansatz* (7.4), chegamos a

$$\left(-\frac{\dot{\Phi}(t)}{\Phi(t)^2} - \frac{k_1}{\Phi(t)} \right) \frac{d}{dz} [z\tilde{\rho}(z)] = \frac{d}{dz} \left\{ \frac{z^{-\theta} e^{(1-\nu)\alpha t}}{\Phi(t)^{\theta+\mu+\nu}} \frac{d^{\mu-1}}{dz^{\mu-1}} [\tilde{\rho}(z)]^\nu \right\}. \quad (7.46)$$

A partir dessa equação promovemos uma separação de variáveis, conduzindo a

$$\left(\frac{\dot{\Phi}(t)}{\Phi(t)^2} + \frac{k_1}{\Phi(t)} \right) \Phi(t)^{\theta+\mu+\nu} e^{(1-\nu)\alpha t} = -\bar{k}'' \quad (7.47)$$

e

$$\bar{k}'' \frac{d}{dz} [z\tilde{\rho}(z)] = \frac{d}{dz} \left\{ z^{-\theta} \frac{d^{\mu-1}}{dz^{\mu-1}} [\tilde{\rho}(z)]^\nu \right\}, \quad (7.48)$$

com \bar{k}'' constante. A integração de (7.47) resulta em

$$\Phi(t) = \left\{ \frac{(1-\mu-\theta-\nu)\bar{k}''}{(\nu-1)\alpha + (\mu+\theta+\nu-1)k_1} [e^{(\nu-1)\alpha t} - e^{-(\mu+\theta+\nu-1)k_1 t}] \right\}^{\frac{1}{\mu+\theta+\nu-1}}, \quad (7.49)$$

e, por sua vez, integrando (7.48) recaímos em (7.37). Portanto, a presença do termo de fonte não altera a parte da solução dependente de z , sendo modificada somente a parte que depende explicitamente de t .

7.4.2 O arraste $F = -k_1 x + k_\gamma x|x|^{\gamma-1}$

Vamos considerar agora casos particulares para a derivada fracionária, especificamente $\mu = 0$ e $\mu = 1$. Iniciemos com $\mu = 0$ e ν arbitrário. A correspondente

equação é

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ x^{-\theta} \int_0^x [\rho(y, t)]^\nu dy + [k_1 x - \bar{k}_\gamma x^{-\nu-\theta+2}] \rho(x, t) \right\} . \quad (7.50)$$

Para resolvê-la, voltemos à Eq. (7.36), com $\mu = 0$ e $\mathcal{C} = 0$, isto é,

$$\bar{k} z \tilde{\rho}(z) = z^{-\theta} \int_0^z d\bar{z} [\tilde{\rho}(\bar{z})]^\nu - \bar{k}_\gamma z^{-\nu-\theta+2} \tilde{\rho}(z) , \quad (7.51)$$

cuja solução é dada por

$$\tilde{\rho}(z) \propto \frac{1}{\bar{k}' z^{1+\theta} + \bar{k}_\gamma z^{-\nu+2}} \left[1 + \tilde{\mathcal{C}} \int dz \left(\bar{k}' z^{1+\theta} + \bar{k}_\gamma z^{-\nu+2} \right)^{-\nu} \right]^{1/(1-\nu)} , \quad (7.52)$$

onde $\tilde{\mathcal{C}}$ é uma constante.

A análise agora é direcionada para o caso $\mu = 1$. Isso corresponde a investigar a equação

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ x^{-\theta} [\rho(x, t)]^\nu + [k_1 x - \bar{k}_\gamma x^{-\nu-\theta+1}] \rho(x, t) \right\} . \quad (7.53)$$

Para obter a solução desta equação, empregando o *ansatz* (7.4), usamos a Eq. (7.36). Segue que

$$\bar{k}' z \tilde{\rho}(z) = z^{-\theta} [\tilde{\rho}(z)]^\nu - \bar{k}_\gamma z^{-\nu-\theta+1} \tilde{\rho}(z) + \mathcal{C} . \quad (7.54)$$

e, conseqüentemente, a solução correspondente para $\mathcal{C} = 0$ é

$$\tilde{\rho}(z) = \left(\bar{k}' z^{1+\theta} + \bar{k}_\gamma z^{-\nu+1} \right)^{1/(\nu-1)} . \quad (7.55)$$

Finalmente, indicaremos uma conexão entre os resultados apresentados aqui e as soluções que surgem da otimização da entropia não extensiva de Tsallis. Estas distribuições não coincidem para valores arbitrários de x . Porém, a comparação entre os comportamentos assintóticos ($|x|$ grande) permite-nos identificar os tipos de cauda. Por exemplo, supondo que sejam os mesmos o comportamento exibido pela Eq. (7.44) para $|x|$ grande,

$$\rho \propto \frac{1}{|x|^{1+\mu+\theta}} , \quad (7.56)$$

e o comportamento assintótico $1/|x|^{2/(q-1)}$, que advém da função que surge da maximização da entropia de Tsallis ($\rho \propto [1 - (1 - q)\lambda|x|^2]^{1/(1-q)}$), constatamos que

$$q = \frac{3 + \mu + \theta}{1 + \mu + \theta} . \quad (7.57)$$

Essa relação é a mesma verificada em [80] na ausência de arraste. Ela também recupera aquela já estabelecida em [73] para $\theta = 0$.

Capítulo 8

Conclusão

Do ponto de vista formal, a origem da difusão anômala pode estar relacionada a vários fatores. Não linearidades na equação que descreve a difusão, dependência espacial e/ou temporal nos coeficientes que caracterizam a equação de difusão, derivadas fracionárias ou uma combinação desses elementos são todos fatores que induzem ao comportamento difusivo anômalo.

Ao incorporarmos um coeficiente de difusão com dependência espacial do tipo $D \propto r^{-\theta}$, numa equação tipo Fokker-Planck não linear em dimensão não-inteira (fractal), obtivemos uma equação de difusão generalizada que interpola a equação de difusão em meios porosos, a equação de Richardson e a equação de O'Shaughnessy-Procaccia. Sua solução é uma gaussiana generalizada que unifica o comportamento tipo lei de potência e exponencial alongada. Na descrição do processo difusivo, verifica-se uma competição caracterizada pelos índices θ , da dependência espacial, e ν , que induz à não linearidade. Quando empregamos o deslocamento quadrático médio (ou a variância) para classificar o regime difusivo, verificamos que uma combinação desses índices pode levar à subdifusão, superdifusão ou mesmo à difusão usual. Neste último caso, constatamos que a forma de distribuição gaussiana não é a única que identifica uma difusão usual.

Introduzindo um termo de fonte nessa equação generalizada, observamos que sua influência no deslocamento quadrático médio se manifesta somente na presença da não linearidade da equação. O termo de fonte constante acentua o caráter

superdifusivo ou subdifusivo do processo. Quando o termo de fonte é uma potência no tempo, as conclusões são essencialmente as mesmas do caso com fonte constante. Na presença de uma força linear do tipo $F(r) = -kr$ nesta equação, verificamos uma solução estacionária para tempo longo, com $\langle r^2 \rangle$ correndo para um valor constante quando k positivo. Para $k < 0$, $\langle r^2 \rangle$ cresce exponencialmente para longo t . As soluções estacionárias desta equação são tais que maximizam a entropia de Tsallis, portanto da forma da distribuição canônica de Tsallis.

A presença de coeficientes dependentes do tempo na equação de difusão pode implicar a emergência de difusão anômala, mesmo o processo sendo descrito por uma equação de difusão linear e uma distribuição gaussiana. Tais coeficientes presentes numa equação não linear com termo de fonte e de arraste, associados a uma distribuição não gaussiana, podem conduzir tanto a processos anômalos como à difusão usual, entendendo-se por usual o comportamento linear no tempo da variância. Estes resultados podem ser úteis para clarear uma possível origem de uma vasta classe de diferentes processos difusivos anômalos, tanto em contextos teóricos quanto experimentais.

A equação de difusão logarítmica vem ampliar o limite de aplicação da equação de difusão em meios porosos e das equações generalizadas estudadas ao longo deste trabalho, uma vez que essas equações deixam de ter a q -gaussiana como solução em $q = 2$. A equação logarítmica é justamente a equação de difusão para este caso, tendo como solução exata a lorentziana. Nesta direção, é obtida uma unificação da equação logarítmica de difusão com a equação de difusão em meios porosos, e, de forma mais geral, com a equação generalizada em dimensão fractal. Assim, este feito representa um avanço na descrição formal dos processos difusivos, bem como nas suas soluções.

Nesta trajetória de unificação e generalização, a equação não linear com derivada fracionária (espacial) e dependência espacial no coeficiente de difusão representa mais um passo importante. São encontradas soluções exatas, que contemplam muitos dos principais casos apresentados no desenvolvimento deste trabalho e resultados importantes vistos na literatura, como situações particulares. Neste contexto, é efetuada uma análise que inclui uma força externa, a qual pode ter curto ou longo

alcance, a depender de uma escolha conveniente de parâmetros.

Apesar de, nesta pesquisa, não invocarmos diretamente questões experimentais relacionadas às equações de difusão anômala investigadas, acreditamos que o trabalho seja relevante. Isso porque as várias equações de difusão analisadas interpolam outras de consagrada posição na literatura. Assim, espera-se que estas equações, ou pelo menos casos especiais delas, reflitam situações físicas nas quais haja competição entre diferentes mecanismos que geram difusão anômala.

Referências Bibliográficas

- [1] S. K. Ma. *Statistical Mechanics*. World Scientific, Singapore, 1985.
- [2] L. F. Richardson. Atmospheric diffusion shown on a distance-neighbour graph. *Proc. R. Soc. London Ser. A*, **110**:709, (1926).
- [3] J. G. Berryman. Evolution of a stable profile for a class of nonlinear diffusion equations with fixed boundaries. *J. Math. Phys.*, **18**:2108, (1997).
- [4] M. F. Shlesinger, J. Klafter, and B. J. West. Lévy walks with applications to turbulence and chaos. *Physica A*, **140**:212, (1986).
- [5] M. F. Shlesinger, B. J. West, and J. Klafter. Lévy dynamics of enhanced diffusion: application to turbulence. *Phys. Rev. Lett.*, **58**:1100, (1987).
- [6] H. Spohn. Surface dynamics below the roughening transition. *J. Phys. (France) I*, **3**:69, (1993).
- [7] J. Stephenson. Some non-linear diffusion equations and fractal diffusion. *Physica A*, **222**:234, (1995).
- [8] O. V. Bychuk and B. O'Shaughnessy. Anomalous diffusion at liquid surfaces. *Phys. Rev. Lett.*, **74**:1795, (1995).
- [9] C. K. Peng, J. Mietus, J. M. Hausdorff, S. Havlin, H. E. Stanley, and A. L. Goldberger. Long range anticorrelations and non-gaussian behavior of the heartbeat. *Phys. Rev. Lett.*, **70**:1343, (1993).

- [10] A. Ott, J. P. Bouchaud, D. Langevin, and W. Urbach. Anomalous diffusion in "living polymers": a genuine Lévy flight? *Phys. Rev. Lett.*, **65**:2201, (1990).
- [11] J. P. Bouchaud, A. Ott, D. Langevin, and W. Urbach. Anomalous diffusion in elongated micelles and its Lévy flight interpretation. *J. Phys. II France*, **1**:1465, (1991).
- [12] T. Geisel, J. Nierwetberg, and A. Zacherl. Accelerated diffusion in Josephson junctions and related chaotic systems. *Phys. Rev. Lett.*, **54**:616, (1985).
- [13] M. F. Shlesinger, G. M. Zaslavsky, and J. Klafter. Strange kinetics. *Nature (London)*, **363**:31, (1993).
- [14] T. H. Solomon, E. R. Weeks, and H. L. Swinney. Observation of anomalous diffusion and Lévy flights in a two-dimensional rotating flow. *Phys. Rev. Lett.*, **71**:3975, (1993).
- [15] E. R. Weeks and H. L. Swinney. Anomalous diffusion resulting from strongly asymmetric random walks. *Phys. Rev. E*, **57**:4915, (1998).
- [16] R. Nossal. Stochastic aspects of biological locomotion. *J. Stat. Phys.*, **30**:391, (1983).
- [17] R. Balescu. Anomalous transport in turbulent plasmas and continuous time random walks. *Phys. Rev. E*, **51**:4807, (1995).
- [18] G. M. Viswanathan, V. Afanasyev, S. V. Buldyrev, E. J. Murphy, P. A. Prince, and H. E. Stanley. Lévy flight search patterns of wandering albatrosses. *Nature*, **381**:413, (1996).
- [19] G. Zumofen, A. Blumen, and J. Klafter. Current flow under anomalous-diffusion conditions: Lévy walks. *Phys. Rev. A*, **41**:4558, (1990).
- [20] H. Scher and E. Montroll. Anomalous transit-time dispersion in amorphous solids. *Phys. Rev. B*, **12**:2455, (1975).

- [21] A. Klemm, H. P. Müller, and R. Kimmich. Evaluation of fractal parameters of percolation model objects and natural porous media by means of NMR microscopy. *Physica A*, **266**:242, (1999).
- [22] S. Havlin, D. Movshovitz, B. Trus, and G. H. Weiss. Probability densities for the displacement of random walks on percolation clusters. *J. Phys. A*, **18**:L719, (1985).
- [23] M. Porto, A. Bunde, S. Havlin, and H. E. Roman. Structural and dynamics properties of the percolation backbone in two and three dimensions. *Phys. Rev. E*, **56**:1667, (1997).
- [24] F. Amblard, A. C. Maggs, B. Yurke, A. N Pargellis, and S. Leibler. Subdiffusion and anomalous local viscoelasticity in action networks. *Phys. Rev. Lett.*, **77**:4470, (1996).
- [25] E. Barkai and J. Klafter. Comment on "subdiffusion and anomalous local viscoelasticity in actin networks". *Phys. Rev. Lett.*, **81**:1134, (1998).
- [26] J. P. Bouchad and A. Georges. Anomalous diffusion in disordered media: statistical mechanisms, models and physical applications. *Phys. Rep.*, **195**:127, (1990).
- [27] A. Compte. Stochastic foundations of fractional dynamics. *Phys. Rev. E*, **53**:4191, (1996).
- [28] A. R. Plastino and A. Plastino. Non-extensive statistical mechanics and generalized Fokker-Planck equation. *Physica A*, **222**:347, (1995).
- [29] A. Compte and D. Jou. Non-equilibrium thermodynamics and anomalous diffusion. *J. Phys. A*, **29**:4321, (1996).
- [30] A. Compte, D. Jou, and Y. Katayama. Anomalous diffusion in linear shear flows. *J. Phys. A*, **30**:1023, (1997).

- [31] C. Tsallis and D. J. Bukman. Anomalous diffusion in the presence of external forces: Exact time-dependent solutions and their thermostistical basis. *Phys. Rev. E*, **54**:R2197, (1996).
- [32] C. Tsallis. Possible generalization of Boltzmann-Gibbs statistics. *J. Stat. Phys.*, **52**:479, (1988).
- [33] E. M. F. Curado and C. Tsallis. Generalized statistical-mechanics - connection with thermodynamics. *J. Phys. A*, **24**:L69, (1991). Corrigenda: **24**, 3187 (1991) and **25**, 1019 (1992).
- [34] L. Borland. Microscopic dynamics of the nonlinear Fokker-Planck equation: A phenomenological model. *Phys. Rev. E*, **57**:6634, (1998).
- [35] L. Borland, F. Pennini, A. R. Plastino, and A. Plastino. The nonlinear Fokker-Planck equation with state-dependent diffusion - a nonextensive maximum entropy approach. *Eur. Phys. J. B*, **12**:285, (1999).
- [36] P. A. Alemany and D. H. Zanette. Fractal random walks from a variational formalism for Tsallis entropies. *Phys. Rev. E*, **49**:R956, (1994).
- [37] D. H. Zanette and P. A. Alemany. Thermodynamics of anomalous diffusion. *Phys. Rev. Lett.*, **75**:366, (1995).
- [38] C. Tsallis, S. V. F. Levy, A. M. C. Souza, and R. Maynard. Statistical-mechanical foundation of the ubiquity of Lévy distributions in nature. *Phys. Rev. Lett.*, **75**:3589, (1995);. **25**, 1019 (1996).
- [39] D. Prato and C. Tsallis. Nonextensive foundation of Lévy distributions. *Phys. Rev. E*, **60**:2398, (1999).
- [40] L. C. Malacarne, R. S. Mendes, I. T. Pedron, and E. K. Lenzi. Nonlinear equation for anomalous diffusion: Unified power-low and stretched exponential exact solution. *Phys. Rev. E*, **63**:030101(R), (2001).

- [41] I. T. Pedron, R. S. Mendes, L. C. Malacarne, and E. K. Lenzi. Nonlinear anomalous diffusion equation and fractal dimension: Exact generalized gaussian solution. *Phys. Rev. E*, **65**:41108, (2002).
- [42] L. C. Malacarne, R. S. Mendes, I. T. Pedron, and E. K. Lenzi. N-dimensional nonlinear Fokker-Planck equation with time-dependent coefficients. *Phys. Rev. E*, **65**:52101, (2002).
- [43] E. K. Lenzi, R. S. Mendes, L. C. Malacarne, and I. T. Pedron. Anomalous diffusion, nonlinear fractional Fokker-Planck equation and solutions. *Physica A*. (Aceito para publicação).
- [44] E. L. Cussler. *Diffusion - Mass Transfer in Fluid Systems*. Cambridge University Press, New York, 1984.
- [45] H. Risken. *The Fokker-Planck Equation*. Springer, New York, 1984.
- [46] T. Tomé and M. J. Oliveira. *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade*. Edusp, São Paulo, 2001.
- [47] G. E. Uhlenbeck and L. S. Ornstein. *Phys. Rev.*, **36**:823, (1930).
- [48] D. G. Aronson. The porous medium equation. *In: Nonlinear diffusion problems, Lecture Notes in Mathematics*, **1224**:1, (1986).
- [49] M. E. Gurtin and R. C. Mac Camy. On the diffusion of biological populations. *Math. Biosciences*, **33**:35, (1977).
- [50] M. Muskat. *The Flow of Homogeneous Fluids Through Porous Media*. McGraw-Hill, New York, 1937.
- [51] J. Buckmaster. Viscous sheets advancing over dry beds. *J. Fluid Mech.*, **81**:735, (1977).
- [52] J. M. Carlson, E. R. Grannan, C. Singh, and G. H. Swindle. Fluctuations in self-organizing systems. *Phys. Rev. E*, **48**:688, (1993).

- [53] H. G. E. Hentschel and I. Procaccia. Relative diffusion in turbulent media - the fractal dimension of clouds. *Phys. Rev A*, **27**:1266, (1983).
- [54] H. G. E. Hentschel and I. Procaccia. Relative diffusion in turbulent media: The fractal dimension of clouds. *Phys. Rev. A*, **29**:1461, (1984).
- [55] B. O'Shaughnessy and I. Procaccia. Analytical solutions for diffusion on fractal objects. *Phys. Rev. Lett.*, **54**:455, (1985).
- [56] B. O'Shaughnessy and I. Procaccia. Diffusion on fractals. *Phys. Rev. A*, **32**:3073, (1985).
- [57] G. Drazer, H. S. Wio, and C. Tsallis. Anomalous diffusion with absorption: Exact time-dependent solutions. *Phys. Rev. E*, **61**:1417, (2000).
- [58] A. C. Scott. The electrophysics of a nerve fiber. *Rev. Mod. Phys.*, **47**:487, (1975).
- [59] J. D. Murray. *Mathematical Biology*. Springer-Verlag, Berlin, 1989.
- [60] R. Aris. *The Mathematical Theory of Diffusion and Reaction in Permeable Catalysts*, volume I and II. Clarendon, Oxford, 1989.
- [61] A. K. Myers-Beaghton and D. D. Vvedensky. Nonlinear equation for diffusion and adatom interactions during epitaxial growth on vicinal surfaces. *Phys. Rev. B*, **42**:5544, (1990).
- [62] <http://tsallis.cat.cbpf.br/biblio.htm>
Para obter uma bibliografia atualizada sobre mecânica estatística generalizada.
- [63] C. Tsallis, R. S. Mendes, and A. R. Plastino. The role of constraints within generalized nonextensive statistics. *Physica A*, **261**:534, (1998).
- [64] C. Giordano, A. R. Plastino, M. Casas, and A. Plastino. Nonlinear diffusion under a time dependent external force: q -maximum entropy solutions. *Eur. Phys. J. B.*, **22**:361, (2001).

- [65] F. Lillo and R. N. Mantegna. Drift-controlled anomalous diffusion: A solvable gaussian model. *Phys. Rev. E*, **61**:R4675, (2000).
- [66] P. Paradisi, R. Cesari, F. Mainardi, and F. Tampieri. The fractional Fick's law for non-local transport processes. *Physica A*, **293**:130, (2001).
- [67] B. L. Sawford and F. M. Guest. Lagrangian stochastic analysis of flux-gradient relationships in the convective boundary layer. *J. Atmos. Sci.*, **44**:1152, (1987).
- [68] R. Metzler and J. Klafter. The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach. *Physics Reports*, **339**:1, (2000).
- [69] F. Mainardi. Fractional relaxation-oscillation and fractional diffusion-wave phenomena. *Chaos Solitons Fractals*, **7**:1461, (1996).
- [70] R. Metzler, W. G. Glöckle, and T. F. Nonnenmacher. Fractional model equation for anomalous diffusion. *Physica A*, **211**:13, (1994).
- [71] B. J. West and V. Seshadri. Linear systems with Lévy fluctuations. *Physica A*, **113**:203, (1982).
- [72] R. Gorenflo, G. Fabritiis, and F. Mainardi. Discrete random walk models for symmetric Lévy-Feller diffusion processes. *Physica A*, **269**:79, (1999).
- [73] M. Bologna, C. Tsallis, and P. Grigolini. Anomalous diffusion associated with nonlinear fractional derivative Fokker-Planck-like equation: Exact time-dependent solutions. *Phys. Rev. E*, **62**:2213, (2000).
- [74] B. J. West, P. Grigolini, R. Metzler, and T. F. Nonnenmacher. Fractional diffusion and Lévy stable processes. *Phys. Rev. E*, **55**:99, (1997).
- [75] A. J. Saichev and G. M. Zaslavsky. Fractional kinetic equations: solutions and applications. *Chaos*, **7**:753, (1997).
- [76] R. Metzler and T. F. Nonnenmacher. Space- and time-fractional diffusion and wave equations, fractional Fokker-Planck equations, and physical motivation. *Chemical Physics*, **284**:67, (2002).

- [77] K. B. Oldham and J. Spanier. *The Fractional Calculus*. Academic Press, New York, 1974.
- [78] N. Goldenfeld. *Lectures On Phase Transitions and The Renormalization Group*. Addison-Wesley Publishing Company, Inc., Reading, 1992.
- [79] C. Tsallis. Non-extensive thermostatistics: brief review and comments. *Physica A*, **221**:227, (1995).
- [80] C. Tsallis and E. K. Lenzi. Anomalous diffusion: nonlinear fractional Fokker-Planck equation. *Chem. Phys.*, **284**:341, (2002).
- [81] C. W. Gardiner. *Handbook of Stochastic Methods: For Physics, Chemistry and the Natural Sciences*. Springer Series in Synergetics, New York, 1996.