Universidade Estadual de Maringá Centro de Ciências Exatas - CCE Departamento de Física - DFI Programa de Pós-Graduação em Física - PFI

Soluções e teorema H para uma família de equações de Fokker-Planck generalizadas

Anna Laura Ferreira Lucchi

Orientador: Prof. Dr. Renio dos Santos Mendes Co-orientador: Prof. Dr. Max Javier Jáuregui Rodríguez

Maringá, 2021

Universidade Estadual de Maringá Centro de Ciências Exatas - CCE Departamento de Física - DFI Programa de Pós-Graduação em Física - PFI

Soluções e teorema *H* para uma família de equações de Fokker-Planck generalizadas

Anna Laura Ferreira Lucchi

Dissertação de mestrado apresentada como parte dos requisitos para obtenção do título de mestre em Física do Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Estadual de Maringá.

Orientador: Prof. Dr. Renio Santos Mendes Co-orientador: Prof. Dr. Max Javier Jáuregui Rodríguez

Maringá, 2021

Dados Internacionais de Catalogação-na-Publicação (CIP) (Biblioteca Central - UEM, Maringá - PR, Brasil)

L934s	Lucchi, Anna Laura Ferreira Soluções e teorema <i>H</i> para uma família de equações de Fokker-Planck generalizadas / Anna Laura Ferreira Lucchi Maringá, PR, 2021. 66 f.: il. color., figs.
	Orientador: Prof. Dr. Renio dos Santos Mendes. Coorientador: Prof. Dr. Max Javier Jáuregui Rodríguez. Dissertação (Mestrado) - Universidade Estadual de Maringá, Centro de Ciências Exatas, Departamento de Física, Programa de Pós-Graduação em Física, 2021.
	 Equação de Fokker-Planck não linear. 2. Estatistica Tsallis. 3. Teorema H. 4. Difusão anômala. I. Mendes, Renio dos Santos, orient. II. Jáuregui Rodríguez, Max Javier, coorient. III. Universidade Estadual de Maringá. Centro de Ciências Exatas. Departamento de Física. Programa de Pós-Graduação em Física. IV. Título.
	CDD 23.ed. 530.132

Márcia Regina Paiva de Brito - CRB-9/1267

ANNA LAURA FERREIRA LUCCHI

SOLUÇÕES E TEOREMA *H* PARA UMA FAMÍLIA DE EQUAÇÕES DE FOKKER-PLANCK GENERALIZADAS

Dissertação apresentada à Universidade Estadual de Maringá, como requisito parcial para a obtenção do título de mestre.

Aprovado em: Maringá, 31 de agosto de 2021.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Renio dos Santos Mendes Universidade Estadual de Maringá – UEM

Prof. Dr. Max Javier Jáuregui Rodríguez Universidade Estadual de Maringá – UEM

Prof. Dr. Ervin Kaminski Lenzi Universidade Estadual de Ponta de Grossa – UEPG

Há um ditado chinês que diz que, se dois homens vêm andando por uma estrada, cada um com um pão, ao se encontrarem, eles trocam os pães; cada um vai embora com um. Porém, se dois homens vêm andando por uma estrada, cada um carregando uma ideia, ao se encontrarem, trocam as ideias; cada um vai embora com duas. Quem sabe, é esse mesmo o sentido do nosso fazer: repartir ideias, para todos terem pão.

Mário Sergio Cortella

Agradecimentos

A Deus, pelo suporte e por me presentear com as alegrias da minha vida, Lola e Mel;

A minha mãe, Lúcia, pelo amor, incentivo e pela oportunidade de me dedicar aos meus objetivos. Ao meu pai, Jorge (em memória), que certamente adoraria acompanhar a minha jornada;

Ao meu orientador, professor Renio, que não mediu esforços para que este trabalho fosse realizado, sem perder a paciência e, principalmente, o bom humor;

Ao meu coorientador, professor Max, sempre muito atencioso e disposto a ajudar o mais prontamente possível;

Ao professor Breno, pela confiança e incentivo desde, literalmente, meu primeiro dia na graduação;

A contribuição que todos os professores tiveram na minha vida acadêmica;

Aos meus amigos, em especial, Thayná, Ana, Bruno e Henrique, pelo apoio e companheirismo;

A todos os membros do *Complex*Lab, por tornarem o ambiente leve e acolhedor;

À agência CAPES, pelo apoio financeiro;

E a todos que contribuíram direta ou indiretamente para a realização deste trabalho.

Resumo

Este trabalho é direcionado ao estudo de uma equação de Fokker-Planck não linear. Nessa direção, começamos fazendo uma breve revisão de alguns processos difusivos: o usual, o de Richardson, o de meios porosos e um que interpola os dois últimos. Nesse estudo, o foco é dado em soluções temporais concentradas na origem do sistema de coordenadas no instante inicial e em soluções estacionárias. Investigamos também uma situação inversa, isto é, partimos de uma distribuição dependente do tempo e chegamos a uma equação de Fokker-Planck que tem esta função como solução. Essa distribuição possui um comportamento de lei de potência próximo à origem das coordenadas e contém várias distribuições conhecidas como casos especiais. Após o cálculo de norma e de momentos dessa distribuição generalizada, identificamos um rico cenário difusivo. Além disso, exibimos uma equação de Fokker-Planck não linear mais geral que inclui as até então consideradas por nós como casos particulares. Supondo uma força externa confinante, obtemos a solução estacionária dessa equação em termos de um potencial efetivo. Para essa equação geral, estudamos ainda uma evolução das soluções temporais com o auxílio de um teorema H e verificamos que ele é consistente com mais de uma possibilidade para forma entrópica e energia interna. Em particular, as formas entrópicas estão relacionadas com a de Tsallis. Uma delas, cuja otimização é consistente com a solução estacionária, pode ser associada com uma generalização da divergência de Kullback-Leibler.

Palavras-chave: equação de Fokker-Planck não linear, teorema H, difusão anômala, forma entrópica de Tsallis.

Abstract

This work is directed to a study of a nonlinear Fokker-Planck equation. In this direction, we begin with a brief review of the usual diffusive process, Richardson one, porous media one and an additional one that interpolates the last two. In this study, the focus is given on temporal solutions concentrated in the origin of the coordinate system at the initial instant and on stationary solutions. We also investigate an inverse situation, that is, we start from a time-dependent distribution and arrive at a Fokker-Planck equation that has this function as a solution. This distribution has a power law behavior close to the origin of the coordinates and contains several well-known distributions as special cases. After calculating the norm and moments of this generalized distribution, we identify a rich diffusive scenario. Moreover, we exhibit a more general nonlinear Fokker-Planck equation that contains those considered by us as particular cases. Assuming a confining external force, we obtain the stationary solution of this equation in terms of an effective potential. For this general equation, we also study an evolution of temporal solutions with the help of an H theorem and verify that it is consistent with more than one possibility for entropic form and internal energy. In particular, the entropic forms are related to the Tsallis one. One of them, whose optimization is consistent with the stationary solution, can be associated with a generalization of the Kullback-Leibler divergence.

Keywords: nonlinear Fokker-Planck equation, H theorem, anomalous diffusion, Tsallis entropic form.

Sumário

Sumário

1	Um	a introdução a processos difusivos	12
	1.1	Difusão usual	12
	1.2	Equação de Fokker-Planck	16
	1.3	Equação de Richardson	17
	1.4	Equação de meios porosos	20
	1.5	Outras equações de difusão anômala	24
2	Um	a distribuição generalizada	27
	2.1	Obtenção de uma equação de difusão anômala	27
	2.2	Cálculo de momentos	30
		2.2.1 Caso $A > 0$	31
		2.2.2 Caso $A < 0$	31
		2.2.3 Caso exponencial	32
	2.3	Representação gráfica da solução	33
	2.4	Condições para existência de momentos	34
	2.5	Casos particulares	36
		2.5.1 Casos do Capítulo 1	36
		2.5.2 Caso particular com $a \neq 0$	37
3	Um	a família de equações de Fokker-Planck generalizadas	41
	3.1	Equação de Fokker-Planck generalizada	41
	3.2	Solução estacionária	42
	3.3	Teorema H	44
	3.4	Casos particulares do teorema H	46
		3.4.1 Equação de difusão usual	46
		3.4.2 Equação de Richardson	47
		3.4.3 Equação de meios porosos	47
		3.4.4 Equação de difusão interpolante	48
	3.5	Forma entrópica generalizada	48

 $\mathbf{7}$

Α	Algumas distribuições de probabilidade	55	
	A.1 Distribuição gaussiana	55	
	A.2 Distribuição gama	55	
	A.3 Distribuição beta	56	
	A.4 Distribuição de Weibull	57	
	A.5 q -distribuições	57	
В	Condições de existência de norma e momentos	59	
	B.1 $A > 0 \in r > 0$	59	
	B.2 $A > 0 e r < 0$	59	
	B.3 $A < 0 e r > 0$	60	
	B.4 $A < 0 e r < 0$	60	
С	Relação entre os parâmetros da equação de difusão e da sua solução	61	
	C.1 Caso geral	61	
	C.2 Caso exponencial	62	
Re	Referências Bibliográficas		

Introdução

As distribuições gaussiana e exponencial aparecem frequentemente no estudo de muitos sistemas físicos. De fato, a distribuição exponencial possui importância central na mecânica estatística, pois está no peso de Boltzmann-Gibbs [1]. Por outro lado, a distribuição gaussiana também está em posição privilegiada, pois é a distribuição limite para a soma de variáveis aleatórias independentes com variância finita, de acordo com o teorema do limite central [2]. Além das distribuições gaussiana e exponencial, outras podem ser empregadas com sucesso na análise de uma grande quantidade de sistemas naturais, sociais e artificiais. A seguir, apresentamos uma pequena lista, porém representativa e variada, de exemplos do uso de distribuições dentre os muitos possíveis.

Um primeiro exemplo refere-se à distribuição de Laplace na análise das taxas de câmbio de moedas virtuais e tradicionais [3]. Uma generalização dessa distribuição, às vezes chamada de gaussiana alongada ou distribuição de Subbotin (densidade proporcional a $\exp(-\beta |x|^r)$), ocorre, em particular, como uma lei de erros generalizada [4].

Na medicina, um estudo sobre a incidência de tipos de câncer mais prevalentes em relação à idade dos pacientes emprega a distribuição gama [5], que contém a exponencial como um caso especial. Outra generalização da distribuição exponencial, chamada distribuição de Weibull, tem várias aplicações em física e economia [6].

Todas as distribuições mencionadas nos últimos parágrafos envolvem a função exponencial em suas definições. Além delas, as distribuições de leis de potência comumente aparecem no estudo de sistemas complexos. Nesse sentido, alguns exemplos significativos são listados a seguir.

A distribuição q-exponencial (densidade proporcional a $[1 - (1 - q)\beta x]^{1/(1-q)}$) é uma generalização da distribuição exponencial. Relacionada com a mecânica estatística não extensiva de Tsallis [7], tem sido utilizada, por exemplo, na investigação de citações científicas [8].

Um outro tipo de distribuição é a q-gaussiana; ela está para a q-exponencial assim como a gaussiana está para a exponencial. Os retornos de preços do mercado de ações Standard & Poor's 500 [9], em especial, vêm sendo ajustados por uma distribuição qgaussiana (densidade proporcional a $[1 - (1 - q)\beta x^2]^{1/(1-q)}$).

A distribuição q-gama (densidade proporcional a $x^{\alpha-1}[1 - (1 - q)\beta x]^{1/(1-q)})$ é uma generalização da distribuição gama. Particularmente, a q-gama vem sendo destinada para caracterizar a distribuição do volume em diversos mercados de ações na escala de alta frequência [10–13]. Uma generalização da distribuição q-gama (densidade proporcional a $x^{a}[1-(1-q)\beta x^{r}]^{1/(1-q)})$ [14] foi usada em um estudo de casos ativos nos primeiros meses da pandemia COVID-19 de vários países.

Em cada distribuição de probabilidade mencionada, uma variável de tempo pode ser introduzida visando descrever situações que evoluem no tempo. Nessa direção, uma distribuição gaussiana dependente do tempo está relacionada à solução fundamental da equação de difusão linear. De forma análoga, outros tipos de equações de difusão podem ter soluções temporais relacionadas a distribuições não gaussianas. Nesse sentido, equações de difusão generalizadas, que envolvem um coeficiente de difusão variável [15, 16] e outras baseadas na adição de termos não lineares [16–19] ou derivadas fracionárias [20–22], podem ser encontradas na literatura. Muitas dessas equações generalizadas têm soluções relacionadas à distribuição de Subbotin ou a uma lei de potência.

Equações generalizadas de difusão, por sua vez, são empregadas na descrição de processos difusivos anômalos. A difusão anômala aparece em muitos sistemas; por exemplo, no estudo do crescimento superficial e transporte de fluido em meios porosos [23], difusão em plasmas [24], difusão em fractais [25] e relaxamento de carga em grafeno monocamada [26]. Usualmente, esses processos são caracterizados por um deslocamento médio quadrático que cresce como uma potência do tempo, $t^{\alpha} \operatorname{com} \alpha \neq 1$.

No contexto de distribuições de probabilidade, a equação de difusão linear usual, em muitos casos pode ser interpretada como uma equação de Fokker-Planck com um termo de força externa nulo [17, 27]. Além disso, se o termo de força externa é confinante e proporcional a x, a equação de Fokker-Planck tem uma solução estacionária que é uma distribuição gaussiana [27]. Por outro lado, se considerarmos equações de difusão mais gerais e, consequentemente, equações de Fokker-Planck generalizadas, poderíamos esperar obter muitas das distribuições de probabilidade bem conhecidas (ver, por exemplo, [16, 17]).

A relaxação para soluções estacionárias para equações de Fokker-Planck generalizadas, por sua vez, tem sido investigada em conexão com teoremas H. Nesses estudos envolvendo teoremas H, funcionais semelhantes à energia livre de Helmholtz usualmente estão presentes [16, 28–33]. Esses funcionais são constituídos por uma parte semelhante à energia interna e outra similar à entropia. Um resultado importante desse tipo de estudo é a possível identificação de novos tipos de energias internas e de formas entrópicas. Visto que essas equações de Fokker-Planck generalizadas podem potencialmente descrever algum tipo de sistema, é de se esperar que essas novas formas entrópicas, e distribuições relacionadas, sejam candidatas a possíveis aplicações. Essa perspectiva indica que essas novas formas entrópicas deveriam ser objeto de estudo.

Nesta dissertação, começaremos considerando a equação de difusão usual. A seguir, passaremos a uma discussão de processos difusivos anômalos via as equações de Richardson, de meios porosos e uma outra que interpola essas duas. Essa exposição sobre difusão, usual e anômala, está basicamente calcada na investigação de dois tipos de soluções. A primeira delas é dependente do tempo para o caso de força externa nula e corresponde a uma alta concentração inicial. A segunda solução é estacionária, supondo que há uma força externa confinante. Como nas equações de difusão analisadas supomos soluções normalizadas à unidade, elas são formalmente consideradas como equações generalizadas de Fokker-Planck. Além disso, mostramos que suas soluções conduzem à grande maioria das distribuições de probabilidades previamente mencionadas. Nesse estudo introdutório,

que está apresentado no Capítulo 1 e contém uma breve revisão sobre difusão anômala, fazemos uma preparação direcionada aos desenvolvimentos a serem considerados posteriormente.

Partindo de uma solução temporal que incorpora as anteriores como casos particulares, obtemos uma equação de Fokker-Planck generalizada que consistentemente recai nas precedentes. Em adição às prévias, essa solução geral tem a possibilidade de se comportar como uma lei de potência perto da origem. Para essa solução temporal geral, norma e momentos são calculados, assim como suas condições de existência. Além disso, vários casos particulares são explicitamente verificados. Esse estudo não comumente tratado na literatura está explicitado no Capítulo 2.

Uma equação de Fokker-Planck generalizada, que incorpora todas as anteriores com solução estacionária, é proposta e examinada. Inicialmente, resolvemos essa equação para soluções estacionárias em termos de um potencial efetivo. Uma análise de como as soluções temporais dessa equação de Fokker-Planck evoluem é feita via um teorema *H*. Nesse estudo, identificamos duas possibilidades de formas entrópicas e duas de funcional de energia interna. Uma forma entrópica é não-usual, devido a uma dependência na posição. Ela generaliza a de Tsallis e, como verificaremos, pode ser discutida em conexão com uma entropia relativa de Kullback-Leibler. O correspondente funcional de energia interna é uma média do potencial efetivo já citado. Na outra possibilidade, a forma entrópica é a de Tsallis, porém o funcional de energia interna é não linear na solução. Veremos que somente a otimização da primeira forma entrópica é consistente com a solução estacionária. Essa pesquisa está desenvolvida no Capítulo 3.

Após o Capítulo 3, exibimos as nossas considerações finais. Há também três apêndices com informações complementares àquelas desenvolvidas nos capítulos.

Capítulo 1 Uma introdução a processos difusivos

Originado do latim, difusão tem como significado espalhar, derramar. Na física, é comum o termo difusão referir-se ao processo em que, através de movimentos moleculares aleatórios, a matéria é transportada de locais em que sua concentração é maior para locais de menor concentração [34]. Neste capítulo, apresentamos uma breve introdução a processos difusivos, indo de difusão usual até difusão anômala. Nesse estudo, abordamos soluções temporais correspondentes a uma condição inicial concentrada na origem do sistema de coordenadas e soluções estacionárias devido a forças confinantes. As equações de difusão consideradas são a usual, a de Richardson, a de meios porosos e uma que interpola as duas anteriores.

1.1 Difusão usual

O primeiro a estudar a difusão quantitativamente foi Adolf Eugen Fick (1855), considerando a equação de condução de calor obtida por Fourier (1822). Fick baseou a forma matemática da difusão na hipótese de que em meios isotrópicos¹ a taxa de transferência de matéria via difusão através de uma área unitária é proporcional ao gradiente da concentração [35], isto é,

$$\vec{J} = -D\vec{\nabla}\rho\,,\tag{1.1}$$

em que \vec{J} é a densidade de corrente do material difundindo, D é uma constante positiva que depende das propriedades do meio e ρ é a concentração da substância. Basicamente, a matéria tende a se distribuir homogeneamente, havendo fluxo de matéria para compensar a inomogeneidade. A grandeza matemática mais simples que indica que algo não é constante é a derivada. Sendo assim, a equação (1.1) incorpora essa operação matemática na direção de fornecer uma expressão para o fluxo de matéria. O sinal negativo se deve ao fato de que a difusão e o aumento da concentração possuem sentidos contrários. A generalização de (1.1) para o caso de meios anisotrópicos consiste em empregar $J_i = -\sum_{j=1}^3 D_{ij} \partial \rho / \partial x_i$.

Se o sistema é conservativo, ou seja, a substância não é criada e nem exterminada durante a difusão, a equação de continuidade é satisfeita,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla}.\vec{J} = 0.$$
(1.2)

¹Meios isotrópicos são aqueles cuja estrutura e propriedades de difusão ao redor de qualquer ponto são iguais em todas as direções.

Combinar as duas equações anteriores resulta na equação de difusão usual

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D\nabla^2 \rho \,, \tag{1.3}$$

cuja vertente unidimensional é dada por

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} \,. \tag{1.4}$$

No desenvolvimento desse trabalho, nosso foco está em equações unidimensionais.

Como é bem conhecido, o uso de análise dimensional pode simplificar bastante a obtenção de determinados resultados. Esse tipo de análise aplica-se também no estudo de difusão. Por exemplo, em uma análise dimensional da equação (1.4), é conveniente incorporar D a t, conduzindo a

$$\frac{\partial \rho}{\partial t'} = \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}, \qquad (1.5)$$

em que t' = Dt. Assim, uma análise dimensional indica que $x^2 \sim t'$ e, portanto, $x^2 \sim t$. Além disso, essa análise permite estimar a dependência temporal do valor médio de $|x|^n$,

$$\langle |x|^n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |x|^n \rho(x, t) dx \,, \tag{1.6}$$

em que, por simplicidade, está sendo suposto que a quantidade total de matéria é unitária, isto é,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x,t) dx = 1.$$
(1.7)

Visto que $x^2 \sim t$, para a variância de x, $\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$, quando $\langle x \rangle = 0$, é esperado obter

$$\langle x^2 \rangle \propto t^{\alpha},$$
 (1.8)

com $\alpha = 1$. Antes de concluir esse parágrafo, deve ser notado que o fato da equação (1.7) valer para qualquer t é consequência direta de partir-se da equação de continuidade (1.2) que, por construção, garante a conservação da matéria. De fato, essa conclusão segue diretamente de

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x,t) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} dx$$

$$= -\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial J(x,t)}{\partial x} dx$$

$$= J(x,t)|_{-\infty}^{\infty}$$

$$= 0, \qquad (1.9)$$

em que foi empregado $\partial \rho / \partial t = -\partial J / \partial x$ e que J está localizado numa região finita do espaço, isto é, $J(x,t) \to 0$ quando $x \to \pm \infty$.

A solução de uma equação de difusão deve indicar que algo inicialmente concentrado se espalha com o passar do tempo. Para o caso particular de uma concentração inicial localizada na posição x = 0 e no tempo t = 0, tem-se

$$\rho(x,0) = \delta(x). \tag{1.10}$$

A solução correspondente a essa condição inicial altamente concentrada é usualmente chamada de solução fundamental da equação de difusão. Motivado pela relação de escala $x^2 \sim t$, espera-se que a dependência em x apareça em uma combinação com t da forma $x/t^{1/2}$. Assim, podemos empregar o ansatz

$$\rho(x,t) = \frac{1}{t^{1/2}} f\left(\frac{x}{t^{1/2}}\right),\tag{1.11}$$

em que f é uma função a ser determinada². O pré-fator $t^{1/2}$ é necessário para contrabalancear dimensionalmente o elemento de integração dx na equação (1.7). Para esse ansatz e usando a variável $z = x/t^{1/2}$, tem-se

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{1}{2t^{3/2}} f(z) - \frac{x}{2t^2} f'(z)
= -\frac{1}{2t^{3/2}} f(z) - \frac{z}{2t^{3/2}} f'(z)
= -\frac{1}{t^{3/2}} \frac{d}{dz} \left(\frac{z}{2} f(z)\right)$$
(1.12)

е

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} = \frac{1}{t^{3/2}} f''(z) \tag{1.13}$$

em que f' = df/dz e $f'' = d^2f/dz^2$. A substituição dessas derivadas na equação de difusão (1.4) conduz à equação diferencial ordinária

$$\frac{d}{dz}\left(Df' + \frac{zf}{2}\right) = 0\tag{1.14}$$

e, portanto, Df' + zf/2 = const. Como ρ deve representar uma matéria localizada, usa-se f' = 0 e f = 0 quando $z \to \pm \infty$. Consequentemente, a equação para f(z) é reduzida a

$$Df' + \frac{zf}{2} = 0, \qquad (1.15)$$

cuja solução é

$$f(z) = N \exp\left(-\frac{z^2}{4D}\right),\tag{1.16}$$

em que N deve ser fixado pela condição inicial $\rho(x, 0) = \delta(x)$ ou, alternativamente, pela equação (1.7). Por exemplo, usando as equações (1.7) e (1.16) com a integral gaussiana,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ax^2) dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \qquad (\operatorname{Re}(a) > 0), \qquad (1.17)$$

verifica-se que $N = 1/\sqrt{4\pi D}$. Logo, o ansatz (1.11) leva a uma solução gaussiana da equação de difusão (1.4) dada por

$$\rho(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right).$$
(1.18)

²Soluções que empregam variáveis como $x/t^{1/2}$ são largamente usadas na obtenção de soluções de equações de difusão [36,37]. Essas soluções são frequentemente chamadas de soluções de similaridade.

Alternativamente, relembrando da representação da função delta em termos da gaussiana [38],

$$\delta(x) = \lim_{a \to \infty} \sqrt{\frac{a}{\pi}} \exp(-ax^2), \qquad (1.19)$$

vemos que a solução (1.18) tem como caso limite $\rho(x, 0) = \delta(x)$ ao empregar a = 1/(4Dt)e $t \to 0$. Qualitativamente, essa solução lembra a forma de um sino. Ao longo desse trabalho, os tipos de soluções com dependência temporal de interesse serão aquelas que lembram (1.18). Além disso, a solução gaussiana recém obtida pode ser empregada para calcular diretamente o valor médio (1.6) e, em particular, a variância (1.8), incluindo o fator de proporcionalidade.

Diferentemente do apresentado na equação (1.4), em um processo difusivo é possível haver a presença de uma força externa. Conhecidamente, quando uma partícula move-se em um meio, é comum chegar-se a uma velocidade limite v como consequência desse meio e da força externa F aplicada, com $v \propto F$. Assim, o efeito da força externa manifestada na densidade de corrente $\vec{J} = \vec{v}\rho$ pode ser escrito como

$$\vec{J} = \mu \vec{F} \rho \,, \tag{1.20}$$

em que o fator de proporcionalidade μ é chamado de mobilidade. Desse modo, para a densidade de corrente que incorpora os termos difusivo (1.1) e de força externa (1.20), obtemos

$$\vec{J} = -D\vec{\nabla}\rho + \mu\vec{F}\rho. \qquad (1.21)$$

A substituição desse \vec{J} na equação de continuidade (1.2) proporciona a equação de difusão que incorpora a presença de uma força externa (de arraste):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D\nabla^2 \rho - \mu \vec{\nabla} \cdot (\vec{F}\rho) \,. \tag{1.22}$$

No caso unidimensional, que é o empregado nesse trabalho, a equação anterior, incorporando μ na definição de F (procedimento frequentemente empregado na literatura), assume a forma

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} - \frac{\partial}{\partial x} (F\rho) \,. \tag{1.23}$$

Além da solução dependente do tempo, como a dada na equação (1.18), outra de interesse nesse trabalho é a estacionária. No caso da equação (1.23), a equação para a solução estacionária é obtida supondo $\partial \rho / \partial t = 0$, que implica $\rho = \rho(x)$. Assim, a equação (1.23) é reduzida a

$$\frac{d}{dx}\left(D\frac{d\rho}{dx} - F\rho\right) = 0, \qquad (1.24)$$

ou seja,

$$D\frac{d\rho}{dx} - F\rho = const.$$
 (1.25)

Se F é confinante como a força harmônica F = -kx, a densidade ρ e sua primeira derivada devem ser nulas quando $x \to \pm \infty$. Nesse sentido, suporemos que a constante (const) na equação (1.25) é nula e, portanto, essa equação resume-se a

$$D\frac{d\rho}{dx} - F\rho = 0. \qquad (1.26)$$

Ao comparar essa equação com a equação (1.21), constatamos que o regime estacionário aqui investigado corresponde a supor uma densidade de corrente nula. Introduzindo a energia potencial

$$V(x) = -\int_0^x F(x') \, dx', \tag{1.27}$$

constatamos que a solução da equação (1.26), que é a solução estacionária almejada, pode ser apresentada como

$$\rho(x) = N \exp\left(-\frac{V(x)}{D}\right),\tag{1.28}$$

em que N é uma constante de normalização. Em particular, se F = -kx, essa solução estacionária é uma gaussiana,

$$\rho(x) = \sqrt{\frac{k}{2\pi D}} \exp\left(-\frac{k x^2}{2D}\right),\tag{1.29}$$

assim como é a solução dependente do tempo (1.18). Como se sabe, a distribuição de probabilidade de equilíbrio correspondente a uma energia potencial V(x) é proporcional ao peso estatístico de Boltzmann-Gibbs, $\exp[-V(x)/(k_BT)]$. A comparação desse peso com a solução estacionária (1.28) mostra que o coeficiente de difusão D é igual à constante de Boltzmann k_B vezes a temperatura T, $D = k_BT$, que é a relação de Einstein (com $\mu = 1$).

1.2 Equação de Fokker-Planck

Do ponto de vista microscópico, em processos como o descrito na seção anterior, podese pensar que as partículas da matéria que está sendo difundida estão bastante diluídas no meio. Assim, cada partícula em difusão está distante das demais e, portanto, interagindo somente com o meio. No caso unidimensional, a sua equação de movimento, conhecida como equação de Langevin, pode ser escrita como³

$$m\frac{d^{2}x}{dt^{2}} = -\kappa\frac{dx}{dt} + F + \eta(t), \qquad (1.30)$$

em que m é a massa da partícula, x sua coordenada, κ é o coeficiente de atrito com o meio, F uma força externa e η é a força aleatória devido as interações com as partículas do meio. A presença de uma variável aleatória dependente do tempo faz com que o processo descrito seja dito estocástico.

Se houvesse somente a força de atrito $-\kappa dx/dt$ e a força externa F, a trajetória da partícula seria determinística. Entretanto, a força aleatória $\eta(t)$ faz com que a trajetória da partícula tenha um componente errático. Por exemplo, se não houvesse força externa, a partícula seria tirada de sua posição inicial de modo aleatório devido à força $\eta(t)$. De uma maneira geral, mesmo partindo de iguais condições iniciais, a trajetória de uma partícula será diferente cada vez que considerarmos um novo experimento. Esse fato indica que a posição de uma partícula em um dado instante de tempo possa também ser pensada em termos probabilísticos, isto é, via uma densidade de probabilidade.

 $^{^{3}}$ Um detalhamento quantitativo da exposição desta seção pode ser encontrado na referência [27].

Em uma primeira aproximação, o termo de aceleração pode ser desconsiderado e, consequentemente, a equação de Langevin é reescrita como

$$\frac{dx}{dt} = f + \xi(t), \tag{1.31}$$

em que $f = F/\kappa$ e $\xi = \eta/\kappa$. Uma descrição equivalente do movimento da partícula seria dado em termos da densidade de probabilidade de encontrá-la na posição x e no tempo t. A equação para essa densidade de probabilidade, denotada por $\rho(x,t)$, é chamada de equação de Fokker-Planck e dada por

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \Gamma \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} - \frac{\partial}{\partial x} (f\rho) \,. \tag{1.32}$$

O primeiro termo do lado direito da igualdade dessa equação advém da força aleatória $\xi(t)$ e o coeficiente Γ é característico da intensidade dessa força. Enquanto que o outro termo do lado direito da igualdade deve-se à força externa f. Deve estar claro, apesar da diferença de abordagens, que resolver a equação de Fokker-Planck é equivalente a resolver a equação de Langevin.

Ao compararmos a equação de Fokker-Planck (1.32) com a de difusão (1.23), vemos que elas têm a mesma forma e seriam idênticas se fizéssemos a identificação $\Gamma = D$ e f = F. Em particular, teríamos que κ e $1/\mu$ seriam iguais. Essas identificações podem ser qualitativamente entendidas via o raciocínio que segue. Em processos difusivos usuais, como o descrito previamente, a densidade ρ , quando integrada em todo espaço, fornece a quantidade total de matéria. Se esse ρ for dividido pela quantidade total de matéria, alcança-se uma outra densidade, que integrada em todo espaço, é igual a 1. Essa nova densidade pode ser interpretada como uma densidade de probabilidade de encontrar uma partícula na posição x no tempo t.

1.3 Equação de Richardson

Processos difusivos que não são convenientemente descritos por uma equação de difusão usual são genericamente referidos como anômalos. Uma classificação menos detalhada de difusão anômala, porém amplamente empregada, é dada em termos da equação (1.8), $\langle x^2 \rangle \propto t^{\alpha}$. Se $\alpha \neq 1$, a difusão é dita anômala e, se $\alpha = 1$ ocorre uma difusão usual. Ademais, temos uma difusão anômala superdifusiva (subdifusiva) quando $\alpha > 1$ ($\alpha < 1$).

A ocorrência de difusão em rios, tubulações, oceanos e ciclones são alguns exemplos de difusão anômala, que é caracterizada por variações instantâneas na velocidade, temperatura e outros aspectos [39]. Fenômenos turbulentos foram extensivamente estudados por Lewis Fry Richardson [15] que, após mostrar que a equação proposta por Fick (1.4) não descrevia corretamente tais fenômenos, propôs uma equação mais adequada

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial}{\partial x} \left(|x|^{2-r} \frac{\partial \rho}{\partial x} \right), \tag{1.33}$$

em que r = 2/3. Como percebemos, em sua equação de difusão anômala, Richardson modificou a equação de difusão usual introduzindo um coeficiente de difusão dependente

da posição, $D|x|^{2-r}$, entre as derivadas na variável x. O parâmetro r indica o grau de desvio da equação de difusão usual, que é recuperada quando r = 2.

Uma análise dimensional da equação (1.33), como feito para a equação (1.5), proporciona $x^r \sim t$. A solução correspondente à (1.18) para a equação de Richardson pode ser obtida empregando um *ansatz* similar ao (1.11), porém incorporando a relação de escala $x^r \sim t$ ao invés de $x^2 \sim t$, isto é,

$$\rho(x,t) = \frac{1}{t^{1/r}} f\left(\frac{x}{t^{1/r}}\right).$$
(1.34)

Utilizar esse ansatz e proceder de maneira similar ao que foi feito para obter a solução (1.18) resultam na obtenção da solução fundamental desejada. De fato, via o ansatz (1.34) e empregando a variável $z = x/t^{1/r}$, tem-se

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{1}{r t^{(r+1)/r}} f(z) - \frac{z}{r t^{(r+1)/r}} f'(z)
= -\frac{1}{t^{(r+1)/r}} \frac{d}{dz} \left(\frac{z}{r} f(z)\right).$$
(1.35)

Para uma função genérica g(z) com $z = x/t^{1/r}$, verifica-se que

$$\frac{\partial}{\partial x}g\left(\frac{x}{t^{1/r}}\right) = \frac{1}{t^{1/r}}\frac{d}{dz}g(z).$$
(1.36)

Assim, podemos empregar a identidade operacional

$$\frac{\partial}{\partial x} \longrightarrow \frac{1}{t^{1/r}} \frac{d}{dz},$$
 (1.37)

o ansatz (1.34) e $|x|^{2-r} = |z|^{2-r} t^{(2-r)/r}$ para escrever

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(|x|^{2-r} \frac{\partial \rho}{\partial x} \right) = \frac{1}{t^{1/r}} \frac{d}{dz} \left[|z|^{2-r} t^{(2-r)/r} \frac{1}{t^{1/r}} \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{t^{1/r}} f(z) \right) \right]$$

$$= \frac{1}{t^{(r+1)/r}} \frac{d}{dz} \left(|z|^{2-r} \frac{d}{dz} f(z) \right).$$
(1.38)

Portanto, empregando as equações (1.36) e (1.38), a equação de Richardson (1.33) pode ser reescrita como

$$\frac{d}{dz}\left(D|z|^{2-r}\frac{d}{dz}f(z) + \frac{z}{r}f(z)\right) = 0.$$
 (1.39)

Considerando f=0ef'=0para $|z|\to\infty,$ a equação (1.39) se reduz a

$$D|z|^{2-r}\frac{d}{dz}f(z) + \frac{z}{r}f(z) = 0, \qquad (1.40)$$

cuja solução é

$$f(z) = N \exp\left(-\frac{|z|^r}{r^2 D}\right),\tag{1.41}$$

em que N é uma constante de normalização. Valendo-se da condição de normalização (1.7), o fator N é alcançado e a solução fundamental correspondente à equação de Richardson (1.33) pode ser escrita como

$$\rho(x,t) = \frac{1}{2\Gamma(1/r)} \left(\frac{1}{r^{2-r}Dt}\right)^{1/r} \exp\left(-\frac{|x|^r}{r^2Dt}\right),$$
(1.42)

em que r > 0 para que $\rho(x,t) \to 0$ quando $x \to \pm \infty$ e $\Gamma(y)$ refere-se à função gama (Apêndice A). O fator de normalização N, ditado por (1.7), foi obtido com auxílio da equação (A.5) e $a = 1/(r^2 Dt)$.

A solução (1.42), como esperado, se reduz ao caso gaussiano quando r = 2. Assumindo r > 0, se r > 2 (r < 2), a solução (1.42) apresenta um decaimento de cauda mais (menos) acentuado que o caso gaussiano. Além disso, aplicando a relação de escala $x^r \sim t$, é de se esperar que

$$\langle x^2 \rangle \propto t^{2/r},\tag{1.43}$$

implicando em uma difusão anômala superdifusiva (subdifusiva) quando r < 2 (r > 2). Esse resultado, inclusive com o fator de proporcionalidade, pode ser obtido diretamente do cálculo de $\langle x^2 \rangle$ considerando o $\rho(x,t)$ exposto na equação (1.42).

Assim como no caso da difusão usual, podemos pensar em incorporar um termo de força externa na equação de Richardson (1.33). É comum supor que o efeito anômalo deve-se apenas ao termo difusivo e, portanto, o termo de força externa é mantido idêntico ao da equação de difusão usual (1.23). Sendo assim, a equação de Richardson com termo de força externa é

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial}{\partial x} \left(|x|^{2-r} \frac{\partial \rho}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} (F\rho) \,. \tag{1.44}$$

Comparando essa equação com $\partial \rho / \partial t = -\partial J / \partial x$, vemos que a densidade de corrente pode ser identificada como

$$J = -D|x|^{2-r}\frac{\partial\rho}{\partial x} + F\rho, \qquad (1.45)$$

em que $D|x|^{2-r}$ é um coeficiente de difusão dependente da posição, isto é, ele cresce (decresce) com |x| se r < 2 (r > 2). Esse fato é consistente com a solução (1.42), pois essa solução, quando comparada com uma gaussiana, apresenta cauda longa (curta) para r < 0 (r > 0).

Seguindo o procedimento e as hipóteses empregados da equação (1.24) até a equação (1.26), a solução estacionária de (1.44) é conseguida resolvendo-se a equação

$$D|x|^{2-r}\frac{d\rho}{dx} - F\rho = 0.$$
 (1.46)

Por sua vez, a solução dessa equação é

$$\rho(x) = N \exp\left(-\frac{\mathcal{V}(x)}{D}\right),\tag{1.47}$$

em que N é um fator de normalização e

$$\mathcal{V}(x) = -\int_0^x \frac{F(x')}{|x'|^{2-r}} \, dx' \tag{1.48}$$

é uma energia potencial efetiva que se diferencia da usual devido ao fator $|x|^{2-r}$ presente no coeficiente de difusão dependente da posição. Como esperado, a solução (1.47), assim como $\mathcal{V}(x)$, recai no caso usual quando r = 2. Um outro caso particular ocorre para a força harmônica F = -kx e, portanto, $\mathcal{V}(x) = k|x|^r/r$. Nesse exemplo, o uso das equações (1.47) e (1.48) proporciona

$$\rho(x) = \frac{1}{2\Gamma(1/r)} \left(\frac{k}{r^{1-r}D}\right)^{1/r} \exp\left(-\frac{k|x|^r}{rD}\right).$$
(1.49)

O fator de normalização para esse $\rho(x)$ foi alcançado por meio da equação (A.5) com a = k/(rD). Assim como correu no estudo da difusão usual, equações (1.18) e (1.29), a dependência referente à variável x é idêntica na solução fundamental (1.42) e na solução estacionária (1.49).

Uma possibilidade extra de generalizar a equação de Richardson (1.44) seria substituir o coeficiente de difusão $D|x|^{2-r}$ por uma expressão mais geral de $\mathcal{D}(x,t)$, levando a

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mathcal{D}(x,t) \frac{\partial \rho}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} (F\rho) \,. \tag{1.50}$$

Nesse caso, obter uma solução do tipo (1.42) pode ser uma tarefa muito difícil, talvez impraticável, a depender da forma de $\mathcal{D}(x,t)$. Entretanto, para a equação (1.50) propiciar uma solução estacionária, bastaria supor $\mathcal{D} = \mathcal{D}(x)$ e a força externa F suficientemente confinante tal que seja possível usar algo como $\rho(x) \in d\rho(x)/dx$ nulos quando $x \to \pm \infty$. Nesse contexto, a equação para a solução estacionária $\rho(x)$ é

$$\mathcal{D}(x)\frac{d\rho}{dx} - F\rho = 0, \qquad (1.51)$$

cuja solução é

$$\rho(x) = N \exp\left(-\tilde{\mathcal{V}}(x)\right), \qquad (1.52)$$

em que N é um fator de normalização e

$$\tilde{\mathcal{V}}(x) = -\int_0^x \frac{F(x')}{\mathcal{D}(x')} dx'$$
(1.53)

é uma energia potencial efetiva ponderada pelo coeficiente de difusão $\mathcal{D}(x)$.

Assim como discutido para o caso da difusão usual, a equação de difusão (1.44), ou a mais geral (1.50) podem pelo menos formalmente ser pensadas como equações de Fokker-Planck generalizadas.

1.4 Equação de meios porosos

Existem outros tipos de processos difusivos anômalos que não são bem descritos pela proposta de Richardson, um exemplo é o caso que envolve difusão em meios porosos. De uma maneira geral, meios porosos possuem muitos espaços vazios, provocando efetivamente processos difusivos anômalos. A equação de meios porosos [23, 40] aparece, por exemplo, na discussão da percolação de gases através de um meio poroso [41], regiões saturadas finas em um meio poroso [42] e filmes líquidos finos espalhados por gravidade [43]. Diferentemente das equações anteriores, essa é uma equação não linear que pode ser expressa por [17]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho^{2-q}}{\partial x^2} \tag{1.54}$$

ou, alternativamente,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = (2-q)D\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho^{1-q}\frac{\partial \rho}{\partial x}\right). \tag{1.55}$$

Em contraste com o caso da equação de Richardson, vemos que nessa última equação foi empregado um coeficiente de difusão dependente de ρ , $(2 - q)D\rho^{1-q}$, entre as derivadas em x.

Assim como nos casos difusivos anteriores, uma análise dimensional da equação (1.54) pode ser feita para se chegar a uma relação de escala entre x e t. Para esse caso, deve ser inicialmente notado que uma condição do tipo normalização, equação (1.7), fornece $\rho \sim x^{-1}$ via uma análise dimensional. Por sua vez, o uso de $\rho \sim x^{-1}$ na análise dimensional da equação de meios porosos (1.54) leva à $x^{3-q} \sim t$. Assim, vamos investigar a solução fundamental da equação de meios porosos (1.54) via o ansatz

$$\rho(x,t) = \frac{1}{t^{1/(3-q)}} f\left(\frac{x}{t^{1/(3-q)}}\right).$$
(1.56)

Consequentemente, ao empregar $z = x/t^{1/(3-q)}$, verifica-se que

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{-1}{(3-q)t^{1/(3-q)+1}} [f(z) + zf'(z)]
= \frac{-1}{(3-q)t^{1/(3-q)+1}} \frac{d}{dz} [zf(z)].$$
(1.57)

Supondo uma função genérica $g(z) \operatorname{com} z = x/t^{1/(3-q)}$, a seguinte igualdade é obtida

$$\frac{\partial}{\partial x}g\left(\frac{x}{t^{1/(3-q)}}\right) = \frac{1}{t^{1/(3-q)}}\frac{dg(z)}{dz}.$$
(1.58)

Logo, podemos escrever a identidade operacional

$$\frac{\partial}{\partial x} \to \frac{1}{t^{1/(3-q)}} \frac{d}{dz} \tag{1.59}$$

para expressar a parcela da equação (1.54) que possui derivadas espaciais, isto é,

$$\frac{\partial^2 \rho^{2-q}}{\partial x^2} = \frac{1}{t^{2/(3-q)}} \frac{d^2}{dz^2} \left(\frac{1}{t^{1/(3-q)}}[f(z)]\right)^{2-q} \\ = \frac{1}{t^{1/(3-q)+1}} \frac{d^2}{dz^2}[f(z)]^{2-q}.$$
(1.60)

Ao substituir as equações (1.57) e (1.60) na equação de meios porosos (1.54) e promover uma simplificação, verificamos que

$$\frac{d}{dz} \left[D \frac{d}{dz} [f(z)]^{2-q} + \frac{1}{(3-q)} zf \right] = 0.$$
(1.61)

Considerando que f = 0 e f' = 0 quando $z \to \pm \infty$, obtemos

$$D\frac{d}{dz}[f(z)]^{2-q} + \frac{1}{(3-q)}zf = 0, \qquad (1.62)$$

ou seja,

$$f^{-1}\frac{d}{dz}[f(z)]^{2-q} = -\frac{z}{D(3-q)}.$$
(1.63)

Note ainda que

$$f^{-1}\frac{d}{dz}[f(z)]^{2-q} = (2-q)f^{-q}\frac{d}{dz}[f(z)]$$
(1.64)

e, portanto, a equação (1.63) pode ser reescrita como

$$f^{-q}\frac{d}{dz}[f(z)] = -\frac{z}{D(3-q)(2-q)}.$$
(1.65)

A solução dessa equação é dada por

$$f(z) = N \left[1 - (1-q) \frac{N^{q-1} z^2}{2D(3-q)(2-q)} \right]_{+}^{1/(1-q)}$$

= $N \left[1 - (1-q)\beta z^2 \right]_{+}^{1/(1-q)}$, (1.66)

em que $[y]_+ = y$ se $y \ge 0$ e $[y]_+ = 0$ se y < 0,

$$\beta = \frac{N^{q-1}}{2D(3-q)(2-q)} \tag{1.67}$$

e N é uma constante de normalização que corresponde a f(0). Operando com a condição de normalização (1.7), o fator N é conseguido⁴

$$N = \begin{cases} \frac{|(1-q)\beta|^{1/2}}{B(^{1/2},c+1)} & \text{se } (1-q)\beta > 0, \ c > -1 & \text{e} \ c \neq 0 \\\\ \frac{|\beta|^{1/2}}{\Gamma(^{1/2})}, & \text{se } q \to 1 \\\\ \frac{|(1-q)\beta|^{1/2}}{B(^{1/2},-^{1/2}-c)} & \text{se } (1-q)\beta < 0 & \text{e} \ c < -1/2 \,, \end{cases}$$
(1.68)

em que c = 1/(1-q). Portanto, a solução fundamental correspondente da equação de meios porosos (1.54) assume a forma

$$\rho(x,t) = \frac{N}{t^{1/(3-q)}} \left[1 - (1-q)\beta \frac{|x|^2}{t^{2/(3-q)}} \right]_+^{1/(1-q)}.$$
(1.69)

Partindo da análise dimensional que levou à $x^{3-q} \sim t$, apura-se que

$$\langle x^2 \rangle \propto t^{2/(3-q)}.\tag{1.70}$$

 $^{^4 \}mathrm{Na}$ seção (2.2), mostramos como obterN para uma distribuição semelhante a essa.

Esse resultado é, em particular, consistente com uma superdifusão (subdifusão) para 3 > q > 1 (q < 1). A classificação em questão da difusão pode também ser investigada diretamente calculando $\langle x^2 \rangle$, via equação (1.6), com ρ apresentado em (1.69). Para q > 1, esse ρ tem o comportamento assintótico proporcional a $x^{-2/(q-1)}$, portanto a integral na equação (1.7) torna-se divergente para $q \ge 3$. Da mesma forma, para q > 1, a integral correspondente a $\langle x^2 \rangle$ é divergente se $q \ge 5/3$. Logo, uma pura análise dimensional pode apresentar limitações no que diz respeito aos valores consistentes do parâmetro q com a existência de normalização e valores médios.

Assim como discutido para as vertentes difusivas já apresentadas, faz sentido incorporar um termo de força externa. Semelhantemente ao que foi feito no caso da difusão de Richardson (1.44), tem-se a equação de meios porosos com um termo de força externa

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho^{2-q}}{\partial x^2} - \frac{\partial}{\partial x} (F\rho) \,. \tag{1.71}$$

Essa equação, quando comparada com $\partial \rho / \partial t = -\partial J / \partial x$, indica que a correspondente densidade de corrente é

$$J = -D_0 \rho^{1-q} \frac{\partial \rho}{\partial x} + F\rho \qquad (\text{com } D_0 = D(2-q)). \qquad (1.72)$$

Devemos pensar em D_0 como uma constante positiva e em $D_0\rho^{1-q}$ como um coeficiente de difusão dependente da densidade ρ . Esse coeficiente de difusão aumenta (diminui) com ρ se q < 1 (q > 1). Essa propriedade do coeficiente de difusão está em concordância com a solução (1.69), pois essa solução, quando confrontada com uma gaussiana, exibe cauda longa (curta) para q > 1 (q < 1).

Se a força F é confinante, pode-se chegar a uma solução estacionária da equação (1.71). Seguindo os mesmos procedimentos dos casos usual e de Richardson, a equação que a solução estacionária $\rho(x)$ satisfaz é

$$D_0 \rho^{1-q} \frac{d\rho}{dx} - F\rho = 0.$$
 (1.73)

A solução dessa equação pode ser escrita como

$$\rho(x) = N \left[1 - (1-q)N^{q-1} \frac{V(x)}{D_0} \right]_+^{1/(1-q)}, \qquad (1.74)$$

em que N é um fator de normalização. Essa solução, para o caso especial em que $V(x) = -k^2 x^2/2$, é reduzida a

$$\rho(x) = N \left[1 - (1-q)N^{q-1} \frac{-k^2 x^2}{2D_0} \right]_+^{1/(1-q)}.$$
(1.75)

Consequentemente, no que se refere à dependência funcional da variável x, percebe-se que as estruturas da solução temporal (1.69) e da solução estacionária (1.75) são idênticas.

Antes de concluir esta seção será feito um comentário sobre a estrutura $[y]_+$. Em vários contextos nos quais esse símbolo está presente, é comum introduzir a q-exponencial como

$$\exp_q(x) = \left[1 + (1-q)x\right]_+^{1/(1-q)} \tag{1.76}$$

e a q-gaussiana como $\exp_q(-x^2)$. Portanto, a solução (1.69) é essencialmente uma qgaussiana. Assim como r, o parâmetro q indica um grau de desvio da vertente usual; o limite $q \to 1$ corresponde ao caso usual. Nesse limite, por exemplo, a q-exponencial se reduz à $\exp(x)$ e a q-gaussiana resulta na gaussiana. Para $|x| \gg 1$ e q > 1, a q-gaussiana tem um decaimento assintótico tipo lei de potência com expoente igual a -2/(q-1), isto é, $|x|^{-2/(q-1)}$. Em contraste, quando q < 1, a q-gaussiana é nula para $|x|^2 \ge 1/(1-q)$. Deve ser notado ainda que, diferentemente das equações (1.16) e (1.41), o fator N não aparece apenas de maneira multiplicativa. Isso deve-se ao fato da equação de meios porosos ser não linear⁵.

A exemplo da equação de Richardson (1.44), a equação de meios porosos (1.71) pode também ser pensada como uma equação de Fokker-Planck generalizada quando supomos a condição de normalização (1.7). Além disso, há a possibilidade de se imaginar uma equação de difusão não linear mais geral do que a de meios porosos, bastando substituir $D\rho^{2-q}$ por um $\mathcal{D}(\rho)$. Desse modo, a equação equação (1.71) seria generalizada para

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial^2 \mathcal{D}(\rho)}{\partial x^2} - \frac{\partial}{\partial x} (F\rho) \tag{1.77}$$

e uma possível solução estacionária $\rho(x)$ satisfaria a equação

$$\frac{d\mathcal{D}(\rho)}{dx} - F\rho = 0. \qquad (1.78)$$

1.5 Outras equações de difusão anômala

Várias outras possibilidades de equações para descrever difusão anômala podem ser propostas. Por exemplo, uma nova equação poderia vir da interpolação das equações de Richardson (1.33) e de meios porosos (1.54). Nesse caso, uma candidata direta é [18]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial}{\partial x} \left(|x|^{2-r} \frac{\partial \rho^{2-q}}{\partial x} \right), \qquad (1.79)$$

pois recai na equação de Richardson se q = 1 e na equação de meios porosos se r = 2.

Assim como nas discussões anteriores, pode-se pensar em uma primeira abordagem no estudo da equação de difusão (1.79) via análise dimensional. Procedendo nessa direção, verifica-se a relação de escala $x^{r-q+1} \sim t$. Com esse fato em mente, pode ser proposto o ansatz

$$\rho(x,t) = \frac{1}{t^{1/(r-q+1)}} f\left(\frac{x}{t^{1/(r-q+1)}}\right),$$
(1.80)

obter a equação para f a partir da equação (1.79) e resolvê-la. Entretanto, uma proposta mais direta é imaginar uma solução da equação (1.79) que interpola as soluções (1.42) e (1.69). Essa solução interpolante pode ser suposta como

$$\rho(x,t) = \frac{N}{t^{1/(r-q+1)}} \left[1 - (1-q)\beta \frac{|x|^r}{t^{r/(r-q+1)}} \right]_+^{1/(1-q)}$$
(1.81)

 $^{^{5}}$ Situação parecida ocorre na mecânica newtoniana quando um oscilador é não-harmônico, implicando no seu período de oscilação depender da amplitude.

visto que a equação (1.42) é recuperada no limite $q \to 1$ e a equação (1.69) é reobtida para r = 2. Para N dado, obtemos que

$$\beta = \frac{N^{q-1}}{Dr(r-q+1)(2-q)}$$
(1.82)

após impor que a equação (1.81) é solução de (1.79). Por sua vez, N pode ser obtido usando a condição de normalização (1.7). Por outro lado, o uso de $x^{r-q+1} \sim t$ permite concluir que

$$\langle x^2 \rangle \propto t^{2/(r-q+1)},\tag{1.83}$$

resultado que poderia também ser obtido, incluindo o fator de proporcionalidade, via a solução (1.81). Ao considerar a equação (1.83) como indicador do tipo de processo difusivo, um rico cenário pode ser vislumbrado. Curiosamente, se r = q + 1, tem-se $\alpha = 1$ na equação (1.8) e a difusão seria usual mesmo com $r \neq 2$ e $q \neq 1$. Na hipótese de r > q + 1 (r < q + 1), obtém-se 2/(r - q + 1) < 1 (2/(r - q + 1) > 1) e, portanto, um processo subdifusivo (superdifusivo).

A introdução de uma força externa no processo difusivo descrito pela equação (1.79) pode ser conseguida, a exemplo dos casos anteriores, por meio da incorporação do termo $-\partial(F\rho)/\partial x$. Com a inclusão desse termo, a equação de difusão anômala (1.79) assume a forma

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial}{\partial x} \left(|x|^{2-r} \frac{\partial \rho^{2-q}}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} (F\rho) \,. \tag{1.84}$$

Essa equação comparada com $\partial \rho / \partial t = -\partial J / \partial x$ indica que a densidade de corrente é

$$J = -D_0 |x|^{2-r} \rho^{1-q} \frac{\partial \rho}{\partial x} + F\rho \qquad (\text{com } D_0 = D(2-q)).$$
 (1.85)

Consistentemente com os casos das equações de Richardson e de meios porosos, o coeficiente de difusão para essa vertente interpolante é $D_0|x|^{2-r}\rho^{1-q}$, que depende tanto de |x| quanto da densidade ρ . Nesse caso, o coeficiente de difusão aumenta (diminui) se o produto $|x|^{2-r}\rho^{1-q}$ é maior (menor) do que 1. Essa característica do coeficiente de difusão deve, assim como nos casos anteriores, estar relacionada com o comportamento de cauda longa ou curta (contrastada com uma gaussiana) da solução (1.81).

Caso exista uma solução estacionária e localizada $\rho(x)$ para a equação (1.84), ela deverá obedecer

$$D_0|x|^{2-r}\rho^{1-q}\frac{d\rho}{dx} - F\rho = 0.$$
 (1.86)

Assim como nos casos anteriores, essa equação corresponde a considerar J = 0. A solução de (1.86), norteada pela vertente interpolante que conduziu à equação (1.79) e à solução (1.81), é

$$\rho(x) = N \left[1 - (1-q)N^{q-1} \frac{\mathcal{V}(x)}{D_0} \right]_+^{1/(1-q)}$$
(1.87)

em que N é uma constante de normalização e \mathcal{V} é definido na equação (1.48). Como esperado, a equação (1.87) se reduz à solução estacionária da equação de Richardson

(1.52) quando $q \to 1$ e recai na solução estacionária da equação de meios porosos (1.75) se r = 2. Caso F(x) = -kx, a equação (1.87) resume-se em

$$\rho(x) = N \left[1 - (1-q)N^{q-1} \frac{k|x|^r}{rD_0} \right]_+^{1/(1-q)}.$$
(1.88)

É digno de nota que as soluções temporal (1.81) e estacionária (1.88) têm a mesma dependência funcional em x.

Pontuamos no início desta seção que muitas outras equações difusivas podem ser consideradas na direção de descrever possíveis contextos que apresentam difusão anômala. Em particular, equações que envolvem derivadas fracionárias, tanto espacial quanto temporal, poderiam ser consideradas com esse propósito. Ademais, combinações das equações de Richardson, meios porosos e com derivadas fracionárias também poderiam ser empregadas. Limitaremos esse trabalho a fazer uso de possibilidades que relembram apenas as equações de Richardson e de meios porosos. Além disso, salientamos que apesar de equações tipo Langevin não serem empregadas na continuação deste trabalho, há a possibilidade de fazer uma conexão com equações de Fokker-Planck não lineares [44–46]. Nesse caso, os ruídos considerados nos processos estocásticos poderão ser do tipo multiplicativo ao invés de aditivo como na equação de Langevin (1.31). Assim, uma formalização mais rigorosa para equação de Langevin, envolvendo cálculo de Ito e de Stratonovich, deveria ser considerada. Finalmente, vale ressaltar que a investigação sobre unicidade de soluções de equações de Fokker-Planck não lineares (47,48].

Capítulo 2 Uma distribuição generalizada

No Capítulo 1, vimos que as soluções fundamentais das equações de difusão usual, de Richardson, de meios porosos e de uma interpolação dessas duas últimas, equações (1.18), (1.42), (1.69) e (1.87), basicamente se diferenciam por tipos particulares de deformação de uma gaussiana. Essas famílias de deformações podem ser relacionadas com alguns tipos de distribuições de probabilidade. Entretanto, se estivéssemos interessados em distribuições de probabilidade com a possibilidade de serem nulas na origem, poderíamos pensar em algo como multiplicar as soluções agora referidas por uma potência de |x|. Neste capítulo, dedicaremos a investigar esse tipo de possibilidade. Ao invés de propor uma equação de difusão que contenha como solução fundamental esse tipo de solução, direcionaremos para a rota inversa. Com esse objetivo em mente, vamos considerar como ponto de partida uma solução geral $\rho(x, t)$ dada por

$$\rho(x,t) = N \frac{|x|^a}{t^b} \left[1 - A \frac{|x|^r}{t^s} \right]_+^c, \qquad (2.1)$$

em que N > 0 é uma constante de normalização, a, b e s são constantes reais, $c \neq 0$, $r \neq 0$ e $A \neq 0$. Como será acentuado posteriormente, a equação (2.1) engloba várias distribuições conhecidas. Especialmente, ela foi usada em uma investigação relacionada a casos de COVID-19 de diversos países [14].

2.1 Obtenção de uma equação de difusão anômala

Para deduzir uma equação de difusão correspondente à função $\rho(x,t)$ definida pela equação (2.1), note inicialmente que $x^r \sim t^s$ e, portanto, $x^a \sim t^{as/r}$. Ao fazer a substituição de x^a por $t^{as/r}$ na equação (2.1), chame a função resultante de ρ_0 , ou seja,

$$\rho_0(x,t) = N \frac{t^{as/r}}{t^b} \left[1 - A \frac{|x|^r}{t^s} \right]_+^c$$

= $\frac{N}{t^{b-as/r}} \left[1 - A \frac{|x|^r}{t^s} \right]_+^c.$ (2.2)

A seguir, suponha que ρ_0 é solução da seguinte equação de difusão

$$\frac{\partial \rho_0}{\partial t} = D \frac{\partial}{\partial x} \left(|x|^{\theta} t^{\gamma} \frac{\partial \rho_0^{\nu}}{\partial x} \right)$$
(2.3)

ou, alternativamente,

$$\frac{\partial \rho_0}{\partial t} = D \left[\theta |x|^{\theta - 1} t^{\gamma} \frac{\partial \rho_0^{\nu}}{\partial x} + |x|^{\theta} t^{\gamma} \frac{\partial^2 \rho_0^{\nu}}{\partial x^2} \right].$$
(2.4)

Como veremos, essa suposição mostra-se verdadeira desde que as constantes D, θ , $\gamma \in \nu$ sejam convenientemente escolhidas. Para obter as condições para esses parâmetros, basta substituir ρ_0 na equação (2.4).

Primeiramente, observe que as derivadas de ρ_0 que precisaremos são dadas por

$$\frac{\partial \rho_0}{\partial t} = -\frac{N}{t^{b-as/r+1}} [\cdots]^c_+ \left(b - \frac{as}{r}\right) + \frac{Nc}{t^{b-as/r}} [\cdots]^{c-1}_+ \left(\frac{A|x|^r s}{t^{s+1}}\right), \tag{2.5}$$

$$\frac{\partial \rho_0^{\nu}}{\partial x} = \frac{N^{\nu} c \nu}{t^{(b-as/r)\nu}} [\cdots]_+^{c\nu-1} \left(-\frac{Ar|x|^{r-1}}{t^s}\right) , \qquad (2.6)$$

е

$$\frac{\partial^2 \rho_0^{\nu}}{\partial x^2} = \frac{N^{\nu} c\nu}{t^{(b-as/r)\nu}} \left[(c\nu - 1) [\cdots]_+^{c\nu - 2} \left(-\frac{Ar|x|^{r-1}}{t^s} \right)^2 - [\cdots]_+^{c\nu - 1} \left(\frac{Ar(r-1)|x|^{r-2}}{t^s} \right) \right],\tag{2.7}$$

em que $[\cdots]_+ = \left[1 - A \frac{|x|^r}{t^s}\right]_+$. Substituindo-as em (2.4), segue que

$$-\frac{N}{t^{b-as/r+1}} \left(b - \frac{as}{r}\right) [\cdots]_{+}^{c} + \frac{Nc}{t^{b-as/r}} \left(\frac{A|x|^{r}s}{t^{s+1}}\right) [\cdots]_{+}^{c-1} = -D\theta |x|^{\theta-1} t^{\gamma} \frac{N^{\nu} c\nu Ar|x|^{r-1}}{t^{s+(b-as/r)\nu}} [\cdots]_{+}^{c\nu-1} + D|x|^{\theta} t^{\gamma} \frac{N^{\nu} c\nu}{t^{(b-as/r)\nu}} \left[(c\nu - 1) [\cdots]_{+}^{c\nu-2} \left(-\frac{Ar|x|^{r-1}}{t^{s}}\right)^{2} - [\cdots]_{+}^{c\nu-1} \left(\frac{Ar(r-1)|x|^{r-2}}{t^{s}}\right) \right].$$

$$(2.8)$$

A fim de simplificar a equação anterior podemos impor que $c=c\nu-1,$ isto é,

$$\nu = \frac{c+1}{c} \,. \tag{2.9}$$

Portanto, a equação (2.8) pode ser separada em duas equações, isto é,

$$\frac{Nc}{t^{b-as/r}} \left(\frac{A|x|^r s}{t^{s+1}}\right) = +D|x|^{\theta} t^{\gamma} \frac{N^{\nu} c\nu}{t^{(b-as/r)\nu}} (c\nu - 1) \left(\frac{Ar|x|^{r-1}}{t^s}\right)^2$$
(2.10)

е

$$\frac{N}{t^{b-as/r+1}} \left(b - \frac{as}{r} \right) = D\theta |x|^{\theta-1} t^{\gamma} \frac{N^{\nu} c \nu Ar |x|^{r-1}}{t^{s+(b-as/r)\nu}} + D|x|^{\theta} t^{\gamma} \frac{N^{\nu} c \nu}{t^{(b-as/r)\nu}} \frac{Ar(r-1)|x|^{r-2}}{t^{s}}.$$
 (2.11)

Além disso, considerar (2.9) na equação (2.10) resulta nas respectivas relações para θ , γ e D:

$$|x|^r = |x|^{\theta + 2r - 2} \Rightarrow \theta = 2 - r, \qquad (2.12)$$

$$t^{-b+as/r-s-1} = t^{\gamma-(b-as/r)\nu-2s} \Rightarrow \gamma = \left(b - \frac{as}{r}\right)\frac{1}{c} + s - 1,$$
 (2.13)

е

$$D = \frac{s}{AN^{1/c}(c+1)r^2}$$
(2.14)

que, quando substituídas em (2.11), nos mostram que existe ainda a seguinte condição para a constante b

$$b = (a+1)\frac{s}{r}.$$
 (2.15)

Desse modo, ρ_0 é solução de (2.4) desde que as condições (2.9), (2.12), (2.13), (2.14) e (2.15) sejam satisfeitas.

Encontrada a relação para b, podemos redefinir as equações (2.1) e (2.2) como

$$\rho(x,t) = N \frac{|x|^a}{t^{(a+1)s/r}} \left[1 - A \frac{|x|^r}{t^s} \right]_+^c$$
(2.16)

е

$$\rho_0(x,t) = \frac{N}{t^{s/r}} \left[1 - A \frac{|x|^r}{t^s} \right]_+^c, \qquad (2.17)$$

respectivamente. De agora em diante, vamos passar a empregar a equação (2.16) ao invés de (2.1).

É instrutivo notar que as equações (2.16) e (2.17) poderiam também ser obtidas das equações (2.1) e (2.2) via uma análise dimensional. Primeiramente, para verificar esse fato, relembre que $x^r \sim t^s$ e, consequentemente, $x \sim t^{s/r}$ e $t \sim x^{r/s}$. Como a condição (1.7) implica $\rho \sim x^{-1}$, a razão $|x|^a/t^b$ na equação (2.1) deve ter dimensão de x^{-1} . Esses resultados implicam $x^a/(x^{r/s})^b \sim x^{-1}$ que conduz a b = (a+1)s/r, que é a equação (2.15). Assim, na equação (2.2), o fator $t^{b-as/r}$ é igual a $t^{s/r}$.

Para continuar na direção de obter uma equação que tenha (2.16) como solução, perceba que há um vínculo entre $\rho_0 \in \rho$, dado por

$$\rho_0(x,t) = \frac{t^{as/r}}{|x|^a} \rho(x,t) \,. \tag{2.18}$$

Podemos fazer uso dessa relação na equação (2.3),

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{t^{as/r}}{|x|^a} \rho(x, t) \right) = D \frac{\partial}{\partial x} \left[|x|^{\theta} t^{\gamma} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{t^{as/r}}{|x|^a} \rho(x, t) \right)^{\nu} \right], \tag{2.19}$$

que certamente será satisfeita. Considerando a regra de diferenciação do produto na derivada temporal, obtemos

$$\frac{as}{r}\frac{t^{as/r-1}}{|x|^a}\rho(x,t) + \frac{t^{as/r}}{|x|^a}\frac{\partial\rho(x,t)}{\partial t} = D\frac{\partial}{\partial x}\left[|x|^{\theta}t^{\gamma+as\nu/r}\frac{\partial}{\partial x}\left(|x|^{-a}\rho(x,t)\right)^{\nu}\right],\tag{2.20}$$

que pode ser reescrita como

$$\frac{as}{rt}\rho(x,t) + \frac{\partial\rho(x,t)}{\partial t} = Dt^{\gamma + as\nu/r - as/r} |x|^a \frac{\partial}{\partial x} \left[|x|^{\theta} \frac{\partial}{\partial x} \left(|x|^{-a} \rho(x,t) \right)^{\nu} \right],$$
(2.21)

resultando em

$$\frac{as}{rt}\rho(x,t) + \frac{\partial\rho(x,t)}{\partial t} = Dt^{\delta}|x|^{a}\frac{\partial}{\partial x}\left[|x|^{\theta}\frac{\partial}{\partial x}\left(|x|^{-a}\rho(x,t)\right)^{\nu}\right],$$
(2.22)

em que $\delta = \gamma + (\nu - 1)as/r$. Por consequência, após utilizar as relações para $\gamma \in \nu$, chega-se à

$$\delta = s - 1 + \frac{(a+1)s}{rc} \,. \tag{2.23}$$

Com o auxílio da regra de diferenciação do produto na derivada espacial externa, podemos escrever

$$|x|^{a}\frac{\partial}{\partial x}\left[|x|^{\theta}\frac{\partial}{\partial x}\left(|x|^{-a}\rho(x,t)\right)^{\nu}\right] = \frac{\partial}{\partial x}\left[|x|^{a+\theta}\frac{\partial}{\partial x}\left(|x|^{-a}\rho(x,t)\right)^{\nu}\right] - a|x|^{a+\theta-1}\frac{\partial}{\partial x}\left(|x|^{-a}\rho(x,t)\right)^{\nu}$$
(2.24)

O uso dessa relação na equação (2.22) resulta em

$$\frac{as}{rt}\rho(x,t) + \frac{\partial\rho(x,t)}{\partial t} = Dt^{\delta}\frac{\partial}{\partial x}\left[\left|x\right|^{a+\theta}\frac{\partial}{\partial x}\left(|x|^{-a}\rho(x,t)\right)^{\nu}\right] - Dt^{\delta}a|x|^{a+\theta-1}\frac{\partial}{\partial x}\left(|x|^{-a}\rho(x,t)\right)^{\nu}.$$
(2.25)

Se substituirmos $\rho(x,t)$ explicitamente no primeiro termo do lado esquerdo da igualdade na equação anterior e no segundo termo de seu lado direito não é difícil ver que

$$\frac{as}{rt}\rho(x,t) = -Dt^{\delta}a|x|^{a+\theta-1}\frac{\partial}{\partial x}\left(|x|^{-a}\rho(x,t)\right)^{\nu}.$$
(2.26)

Por consequência, a função ρ , definida pela equação (2.16) (que é equivalente à equação (2.1)), é uma solução da equação de difusão

$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial}{\partial x} \left[|x|^{a+\theta} t^{\delta} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\rho(x,t)}{|x|^{a}} \right)^{\nu} \right], \qquad (2.27)$$

em que $\theta = 2-r$, $\nu = 1+1/c$, $\delta = s-1+(a+1)s/rc$ e D é dado pela equação (2.14). Uma breve visão direcionada das relações dos parâmetros contidos na equação de difusão (2.27) e na sua solução (2.16) é apresentada no Apêndice C. Vale ressaltar que a equação (2.27), assim como sua solução (2.16), pode ser considerada como um caso particular daquela investigada na referência [49], a qual envolve derivadas fracionárias.

2.2 Cálculo de momentos

Nesta seção, obteremos as expressões para a norma e para os momentos da função geral ρ , definida pela equação (2.16), assim como suas condições de existência. Mais precisamente, para cada número inteiro $n \ge 0$, calcularemos $\langle |x|^n \rangle$. Assim, como $\rho(x, t)$ é uma função par de x, segue que

$$\langle x^n \rangle = \begin{cases} \langle |x|^n \rangle & \text{se } n \text{ for par} \\ 0 & \text{se } n \text{ for impar}. \end{cases}$$
(2.28)

Além disso, considerando ρ definido pela equação (2.16), obtemos

$$\langle |x|^{n} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} N \frac{|x|^{n+a}}{t^{(a+1)s/r}} \left[1 - A \frac{|x|^{r}}{t^{s}} \right]_{+}^{c} dx$$

$$= \frac{2N}{t^{(a+1)s/r}} \int_{0}^{\infty} x^{n+a} \left[1 - A \frac{x^{r}}{t^{s}} \right]_{+}^{c} dx .$$

$$(2.29)$$

2.2.1 Caso A > 0

Se A > 0, a função ρ não é suportada em toda a linha real; por exemplo, ela tem suporte compacto se r > 0; por outro lado, $\rho(x,t) = 0$ para valores de x ao redor de zero se r < 0. Para qualquer valor de $r \neq 0$, podemos considerar a mudança de variáveis ditada pela igualdade sen² $\phi = Ax^{r}/t^{s}$, isto é,

$$\langle |x|^n \rangle = \frac{2N}{t^{(a+1)s/r}} \int_0^{\pi/2} \left(\frac{t^{s/r}}{A^{1/r}} (\operatorname{sen} \phi)^{2/r} \right)^{n+a} \left(1 - \operatorname{sen}^2 \phi \right)^c \frac{2t^{s/r}}{|r|A^{1/r}} (\operatorname{sen} \phi)^{2/r-1} \cos \phi \, d\phi \,.$$
(2.30)

Fazendo uma simplificação, constatamos que

$$\langle |x|^n \rangle = \frac{4Nt^{ns/r}}{|r|A^{(n+a+1)/r}} \int_0^{\pi/2} (\operatorname{sen} \phi)^{(n+a+1)2/r-1} (\cos \phi)^{2c+1} d\phi = \frac{4Nt^{ns/r}}{|r|A^{l(n)}} \int_0^{\pi/2} (\operatorname{sen} \phi)^{2l(n)-1} (\cos \phi)^{2c+1} d\phi ,$$
 (2.31)

em que

$$l(n) = \frac{n+a+1}{r} \,. \tag{2.32}$$

A integral na equação (2.31) pode ser identificada com uma representação integral da função beta, equação (A.11). Essa representação é

$$B(y,z) = 2 \int_0^{\pi/2} (\sin\theta)^{2y-1} (\cos\theta)^{2z-1} d\theta, \qquad (2.33)$$

desde que $\operatorname{Re}(y) > 0$ e $\operatorname{Re}(z) > 0$. Com isso, concluímos que

$$\langle |x|^n \rangle = \frac{2Nt^{ns/r}}{|r|A^{l(n)}} B\left[l(n), c+1\right] , \qquad (2.34)$$

com l(n) > 0 e c > -1 (obviamente, também devemos ter $c \neq 0$).

2.2.2 Caso A < 0

Por outro lado, se A < 0, a função ρ é suportada em toda a linha real. Portanto, substituindo A por -|A| na equação (2.29), obtemos

$$\langle |x|^n \rangle = \frac{2N}{t^{(a+1)s/r}} \int_0^\infty x^{n+a} \left[1 + |A| \frac{x^r}{t^s} \right]_+^c dx \,. \tag{2.35}$$

Considere uma nova variável de integração ϕ regida pela igualdade $\tan^2 \phi = |A|x^r/t^s$. Dessa forma, podemos escrever

$$\langle |x|^n \rangle = \frac{2N}{t^{(a+1)s/r}} \int_0^{\pi/2} \left(\frac{t^{s/r}}{A^{1/r}}\right)^{n+a} (\tan\phi)^{(n+a)2/r} \left(1 + \tan^2\phi\right)^c \frac{2t^{s/r}}{|r| |A|^{1/r}} (\tan\phi)^{2/r-1} (\sec^2\phi) d\phi$$

$$= \frac{4Nt^{ns/r}}{|r|A^{l(n)}} \int_0^{\pi/2} (\sin\phi)^{2l(n)-1} (\cos\phi)^{-2l(n)-2c-1} d\phi .$$

$$(2.36)$$

Assim como no caso A > 0, podemos empregar a representação integral (2.33) para expressar $\langle |x|^n \rangle$. Consequentemente, para A < 0, somos levados à

$$\langle |x|^n \rangle = \frac{2Nt^{ns/r}}{|r||A|^{l(n)}} B\left[l(n), -l(n) - c\right], \qquad (2.37)$$

desde que c < -l(n) < 0.

Os cálculos que acabamos de efetuar revelam que uma condição necessária para a função ρ , definida pela equação (2.16), seja normalizável é que l(0) > 0, pois n = 0. Nesse caso, obtemos das equações (2.34) e (2.37) que a constante de normalização N é dada por

$$N = \begin{cases} \frac{|r||A|^{l(0)}}{2B(l(0), c+1)} & \text{se } A > 0, \ c > -1 \ e \ c \neq 0\\ \frac{|r||A|^{l(0)}}{2B(l(0), -l(0) - c)} & \text{se } A < 0 \ e \ c < -l(0) \,. \end{cases}$$
(2.38)

2.2.3 Caso exponencial

Vamos considerar um caso especial da equação (2.1) que é aquele em que $[1-A|x|^r/t^s]_+^c$ se reduz a uma exponencial. Por esse caso ser de grande valia, vamos refazer vários dos cálculos anteriores tomando como ponto de partida esse caso limite. Para facilitar a identificação desse caso limite, é conveniente introduzir um $\beta > 0$ tal que $A = \beta/c$. De fato, para esse caso, temos

$$\rho(x,t) = \lim_{c \to \infty} N \frac{|x|^a}{t^{(a+1)s/r}} \left[1 - \frac{\beta}{c} \frac{|x|^r}{t^s} \right]_+^c \\
= N \frac{|x|^a}{t^{(a+1)s/r}} \exp\left(-\beta \frac{|x|^r}{t^s}\right).$$
(2.39)

Excepcionalmente, se r < 0, essa função não tem um comportamento assintótico com lei de potência próximo à origem. Como foi visto, $\rho(x, t)$ dado na equação (2.16) satisfaz a equação de difusão anômala (2.27), portanto o caso limite (2.39) satisfaz a equação

$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial}{\partial x} \left[|x|^{a+\theta} t^{s-1} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\rho(x,t)}{|x|^a} \right) \right], \qquad (2.40)$$

ao considerarmos os parâmetros $\theta = 2 - r$, $\nu = 1$, $\delta = s - 1$ e $D = s/\beta r^2$.

A seguir, vamos calcular o valor médio $\langle |x|^n \rangle$ partindo de ρ definido pela equação (2.39), em que *n* é um inteiro não negativo. Nesse caso, deparamos com

$$\langle |x|^n \rangle = \frac{N}{t^{(a+1)s/r}} \int_{-\infty}^{\infty} |x|^{n+a} \exp\left(-\beta \frac{|x|^r}{t^s}\right) dx$$

$$= \frac{2N}{t^{(a+1)s/r}} \int_0^{\infty} x^{n+a} \exp\left(-\beta \frac{x^r}{t^s}\right) dx .$$

$$(2.41)$$

A exemplo do que foi feito na equação (A.5), vamos fazer uma mudança de variável na direção de expressar essa última integral em termos de uma função gama. Nesse sentido, fazendo a mudança de variáveis $h = \beta x^r / t^s$, podemos escrever

$$\langle |x|^{n} \rangle = \frac{2N}{t^{(a+1)s/r}} \int_{0}^{\infty} \left(\frac{ht^{s}}{\beta}\right)^{(n+a)/r} \exp(-h) \frac{1}{|r|} \left(\frac{ht^{s}}{\beta}\right)^{1/r-1} \frac{t^{s}}{\beta} dh$$

$$= \frac{2Nt^{ns/r}}{|r|\beta^{l(n)}} \int_{0}^{\infty} h^{(n+a+1)/r-1} \exp(-h) dh .$$
(2.42)

Para essa integral convergir, devemos ter (n + a + 1)/r > 0, isto é, l(n) > 0 (conforme a definição (2.32)). Assim, chegamos à

$$\langle |x|^n \rangle = \frac{2Nt^{ns/r}}{|r|\beta^{l(n)}} \Gamma\left[l(n)\right], \qquad (2.43)$$

se l(n) > 0. Uma primeira aplicação desse último resultado refere-se ao caso n = 0, que permite obter a constante de normalização, dada por

$$N = \frac{|r|\beta^{l(0)}}{2\Gamma(l(0))}.$$
(2.44)

Uma apresentação resumida das relações dos parâmetros envolvidos na equação de difusão (2.40) e na sua solução (2.39) é catalogada no Apêndice C.

2.3 Representação gráfica da solução

Visando ilustrar os resultados obtidos nas duas últimas seções, apresentaremos gráficos das soluções normalizadas $\rho(x, t)$, apresentadas nas equações (2.16) e (2.39). A figura (2.1) mostra o gráfico de $\rho(x, 1)$ em função de x, levando em consideração as expressões para as constantes de normalização N dadas nas equações (2.38) e (2.44). Para os painéis A e D, consideramos a equação (2.16) como a definição de ρ com A = 1, c = 2, |r| = 1e vários valores de a, parâmetros estes consistentes com a possibilidade de normalização de ρ . Conforme observado nessa figura, ρ não é suportado em toda a linha real. Em particular, $\rho(x, 1)$ possui suporte compacto para r = 1, como mostrado no painel A. Também consideramos a equação (2.16) como a definição de ρ para os painéis B e E; entretanto, desta vez, escolhemos A = -1 e c = -3. Nesse caso, $\rho(x, 1)$ é suportado em toda linha real. Para os painéis C e F, consideramos que ρ é definido pela equação (2.39) com $\beta > 0$ e, consequentemente, $\rho(x, 1)$ é suportado em toda a linha real. Além disso, de acordo com a observação que fizemos no início da subseção (2.2.3), a função $\rho(x, 1)$ não se comporta como uma lei de potência próxima à origem se r < 1, como é o caso ilustrado no painel F.



Figura 2.1: Representação de $\rho(x, 1)$ em função de x, definida pela equação (2.16) ou equação (2.39), para vários valores do parâmetro a. Os painéis A, B e C mostram $\rho(x, 1)$ com r = 1, os painéis D, E e F consideram os casos em que r = -1. Além disso, em cada caso, a constante de normalização de ρ foi obtida adequadamente usando as equações (2.38) e (2.44). Para os painéis A e D, consideramos $\rho(x, 1)$ definido pela equação (2.16) com A = 1 e c = 2, resultando em uma função que não é suportada em toda linha real. Em particular, $\rho(x, 1)$ possui suporte compacto se r > 0, como mostrado no painel A. Usamos a equação (2.16) para definir $\rho(x, 1)$ para os painéis B e E; no entanto, desta vez considerando A = -1 e c = -3, produzindo uma função suportada em toda a linha real. Finalmente, para os painéis C e F, consideramos $\rho(x, 1)$ definido pela equação (2.39) com $\beta = 1$. Em particular, o painel F ilustra uma situação em que a função $\rho(x, 1)$ não se comporta como uma lei de potência próxima à origem.

Como deve estar claro, essas figuras ilustram a grande variedade de comportamentos para $\rho(x, 1)$, que é uma função par de x, a depender da fixação de valores particulares para os seus parâmetros. Em particular, existe um comportamento que lembra um sino no que diz respeito às caudas. Além disso, na região central, há dois tipos característicos de comportamento, um indicando um máximo e outro indicando um mínimo igual à zero.

2.4 Condições para existência de momentos

Para várias aplicações, podemos estar interessados em saber sob quais condições a função geral ρ é normalizável e possui momentos até uma determinada ordem. Nesta direção, consideremos inicialmente um caso limite de ρ , aquele dado pela equação (2.39).

Nessa situação, com r > 0, segue da equação (2.32) a desigualdade

$$l(n+1) > l(n) \tag{2.45}$$

para qualquer número inteiro $n \ge 0$. Então, de acordo com as equações (2.43) e (2.44), devemos ter

$$l(0) > 0$$
 (2.46)

(ou, equivalentemente, a > -1) para garantir que ρ seja normalizável, assim como os momentos de qualquer ordem n > 0. Se r < 0, podemos obter de forma análoga uma condição para que ρ possua momento de ordem n. Nesse último caso, a condição é

$$a < -n - 1. \tag{2.47}$$

Assim, basta ter a < -1 para que ρ seja normalizável.

Por outro lado, para o caso geral de ρ definido pela equação (2.16), podemos verificar que um, e apenas um, dos seguintes conjuntos de condições deve ser atendido para garantir que ρ seja normalizável e tenha momentos até a ordem n (para mais detalhes, consulte o Apêndice B):

1. se A > 0 e r > 0, então c > -1, $c \neq 0$ e l(0) > 0 (ou, equivalentemente, a > -1);

2. se A > 0 e r < 0, então c > -1, $c \neq 0$ e l(n) > 0 (ou, equivalentemente, a < -n-1); 3. se A < 0 e r > 0, então c + n/r < -l(0) < 0 (ou, equivalentemente, rc + n + 1 < 0 < 1);

$$-a < 1$$
)

4. se A < 0 e r < 0, então c < -l(0) < n/r (ou, equivalentemente, rc+1 > -a > n+1).

Uma amostra da riqueza de comportamentos relacionados à solução ρ , dada na equação (2.16), pode ser obtida de seus momentos. Por exemplo, na perspectiva de norma e variância finitas, a figura (2.2) ilustra de maneira gráfica a região de valores dos parâmetros a e c para os quais a função ρ , definida pela equação (2.16) com |r| = 1, possui essas características. Um outro exemplo está relacionado à classificação do processo difusivo via variância, que se reduz ao segundo momento como ρ é uma função par de x. Nessa direção, considerando a região de parâmetros que garantem o segundo momento finito, temos

$$\left\langle x^2 \right\rangle \propto t^{2s/r}.$$
 (2.48)

Assim, essa equação indica que a função geral ρ , equação (2.16), está associada a uma difusão anômala se $s/r \neq 1/2$; tem-se um processo superdifusivo (subdifusivo) caso 2s > r (2s < r).



Figura 2.2: As regiões sombreadas contém os pares (c, a) para os quais a função ρ definida pela equação (2.16) com |r| = 1 tem norma e variância finitas. As linhas pontilhadas estão excluídas dessas regiões.

2.5 Casos particulares

A função ρ e seu caso limite, definidos pelas equações (2.16) e (2.39), fornecem uma ampla família de soluções dependentes do tempo devido a sua dependência de vários parâmetros. Como deve estar claro de discussões apresentadas no Capítulo 1, essa função geral $\rho(x,t)$ em algum sentido relembra uma forma de sino, assim como sua condição inicial $\rho(x,0)$ deve estar relacionada a uma função delta de Dirac centrada na origem, $\delta(x)$. Por sua vez, a vasta família de equações (2.27), que contém $\rho(x,t)$ (2.16) como uma de suas soluções, tem como casos particulares várias outras equações de difusão. Nessa seção, visando ilustrar essa gama de casos particulares, chamaremos a atenção para vários desses ρ 's e equações de difusão correspondentes.

É oportuno dizer que as equações de difusão para distribuições específicas a serem apresentadas podem ter aplicação no estudo de sistemas complexos, como por exemplo, aquela associada à distribuição beta (ver equação (2.50)).

2.5.1 Casos do Capítulo 1

Primeiramente, por construção, a equação de difusão anômala (2.27) e a solução (2.16) devem recuperar os casos discutidos no Capítulo 1 via escolha conveniente de parâmetros. Para ressaltar esse fato, listamos as escolhas de parâmetros para as correspondentes equações de difusão:

- A equação de difusão usual (1.4) é recuperada quando consideramos $a = \theta = \delta = 0$ e $\nu = 1$ na equação (2.40);
- A equação de difusão de Richardson (1.33) é obtida se $a = \delta = 0, \theta = 2 r \in \nu = 1;$
- A equação de meios porosos (1.54) é verificada para $a = \theta = \delta = 0$ e $\nu = 2 q$;

• A equação que interpola as equações de Richardson e de meios porosos (1.79) é alcançada quando $a = \delta = 0, \ \theta = 2 - r \in \nu = 2 - q$.

2.5.2 Caso particular com $a \neq 0$

A seguir, exporemos de maneira breve, alguns outros casos particulares da equação geral (2.16) e da solução (2.27), porém ainda não apresentados separadamente. Essas vertentes, diferentemente das que acabamos de expor, têm um comportamento tipo lei de potência $|x|^a$ junto à origem do sistema de coordenadas. Como essas equações e soluções não têm nomes característicos, rotularemos os casos particulares por meio dos parâmetros da solução (2.16) a serem fixados.

Caso com r = s = 1, a = a' - 1, c = b' - 1 e A = 1

Um caso particular com $a \neq 0$ pode ser obtido restringindo a equação (2.16) para $x \geq 0$ e escolhendo, por exemplo, r = s = 1, a = a' - 1, c = b' - 1 e A = 1, em que a' > 0 e b' > 0. Portanto, a solução (2.16) é reduzida à

$$\rho(x,t) = \frac{x^{a'-1}}{B(a',b')t^{a'}} \left[1 - \frac{x}{t} \right]_{+}^{b'-1}, \quad x \ge 0,$$
(2.49)

em que N = 1/[2B(a', b')]. Note que o suporte desta distribuição está contido no eixo xnão negativo e esse $\rho(x, t)$ é essencialmente uma distribuição beta (ver equação (A.12)). Devido a esse fato, as expressões para a constante de normalização, dada na equação (2.38), devem ser multiplicadas por um fator 2. Esse tipo de situação também ocorrerá nos exemplos seguintes desta seção.

Por sua vez, usando a mesma fixação de parâmetros que conduziu à equação (2.49) na equação de difusão (2.27), somos levados à equação

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial}{\partial x} \left[x^{a'} t^{a'/(b'-1)} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\rho}{x^{a'-1}} \right)^{b'/(b'-1)} \right], \qquad (2.50)$$

em que $D = (b')^{-1} [B(a', b')]^{1/(b'-1)}$.

Situações como a descrita pelas equações (2.49) e (2.50) são candidatas a ocorrer na análise de sistemas sociais ou, de maneira mais geral, no estudo de sistemas complexos. Realmente, a função (2.49) e a equação (2.50) foram empregadas para modelar presença parlamentar [19]. Nesse contexto, t representa o número da sessão parlamentar de uma legislatura e x indica a quantidade de sessões parlamentares que um parlamentar esteve presente até a sessão t. Ademais, é de se ressaltar a consistência do uso do símbolo $[\cdots]_+$ com o fato de que $x \leq t$.

Caso com $a = \alpha - 1$ e r = 1

Se considerarmos a equação (2.39), que é um caso limite da solução (2.16), com $a = \alpha - 1$, $\alpha > 0$, e r = 1, obtemos

$$\rho(x,t) = 2N \frac{x^{\alpha-1}}{t^{(\alpha-1+1)s}} \exp\left(-\beta \frac{x^1}{t^s}\right)$$
$$= 2N \frac{x^{\alpha-1}}{t^{\alpha s}} \exp\left(-\beta \frac{x}{t^s}\right) \qquad (x \ge 0).$$
(2.51)

A constante de normalização N é explicitada por meio da equação (2.44) com $l(0) = \alpha$, ou seja,

$$N = \frac{\beta^{l(0)}}{2\Gamma(l(0))} = \frac{\beta^{\alpha}}{2\Gamma(\alpha)}$$
(2.52)

e, assim,

$$\rho(x,t) = \frac{\beta^{\alpha}}{\Gamma(\alpha)} \frac{x^{\alpha-1}}{t^{\alpha s}} \exp\left(-\beta \frac{x}{t^s}\right) \qquad (x \ge 0), \qquad (2.53)$$

que é uma distribuição gama (ver equação (A.8)). Do ponto de vista de aplicações, essa solução é uma distribuição gama dependente do tempo que tem a vantagem do parâmetro s fornecer uma liberdade de sintonia dessa dependência temporal. De acordo com a equação (2.27) e empregando os parâmetros que levaram à esse $\rho(x, t)$, essa função é uma solução da equação de difusão

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{s}{\beta} \frac{\partial}{\partial x} \left[x^{\alpha} t^{s-1} \frac{\partial}{\partial x} (x^{1-\alpha} \rho) \right].$$
(2.54)

Caso com a = r - 1

Se, em vez da escolha anterior dos parâmetros, apenas escolhermos a = r - 1, constatamos que

$$\rho(x,t) = 2N \frac{x^{r-1}}{t^{(r-1+1)s/r}} \exp\left(-\beta \frac{x^r}{t^s}\right)
= 2N \frac{x^{r-1}}{t^s} \exp\left(-\beta \frac{x^r}{t^s}\right),$$
(2.55)

cuja normalização é dada por

$$N = \frac{|r|\beta^{l(0)}}{2\Gamma(l(0))} = \frac{|r|\beta}{2}, \qquad (2.56)$$

em que foi usado $l(0) = 1 \in \Gamma(1) = 1$. Logo,

$$\rho(x,t) = \frac{|r|\beta x^{r-1}}{t^s} \exp\left(-\beta \frac{x^r}{t^s}\right) \qquad x \ge 0, \qquad (2.57)$$

que está relacionado à distribuição de Weibull (ver equação (A.13)). Segue da equação (2.27), via os parâmetros em questão, que essa função é uma solução da equação de difusão

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{s}{\beta r^2} \frac{\partial}{\partial x} \left[x t^{s-1} \frac{\partial}{\partial x} (x^{1-r} \rho) \right].$$
(2.58)

Assim como no caso anterior, existe uma dependência temporal ajustável via o parâmetro s, porém na distribuição de Weibull (2.57) ao invés da distribuição gama (2.53).

Caso com $a = \alpha - 1$, c = 1/(1 - q), r = 1 **e** $A = -(q - 1)\beta$

Se considerarmos a solução (2.16) com $a = \alpha - 1$, $\alpha > 0$, c = 1/(1-q), $1 < q < 1+1/\alpha$, r = 1 e $A = -(q-1)\beta$, $\beta > 0$, temos

$$\rho(x,t) = 2N \frac{x^{\alpha-1}}{t^{\alpha s}} \left[1 - (1-q)\beta \frac{x}{t^s} \right]^{1/(1-q)}.$$
(2.59)

Esse caso corresponde a A < 0 e $c < -\ell(0)$ no cálculo da constante de normalização para ρ . Assim, por meio da equação (2.38), verificamos que

$$N = \frac{|1|| - (q - 1)\beta|^{l(0)}}{2B(l(0), -l(0) - c)}$$

= $\frac{|(1 - q)\beta|^{l(0)}}{2B(l(0), -l(0) - c)}$
= $\frac{|(1 - q)\beta|^{\alpha}}{2B\left(\alpha, -\alpha - \frac{1}{1 - q}\right)},$ (2.60)

pois $l(0) = \alpha$ e c = 1/(q-1). E, portanto, a equação (2.59) assume a forma

$$\rho(x,t) = \frac{|(1-q)\beta|^{\alpha}}{B\left(\alpha, -\alpha - \frac{1}{1-q}\right)} \frac{x^{\alpha-1}}{t^{\alpha s}} \left[1 - (1-q)\beta \frac{x}{t^s}\right]^{1/(1-q)}$$
(2.61)

para qualquer $x \ge 0$. Essa função está relacionada à chamada distribuição q-gama [12] (ver equação (A.19)) e, em virtude da equação (2.27), é uma solução da equação de difusão

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial}{\partial x} \left[x^{\alpha} t^{s-1-(q-1)\alpha s} \frac{\partial}{\partial x} (x^{1-\alpha} \rho)^{2-q} \right], \qquad (2.62)$$

 com

$$D = \frac{s \, 2^{1-q}}{\beta(2-q)} \, \frac{\left[B\left(\alpha, -\alpha - \frac{1}{1-q}\right)\right]^{1-q}}{|(1-q)\beta|^{\alpha(1-q)}} \,. \tag{2.63}$$

Caso com a > -1, r > 0, c = 1/(1-q) **e** $A = -(q-1)\beta$

Como último caso particular, consideramos a equação (2.16) com a > -1, r > 0, c = 1/(1-q), 1 < q < 1 + r/(a+1), e $A = -(q-1)\beta$, $\beta > 0$. Desse modo, somos levados a

$$\rho(x,t) = 2N \frac{x^a}{t^{(a+1)s/r}} \left[1 - (1-q)\beta \frac{x^r}{t^s} \right]^{1/(1-q)}.$$
(2.64)

Da mesma maneira que no caso anterior, temos A < 0 e c < -l(0) e, portanto, usaremos a constante de normalização obtida a partir da equação (2.38). Consequentemente, obtemos

$$N = \frac{r|-(q-1)\beta|^{l(0)}}{2B(l(0),-l(0)-c)} = \frac{r|(1-q)\beta|^{l(0)}}{2B\left(l(0),-l(0)-\frac{1}{1-q}\right)}$$
(2.65)

que, quando substituído na equação (2.64), resulta em

$$\rho(x,t) = \frac{r|(1-q)\beta|^{l(0)}}{B\left(l(0), -l(0) - \frac{1}{1-q}\right)} \frac{x^a}{t^{sl(0)}} \left[1 - (1-q)\beta \frac{x^r}{t^s}\right]^{1/(1-q)} \qquad (x \ge 0), \qquad (2.66)$$

em que l(0) = (a+1)/r. Essa função é uma distribuição q-gama generalizada (ver equação (A.21)) e foi usada na descrição dos casos de COVID-19 de vários países [14]. Segue da equação (2.27) que (2.66) é uma solução da equação de difusão

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial}{\partial x} \left[x^{a+2-r} t^{s-1-(q-1)sl(0)} \frac{\partial}{\partial x} (x^{-a} \rho)^{2-q} \right], \qquad (2.67)$$

 com

$$D = \frac{s r^{q-3} 2^{1-q}}{(2-q)\beta} \frac{|(1-q)\beta|^{(q-1)l(0)}}{\left[B\left(l(0), -l(0) - \frac{1}{1-q}\right)\right]^{q-1}}.$$
(2.68)

Capítulo 3 Uma família de equações de Fokker-Planck generalizadas

No Capítulo 1, fizemos uma primeira discussão sobre equações de difusão, começando pela difusão usual, passando pelas difusões de Richardson e de meios porosos, e chegando a processos anômalos que interpolam esses dois últimos. Para essas equações, obtivemos as soluções temporais com a condição inicial centrada na origem. Também, para essas equações, alcançamos soluções estacionárias devido a forças confinantes. No Capítulo 2, partimos de uma solução temporal, que tem as apresentadas no Capítulo 1 como casos particulares, para conseguir uma equação que recaia nas exibidas no Capítulo 1 como casos especiais após fixação conveniente de parâmetros. Neste capítulo, estenderemos a equação de difusão mais geral considerada no Capítulo 2. Além disso, vinculado a essa equação, investigaremos sua solução estacionária, teorema H, energia média e forma entrópica [50].

3.1 Equação de Fokker-Planck generalizada

A equação de difusão mais geral apresentada no Capítulo 2, equação (2.27), pode ser reescrita como

$$\frac{\partial \rho}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \mathcal{D}(x,t) \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\rho}{\mathcal{C}(x,t)} \right]^{\nu} \right\},\tag{3.1}$$

em que $\mathcal{D}(x,t) = D|x|^{a+\theta}t^{\delta}$ e $\mathcal{C}(x,t) = |x|^{a}$. Um cenário ainda mais geral ocorreria se $\mathcal{D}(x,t)$ e $\mathcal{C}(x,t)$ fossem funções não-negativas arbitrárias. Neste capítulo, a fim de investigar soluções estacionárias e teoremas H relacionadas a essa família de equações, vamos focar nossa atenção na equação

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \mathcal{D}(x) \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\rho}{\mathcal{C}(x)} \right]^{\nu} \right\} - \frac{\partial}{\partial x} [F(x)\rho], \qquad (3.2)$$

em que F(x) é um termo de força externa e $\mathcal{D}(x)$ e $\mathcal{C}(x)$ são funções não negativas.

Como vimos no final da seção (1.1), a equação de difusão usual poderia ser vista como uma equação para a densidade de probabilidade de uma partícula; nesse caso, a equação de difusão é chamada de equação de Fokker-Planck. Para um caso geral, se supormos que a condição de normalização da densidade ρ satisfaz a equação (1.7), ρ pode ser pensado como uma densidade de probabilidade. Assim, a equação de difusão, anômala ou não, para ρ pode ser vista como uma equação para uma densidade de probabilidade. Pelo menos do ponto de vista formal, podemos pensar que muitas equações podem ser consideradas como algum tipo de equação de Fokker-Planck. Nesse contexto, é comum empregar os termos equação de Fokker-Planck generalizada e equação de Fokker-Planck não linear. Essa última denominação é frequentemente empregada quando a equação em questão é não linear. Neste capítulo, em particular, consideraremos a equação (3.2) em conexão com distribuições de probabilidade e, sem entrar em mais detalhes, usaremos ambas denominações para ela.

3.2 Solução estacionária

Nesta seção, obteremos e discutiremos a solução estacionária da equação (3.2). A exemplo do que foi discutido no Capítulo 1, uma solução estacionária, que será denominada ρ_s , da equação (3.2) deve satisfazer a equação

$$\frac{d}{dx}\left\{\mathcal{D}(x)\frac{d}{dx}\left[\frac{\rho_s}{\mathcal{C}(x)}\right]^{\nu} - F(x)\rho_s\right\} = 0.$$
(3.3)

Consistentemente com $\rho_s(x)$ convergindo para 0 quando $|x| \to \infty$, consideramos a expressão entre chaves como igual a 0, ou seja, tomamos ρ_s como uma solução da equação

$$\mathcal{D}(x)\frac{d}{dx}\left[\frac{\rho_s}{\mathcal{C}(x)}\right]^{\nu} = F(x)\rho_s.$$
(3.4)

Se $\nu \neq 1,$ esta equação pode ser reduzida a

$$\frac{\mathcal{C}(x)}{\rho_s} \frac{d}{dx} \left[\frac{\rho_s}{\mathcal{C}(x)} \right]^{\nu} = \frac{\mathcal{C}(x)}{\mathcal{D}(x)} F(x)$$
(3.5)

e, portanto,

$$\frac{d}{dx} \left[\frac{\rho_s}{\mathcal{C}(x)} \right]^{\nu-1} = \frac{\nu-1}{\nu} \frac{\mathcal{C}(x)}{\mathcal{D}(x)} F(x) \,. \tag{3.6}$$

Ao integrar essa equação, verificamos que

$$\rho_s(x) = \mathcal{C}(x) \left[K - \frac{\nu - 1}{\nu} \bar{V}(x) \right]_+^{1/(\nu - 1)}.$$
(3.7)

Nesse resultado, $[x]_{+} = \max\{x, 0\}$ (como visto nos capítulos anteriores), K é uma constante de integração que pode ser determinada usando a condição de normalização e \bar{V} é uma função que pode ser interpretada como um potencial efetivo, definido pela relação

$$\frac{d\bar{V}}{dx} = -\frac{\mathcal{C}(x)}{\mathcal{D}(x)}F(x).$$
(3.8)

Portanto, podemos escrever o potencial efetivo como

$$\bar{V}(x) = -\int_0^x \frac{\mathcal{C}(x')}{\mathcal{D}(x')} F(x') \, dx' \,. \tag{3.9}$$

Se $C \in D$ fossem constantes, $\bar{V}(x)$ seria o potencial usual, equação (1.27), multiplicado pela constante C/D. Fazendo uso da função q-exponencial (1.76), a equação (3.7) pode ser reescrita como

$$\rho_s(x) = N \mathcal{C}(x) \exp_{2-\nu} \left[-\frac{V(x)}{\nu N^{\nu-1}} \right], \qquad (3.10)$$

em que N é uma constante de normalização.

Se $\nu = 1$, a equação (3.4) pode ser reduzida à

$$\frac{d}{dx}\ln\left[\frac{\rho_s}{\mathcal{C}(x)}\right] = \frac{\mathcal{C}(x)}{\mathcal{D}(x)}F(x)$$
(3.11)

e, consequentemente,

$$\rho_s(x) = N \mathcal{C}(x) e^{-V(x)},$$
(3.12)

em que N é uma constante de normalização. Além disso, notamos que a equação (3.12) segue imediatamente da equação (3.10) se tomarmos o limite $\nu \to 1$. Ademais, as equações (3.10) e (3.12) dão origem à possibilidade de interpretar a função C(x) como uma densidade de estados.

Para evidenciar o papel do potencial efetivo \overline{V} , suponhamos que F(x) venha de uma função potencial V, ou seja,

$$F(x) = -\frac{dV(x)}{dx}.$$
(3.13)

Nesse caso, o potencial efetivo \overline{V} não seria proporcional ao original V (exceto por uma constante aditiva), a menos que a razão $C(x)/\mathcal{D}(x)$ seja uma constante. Como exemplo, podemos discutir brevemente o caso particular da equação (3.2) com

$$F(x) = -k|x|^{\lambda - 1}x,$$
 (3.14)

em que $k > 0, \lambda \in \mathbb{R}$. Se $\lambda = 1$ e \mathcal{C} e \mathcal{D} são funções constantes, podemos verificar imediatamente que a equação (3.9) implica que \bar{V} é um potencial harmônico. No entanto, a equação (3.9) mostra que \bar{V} pode ser muito diferente do potencial harmônico se \mathcal{C} e \mathcal{D} forem funções não constantes. Por outro lado, se $\lambda \neq 1$, existem infinitas possibilidades de escolha das funções \mathcal{C} e \mathcal{D} de forma que o potencial efetivo \bar{V} seja harmônico. Por exemplo, se considerarmos $\mathcal{D}(x) = |x|^{\alpha}$ e $\mathcal{C}(x) = |x|^{\beta}$, temos

$$\bar{V}(x) = -\int_0^x \frac{|x'|^{\beta}}{|x'|^{\alpha}} \left(-k|x'|^{\lambda-1}x'\right) dx'$$
(3.15)

e, com $\beta - \alpha = 1 - \lambda$, verificamos que $\overline{V}(x) = kx^2/2$.

Como já discutimos, a equação (3.2) pode ser vista como uma grande família de equações generalizadas de Fokker-Planck que contém um amplo espectro de soluções. Em particular, sua solução estacionária, dada pela equação (3.10), circunscreve várias distribuições bem conhecidas. Por exemplo, uma distribuição q-gaussiana, equação (A.17), pode ser obtida na equação (3.10) considerando $C(x) = 1 \in V(x) \propto x^2$. Além disso, se considerarmos $x \ge 0$, $C(x) = x^a \in V(x) \propto x^r$ na equação (3.10), obtemos uma distribuição q-gama generalizada (equação (A.21))

$$\rho_s(x) = N \, x^a \, \exp_{2-\nu} \left(-\beta x^r\right), \tag{3.16}$$

em que β é uma constante proporcional a $\nu^{-1}N^{1-\nu}$. Como é mostrado no Apêndice A, essa distribuição inclui as distribuições Weibull ($a = r - 1 \in \nu \to 1$), gama ($r = 1 \in \nu \to 1$) e q-gama (r = 1) como casos particulares.

Ressaltaremos a seguir um aspecto relacionado à dependência da solução estacionária da equação (3.2) com as funções $C(x) \in \overline{V}(x)$, e do potencial efetivo $\overline{V}(x)$ com a razão de $C(x)F(x) \in \mathcal{D}(x)$ (ver equação (3.9)). Se a função C(x) é fixa, $\overline{V}(x)$ pode, em princípio, ser qualquer função, uma vez que podemos escolher convenientemente a razão $F(x)/\mathcal{D}(x)$ a fim de obter a expressão desejada para o potencial efetivo $\overline{V}(x)$. Como consequência, diferentes membros da família de equações (3.2) podem ter a mesma solução estacionária.

3.3 Teorema H

Até o presente momento, discutimos dois tipos de soluções: soluções temporais correspondentes a uma condição inicial concentrada na origem e soluções estacionárias. Para a equação (3.2), acabamos de encontrar a solução estacionária em termos de \mathcal{D} e \mathcal{C} gerais. Entretanto, não conseguimos obter esse tipo de solução temporal com tamanha generalidade. Por outro lado, é possível fazer uma investigação relacionada com a evolução temporal de $\rho(x, t)$ à medida que ela aproxima-se da solução estacionária. Promoveremos uma investigação desse tipo via o teorema H, a exemplo do que tem sido conduzido para outras equações generalizadas de Fokker-Planck [16, 31, 32]. Em um teorema H, pode ser considerado um funcional do tipo energia livre

$$\mathcal{F} = U - S \,, \tag{3.17}$$

em que a distribuição de probabilidade é $\rho(x,t)$. Essencialmente, o teorema H consiste em mostrar que

$$\frac{d\mathcal{F}}{dt} \le 0. \tag{3.18}$$

A depender da generalidade da equação de Fokker-Planck, comportamentos que se desviam dos usuais para a energia U e para a forma entrópica S podem ser encontrados. A seguir, passaremos ao teorema H e a discussão dos respectivos U e S para a equação de Fokker-Planck não linear (3.2).

Em nosso caso, podemos verificar esse teorema para a equação (3.2) usando

$$U = \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{V}(x) \rho \, dx \tag{3.19}$$

е

$$S = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{[\mathcal{C}(x)]^{1-\nu} \rho^{\nu} - \rho}{1-\nu} \, dx \,, \qquad (3.20)$$

em que \overline{V} é o potencial efetivo definido via a equação (3.9). Como deve estar claro, o funcional U desempenharia o papel de uma energia interna, a menos de uma constante multiplicativa, possivelmente relacionada a algum tipo de temperatura.

A derivada temporal de \mathcal{F} é dada por

$$\frac{d\mathcal{F}}{dt} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial t} \left[\bar{V}(x)\rho - \frac{[\mathcal{C}(x)]^{1-\nu}\rho^{\nu} - \rho}{1-\nu} \right] dx$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\bar{V}(x) - \frac{[\mathcal{C}(x)]^{1-\nu}\nu\rho^{\nu-1} - 1}{1-\nu} \right] \frac{\partial\rho}{\partial t} dx.$$
(3.21)

Usando o lado direito da igualdade na equação (3.2) para substituir $\partial \rho / \partial t$, constatamos que

$$\frac{d\mathcal{F}}{dt} = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\bar{V}(x) - \frac{[\mathcal{C}(x)]^{1-\nu} \nu \rho^{\nu-1} - 1}{1-\nu} \right] \frac{\partial}{\partial x} \left\{ -F(x)\rho + \mathcal{D}(x) \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\rho}{\mathcal{C}(x)} \right]^{\nu} \right\} dx \,. \quad (3.22)$$

A seguir, fazemos uma integração por partes que resulta em

$$\frac{d\mathcal{F}}{dt} = \left[\bar{V}(x) - \frac{[\mathcal{C}(x)]^{1-\nu}\nu\rho^{\nu-1} - 1}{1-\nu}\right] \left\{-F(x)\rho + \mathcal{D}(x)\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\rho}{\mathcal{C}(x)}\right]^{\nu}\right\}\Big|_{-\infty}^{\infty}$$
(3.23)

$$-\int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ -\frac{\mathcal{C}(x)F(x)}{\mathcal{D}(x)} + \frac{\nu}{\nu-1} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\rho}{\mathcal{C}(x)} \right]^{\nu-1} \right\} \left\{ -F(x)\rho + \mathcal{D}(x) \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\rho}{\mathcal{C}(x)} \right]^{\nu} \right\} dx.$$

Visando avançar na demonstração do teorema H, vamos empregar a hipótese razoável de que o sistema descrito pela equação de Fokker-Planck não linear (3.2) localiza-se em uma região limitada em qualquer instante de tempo. Quantitativamente, essa hipótese pode ser incorporada assumindo que $\rho(x,t)$ se aproxima de 0 rápido o suficiente conforme |x| aumenta além de todos os limites. Com isso, o primeiro termo do lado direito da equação (3.23) é nulo e, portanto, obtemos

$$\frac{d\mathcal{F}}{dt} = -\int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ -\frac{\mathcal{C}(x)F(x)}{\mathcal{D}(x)} + \frac{\nu}{\nu-1}\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\rho}{\mathcal{C}(x)}\right]^{\nu-1} \right\} \left\{ -F(x)\rho + \mathcal{D}(x)\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\rho}{\mathcal{C}(x)}\right]^{\nu} \right\} dx$$
$$= -\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathcal{D}(x)\rho}{\mathcal{C}(x)} \left\{ -\frac{\mathcal{C}(x)F(x)}{\mathcal{D}(x)} + \frac{\nu}{\nu-1}\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\rho}{\mathcal{C}(x)}\right]^{\nu-1} \right\}^2 dx.$$
(3.24)

Consequentemente, uma vez que $\rho(x,t)$, $\mathcal{D}(x) \in \mathcal{C}(x)$ são assumidos como funções não negativas, o lado direito dessa última igualdade é não-positivo. Assim, chegamos a $d\mathcal{F}/dt \leq 0$ que, como já tínhamos anunciado, pode ser visto como um teorema H associado à equação (3.2).

Além desse último resultado, podemos escrever uma relação envolvendo dois tipos de \mathcal{F} 's, uma delas com ρ dependente do tempo e a outra correspondendo ao caso estacionário ρ_s . Em virtude da equação (3.7), o potencial efetivo V pode ser escrito em termos da solução estacionária como

$$\bar{V}(x) = \frac{\nu}{\nu - 1} \left\{ K - \left[\frac{\rho_s}{\mathcal{C}(x)} \right]^{\nu - 1} \right\}.$$
(3.25)

O uso da equação (3.25) permite expressar o funcional $\mathcal{F} = U - S$, via as equações (3.19) e (3.20), em termos de $\rho \in \rho_s$. Isso feito, \mathcal{F} pode ser expresso como

$$\mathcal{F}[\rho] = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\nu}{\nu - 1} \left\{ K - \left[\frac{\rho_s}{\mathcal{C}(x)} \right]^{\nu - 1} \right\} \rho \, dx - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{[\mathcal{C}(x)]^{1 - \nu} \rho^{\nu} - \rho}{1 - \nu} dx \\ = \frac{\nu K - 1}{\nu - 1} + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{[\mathcal{C}(x)]^{\nu - 1}} \left(\frac{\rho^{\nu}}{\nu - 1} - \frac{\nu \rho_s^{\nu - 1} \rho}{\nu - 1} \right) dx, \qquad (3.26)$$

em que fizemos algumas manipulações algébricas e usamos a condição de normalização (1.7). Em particular, calcular \mathcal{F} para a solução estacionária ρ_s consiste em substituir ρ por ρ_s na expressão do funcional. Assim, usando a equação (3.26), vemos que

$$\mathcal{F}[\rho_s] = \frac{\nu K - 1}{\nu - 1} + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{[\mathcal{C}(x)]^{\nu - 1}} \left(\frac{\rho_s^{\nu}}{\nu - 1} - \frac{\nu \rho_s^{\nu - 1} \rho_s}{\nu - 1} \right) dx$$

$$= \frac{\nu K - 1}{\nu - 1} - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\rho_s^{\nu}}{[\mathcal{C}(x)]^{\nu - 1}} dx.$$
(3.27)

Empregando as equações (3.26) e (3.27), verificamos que

$$\mathcal{F}[\rho] - \mathcal{F}[\rho_{s}] = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{[\mathcal{C}(x)]^{\nu-1}} \left(\frac{\rho^{\nu}}{\nu-1} - \frac{\nu \rho_{s}^{\nu-1} \rho}{\nu-1} \right) dx + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\rho_{s}^{\nu}}{[\mathcal{C}(x)]^{\nu-1}} dx$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\rho_{s}^{\nu}}{[\mathcal{C}(x)]^{\nu-1}} \left\{ \frac{1}{\nu-1} \left[\left(\frac{\rho}{\rho_{s}} \right)^{\nu} - \nu \frac{\rho}{\rho_{s}} \right] + 1 \right\} dx$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\rho_{s}^{\nu}}{[\mathcal{C}(x)]^{\nu-1}} g\left(\frac{\rho}{\rho_{s}} \right) dx$$
(3.28)

 com

$$g(z) = \frac{z^{\nu} - \nu z}{\nu - 1} + 1, \qquad z \ge 0.$$
(3.29)

Considerando $\nu > 0$, notamos que a função g tem um mínimo global no ponto 1 e, consequentemente, $g(z) \ge g(1) = 0$ para todo $z \ge 0$. Fazendo uso desse fato na equação (3.28), observamos que o lado direito da última igualdade é não-negativo e, portanto, constatamos que

$$\mathcal{F}[\rho] \ge \mathcal{F}[\rho_s] \,. \tag{3.30}$$

A essência do teorema H associado à equação (3.2) é que, se assumirmos que ρ_s é a única solução estacionária da equação (3.2) para $\nu > 0$, em virtude das desigualdades (3.18) e (3.30), toda solução da equação (3.2) tende a ρ_s à medida que t aumenta sem limite, ou seja, ρ_s é a solução de equilíbrio.

3.4 Casos particulares do teorema H

Assim como procedemos no Capítulo 2, partindo de um caso geral e posteriormente obtendo casos específicos, discutiremos a seguir vertentes particulares vinculadas ao teorema H. Começaremos com a difusão usual, passaremos pelas equações de Richardson e de meios porosos e terminaremos no caso que interpola essas duas últimas.

3.4.1 Equação de difusão usual

Para o caso da equação de difusão usual, o coeficiente de difusão \mathcal{D} é uma constante $D \in \mathcal{C}(x) = 1$. Assim, o potencial efetivo (1.53) é reduzido a V(x)/D. Além disso, para a forma entrópica (3.20), verificamos que

$$S = \lim_{\nu \to 1} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\rho^{\nu} - \rho}{1 - \nu} dx$$

= $-\int_{-\infty}^{+\infty} \rho \ln \rho dx$, (3.31)

que apresenta a mesma forma funcional da entropia usual, exceto pela ausência da constante de Boltzmann k_B . Com esses dois resultados, o funcional \mathcal{F} pode ser representado por

$$\mathcal{F} = \frac{1}{D} \int_{-\infty}^{+\infty} V(x) \rho \, dx + \int_{-\infty}^{+\infty} \rho \, \ln \rho \, dx$$
$$= \frac{1}{D} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} V(x) \rho \, dx - T \left(-k_B \int_{-\infty}^{+\infty} \rho \, \ln \rho \, dx \right) \right]. \tag{3.32}$$

Como podemos perceber, salvo pela constante multiplicativa 1/D, esse \mathcal{F} tem a forma da energia livre de Helmholtz ao identificarmos D com k_BT .

3.4.2 Equação de Richardson

No que diz respeito à equação de Richardson, devemos identificar \mathcal{D} com $D|x|^{2-r} \in \mathcal{C}$ com 1. Com isso, o potencial efetivo (1.53) passa a ser escrito como

$$\tilde{\mathcal{V}}(x) = -\int_0^x \frac{F(x')}{D|x'|^{2-r}} \, dx'.$$
(3.33)

Por sua vez, a forma entrópica (3.20) é justamente aquela apresentada na equação (3.31). Consequentemente, usando as equações (3.31) e (3.33), o funcional \mathcal{F} (3.17) passa a ser escrito como

$$\mathcal{F} = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\mathcal{V}}(x) \,\rho \, dx + \int_{-\infty}^{+\infty} \rho \, \ln \rho \, dx. \tag{3.34}$$

Novamente, presenciamos um funcional tipo energia livre de Helmholtz, porém com uma energia interna efetiva devido ao fator $|x|^{2-r}$.

3.4.3 Equação de meios porosos

A equação de meios porosos (1.71) é recuperada da equação geral (3.2) usando $\mathcal{D} = D$ e $\mathcal{C} = 1$. Isso posto, a forma entrópica (3.20) vem a ser expressa por

$$S_{\nu} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\rho^{\nu} - \rho}{1 - \nu} \, dx \,. \tag{3.35}$$

Essa forma entrópica é usualmente chamada de entropia de Tsallis [51], em que o parâmetro ν indica o grau de desvio do caso usual ($\nu \rightarrow 1$). Já o potencial efetivo (1.53), assim como no caso da equação de difusão usual, é simplificado para V(x)/D. Mediante o exposto, a forma funcional \mathcal{F} (3.17) torna-se

$$\mathcal{F} = \frac{1}{D} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} V(x) \,\rho \, dx - D \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\rho^{\nu} - \rho}{1 - \nu} \, dx \right). \tag{3.36}$$

Apesar da forma entrópica (3.35) ser distinta da (3.31), deve ser notado que esse \mathcal{F} é muito semelhante ao do caso da difusão usual se D fosse identificado com $k_B T$. Esse tipo de paralelo tem sido explorado para introduzir formalmente uma temperatura [52].

3.4.4 Equação de difusão interpolante

A difusão anômala que interpola as de Richardson e de meios porosos (1.84) corresponde a $\mathcal{D} = D|x|^{2-r}$ e $\mathcal{C} = 1$ na equação geral (3.2). Nesse caso, o potencial efetivo é dado por (3.33) e a forma entrópica se resume à de Tsallis (3.35). Esses dois últimos resultados, fazem com que o funcional (3.17) seja

$$\mathcal{F} = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\mathcal{V}}(x) \,\rho \, dx - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\rho^{\nu} - \rho}{1 - \nu} \, dx \,. \tag{3.37}$$

Como poderia ser esperado, verificamos que o funcional \mathcal{F} incorpora as mudanças devido a equação de Richardson e aquelas oriundas da equação de meios porosos.

3.5 Forma entrópica generalizada

A forma entrópica S dada na equação (3.20), que tem uma dependência incomum da posição, pode ser vista como uma generalização da forma entrópica de Tsallis (3.35) [7,51], uma vez que a equação (3.35) pode ser obtida da equação (3.20) tomando C(x) = 1. Em particular, como vimos, no caso limite em que $C \to 1$ e $\nu \to 1$, recuperamos a forma entrópica de Shannon (3.31).

As formas entrópicas que acabamos de apresentar podem ser escritas compactamente empregando a função q-logaritmo, definida como

$$\ln_q x = \begin{cases} \ln x & \text{para } q = 1\\ \frac{x^{1-q}-1}{1-q} & \text{para } q \neq 1 \end{cases}.$$
(3.38)

Nesse momento, é pertinente ressaltar que o q-logaritmo é justamente a função inversa da q-exponencial (1.76), na região em que essa última função é bijetora. Portanto, usando o q-logaritmo com $q = 2 - \nu$, temos que a equação (3.20) pode ser escrita como

$$S = -\int_{-\infty}^{+\infty} \rho \ln_{2-\nu} \left[\frac{\rho}{\mathcal{C}(x)} \right] dx \,. \tag{3.39}$$

Em mecânica estatística, um procedimento bem conhecido para obter distribuições de equilíbrio consiste em otimizar a entropia levando em consideração alguns vínculos. Esse procedimento também pode ser implementado considerando outras formas entrópicas; por exemplo, no estudo de sistemas complexos. Para ilustrar essa abordagem, consideramos aqui a otimização da forma entrópica dada na equação (3.39) sujeita aos vínculos

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho \, dx = 1 \quad \text{e} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \rho \, \bar{V}(x) \, dx = U \,, \tag{3.40}$$

que correspondem às equações (1.7) e (3.19), em que U assume um dado valor. Usando o método dos multiplicadores de Lagrange, podemos definir o funcional auxiliar

$$\mathcal{G} = S + \beta \left(U - \int_{-\infty}^{+\infty} \rho \, \bar{V}(x) \, dx \right) + \lambda \left(1 - \int_{-\infty}^{+\infty} \rho \, dx \right), \tag{3.41}$$

em que β e λ são os multiplicadores de Lagrange correspondentes a cada um dos vínculos. A extremização de *S* sujeita aos vínculos (3.40) corresponde a supor que a derivada funcional de \mathcal{G} em relação a ρ é nula, isto é, $\delta \mathcal{G}/\delta \rho = 0$. Assim, temos

$$\frac{\delta \mathcal{G}}{\delta \rho} = \frac{\nu [\mathcal{C}(x)]^{1-\nu} \, \rho^{\nu-1} - 1}{1-\nu} - \beta \bar{V}(x) - \lambda = 0 \,. \tag{3.42}$$

Resolvendo essa equação para ρ , constatamos que

$$\rho(x) = \left[\frac{1+(1-\nu)\lambda}{\nu}\right]_{+}^{1/(\nu-1)} \mathcal{C}(x) \left[1-(\nu-1)\frac{\beta}{1+(1-\nu)\lambda}\bar{V}(x)\right]_{+}^{1/(\nu-1)}.$$
 (3.43)

Se denominarmos o fator

$$N = \left[\frac{1 + (1 - \nu)\lambda}{\nu}\right]_{+}^{1/(\nu - 1)}, \qquad (3.44)$$

vemos que $\rho(x)$ pode ser reescrito como

$$\rho(x) = N \mathcal{C}(x) \left[1 - (\nu - 1) \frac{N^{1-\nu}\beta}{\nu} \bar{V}(x) \right]_{+}^{1/(\nu-1)}, \qquad (3.45)$$

em que N é um fator que é fixado pela condição de normalização. Por sua vez, se usarmos $q = 2 - \nu$, $\tilde{\beta} = N^{1-\nu}\beta/\nu$ e a definição de q-exponencial (1.76), a expressão para $\rho(x)$ é reduzida a

$$\rho(x) = N \mathcal{C}(x) \exp_{2-\nu}[-\tilde{\beta}\bar{V}(x)]. \qquad (3.46)$$

Como percebemos, esse $\rho(x)$ corresponde a uma distribuição de Boltzmann-Gibbs generalizada. Notamos que essa distribuição coincide com a solução estacionária dada na equação (3.10).

Se estivéssemos considerado apenas o vínculo de normalização, seria equivalente a empregar $\beta = 0$ em \mathcal{G} . Nesse caso, todos os cálculos para obter o $\rho(x)$ dado na equação (3.46) deveriam ser feitos tomando $\beta = 0$. Como $\tilde{\beta} = N^{1-\nu}\beta/\nu \in \beta = 0$, segue que $\tilde{\beta} = 0$ e, consequentemente, a equação (3.46) resume-se a

$$\rho(x) = N \mathcal{C}(x), \qquad (3.47)$$

desde que $\mathcal{C}(x)$ possa ser normalizado. Esse resultado recupera o caso de equiprobabilidade quando $\mathcal{C}(x)$ é uma função constante em um intervalo compacto.

A seguir, faremos uma observação a respeito da forma entrópica (3.39). Nesse sentido, notamos inicialmente que, relacionada à entropia de Shannon, tem-se a entropia relativa de Kullback-Leibler, também conhecida como divergência de Kullback-Leibler [53]. Ela é definida por

$$D_{KL}(\rho||\zeta) = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) \ln \frac{\rho(x)}{\zeta(x)} dx, \qquad (3.48)$$

em que $\rho(x)$ e $\zeta(x)$ são duas distribuições de probabilidade. Se $\rho(x) = \zeta(x)$, $D_{KL}(\rho||\zeta)$ será nulo. Devido a essa propriedade, apesar de $D_{KL}(\rho||\zeta)$ não ser simétrico pela troca de $\rho(x)$ e $\zeta(x)$, essa entropia relativa também é vista como uma distância entre as duas distribuições de probabilidade¹. Ao comparar a equação (3.48) com a equação (3.39) com $\nu \to 1$, concluímos que -S tem a forma da entropia relativa de Kullback-Leibler. No contexto da entropia de Tsallis, também foi definida uma entropia relativa [54]. Essa nova entropia relativa é obtida ao substituir a função logaritmo pela função q-logaritmo. Assim, o -S, apresentado na equação (3.39), tem justamente a forma de uma entropia relativa generalizada. Para que -S possa ser visto como uma entropia relativa, $\mathcal{C}(x)$ deve ser pensado como uma distribuição de probabilidade. Assim, vemos que, a depender do contexto, $\mathcal{C}(x)$ poderia ser visto como uma densidade de probabilidade (equações (3.39) e (3.47)) ou como uma densidade normalizada de estados em conexão com a equação (3.10).

Deve ser colocado em evidência que os termos do funcional \mathcal{F} podem ser arranjados de diferentes maneiras. Esse fato aponta na direção de outras definições de energia interna e forma entrópica. Para explorar essa possibilidade, note que as equações (3.17), (3.19) e (3.20) conduzem a

$$\mathcal{F} = \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{V}(x) \,\rho \,dx - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{[\mathcal{C}(x)]^{1-\nu} \rho^{\nu} - \rho}{1-\nu} \,dx \,, \tag{3.49}$$

que pode ser reescrito como

$$\mathcal{F} = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\bar{V}(x) \,\rho - \rho^{\nu} \ln_{\nu} \mathcal{C}(x) \right) dx - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\rho^{\nu} - \rho}{1 - \nu} \, dx \,. \tag{3.50}$$

Esse resultado baseia-se na identidade

$$\frac{[\mathcal{C}(x)]^{1-\nu}\rho^{\nu}-\rho}{1-\nu} = \frac{\rho^{\nu}-\rho}{1-\nu} + \rho^{\nu} \frac{[\mathcal{C}(x)]^{1-\nu}-1}{1-\nu}$$
(3.51)

e no uso da definição de q-logaritmo (3.38). Assim, constatamos que

$$\mathcal{F} = \mathcal{U} - S_{\nu} \,, \tag{3.52}$$

em que S_{ν} é a forma entrópica de Tsallis (3.35) e

$$\mathcal{U} = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\bar{V}(x) \,\rho - \rho^{\nu} \ln_{\nu} \mathcal{C}(x) \right) dx \,. \tag{3.53}$$

Uma comparação direta de $U \in \mathcal{U}$ mostra que esses dois tipos de energia interna coincidem quando $\mathcal{C}(x) = 1$. Da mesma forma, $S \in S_{\nu}$ são iguais nessa condição. Por outro lado, se $\mathcal{C}(x) \neq 1$, $U \in \mathcal{U}$ diferem-se pelo termo

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho^{\nu} \left(-\ln_{\nu} \mathcal{C}(x) \right) dx \,. \tag{3.54}$$

Formalmente, esse termo pode ser pensado como um tipo de média do potencial $-\ln_{\nu} C$ cuja densidade de probabilidade é ρ^{ν} ao invés de ρ . Essa espécie de média tem sido

$$D_{KL}^{S}(\rho||\zeta) = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) \ln \frac{\rho(x)}{\zeta(x)} dx + \int_{-\infty}^{\infty} \zeta(x) \ln \frac{\zeta(x)}{\rho(x)} dx$$

para definir uma entropia relativa simétrica.

¹Para contornar essa dificuldade, é comum considerar

empregada em vários trabalhos relacionados a mecânica estatística não extensiva de Tsallis [7, 51]. Apesar da sua simplicidade, essa espécie de média traz consigo um aspecto indesejado, pois o valor médio da unidade não é igual à unidade em geral. As duas maneiras de decompor o funcional \mathcal{F} apontam, portanto, para a necessidade da introdução de termos não usuais. Se nos retermos a uma energia interna convencional, os termos remanescentes compõem uma forma entrópica não usual (equação (3.39)) dependente da posição. Por outro lado, se consideramos a forma entrópica de Tsallis (3.35) no funcional \mathcal{F} , somos conduzidos a uma energia interna não convencional, envolvendo uma pseudomédia que não retorna 1 quando ela é aplicada em 1.

Por fim, analisaremos o extremo da forma entrópica de Tsallis S_{ν} , equação (3.35), sujeita ao vínculo de \mathcal{U} constante e ao vínculo da normalização de ρ . Nesse sentido, introduziremos a função auxiliar

$$\mathcal{L} = S_{\nu} + \beta \left[\mathcal{U} - \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\bar{V}(x) \rho - \rho^{\nu} \ln_{\nu} \mathcal{C}(x) \right) dx \right] + \lambda \left(1 - \int_{-\infty}^{+\infty} \rho \, dx \right), \qquad (3.55)$$

em que β e λ são multiplicadores de Lagrange. A seguir, usando $\delta \mathcal{L}/\delta \rho = 0$, constatamos que

$$\frac{\nu \,\rho^{\nu-1} - 1}{1 - \nu} - \beta \bar{V} + \nu \beta \rho^{\nu-1} \ln_{\nu} \mathcal{C}(x) - \lambda = 0.$$
(3.56)

Assim, resolvendo essa equação para ρ , somos levados a

$$\rho(x) = N \left[1 + (1-\nu)\tilde{\beta}\bar{V}(x) \right]_{+}^{1/(\nu-1)} \left[1 + (1-\nu)\beta \ln_{\nu} C(x) \right]_{+}^{1/(1-\nu)} \\ = N \exp_{2-\nu} \left(-\tilde{\beta}\bar{V}(x) \right) \exp_{\nu} \left[\beta \ln_{\nu} C(x) \right] , \qquad (3.57)$$

em que utilizamos a definição de q-exponencial, equação (1.76), $N = \{[1+(1-\nu)\lambda]/\nu\}^{1/(\nu-1)}_+$ é uma constante de normalização e $\tilde{\beta} = N^{1-\nu}\beta/\nu$. A comparação desse $\rho(x)$ com aqueles nas equações (3.10) e (3.46) mostra que ele não é idêntico a esses dois últimos. Isto indica que a maneira de decompor o funcional \mathcal{F} em uma energia interna e uma forma entrópica deveria ser pensada com cuidado. Em particular, nossas opções de decomposição não podem ser quaisquer se desejamos ter uma concordância entre a solução estacionária e a distribuição que otimiza a forma entrópica. Nessa direção, a decomposição $\mathcal{F} = U - S$ parece ser uma melhor escolha que $\mathcal{F} = \mathcal{U} - S_{\nu}$.

Considerações finais

Neste trabalho, investigamos algumas equações de Fokker-Planck generalizadas. Começamos este estudo revendo alguns aspectos gerais da equação de difusão usual. Em particular, para o caso sem força externa, focamos na solução gaussiana dependente do tempo correspondente a uma condição inicial concentrada na origem. A seguir, na presença de uma força externa confinante, a solução estacionária foi nosso objeto de atenção. Essa discussão prévia serviu de base para avançarmos no estudo de equações de difusão generalizadas. A primeira equação de difusão anômala considerada foi a de Richardson, que contém um coeficiente de difusão proporcional a uma potência do módulo da posição. Nesse caso, refizemos a mesma análise que foi feita para o caso da difusão usual. Essa análise forneceu uma indicação de como o comportamento anômalo manifesta-se na solução dependente do tempo e na estacionária via gaussianas alongadas. Outro tipo de difusão anômala pontuada foi a de meios porosos. Nessa vertente, mais uma vez, colocamos nossa atenção nas soluções dependente do tempo e estacionária, ressaltando o papel de q-gaussianas. Visando fornecer bases para os nossos estudos subsequentes, em um terceiro exemplo de difusão anômala, nos voltamos para uma situação interpolante das equações de Richardson e de meios porosos. Constatamos que as soluções temporal e estacionária são da forma de q-gaussianas alongadas. Além disso, nesses estudos introdutórios, pontuamos que equações de difusão anômala podem, formalmente, ser vistas como equações de Fokker-Planck generalizadas se a função de distribuição considerada é vista como uma distribuição de probabilidade.

Na etapa seguinte de nossos estudos envolvendo equações de Fokker-Planck generalizadas, nos direcionamos a uma situação mais abrangente que os casos anteriores. Mais especificamente, partimos de uma solução temporal proporcional a uma potência da posição vezes uma q-gaussiana alongada para identificar uma equação de Fokker-Planck generalizada que tem aquelas citadas no parágrafo anterior como casos particulares. Além de obter essa última equação, calculamos a norma e os momentos dessa solução geral, assim como as condições sobre seus parâmetros para a existência desses objetos. Também trilhamos, a partir da solução geral, o caminho para várias soluções particulares e as equações de Fokker-Planck generalizadas correspondentes. Exploramos ainda, em função dos parâmetros, o comportamento do segundo momento tencionando classificar os processos em super e subdifusivos. Ressaltamos, por fim, que a solução geral em questão tem como casos particulares um grande conjunto de distribuições de probabilidade. Por exemplo, as distribuições de probabilidade exponencial, q-exponencial, gaussiana, gaussiana alongada, q-gaussiana, gama, gama generalizada, q-gama, q-gama generalizada, beta, Weibull e q-Weibull.

Na terceira etapa de nosso estudo, que é a sua parte mais inovativa, investigamos uma ampla família de equações generalizadas de Fokker-Planck que depende de três funções genéricas da posição a serem fixadas. Duas dessas funções, $\mathcal{C}(x) \in \mathcal{D}(x)$, estão no termo difusivo e a outra refere-se à força externa F(x). Essa família contém todos os casos anteriores como particulares, em especial o de Richardson e o de meios porosos. Devido à generalidade dessa equação, o eixo da nossa análise está ligado a soluções estacionárias. Mostramos que cada membro dessa família de equações tem uma solução estacionária se o termo de força externa for confinante. Além disso, a solução estacionária depende de $\mathcal{C}(x)$ e de um potencial efetivo $\bar{V}(x)$ que vincula-se a $\mathcal{C}(x)$, $F(x) \in \mathcal{D}(x)$. Essa dependência faz com que $\mathcal{C}(x) \in \mathcal{D}(x)$ possam atenuar ou pronunciar o aspecto confinante de F(x). Além disso, em virtude da dependência funcional da solução estacionária em termos dessas três funções genéricas, diferentes membros da família de equações de Fokker-Planck generalizada em questão podem ter a mesma solução estacionária. Assim como no caso das soluções temporais mencionadas no parágrafo anterior, as soluções estacionárias contém um conjunto ainda mais amplo de distribuições bem conhecidas como casos particulares.

Além de encontrar soluções estacionárias para a família proposta de equações generalizadas de Fokker-Planck, verificamos um comportamento temporal de suas soluções. Esse padrão é ditado por um teorema H para cada membro da família. Esse teorema H, nos permite dizer que, se uma equação de Fokker-Planck generalizada tem uma solução estacionária única ρ_s , então qualquer solução (bem comportada) dessa equação tende a ρ_s conforme o tempo aumenta sem limite. Assim, ρ_s acaba sendo a solução de equilíbrio. Para verificar o teorema H, consideramos um funcional do tipo energia livre, $\mathcal{F} = U - S$, como é comum em várias pesquisas sobre o tema. Em nosso estudo, U pode ser visto como um tipo de energia interna e S como uma possível forma entrópica. Particularmente, Upode ser a média do potencial efetivo V(x) e S uma forma entrópica que generaliza a de Tsallis. Essa forma entrópica apresenta uma dependência não usual na posição. Por sua vez, a otimização dessa forma entrópica, levando em consideração uma condição de normalização e um valor constante para U, também resulta na solução estacionária ρ_s . Um outro fato sobre a forma entrópica S é que, curiosamente, -S tem a forma de uma entropia relativa generalizada. Esse fato aponta para a possibilidade de novas investigações ou aplicações fora do contexto do teorema H e das equações de Fokker-Planck; por exemplo, no estudo de sistemas complexos. É digno de nota que há outras maneiras possíveis de definir $U \in S \in \mathcal{F}$. Em particular, um outro modo de definir essas duas grandezas consiste em identificar S como a forma entrópica de Tsallis e U composto por dois termos. Um deles corresponde ao antigo U e o outro contém um comportamento não linear na densidade de probabilidade e, consequentemente, não pode ser visto como um valor médio tradicional. Esse estudo do teorema H indica, portanto, ou a consideração de uma forma entrópica que depende da posição ou uma forma energética que não é uma média usual. Entretanto, em contraste com a primeira forma entrópica, a otimização da forma entrópica de Tsallis conduz a uma distribuição que não é consistente com a solução estacionária. Assim, a maneira de decompor o funcional \mathcal{F} em termos de uma energia interna e uma forma entrópica pode levar a resultados indesejáveis.

Situações mais gerais do que a discutida neste trabalho podem ser conduzidas con-

siderando, por exemplo, que as funções \mathcal{D} e \mathcal{C} dependem explicitamente da distribuição ρ além da posição. Nesse caso, podemos esperar que outros potenciais efetivos e outras formas entrópicas relativas possam surgir. Um estudo mais ambicioso desses dois aspectos poderia ser baseado em generalizações da equação de Fokker-Planck envolvendo adicionalmente derivadas fracionárias. Além disso, em princípio, todas essas investigações possíveis também poderiam ser estendidas a mais de uma dimensão.

Apêndice A

Algumas distribuições de probabilidade

Ao longo deste trabalho, está presente uma variedade de distribuições de probabilidade. Neste apêndice, apresentaremos brevemente algumas delas. Basicamente, uma densidade de probabilidade p(x) deve ser positiva para qualquer x dentro do intervalo que ela está definida. Além disso, p(x) deve satisfazer a condição de normalização

$$\int_{x_1}^{x_2} p(x) \, dx = 1, \tag{A.1}$$

em que x_1 e x_2 delimitam a região em que p(x) está definida.

A.1 Distribuição gaussiana

A primeira distribuição de probabilidade que consideraremos é a gaussiana:

$$p(x) = \sqrt{\frac{1}{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) \qquad (-\infty < x < \infty; \ \sigma^2 > 0),$$
(A.2)

em que os parâmetros $\mu \in \sigma$ correspondem ao valor médio e ao desvio padrão de x, respectivamente. A forma dessa distribuição relembra um sino cuja posição do topo corresponde a $x = \mu$. O fator que precede a exponencial, a constante de normalização, segue da integral gaussiana

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-ax^2\right) dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \qquad (\operatorname{Re}(a) > 0). \tag{A.3}$$

A.2 Distribuição gama

Antes de apresentar a distribuição gama, teceremos alguns comentários sobre a função gama, $\Gamma(z)$. Essa função pode ser vista como uma generalização da função fatorial. Nesse trabalho, será usada a representação integral

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty x^{z-1} \exp(-x) \, dx \qquad (\operatorname{Re}(z) > 0). \tag{A.4}$$

Várias integrais podem ser calculadas em termos dessa função, por exemplo, usando $x = ay^r$ (portanto, $y = a^{-1/r}x^{1/r}$), verifica-se que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-a|y|^{r}) dy = 2 \int_{0}^{\infty} \exp(-ay^{r}) dy$$
$$= \frac{2}{r a^{1/r}} \int_{0}^{\infty} x^{1/r - 1} \exp(-x) dx$$
$$= \frac{2 \Gamma(1/r)}{r a^{1/r}},$$
(A.5)

em que foi empregada a equação (A.4) com z = 1/r.

A partir da integral (A.5), podemos considerar a distribuição gaussiana alongada (também conhecida como distribuição de Subbotin)

$$p(x) = \frac{r a^{1/r}}{2 \Gamma(1/r)} \exp(-a|x|^r) \qquad (-\infty < x < \infty; \ a > 0).$$
(A.6)

A denominação alongada deve-se ao fato de r < 2 corresponder a uma distribuição de probabilidade com cauda mais longa do que a da gaussiana; se r > 2, tem-se uma cauda mais curta. Se r = 1, a equação (A.6) é chamada de distribuição de Laplace. Se a distribuição (A.6) é limitada a $x \ge 0$, ela é comumente denominada de distribuição exponencial alongada, devido ao caso 0 < r < 1. No caso r = 1, com $x \ge 0$, obtemos a distribuição exponencial

$$p(x) = a \exp(-ax)$$
 $(x \ge 0; a > 0).$ (A.7)

A partir do integrando em (A.4) e usando o resultado dessa integral, segue a distribuição gama

$$p(x) = \frac{w^z}{\Gamma(z)} x^{z-1} \exp(-wx) \qquad (x \ge 0; \ w > 0), \tag{A.8}$$

em que w é um parâmetro positivo. Essa distribuição apresenta uma cauda alongada e um máximo. Além disso, ela é nula na origem se z > 1 e diverge na origem se 0 < z < 1. Quando z = 1 recaímos na distribuição exponencial (A.7) novamente.

A distribuição de probabilidade

$$p(x) = \frac{r w^{z/r}}{\Gamma(z/r)} x^{z-1} \exp(-wx^r) \qquad (x \ge 0; \ z > 0, \ w > 0 \ e \ r > 0)$$
(A.9)

é uma distribuição gama generalizada, pois quando r = 1 a distribuição gama é recuperada. O fator de normalização é obtido de modo análogo ao feito na equação (A.5).

A.3 Distribuição beta

Outra função relevante na nossa discussão é a função beta, B(y, z). Essa função, que se relaciona com a função gama via a identidade

$$B(y,z) = \frac{\Gamma(y)\Gamma(z)}{\Gamma(y+z)},$$
(A.10)

pode ser escrita via as representações integrais

$$B(y,z) = \int_0^1 x^{y-1} (1-x)^{z-1} dx$$

= $2 \int_0^{\pi/2} (\sin \theta)^{2y-1} (\cos \theta)^{2z-1} d\theta$, (A.11)

desde que $\operatorname{Re}(y) > 0$ e $\operatorname{Re}(z) > 0$. Para obter a segunda representação integral a partir da primeira, usa-se uma mudança de variável de x para θ , em que $x = \operatorname{sen}^2 \theta$ e $dx = 2 \operatorname{sen} \theta \cos \theta \, d\theta$.

Assim como no contexto da função gama, tem-se uma distribuição relacionada com a função beta. Nesse caso, a distribuição de probabilidade beta é dada por

$$p(x) = \frac{w^y}{B(y,z)} x^{y-1} (1 - wx)^{z-1} \qquad (0 \le x \le 1/w; \ w > 0), \tag{A.12}$$

que se reduz à distribuição beta padrão quando o parâmetro positivo w é igual a 1. O fator B(y, z) em p(x) garante a normalização, como se conclui a partir da primeira igualdade da equação (A.11).

A.4 Distribuição de Weibull

Um exemplo de distribuição de probabilidade que comumente lembra a forma da distribuição gama, porém quantitativamente diferente, é a distribuição de Weibull. Ela é definida por

$$p(x) = \frac{r x^{r-1}}{w^r} \exp\left(-\frac{x^r}{w^r}\right) \qquad (x \ge 0; \ w > 0, \ r > 0).$$
(A.13)

Deve ser notado que esse p(x) é um caso particular da distribuição gama generalizada, pois z = r na equação (A.9) conduz à equação (A.13); essa identificação é completa se o parâmetro w é redefinido. A normalização da distribuição de Weibull é diretamente verificada por meio de uma mudança de variáveis ditada por $y = x^r/w^r$. De fato,

$$\int_0^\infty \frac{r x^{r-1}}{w^r} \exp\left(-\frac{x^r}{w^r}\right) dx = \int_0^\infty \exp(-y) dy$$

= 1. (A.14)

A.5 q-distribuições

No Capítulo 1, tivemos a oportunidade de introduzir a função q-exponencial, definida na equação (1.76). A partir dessa definição, podemos pensar em generalizar distribuições que apresentam uma função exponencial em sua definição, bastando substituir a exponencial pela q-exponencial. Nessa possibilidade, o parâmetro q fornece uma indicação de quanto a q-exponencial desvia da exponencial (que corresponde ao limite $q \rightarrow 1$ da qexponencial). Nesse contexto, um primeiro exemplo é o caso da distribuição q-exponencial, dada por

$$p(x) = (2-q) a [1-(1-q)ax]_{+}^{1/(1-q)}$$

= (2-q) a exp_q (-ax) (a > 0). (A.15)

Essa distribuição está corretamente normalizada, pois

$$\int_0^\infty \left[1 - (1 - q)ax\right]_+^{1/(1 - q)} dx = \frac{1}{(2 - q)a} \qquad (2 > q).$$
(A.16)

Ressaltamos que essa integral não é divergente somente se 2 > q, ou seja, a distribuição q-exponencial é normalizável somente se 2 > q. O suporte dessa distribuição é $0 \le x \le 1/[(1-q)a]$ se q < 1 e $x \ge 0$ se q > 1.

Outro exemplo é o da distribuição q-gaussiana, isto é,

$$p(x) = N \exp_q \left(-ax^2\right). \tag{A.17}$$

Ao invés de calcularmos o fator de normalização, faremos apenas algumas observações. N é um fator de normalização que depende de q e a. Essa distribuição é normalizável somente se q < 3. A região que está definida essa distribuição (o seu suporte) corresponde a $|x| \leq [(1-q)a]^{1/2}$ ($|x| < \infty$) se q < 1 ($q \geq 1$). Nesse contexto, a distribuição q-gaussiana alongada é

$$p(x) = N \exp_q(-a|x|^r). \tag{A.18}$$

O fator N é uma função de q, $r \in a$. Devemos ter q < r + 1 para que essa distribuição seja normalizável. A exemplo do caso anterior, esse último p(x) tem suporte compacto para $q < 1 \in x$ pode ser qualquer para q > 1.

A distribuição q-gama é dada por

$$p(x) = Nx^{z-1} \exp_q(-wx). \tag{A.19}$$

O fator de normalização N é uma função de q, $z \in w$. Essa distribuição é normalizável somente se q < (z+1)/z. Assim como no caso da q-exponencial, o suporte desse p(x) é $0 \le x \le 1/[(1-q)w]$ se q < 1 e $x \ge 0$ se q > 1. É curioso notar que a distribuição beta tem a forma de uma distribuição q-gama, pois $(1-wx)^{z-1}$ pode ser escrito como $[1-(1-q)ax]^{1/(1-q)}$ com w = (1-q)a e z - 1 = 1/(1-q).

A distribuição q-Weibull é expressa como [55]

$$p(x) = Nx^{r-1} \exp_q\left(-\frac{x^r}{w^r}\right) \qquad (x \ge 0; \ w > 0, \ r > 0).$$
(A.20)

Além disso, a distribuição q-gama generalizada é definida por

$$p(x) = Nx^{z-1} \exp_q(-wx^r). \tag{A.21}$$

Quando z = r essa última distribuição se reduz a q-Weibull. Assim como nos casos anteriores envolvendo q-exponencial, há presença de suporte compacto se q < 1 e $x \ge 0$ ocorre quando q > 1. Os fatores de normalização dessas duas últimas distribuições, assim como outras contendo uma q-exponencial, não foram calculados neste apêndice, pois têm seus cálculos feitos no corpo desse trabalho. Deve ser ressaltado ainda que a distribuição de probabilidade dependente do tempo mais geral analisada nesse trabalho tem a forma de uma q-gama generalizada.

Apêndice B

Condições de existência de norma e momentos

A seguir, vamos expandir a análise feita na seção (2.2). Nosso intuito é obter as condições para que a função ρ tenha norma e momentos até a ordem n. Essa análise será dividida em quatro partes a depender dos parâmetros A e r: A > 0 e r > 0; A > 0 e r < 0; A < 0 e r < 0; A < 0 e r < 0.

B.1 A > 0 **e** r > 0

Nesse caso, a expressão para a norma e momentos de ordem n é dada pela equação (2.34), isto é,

$$\langle |x|^n \rangle = \frac{2Nt^{ns/r}}{|r|A^{l(n)}} B\left[l(n), c+1\right]$$

Assim, surgem as condições l(n) > 0 e c + 1 > 0 (logo, c < -1), que correspondem a cada um dos argumentos da função beta serem positivos. Como r é positivo e l(n) = (n + a + 1)/r, podemos ver que l(n) é uma função crescente em relação a n, ou seja,

$$l(n+1) > l(n) > \dots > l(0).$$
 (B.1)

Além disso, de l(n) > 0 para todo n > 0, temos a desigualdade l(0) > 0 que, juntamente com c < -1, nos garantem a existência de norma e de quaisquer momentos com n > 0. Note que l(0) > 0 implica em (a + 1)/r > 0 e, portanto, a > -1.

B.2 A > 0 e r < 0

Para essa possibilidade, a expressão para a norma e momentos também é dada pela equação (2.34) e, portanto, l(n) > 0 e c + 1 > 0. Nesse caso, porém, l(n) é uma função decrescente, pois r < 0, ou seja,

$$l(n+1) < l(n) < \dots < l(0)$$
 (B.2)

para todo $n \ge 0$. Portanto, as desigualdades l(n) > 0 e c > -1 garantem a existência de norma e momentos de ordem menor ou igual à n. Como r < 0, podemos reescrever a desigualdade l(n) > 0 como (n + a + 1)/r > 0 e, desse modo, a < -n - 1.

B.3 A < 0 e r > 0

Nesse cenário, a expressão para a norma e momentos é dada pela equação (2.37), ou seja,

$$\langle |x|^n \rangle = \frac{2Nt^{ns/r}}{|r||A|^{l(n)}} B[l(n), -l(n) - c],$$

em que l(n) > 0 e -l(n) - c > 0. A primeira desigual dade se resume à l(0) > 0, pois l(n) é uma função crescente. A outra exigência, -c > l(n), conjuntamente com o fato de que l(n) é uma função crescente, nos proporciona

$$-c > l(n) > l(n-1) > \dots > l(0).$$
 (B.3)

Logo, as desigualdades $-c > l(n) \in l(0) > 0$ garantem a existência da norma de ρ e de todos os seus momentos até a ordem n. Podemos ainda observar que l(n) = l(0) + n/r e -c > l(n) conduzem a

$$-c > l(n) \Rightarrow -c > l(0) + n/r.$$
 (B.4)

Além disso, esse resultado juntamente com l(0) > 0 leva à

$$-c - n/r > l(0) > 0.$$
 (B.5)

Como c+n/r < -l(0) < 0, após algumas manipulações, chegamos em rc+n+1 < -a < 1.

B.4 A < 0 e r < 0

Como esse caso é análogo ao anterior, deve-se ter l(n) > 0 e, por consequência, l(0) + n/r > 0 (pois l(n) = l(0) + n/r). A outra condição é -c > l(n), que pode ser expressa por c < -l(0) graças ao fato de r < 0 tornar a função l(n) decrescente. Unindo essas duas últimas condições, obtemos

$$c < -l(0) < n/r. \tag{B.6}$$

Por fim, substituindo l(0) nessa última desigualdade, temos rc + 1 > -a > n + 1.

Apêndice C

Relação entre os parâmetros da equação de difusão e da sua solução

Neste apêndice, visando apresentar de forma conjunta alguns dos principais resultados do Capítulo 2, resumiremos como os parâmetros da equação geral (2.27) podem ser escritos em termos dos parâmetros da solução geral (2.16) e vice-versa. Também faremos o mesmo para o caso exponencial, equações (2.40) e (2.39).

C.1 Caso geral

Nesse caso, temos a equação (2.27), que é dada por

$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial}{\partial x} \left[|x|^{a+\theta} t^{\delta} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\rho(x,t)}{|x|^{a}} \right)^{\nu} \right], \tag{C.1}$$

e sabemos que a sua solução (2.16) é

$$\rho(x,t) = N \frac{|x|^a}{t^{(a+1)s/r}} \left[1 - A \frac{|x|^r}{t^s} \right]_+^c.$$
 (C.2)

Assim, usando as equações (2.9), (2.12) e (2.23), os parâmetros da equação diferencial em termos dos parâmetros de ρ são

$$\nu = \frac{c+1}{c}$$
, $\theta = 2-r$ e $\delta = s - 1 + \frac{(a+1)s}{rc}$. (C.3)

Por outro lado, os parâmetros de ρ podem ser escritos a partir dos parâmetros da equação diferencial, isto é,

$$c = \frac{1}{\nu - 1},$$
 $r = 2 - \theta$ e $s = \frac{(\delta + 1)(2 - \theta)}{1 - \theta + a(\nu - 1) + \nu}.$ (C.4)

Por fim, reescrevemos as equações (2.14) e (2.38):

$$D = \frac{s}{AN^{1/c}(c+1)r^2}$$
(C.5)

 \mathbf{e}

$$N = \begin{cases} \frac{|r||A|^{l(0)}}{2B(l(0), c+1)} & \text{se } A > 0, \ c > -1 \ \text{e} \ c \neq 0\\ \frac{|r||A|^{l(0)}}{2B(l(0), -l(0) - c)} & \text{se } A < 0 \ \text{e} \ c < -l(0) \end{cases}$$
(C.6)

em que l(0) = (a+1)/r.

C.2 Caso exponencial

No caso exponencial, a equação de difusão (2.40) é

$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial}{\partial x} \left[|x|^{a+\theta} t^{s-1} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\rho(x,t)}{|x|^a} \right) \right], \tag{C.7}$$

e o correspondente ρ (2.39) é

$$\rho(x,t) = N \frac{|x|^a}{t^{(a+1)s/r}} \exp\left(-\beta \frac{|x|^r}{t^s}\right).$$
(C.8)

Os parâmetros da equação diferencial, em termos dos parâmetros de ρ , são dados por

$$\theta = 2 - r$$
 e $D = s/\beta r^2$. (C.9)

Por sua vez, os parâmetros de $\rho,$ a partir dos parâmetros da equação diferencial, são

$$r = 2 - \theta$$
 e $\beta = \frac{s}{Dr^2}$. (C.10)

Com a equação (2.44) e com os resultados escritos acima é possível encontrar N, isto é,

$$N = \frac{|r|\beta^{l(0)}}{2\Gamma(l(0))},$$
 (C.11)

em que l(0) = (a+1)/r.

Referências Bibliográficas

- [1] Gallavotti, G.: Statistical mechanics: A short treatise. Springer-Verlag, Berlin, 1999.
- [2] Durrett, R.: Probability: Theory and examples. Cambridge University Press, New York, 4^a edição, 2010.
- [3] Hempfing, A.: What's left after the hype? An empirical approach comparing the distributional properties of traditional and virtual currency exchange rates. PLOS ONE, 14(7):1–21, 2019.
- [4] Subbotin, M. T.: On the law of frequency of error. Matematicheskii Sbornik, 31(2):296–301, 1923.
- [5] Belikov, A. V.: The number of key carcinogenic events can be predicted from cancer incidence. Scientific Reports, 7:12170, 2017.
- [6] Laherrère, J. e D. Sornette: Stretched exponential distributions in nature and economy: "Fat tails" with characteristic scales. The European Physical Journal B -Condensed Matter and Complex Systems, 2(4):525–539, 1998, ISSN 1434-6036.
- [7] Tsallis, C.: Introduction to nonextensive statistical mechanics: Approaching a complex world. Springer, New York, 2009.
- [8] Anastasiadis, A. D., M. P. de Albuquerque, M. P. de Albuquerque e D. B. Mussi: *Tsallis q-exponential describes the distribution of scientific citations: A new characterization of the impact.* Scientometrics, 83(1):205–218, 2010, ISSN 1588-2861.
- [9] Alonso-Marroquin, F., K. Arias-Calluari, M. Harré, M. N. Najafi e H. J. Herrmann: q-Gaussian diffusion in stock markets. Phys. Rev. E, 99:062313, 2019.
- [10] Osorio, R., L. Borland e C. Tsallis: Distributions of high-frequency stock market observables. Em Gell-Mann, M. e C. Tsallis (editores): Nonextensive entropy – Interdisciplinary applications, páginas 321–334. Oxford University Press, New York, 2004.
- [11] Souza, J. de, L. Moyano e S. M. Duarte Queirós: On statistical properties of traded volume in financial markets. Eur. Phys. J. B, 50:165–168, 2006.

- [12] Cortines, A. A. G., R. Riera e C. Anteneodo: Measurable inhomogeneities in stock trading volume flow. EPL (Europhysics Letters), 83(3):30003, 2008.
- [13] Duarte Queirós, S. M.: Trading volume in financial markets: An introductory review. Chaos, Solitons & Fractals, 88:24 – 37, 2016, ISSN 0960-0779. Complexity in Quantitative Finance and Economics.
- [14] Tsallis, C. e U. Tirnakli: Predicting COVID-19 Peaks Around the World. Frontiers in Physics, 8:217, 2020, ISSN 2296-424X.
- [15] Richardson, L. F. e G. T. Walker: Atmospheric diffusion shown on a distanceneighbour graph. Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character, 110(756):709–737, 1926.
- [16] Sicuro, G., P. Rapčan e C. Tsallis: Nonlinear inhomogeneous Fokker-Planck equations: Entropy and free-energy time evolution. Phys. Rev. E, 94:062117, 2016.
- [17] Plastino, A. R. e A. Plastino: Non-extensive statistical mechanics and generalized Fokker-Planck equation. Physica A, 222:347, 1995.
- [18] Malacarne, L. C., R. S. Mendes, I. T. Pedron e E. K. Lenzi: Nonlinear equation for anomalous diffusion: Unified power-law and stretched exponential exact solution. Phys. Rev. E, 63:030101, 2001.
- [19] Vieira, D. S., J. M. E. Riveros, M. Jauregui e R. S. Mendes: Anomalous diffusion behavior in parliamentary presence. Phys. Rev. E, 99:042141, 2019.
- [20] Metzler, R. e J. Klafter: The restaurant at the end of the random walk: Recent developments in the description of anomalous transport by fractional dynamics. Journal of Physics A: Mathematical and General, 37(31):R161–R208, 2004.
- [21] A. T. Silva, E. K. Lenzi, L. R. Evangelista, M. K. Lenzi e L. R. da Silva: Fractional nonlinear diffusion equation, solutions and anomalous diffusion. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 375(1):65-71, 2007, ISSN 0378-4371. https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378437106009848.
- [22] Dubkov, A. A., B. Spagnolo e V. V. Uchaikin: Lévy flight superdiffusion: An introduction. International Journal of Bifurcation and Chaos, 18(09):2649–2672, 2008.
- [23] H. Spohn: Surface dynamics below the roughening transition. J. Phys. I France, 3(1):69-81, 1993.
- [24] Berryman, J. G.: Evolution of a stable profile for a class of nonlinear diffusion equations with fixed boundaries. Journal of Mathematical Physics, 18(11):2108–2115, 1977.
- [25] Stephenson, J.: Some non-linear diffusion equations and fractal diffusion. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 222(1):234 247, 1995, ISSN 0378-4371.
- [26] Kolomeisky, E. B. e J. P. Straley: Relaxation of charge in monolayer graphene: Fast nonlinear diffusion versus Coulomb effects. Phys. Rev. B, 95:045415, 2017.

- [27] Risken, H.: The Fokker-Planck equation: Methods of solution and applications. Springer, Berlin, 2^a edição, 1996.
- [28] Shiino, M.: Free energies based on generalized entropies and H-theorems for nonlinear Fokker-Planck equations. Journal of Mathematical Physics, 42(6):2540-2553, 2001. https://doi.org/10.1063/1.1367327.
- [29] Kaniadakis, G.: H-theorem and generalized entropies within the framework of nonlinear kinetics. Physics Letters A, 288(5):283-291, 2001, ISSN 0375-9601. https: //www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375960101005436.
- [30] Frank, T. D.: Nonlinear Fokker-Planck equations: Fundamentals and applications. Springer, Berlin, 2005.
- [31] Schwämmle, V., E. M. F. Curado e F. D. Nobre: A general nonlinear Fokker-Planck equation and its associated entropy. Eur. Phys. J. B, 58:159, 2007.
- [32] Schwämmle, V., F. D. Nobre e E. M. F. Curado: Consequences of the H theorem from nonlinear Fokker-Planck equations. Phys. Rev. E, 76:041123, 2007.
- [33] Casas, G. A., F. D. Nobre e E. M. F. Curado: New type of equilibrium distribution for a system of charges in a spherically symmetric electric field. EPL (Europhysics Letters), 126(1):10005, 2019. https://doi.org/10.1209/0295-5075/126/10005.
- [34] Evangelista, L. R. e E. K. Lenzi: Fractional diffusion equations and anomalous diffusion. Cambridge University Press, 2018.
- [35] Crank, J.: The Mathematics of Diffusion. Oxford University Press, 1975.
- [36] Dresner, L.: Similarity solutions of nonlinear partial differential equations. Pitman Publishing, 1983.
- [37] Kaviany, M.: Principles of heat transfer in porous media. Springer-Verlag, 1995.
- [38] Butkov, E.: Mathematical Physics. Addison-Wesley, 1973.
- [39] J. F. A. de Souza, L. R. de Oliveira, J. L. L. de Azevedo, I. D. Soares e M. M. Mata: Uma revisão sobre a turbulência e sua modelagem. Revista Brasileira de Geofísica, 2011. https://doi.org/10.1590/S0102-261X2011000100002.
- [40] Aronson, D. G.: The porous medium equation. Em Lecture notes in mathematics, volume 1224, página 1. Chelsea, Berlin, 1986.
- [41] Muskat, M.: The flow of homogeneous fluids through porous media. McGraw-Hill, New York, 1937.
- [42] Polunarinova-Kochina, P. Y.: Theory of ground water movement. Princeton University Press, Princeton, 1962.
- [43] Buckmaster, J.: Viscous sheets advancing over dry beds. Journal of Fluid Mechanics, 81(4):735–756, 1977.

- [44] Borland, L.: Microscopic dynamics of the nonlinear Fokker-Planck equation: A phenomenological model. Phys. Rev. E, 57:6634-6642, Jun 1998. https://link.aps. org/doi/10.1103/PhysRevE.57.6634.
- Borland, L.: Option Pricing Formulas Based on a Non-Gaussian Stock Price Model. Physical Review Letters, 89(9), Aug 2002, ISSN 1079-7114. http://dx.doi.org/ 10.1103/PhysRevLett.89.098701.
- [46] Anteneodo, C.: Non-extensive random walks. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 358(2):289-298, 2005, ISSN 0378-4371. https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378437105006436.
- [47] Barbu, V.: Generalized solutions to nonlinear Fokker-Planck equations. Journal of Differential Equations, 261(4):2446-2471, 2016, ISSN 0022-0396. https://www. sciencedirect.com/science/article/pii/S0022039616300699.
- [48] Coghi, M. e B. Gess: Stochastic nonlinear Fokker-Planck equations. Nonlinear Analysis, 187:259-278, 2019, ISSN 0362-546X. https://www.sciencedirect.com/ science/article/pii/S0362546X1930149X.
- [49] Gonçalves, G., M. K. Lenzi, E. K. Lenzi, F. J. Antonio e A. Schot: Equação da difusão fracionária não-linear: solução exata. Acta Scientiarum. Technology. https: //www.redalyc.org/articulo.oa?id=303226515004.
- [50] Jauregui, M., A. L. F. Lucchi, J. H. Y. Passos e R. S. Mendes: Stationary solution and H theorem for a generalized Fokker-Planck equation. Phys. Rev. E. Aceito para publicação em 13 de setembro de 2021.
- [51] Tsallis, C.: Possible generalization of Boltzmann-Gibbs statistics. J. Stat. Phys., 52:479–487, 1988.
- [52] Curado, E. M. F., A. M. C. Souza, F. D. Nobre e R. F. S. Andrade: Carnot cycle for interacting particles in the absence of thermal noise. Phys. Rev. E, 89:022117, Feb 2014. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.89.022117.
- [53] Kullback, S. e R. A. Leibler: On Information and Sufficiency. The Annals of Mathematical Statistics, 22(1):79 – 86, 1951. https://doi.org/10.1214/aoms/ 1177729694.
- [54] Tsallis, C.: Generalized entropy-based criterion for consistent testing. Phys. Rev. E, 58:1442-1445, 1998. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.58.1442.
- [55] Picoli, S., R. Mendes e L. Malacarne: q-exponential, Weibull, and q-Weibull distributions: An empirical analysis. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 324, 2003.