
UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ
PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Roberto Rossato

Extensões da Equação de Difusão: Soluções e Aplicações

Maringá
16 de dezembro de 2011

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ
PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Roberto Rossato

Extensões da Equação de Difusão: Soluções e Aplicações

Tese de Doutorado Apresentada ao Departamento de Física da Universidade Estadual de Maringá.

Orientador: Prof. Dr. Ervin Kaminski Lenzi

Maringá
2011

*À minha futura esposa Karla pelo amor e
apoio incondicional em todos os momentos, e
à minha tia Izabel pelo amor, carinho,
compreensão e exemplo de vida.*

Agradecimentos

Primeiramente a Deus, por estar sempre ao meu lado.

A minha tia Izabel de F. Andrian, que me acolheu e me acompanhou durante esses anos.

Ao professor Doutor Ervin Kaminski Lenzi, pela paciência, amizade, confiança e orientação durante esse período.

Ao professor Doutor Luiz Roberto Evangelista, por ter me dado a oportunidade de trabalhar junto ao grupo de física teórica da UEM.

A minha namorada Karla K. de Oliveira Oyama, pela compreensão e ajuda nas horas difíceis.

Ao CNPq e Capes, pelo apoio financeiro.

Aos professores da pós-graduação que contribuíram com o meu trabalho.

Aos amigos que me acompanharam e me ajudaram desde o início.

A Akiko, por todo esforço, paciência e auxílio.

A todos que me ajudaram.

Resumo

O presente trabalho é dedicado à investigação de extensões da equação de difusão que contém derivadas espaciais e temporais de ordem fracionária na presença de forças externas e termos não-locais. Começamos nosso estudo pelo formalismo de caminhantes aleatórios seguido da equação de Langevin, no intuito de compreendermos a equação de difusão usual e as consequências quando a mesma é generalizada. Seguindo, apresentamos importantes propriedades a respeito do cálculo fracionário que serão usadas nos demais capítulos. Depois, analisamos a equação de difusão em uma dimensão com derivadas espaciais e temporais de ordem fracionária. Na sequência, investigamos os efeitos obtidos pela presença de termos não-locais na equação de difusão. Também discutimos a influência das condições de contorno no espalhamento do sistema. Para as equações, sejam elas com derivadas fracionárias ou com termos não-locais com ausência ou não de forças externas, obtivemos soluções analíticas dependentes do tempo utilizando o formalismo das funções de Green e mostramos que elas exibem uma dispersão anômala. Finalmente, apresentamos nossas conclusões.

Palavras-Chave: equação de difusão, difusão anômala, funções de Green.

Abstract

The present work is dedicated to investigate extensions of diffusion equations by incorporating spatial and time fractional derivatives, in the presence of external forces and nonlocal terms. We start by studying the continuous time random walk approach and the Langevin equation in order to understand the usual diffusion equation and the consequences obtained when it is extended. Following, we present important properties concerned to the fractional calculus which will be used in the others chapters. After, the one dimensional fractional diffusion equations are analyzed. Next, we investigate the effects obtained when nonlocal terms are incorporated. The influence of the boundary conditions on the spreading of the system is also investigated. For equations with fractional derivatives or nonlocal terms in the absence of external forces or not, we obtain analytical solutions using the time-dependent formalism of the Green functions and the solutions exhibit an anomalous dispersion. Finally, we present our conclusions.

Sumário

Resumo	4
Abstract	5
Introdução	11
1 Movimento browniano	14
1.1 Caminhante aleatório com espaço e tempo contínuos	14
1.2 Equação de Langevin	21
1.3 Equação de difusão usual	26
1.4 A equação de Fokker-Planck	28
1.5 Soluções da equação de Fokker-Planck	31
2 Cálculo fracionário	37
2.1 A origem do cálculo fracionário	37
2.2 A definição de Riemann-Liouville	40
2.3 Definição da integral fracionária	42
2.4 Exemplos de integrais fracionárias	44
2.5 Transformada de Laplace da integral fracionária	48
2.6 A derivada fracionária	51
2.6.1 Derivada fracionária segundo Riemann-Liouville	52
2.6.2 Derivada fracionária segundo Caputo	53
2.7 Transformada de Laplace da derivada fracionária	54
3 Equação de difusão fracionária linear unidimensional	57
3.1 Derivada fracionária aplicada à variável temporal	57

3.2	Derivada fracionária aplicada à variável espacial	66
4	Equação de difusão com um termo não-local	70
4.1	Equações de difusão e soluções	71
4.1.1	Primeiro caso: $\mathcal{K}(x, t) \propto \delta(t)/ x ^{1+\mu}$	72
4.1.2	Segundo caso: $\mathcal{K}(x, t) \propto \delta(t)\bar{\mathcal{K}}(x)$	74
4.1.3	Terceiro caso: $\mathcal{K}(x, t) \propto t^{\gamma-1}/ x ^{1+\mu}$	75
4.2	Equações de difusão fracionária e soluções	76
4.2.1	Primeiro caso: $\mathcal{K}(\mathbf{r}, t) = \bar{\mathcal{K}}(\mathbf{r})\delta(t)$	77
4.2.2	Segundo caso: $\mathcal{K}(\mathbf{r}, t)$ arbitrário	79
5	Equação de difusão fracionária em uma região confinada: efeitos de superfície e soluções exatas	82
5.1	Equação de difusão fracionária: caso unidimensional	83
5.2	Equação de difusão fracionária: caso bidimensional	86
5.3	Equação de difusão fracionária: caso \mathcal{N} -dimensional	88
	Discussões e Conclusões	98
A	Funções especiais	102
A.1	Operador fracionário de Riemann-Liouville	102
A.2	Operador fracionário de Riesz/Weyl	102
A.3	Funções gama, beta e gama incompleta	103
A.3.1	Função gama	103
A.3.2	Função beta	104
A.3.3	Função gama incompleta	105
A.4	Funções de Fox e de Mittag-Leffler	106
A.4.1	Funções de Fox	106
A.4.2	Funções de Mittag-Leffler	107
A.5	Funções de Green	108
A.5.1	Problema de Sturm-Liouville	109
A.5.2	Expansão das funções de Green em autofunções	110

Lista de Figuras

1.1	<i>A linha contínua é a variância versus o tempo, considerando Eq. (1.16) com $\gamma = 0.5$, $\mathcal{D} = 1$, $\tau = 0.1$ e $\tau_\gamma = 0.1$. A linha pontilhada representa a expansão assintótica para tempos pequenos, $\sigma_x^2 \sim t$, e a linha tracejada para tempos longos, $\sigma_x^2 \sim t^\gamma$.</i>	18
1.2	<i>Comportamento de $[1/\rho(0, t)]^2$ versus o tempo considerando $\mathcal{D}_\mu(k) = \mathcal{D}_1 k + \mathcal{D}_{3/2} k ^{3/2}$ na Eq. (1.22). Por simplicidade, escolhamos sem perda de generalidade, $\mathcal{D} = 1/2$, $\mathcal{D}_1 = 1$, e $\mathcal{D}_{3/2} = 10$. A linha pontilhada representa $[1/\rho(0, t)]^2 \sim t^{4/3}$, a linha pontilhada-tracejada corresponde ao comportamento de $[1/\rho(0, t)]^2$ e a linha tracejada mostra o comportamento assintótico de $[1/\rho(0, t)]^2 \sim t^2$.</i>	20
1.3	<i>Comportamento da variância versus o tempo, considerando por simplicidade, $\gamma = 0,5$, $\bar{A} = 0,1$ e $\bar{B} = 1$ na Eq. (1.42). A linha pontilhada representa a expansão assintótica para tempos curtos e a linha tracejada para tempos longos.</i>	25
1.4	<i>Comportamento de $\mathcal{G}(x, t)$ versus x, que ilustra a Eq. (1.81) considerando, por simplicidade, $t = 30$.</i>	32
1.5	<i>Comportamento de $\rho(x, t)$ versus t, que ilustra a Eq. (1.88) considerando, por simplicidade, $\rho_0 = 1$, $x = 0$ para $\alpha(t) = \cos(t)$, $\rho_0 = 1$, $x = 0$, $\alpha = 1$ para $\alpha(t) = \alpha e^{-t^2}$, e $\rho_0 = 1$, $x = 2$, $\alpha = 1$ para $\alpha(t) = \alpha t$.</i>	34
3.1	<i>Comportamento de $(4\pi\mathcal{D}t^\gamma)^{1/2}\mathcal{G}(x, t)$ versus $x/(4\mathcal{D}t^\gamma)$, que ilustra a Eq. (3.14) para valores típicos de γ (subdifusivo).</i>	61
3.2	<i>Comportamento da Eq. (3.14) para grandes valores dos argumentos.</i>	61

3.3	<i>Comportamento de $(\mathcal{D}t)^{1/\mu} L_\mu(x, t)$ versus $x/(\mathcal{D}t)^{1/\mu}$, que ilustra a Eq. (3.38) para valores típicos de μ.</i>	68
4.1	<i>Esta figura ilustra o comportamento de $\rho(x, t)$ versus x para diferentes valores de tempo na Eq. (4.7) considerando, por simplicidade, $\mu = 1$, $\mathcal{D} = 1$, $\mathcal{K} = 1$ e a condição inicial $\rho(x, 0) = \delta(x)$.</i>	73
4.2	<i>Esta figura ilustra o comportamento de $\rho(x, t)$ versus x para diferentes valores de \mathcal{D} e \mathcal{K} na Eq. (4.7) considerando, por simplicidade, $t = 1$, $\mu = 1$ e a condição inicial $\rho(x, 0) = \delta(x)$.</i>	73
4.3	<i>Esta figura ilustra o comportamento de $(4\pi\mathcal{D}t^\gamma)^{3/2}\mathcal{G}(r, t)$ versus $r^2/(4\mathcal{D}t^\gamma)$ para Eq. (4.25) considerando valores típicos de γ e μ com $t = 1$.</i>	78
4.4	<i>Esta figura ilustra o comportamento de $(4\pi\mathcal{D}t^\gamma)^{3/2}\mathcal{G}(r, t)$ versus $r^2/(4\mathcal{D}t^\gamma)$ para Eq. (4.29) considerando valores típicos de γ e η com $t = 1$.</i>	80
4.5	<i>Esta figura ilustra o comportamento de $(4\pi\mathcal{D}t^\gamma)^{3/2}\mathcal{G}(r, t)$ versus $r^2/(4\mathcal{D}t^\gamma)$ para Eq. (4.29) considerando $\gamma = 1$ e $\eta = -1/2$ para valores típicos de t.</i>	81
5.1	<i>Comportamento de $\rho(x, t)$ versus x, que ilustra a Eq. (5.7) considerando, por simplicidade, $\gamma = 1/2$, $\mathcal{D} = 1$, $\mathcal{D}_\alpha = 0$, $a = 3$, $t = 0.1$ e $\rho(x, 0) = \delta(x - 1)$.</i>	85
5.2	<i>Comportamento de $\mathcal{G}(x, x'; t)$ versus x, que ilustra a Eq. (5.8) considerando, por simplicidade, $a = 5$, $x' = 1$, e $t = 1$.</i>	85
5.3	<i>Comportamento de $\rho(r, \theta, t)$ versus r, que ilustra a Eq. (5.10) considerando, por simplicidade, $\gamma = 1/2$, $\mathcal{D} = 1$, $\mathcal{D}_\alpha = 0$, $\rho(r, \theta, 0) = (2/r)\delta(r - \tilde{r})$ com $\tilde{r} = 2.3$, $a = 2$, $b = 3$ e $t = 1$.</i>	87
5.4	<i>Comportamento de $\rho(r, t)$ versus r obtido da Eq. (5.19) para valores típicos de θ, fazendo $\phi_a(t) = 1$ e $\phi_b(t) = 0$. Consideramos, por simplicidade, $\mathcal{D} = 1$, $\mathcal{N} = 2$, $a = 1$, $b = 3$, $t = 1$, $\gamma + \eta = 1/2$, e a condição inicial $\rho(r, 0) = \delta(r - 3/2)/r^{\mathcal{N}-1}$.</i>	90
5.5	<i>Comportamento de $\sigma^2(t)$ versus t, obtido da Eq. (5.21) para valores típicos de $\gamma + \eta$, considerando $\mathcal{D} = 1$, $\mathcal{N} = 1$, $a = 1$, $b = 3$, e $\rho(r, 0) = \delta(r - 2)/r^{\mathcal{N}-1}$.</i>	92
5.6	<i>Comportamento de $\mathcal{S}(t)$ versus t obtido da Eq. (5.24) para valores de $\gamma + \eta$, considerando $\Phi_a(t) = 1$, $\Phi_b(t) = 0$, $\mathcal{D} = 1$, $\mathcal{N} = 1$, $a = 1$, $b = 3$, e a condição inicial $\rho(r, 0) = \delta(r - 2)/r^{\mathcal{N}-1}$.</i>	92

5.7	<i>Comportamento de $\mathcal{G}(r, \tilde{r}, t)$ versus r o qual ilustra a Eq. (5.33) para valores típicos de \mathcal{K} considerando, por simplicidade, $\mathcal{D} = 1$, $\mathcal{N} = 2$, $t = 1$, $\tilde{r} = 1$ e $\theta = 1$.</i>	95
A.1	<i>Função Gama</i>	103
A.2	<i>Função Beta</i>	105

Introdução

A compreensão da difusão, em especial da difusão anômala, ou de sistemas que possuem uma relaxação anômala, tem atraído a atenção de vários pesquisadores devido ao grande número de situações ligadas a física, a engenharia, a biologia, a economia, etc. De fato, a difusão anômala está presente em várias situações, tais como difusão em meios fractais [1], na relaxação ao equilíbrio de sistemas com memória temporal longa (por exemplo, cadeias de polímeros e membranas) [2,3], na descrição de transporte anômalo em sistemas desordenados [4], para modelar processos dinâmicos não-Markovianos em proteínas [5], na lei de Richardson [6], na lei de Kolmogorov [7] (estas duas leis aplicam-se ao estudo de turbulência), no transporte axial de materiais granulares [8], no transporte de substância em um solvente de um vaso para outro através de uma membrana [9], na translocação assimétrica do DNA [10], no desenvolvimento de tumores, modelando a taxa de disseminação do câncer [11, 12], no transporte através de um meio poroso [13], nas flutuações de sistemas financeiros [14], nas batidas do coração [15], em semicondutores amorfos [16], no comportamento térmico do calor específico de sólidos não cristalinos [17], em micelas dissolvidas em água salgada [18], entre outras. Nas situações em que temos uma difusão anômala como nas mencionadas acima, podemos ter o segundo momento finito [19] ou não [19, 20]. A difusão anômala com o segundo momento finito, $\langle \mathbf{r}^2 \rangle \sim t^\gamma$, geralmente tem como característica $\gamma < 1$ e $\gamma > 1$, correspondendo a subdifusão e superdifusão, respectivamente. Nesse contexto, algumas equações representativas na descrição deste fenômeno são as equações de difusão que empregam derivadas fracionárias temporais [2, 21], a equação de meios porosos $\partial_t \rho = \mathcal{D} \partial_x^2 \rho^\nu$, que é não-linear, [19] e a equação usual de difusão, com coeficientes dependentes de variáveis de posição ou de tempo [22, 23]. Por sua vez, a difusão anômala, quando não possui o segundo momento finito, é caracterizada pelas distribuições do tipo Lévy [20, 21]. Desse modo, temos a equação de difusão com derivadas fracionárias na variável espacial, cuja solução é dada em termos das distribui-

ções de Lévy, que satisfazem o teorema de Lévy-Gnedenko, isto é, uma generalização do teorema do limite central.

De um ponto de vista formal, a partir do exposto acima, vemos que a difusão anômala pode ser investigada através de diferentes tipos de equações diferenciais parciais. Assim, o estudo desses tipos de equações diferenciais, suas extensões e as situações relacionadas a elas são importantes, pois possibilitam a investigação de novos cenários. Nesse sentido, dedicamos nossos esforços ao estudo das equações de difusão fracionárias lineares na presença de uma força externa ("drift"). Assim, focalizamos nossa atenção em equações de difusão que estão contidas na equação abaixo:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(\mathbf{r}, t) &= \int_0^t dt' \tilde{\mathcal{K}}(t-t') \nabla^\mu \rho(\mathbf{r}, t') - \nabla \cdot (F(\mathbf{r}, t) \rho(\mathbf{r}, t)) \\ &- \int d\mathbf{r}' \int_0^t dt' \mathcal{K}(\mathbf{r}-\mathbf{r}', t-t') \rho(\mathbf{r}', t'). \end{aligned} \quad (1)$$

Na equação precedente, a derivada fracionária no tempo é considerada na representação de Caputo [24], a derivada fracionária espacial é considerada na representação de Riesz/Weyl [24], $F(\mathbf{r}, t)$ representa uma força externa atuando sobre o sistema e o último termo da equação é um termo não-local, que pode ser relacionado a derivadas de ordem fracionárias. Ressalta-se que os *kernels* $\tilde{\mathcal{K}}(t)$ e $\mathcal{K}(\mathbf{r}, t)$ presentes na Eq. (1) representam outra forma, além das derivadas de ordem fracionárias, de introduzir a presença de memória na equação de difusão ou de Fokker-Planck. Assim, estudamos a Eq. (1) levando em conta vários cenários no intuito de compreender suas propriedades formais para futuras aplicações.

O primeiro capítulo é dedicado à compreensão dos formalismos que são usualmente empregados na descrição de um processo estocástico. Dentre esses formalismos temos, por exemplo, o formalismo de caminhantes aleatórios com espaço e tempo contínuos (CTRW), a equação de Langevin e a equação de Fokker-Planck, que tem como caso particular, a equação de difusão usual. Esses formalismos são úteis na compreensão dos processos usuais e têm um papel importante no estudo das equações de difusão fracionárias. Dessa forma, fazendo escolhas adequadas para a distribuição dos tempos entre saltos e para distribuição dos saltos no CTRW, adquirimos diferentes regimes difusivos que podem ser relacionados com uma equação similar a da difusão. Para a equação de Langevin, mudando-se o ruído obtivemos diferentes comportamentos difusivos que foram analisados através do cálculo da variância que nos dá uma idéia de como nosso sistema se dispersa.

No segundo capítulo, fazemos uma abordagem histórica do cálculo fracionário e em seguida descrevemos os fundamentos teóricos e matemáticos do formalismo que são

essenciais no estudo de difusão anômala.

No terceiro capítulo abordamos as equações de difusão fracionárias lineares unidimensionais, que empregam derivadas fracionárias tanto a operadores relacionados à variável temporal como à variável espacial. Isso significa que nesse capítulo estudamos a Eq. (1) em uma dimensão com $\tilde{\mathcal{K}}(t) = \delta(t)$ e $\mathcal{K}(\mathbf{r}, t) = 0$ na presença de forças externas, levando em conta condições de contorno do tipo $\rho(\pm\infty, t) = 0$ e, obtivemos soluções analíticas usando o formalismo das funções de Green.

No quarto capítulo, consideramos a presença do termo não local $\mathcal{K}(\mathbf{r}, t) \neq 0$, levando em conta algumas formas da função $\mathcal{K}(\mathbf{r}, t)$ presentes no termo não-local, isto é, estudamos seus efeitos sobre a solução da equação de difusão fracionária no tempo e na usual, na ausência de forças externas. Para esse caso, também empregamos condições de contorno do tipo $\rho(\pm\infty, t) = 0$ e, obtivemos soluções analíticas usando o formalismo das funções de Green onde as soluções ficaram representadas pelas funções de Fox.

No quinto capítulo, investigamos como as soluções da equação de difusão são influenciadas pelos seus contornos. Para tal, primeiramente consideramos a Eq. (1) unidimensional na ausência de termos não-locais e forças externas com $\tilde{\mathcal{K}}(t) = \mathcal{D}_\alpha t^{\alpha-1}/\Gamma(\alpha)$ e condições de contorno dependentes do tempo em uma região confinada. Em seguida, analisamos o caso bidimensional com simetria cilíndrica e condições de contorno com dependência espacial e temporal. Por último, consideramos o caso \mathcal{N} -dimensional com simetria radial na ausência de força externa, com dependência espacial e temporal no coeficiente de difusão e com o termo de reação sujeito a uma condição de contorno dependente do tempo. Novamente, obtivemos soluções analíticas usando o formalismo das funções de Green. Por fim, apresentamos nossas discussões e conclusões a respeito dos resultados que obtivemos ao analisar as situações que são compreendidas pela Eq. (1) e apontamos algumas perspectivas futuras.

Movimento browniano

Nesse capítulo inicial apresentamos uma breve discussão acerca do movimento browniano, isto é, um movimento estocástico, sob o enfoque de caminhantes aleatórios com espaço e tempo contínuos, equações de Langevin e equações de difusão. Tais conceitos são fundamentais na compreensão do desenvolvimento do presente trabalho.

1.1 Caminhante aleatório com espaço e tempo contínuos

Desde as primeiras observações executadas por Robert Brown sobre o movimento aleatório de partículas suspensas em um fluido, e as explicações propostas por Einstein para o fenômeno, os processos difusivos têm sido largamente estudados em vários contextos [25]. O formalismo de caminhantes aleatórios com espaço e tempo contínuos CTRW [26, 27], de forma análoga à equação de Langevin que veremos na próxima seção, descreve o movimento de partículas individuais (ou qualquer outra quantidade conservada, como distribuição de probabilidade). Esse formalismo é baseado em distribuições de probabilidade que governam o movimento microscópico das partículas. Uma das características desse fenômeno é o comportamento do deslocamento quadrático médio o qual é linear com o tempo, isto é, $\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle \propto t$.

Considere o movimento de uma partícula no espaço, por simplicidade também unidimensional. No formalismo CTRW, a partícula executa um pulo de comprimento e direção arbitrária x em um intervalo de tempo t a $t + dt$. Os pulos são estatisticamente independentes e executados em intervalos de tempo aleatórios, os quais devem ser definidos estatisticamente. Dessa forma, o CTRW é baseado na idéia que o comprimento dos pulos, assim como os intervalos de tempo entre dois sucessivos pulos são descritos por uma fun-

ção densidade de probabilidade (PDF) $\psi(x, t)$. De $\psi(x, t)$ podemos obter a distribuição relacionada ao comprimento do pulo:

$$\lambda(x) = \int_0^{+\infty} dt \psi(x, t) \quad (1.1)$$

e a distribuição relacionada ao intervalo de tempo

$$\omega(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi(x, t). \quad (1.2)$$

Na Eq. (1.1), $\lambda(x)dx$ representa a probabilidade de ocorrer um pulo no comprimento entre $(x, x + dx)$ e $\omega(t)dt$, na Eq. (1.2), a probabilidade de ocorrerem pulos entre o tempo $(t, t + dt)$. Como o comprimento do pulo e os intervalos de tempo entre os pulos são variáveis aleatórias independentes, encontra-se a forma desacoplada $\psi(x, t) = \omega(t)\lambda(x)$ para a PDF do pulo $\psi(x, t)$. Se ambos são acoplados, um pulo de certo comprimento envolve um custo no tempo ou vice versa; ou seja, em um dado intervalo de tempo o caminhante tem uma distância máxima que pode atingir. Com estas definições, o CTRW pode ser descrito pela equação [21]

$$\eta(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \int_0^t dt' \eta(x', t') \psi(x - x', t - t') + \delta(x)\delta(t) \quad (1.3)$$

a qual relaciona a PDF $\eta(x, t)$ da chegada na posição x no tempo t , e o evento da chegada em x' no tempo t' com $\eta(x', t')$. O segundo termo na Eq. (1.3) denota a condição inicial do tipo $\delta(x)$ para o caminhante aleatório. Consequentemente, a probabilidade $\rho(x, t)$ de a partícula estar na posição x em um tempo t é dada por

$$\rho(x, t) = \int_0^t dt' \eta(x, t') \Psi(t - t'), \quad (1.4)$$

onde

$$\Psi(t) = 1 - \int_0^t \omega(t') dt' \quad (1.5)$$

é a probabilidade cumulativa. No espaço de Fourier-Laplace, a Eq. (1.4) se torna

$$\rho(k, s) = \frac{1 - \omega(s)}{s} \frac{1}{1 - \psi(k, s)}, \quad (1.6)$$

que é o propagador geral do CTRW. Dessa forma, fazendo escolhas adequadas para a dis-

tribuição dos tempos entre saltos e para a distribuição do comprimento dos saltos, podemos adquirir diferentes regimes difusivos para um mesmo processo difusivo e relacionar com a difusão anômala [25]. Para fazer isto, é necessário notar que a difusão usual tem uma variância, isto é, o segundo momento é finito e a média das distribuições dos intervalos de tempo é definida. Essas características estão relacionadas a processos Markovianos (o estado futuro depende apenas do estado presente e não dos estados passados), conduzindo-nos a escolher a função de distribuição de probabilidade de pulos e intervalos de tempo dada por $\lambda(k) = 1 - \mathcal{D}k^2 + \mathcal{O}(k^4)$ e $\omega(s) = 1 - \tau s + \mathcal{O}(s^2)$, que para checar nossa escolha com a relação da difusão usual, podemos relacionar diretamente com a distribuição que emerge da equação de difusão

$$\tau \frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) = \mathcal{D} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, t). \quad (1.7)$$

Para isso, executamos a transformada de Fourier-Laplace na Eq (1.7) com a condição inicial $\rho(x, 0) = \delta(x)$ e a condição de contorno $\rho(\pm\infty, t) = 0$, sendo possível mostrar que

$$\rho(k, s) = \frac{1}{s + (\mathcal{D}/\tau)k^2}. \quad (1.8)$$

Comparando a Eq. (1.8) com a equação (1.6) podemos encontrar $\lambda(k)$ e $\omega(s)$ que, no espaço de Fourier-Laplace são dados por $\lambda(k) = 1 - \mathcal{D}k^2$ e $\omega(s) = 1/(1 + s\tau)$.

O resultado obtido da equação de difusão indica que para modelar um ou outro processo difusivo, temos que escolher um $\psi(k, s)$ que esteja de acordo com as características do processo difusivo. Uma primeira situação que podemos considerar é a mistura entre um comportamento de longo e curto alcance para a distribuição dos intervalos de tempo. A escolha anterior para $\omega(s)$, isto é, $\omega(s) \approx 1 - s\tau + \mathcal{O}(s^2)$ representa um comportamento de curto alcance. Um comportamento de longo alcance para $\omega(s)$ pode ser obtido considerando, por exemplo, $\omega(s) \approx 1 - s^\gamma \tau_\gamma^\gamma + \mathcal{O}(s^{2\gamma})$, com $0 < \gamma < 1$. Incorporando esses dois comportamentos em $\omega(s)$, obtemos $\omega(s) \approx 1 - (\tau s + \tau_\gamma^\gamma s^\gamma)$. Nota-se que o comportamento difusivo diferente manifestado por esta escolha de $\omega(s)$ é determinado por um tempo característico τ e τ_γ^γ , isto é, dependendo da escala de tempo considerada, podemos ter um comportamento anômalo ou usual. Um crescimento temporal linear do deslocamento quadrático médio, $\langle x^2(t) \rangle \propto t$, ou, de forma equivalente, da variância, é uma característica do movimento browniano e, portanto, da difusão usual. Em contraste, a difusão anômala, em geral, tem como característica o crescimento não-linear da variância no decorrer do tempo, ou seja, a difusão será considerada anômala se houver desvio no

comportamento, sendo assim, o crescimento da variância pode ser do tipo lei de potência, $\langle x^2(t) \rangle \propto t^\gamma$, ou apresentar outro padrão. Desta forma, uma escolha típica para a distribuição dos intervalos de tempo é dado por

$$\omega(s) = \frac{1}{1 + s\tau + (s\tau_\gamma)^\gamma}. \quad (1.9)$$

Essa distribuição dos intervalos de tempo tem dois comportamentos diferentes os quais podem ser evidenciados considerando $s \rightarrow 0$ ($t \rightarrow \infty$) e $s \rightarrow \infty$ ($t \rightarrow 0$). Para o primeiro caso, o comportamento de $\omega(s)$ é essencialmente governado por

$$\omega(s) = \frac{1}{1 + (s\tau_\gamma)^\gamma} \quad (1.10)$$

que tem como transformada inversa de Laplace

$$\omega(t) = \frac{1}{\tau_\gamma^\gamma} \left(\frac{t}{\tau_\gamma} \right)^{\gamma-1} E_{\gamma,\gamma} \left(-\frac{t^\gamma}{\tau_\gamma^\gamma} \right), \quad (1.11)$$

onde $E_{\gamma,\beta}(x)$ é a função de Mittag-Leffler generalizada (A.28). Para o outro limite, o comportamento de $\omega(s)$ é essencialmente governado por

$$\omega(s) = \frac{1}{1 + s\tau} \quad (1.12)$$

com a transformada inversa de Laplace dada por

$$\omega(t) = \frac{1}{\tau} e^{-t/\tau}. \quad (1.13)$$

A transformada inversa de Laplace da Eq. (1.9) também pode ser obtida diretamente em termos da função de Mittag-Leffler:

$$\omega(t) = \frac{1}{\tau} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{\tau_\gamma^\gamma}{\tau} t^{1-\gamma} \right)^n E_{\alpha,\beta}^{(n)} \left(-\frac{t}{\tau} \right) \quad (1.14)$$

com $\alpha = 1$ e $\beta = 1 - \gamma n$, onde $E_{\alpha,\beta}^{(n)}(x) \equiv d^n E_{\alpha,\beta}(x)/dx^n$ é a derivada da função de Mittag-Leffler (A.31). Similar ao caso anterior, relacionando a equação de difusão usual e a distribuição dos intervalos de tempo é possível relacionar também o processo difusivo a

uma equação similar a da difusão usual dada por

$$\tau \frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) + \tau_\gamma^\gamma \frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(x, t) = \mathcal{D} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, t). \quad (1.15)$$

Para identificarmos o comportamento de $\omega(t)$ na equação acima, basta analisar o deslocamento quadrático médio $\sigma_x^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$, o qual para a condição inicial considerada aqui é igual ao segundo momento, $\sigma_x^2 = \langle x^2 \rangle$. O segundo momento para este caso é dado por [28]

$$\langle x^2 \rangle = 2\mathcal{D} \frac{t}{\tau} \text{E}_{1-\gamma, 2} \left(-\frac{\tau_\gamma^\gamma}{\tau} t^{1-\gamma} \right), \quad (1.16)$$

(veja Fig. (1.1)).

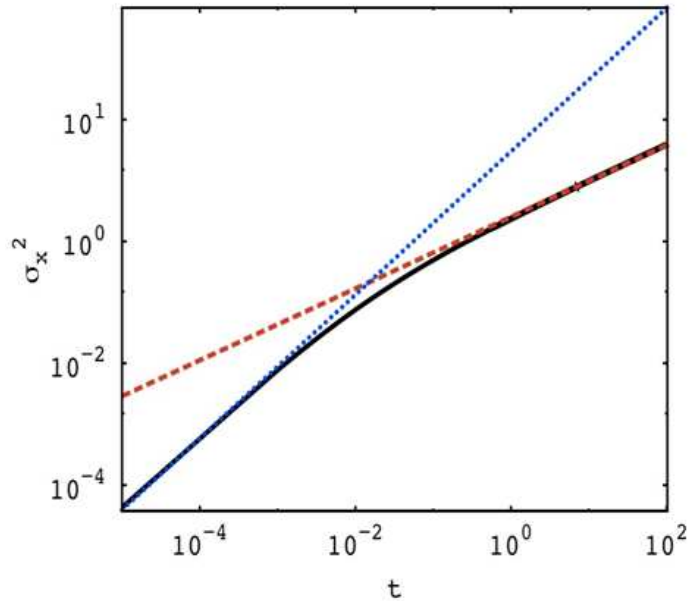


Figura 1.1: A linha contínua é a variância versus o tempo, considerando Eq. (1.16) com $\gamma = 0.5$, $\mathcal{D} = 1$, $\tau = 0.1$ e $\tau_\gamma = 0.1$. A linha pontilhada representa a expansão assintótica para tempos pequenos, $\sigma_x^2 \sim t$, e a linha tracejada para tempos longos, $\sigma_x^2 \sim t^\gamma$.

Tomando os limites anteriores $s \rightarrow 0$ ($t \rightarrow \infty$) e $s \rightarrow \infty$ ($t \rightarrow 0$) é possível mostrar que $\langle x^2 \rangle \approx t^\gamma$ e $\langle x^2 \rangle \approx t$, caracterizando dois regimes diferentes de difusão como esperado. Uma extensão desta análise pode ser feita considerando a distribuição dos intervalos de

tempo

$$\omega(s) = \frac{1}{1 + \tau s + \Lambda(s)}, \quad (1.17)$$

onde $\Lambda(s)$ é a transformada de Laplace de uma função dependente do tempo $\Lambda(t)$ que pode apresentar diferentes comportamentos dependendo da escolha de $\Lambda(s)$. A transformada inversa de Laplace da Eq. (1.17) pode ser obtida e dada por

$$\begin{aligned} \omega(t) &= \frac{1}{\tau} e^{-t/\tau} + \frac{1}{\tau} \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{1}{\tau}\right)^n \int_0^t dt' (t-t')^n e^{-(t-t')/\tau} \\ &\times \int_0^{t'} dt_n \Lambda(t' - t_n) \int_0^{t_n} dt_{n-1} \Lambda(t_n - t_{n-1}) \cdots \\ &\times \int_0^{t_3} dt_2 \Lambda(t_3 - t_2) \int_0^{t_2} dt_1 \Lambda(t_2 - t_1) \Lambda(t_1). \end{aligned} \quad (1.18)$$

Uma equação de difusão similar relacionada a esta escolha para a distribuição dos intervalos de tempo fica representada por

$$\int_0^t dt' \Phi(t-t') \frac{\partial}{\partial t'} \rho(x, t') = \mathcal{D} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, t) \quad (1.19)$$

com $\Phi(t) = \tau \delta(t) + \Lambda'(t)$ e $\Lambda'(t) = \int_0^t dt' \Lambda(t')$. A partir desta equação, também é possível obter o deslocamento quadrático médio considerando a condição inicial $\rho(x, 0) = \delta(x)$ a qual simplifica nosso cálculo do segundo momento que pode ser formalmente representado por

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= \frac{2\mathcal{D}}{\tau} t + \frac{2\mathcal{D}}{\tau} \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{1}{\tau}\right)^n \int_0^t dt' (t-t') \int_0^{t'} dt_n \Lambda'(t' - t_n) \\ &\times \int_0^{t_n} dt_{n-1} \Lambda'(t_n - t_{n-1}) \cdots \int_0^{t_3} dt_2 \Lambda'(t_3 - t_2) \\ &\times \int_0^{t_2} dt_1 \Lambda'(t_2 - t_1). \end{aligned} \quad (1.20)$$

As análises anteriores foram realizadas considerando mudanças na distribuição dos intervalos de tempo. Agora, vamos investigar as mudanças que ocorrem quando se modifica a probabilidade dos pulos $\lambda(k)$. Uma mudança típica, que caracteriza comportamentos de longo alcance, é adicionar o termo $\mathcal{D}_\mu |k|^\mu$. Assim, a probabilidade do pulo no espaço de Fourier é dado por $\lambda(k) \approx 1 - \mathcal{D}_\mu |k|^\mu$. Essa escolha para $\lambda(k)$ têm dois comportamen-

tos, um deles governado por uma distribuição gaussiana e o outro por uma distribuição de Lévy. Nesse caso, a equação similar de difusão é dada por

$$\tau \frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) = \mathcal{D} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, t) + \mathcal{D}_\mu \frac{\partial^\mu}{\partial |x|^\mu} \rho(x, t) . \quad (1.21)$$

Uma outra escolha que pode ser realizada para $\lambda(k)$, que admite uma inversa de Fourier é $\lambda(k) \approx 1 - \mathcal{D}|k|^2 - \mathcal{D}_\mu|k|$. Para esse caso, a equação de difusão fica dada por

$$\tau \frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) = \mathcal{D} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, t) + \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \mathcal{D}_\mu(x - x') \rho(x', t) . \quad (1.22)$$

A presença de diferentes regimes difusivos pode ser detectada considerando uma escala de tempo apropriada. A Fig. (1.2) ilustra o comportamento de $[1/\rho(0, t)]^2$ obtido da Eq. (1.22) versus t considerando $\mathcal{D}_\mu(k) = \mathcal{D}_1|k| + \mathcal{D}_{3/2}|k|^{3/2}$. Para evidenciar diferentes regimes difusivos, os quais são manifestados pela escolha de \mathcal{D}_μ , traçamos linhas retas para indicar o domínio da dependência temporal.

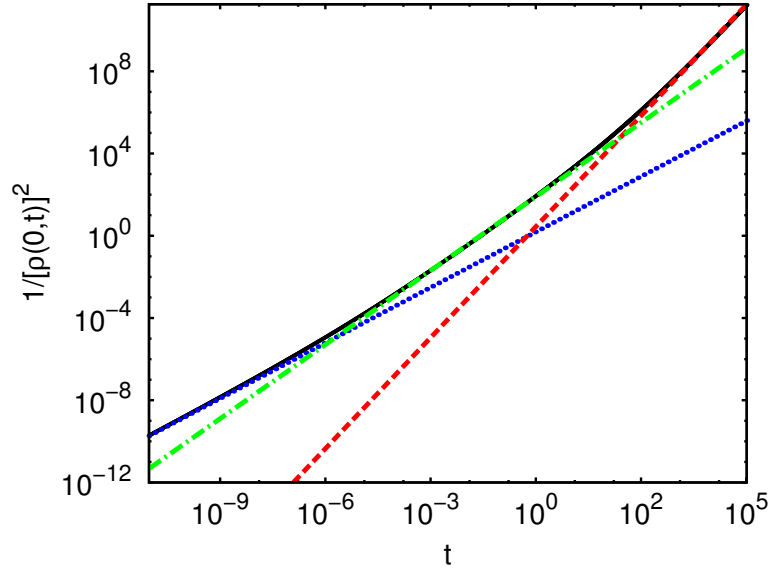


Figura 1.2: Comportamento de $[1/\rho(0, t)]^2$ versus o tempo considerando $\mathcal{D}_\mu(k) = \mathcal{D}_1|k| + \mathcal{D}_{3/2}|k|^{3/2}$ na Eq. (1.22). Por simplicidade, escolhamos sem perda de generalidade, $\mathcal{D} = 1/2$, $\mathcal{D}_1 = 1$, e $\mathcal{D}_{3/2} = 10$. A linha pontilhada representa $[1/\rho(0, t)]^2 \sim t^{4/3}$, a linha pontilhada-tracejada corresponde ao comportamento de $[1/\rho(0, t)]^2$ e a linha tracejada mostra o comportamento assintótico de $[1/\rho(0, t)]^2 \sim t^2$.

Uma outra possibilidade para modelar situações com diferentes regimes difusivos usando o formalismo do CTRW é considerar mudanças simultâneas para a distribuição dos intervalos de tempo e a probabilidade de pulos. Dessa forma, é possível considerar a distribuição dos intervalos de tempo da forma

$$\omega(s) = \frac{1}{1 + \tau s + s^{\gamma-1}\Lambda(s)} \quad (1.23)$$

e a probabilidade dos pulos dada por $\lambda(k) \approx 1 - \mathcal{D}_\mu(k)$, onde a equação similar de difusão fica dada por

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x, t) + \int_0^t d\tilde{t}\Lambda(t - \tilde{t})\frac{\partial^\gamma}{\partial \tilde{t}^\gamma}\rho(x, \tilde{t}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{D}_\mu(x - x')\rho(x', t)dx', \quad (1.24)$$

estando sujeita a diferentes regimes dependendo da escolha de $\Lambda(t)$, $\mathcal{D}_\mu(x)$ e γ . Assim, as mudanças consideradas para a distribuição dos intervalos de tempo conduz-nos a situações com o deslocamento quadrático médio finito para o mesmo processo, onde podem ser detectados em diferentes escalas de tempo.

1.2 Equação de Langevin

Muitos fenômenos que possuem um comportamento altamente aleatório em nível microscópico com uma regularidade macroscópica podem ser descritos por meio de vários formalismos, em particular, pela equação de Langevin. Para tal, vamos considerar o movimento de uma partícula de massa m imersa num líquido. Esta, por sua vez, está sujeita a uma força viscosa que será considerada proporcional à sua velocidade e uma força de caráter aleatório (estocástico), devida ao bombardeio contínuo das partículas em suspensão pelas moléculas do fluido. Para simplificar nosso problema, vamos considerar o caso unidimensional na direção x . Portanto, a equação de movimento em sua forma mais simples fica dada por

$$m\frac{dv}{dt} = -\alpha v + F(t), \quad (1.25)$$

onde

$$v = \frac{dx}{dt} \quad (1.26)$$

é a velocidade e x a posição da partícula. O primeiro termo do lado direito da Eq. (1.25) é a força viscosa, sendo α uma constante e $F(t)$ a força aleatória. Em nosso estudo vamos supor que a aleatoriedade de $F(t)$ implica interações com intensidades diversas, de modo que

as variáveis $F(t)$ e $F(t')$ são independentes para $t \neq t'$. Assim, $F(t)$ é nula em média, ou seja, $\langle F(t) \rangle = 0$. Da mesma forma, é necessário observar que $\langle F(t)F(t') \rangle = \langle F(t) \rangle \langle F(t') \rangle = 0$ se $t \neq t'$, pois $F(t)$ e $F(t')$ são consideradas variáveis aleatórias independentes [29]. Por outro lado, se $t = t'$ temos um valor pronunciado para $\langle F(t)F(t') \rangle$. Em resumo, a força aleatória que estamos considerando aqui possui as seguintes propriedades:

$$\langle F(t) \rangle = 0 \quad (1.27)$$

e

$$\langle F(t)F(t') \rangle = b\delta(t - t'), \quad (1.28)$$

pois estamos considerando que as colisões das partículas com as moléculas do líquido sejam independentes. Reescrevendo a Eq. (1.25), obtemos

$$\frac{dv}{dt} = -\gamma v + \zeta(t), \quad (1.29)$$

onde $\gamma = \alpha/m$ e $\zeta(t) = F(t)/m$. A variável $\zeta(t)$, que possui as propriedades da força aleatória definida acima, é uma variável estocástica chamada de ruído. Particularmente, substituindo $F(t)$ por $\zeta(t)$ nas equações (1.27) e (1.28) temos

$$\langle \zeta(t) \rangle = 0 \quad (1.30)$$

e

$$\langle \zeta(t)\zeta(t') \rangle = \Gamma\delta(t - t'), \quad (1.31)$$

onde $\Gamma = b/m^2$, com $b = 2\gamma K_B T/m$.

A escolha feita acima, equações (1.30) e (1.31) (ou (1.27) e (1.28)), recebe o nome de *ruído branco*, porque a distribuição espectral [23] dada pela transformada de Fourier da Eq. (1.31) é independente da frequência w . Se a distribuição espectral depende da frequência, chama-se de *ruído colorido*. Se, por acaso, escolhermos outra forma funcional para a equação, podemos ser conduzidos a outras situações que abrangem outros tipos de movimentos estocásticos que não venham a ser o browniano típico que conhecemos. Por exemplo, a escolha de um ruído dependente da concentração [19] pode nos levar a uma situação que é caracterizada pela equação de meios porosos e, conseqüentemente, estabelecer uma relação com a mecânica estatística não-extensiva.

A partir da Eq. (1.25), juntamente com a propriedade (1.31), é possível obter a dispersão do sistema, que caracteriza a forma como se difunde. Esta, por sua vez, é dada

por

$$\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \left(v_0^2 - \frac{b}{2\gamma} \right) \frac{(1 - e^{-\gamma t})^2}{\gamma^2} + \frac{b}{\gamma^2} t - \frac{b}{\gamma^3} (1 - e^{-\gamma t}). \quad (1.32)$$

Para um estado estacionário, isto é, $\gamma t \gg 1$, a equação acima se reduz a

$$\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle \approx 2\mathcal{D}t \quad (1.33)$$

que é a conhecida relação de *Einstein-Smoluchowski*, com $\mathcal{D} = b/2\gamma^2 = K_B T/m\gamma$ [30]. Nesse ponto, deve ser ressaltado que uma das características marcantes da maioria dos processos difusivos é a relação de dispersão ser linear com o tempo. Sistemas que sofrem um processo anômalo de difusão não verificam esta propriedade.

Similar ao que foi feito na seção anterior, podemos ter diferentes comportamentos difusivos mudando-se a forma do ruído na equação de Langevin generalizada [31–33]. Dessa forma, vamos iniciar considerando dois ruídos aditivos na equação de Langevin generalizada, um ruído branco e um outro como uma função de correlação dada por uma lei de potência. Depois, vamos incorporar variáveis estocásticas com funções de correlação dadas pelas funções de Mittag-Leffler.

Vamos iniciar nossa análise da equação de Langevin generalizada sujeita a condição inicial $x(0) = x_0$ e $\dot{x}(0) = v_0$. Para este caso, a Eq. (1.25) pode ser reescrita como

$$\ddot{x}(t) + \int_0^t dt' \zeta(t-t') \dot{x}(t') = \bar{\xi}(t). \quad (1.34)$$

Aqui, $\bar{\xi}(t) = \alpha\xi(t) + \beta\eta(t)$, onde $\xi(t)$ e $\eta(t)$ são variáveis estocásticas com média zero e função de correlação dada por [31]

$$\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = \mathcal{A}\delta(t-t'), \quad (1.35)$$

$$\langle \eta(t)\eta(t') \rangle = \mathcal{B}/|t-t'|^\gamma. \quad (1.36)$$

com

$$\alpha^2 \langle \xi(t)\xi(t') \rangle + \beta^2 \langle \eta(t)\eta(t') \rangle = k_B T \zeta(|t-t'|) \quad (1.37)$$

a fim de satisfazer o teorema de flutuação-dissipação. Note que Eqs. (1.35) e (1.36) foram escolhidas para produzir diferentes regimes dependendo da escala de tempo considerada, similar as situações trabalhadas para o formalismo do CTRW.

Para fazermos a análise do processo difusivo, precisamos resolver a Eq. (1.34) e analisar o deslocamento quadrático médio relacionado a variável x . Nessa direção, aplicando

a transformada de Laplace nas Eqs.(1.34) e (1.37) é possível mostrar que $x(s)$ é dada por

$$x(s) = [(s + \gamma(s))x_0 + v_0]\mathcal{G}(s) + \bar{\xi}(s)\mathcal{G}(s), \quad (1.38)$$

com

$$\mathcal{G}(s) = \frac{1}{s^2 + s\zeta(s)} \quad (1.39)$$

e $\zeta(s) = \bar{\mathcal{A}} + \bar{\mathcal{B}}s^{\gamma-1}$, onde $\bar{\mathcal{A}} = \alpha^2\mathcal{A}/k_B T$ e $\bar{\mathcal{B}} = \beta^2\mathcal{B}/k_B T$. A transformada inversa de Laplace conduz-nos a

$$x(t) = \langle x(t) \rangle + \alpha \int_0^t dt' \xi(t')\mathcal{G}(t-t') + \beta \int_0^t dt' \eta(t')\mathcal{G}(t-t'), \quad (1.40)$$

com $\langle x(t) \rangle = v_0\mathcal{G}(t) + x_0$ e a transformada inversa de Laplace de $\mathcal{G}(s)$ fica dada por

$$\mathcal{G}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t}{\Gamma(1+n)} (-\bar{\mathcal{B}}t^{3-\gamma})^n \mathbf{E}_{\tilde{\alpha}, \tilde{\beta}}^{(n)}(-\bar{\mathcal{A}}t), \quad (1.41)$$

onde $\tilde{\alpha} = 1$ e $\tilde{\beta} = 2 + (2 - \gamma)n$. De posse destas equações é possível encontrar o comportamento do deslocamento quadrático médio para a variável x [34] que fica dado por

$$\sigma_x^2(t) = 2\mathcal{I}(t) - \mathcal{G}^2(t), \quad (1.42)$$

com $\mathcal{I}(t) = \int_0^t dt' \mathcal{G}(t')$ e $k_B T = 1$. Note que o comportamento dependente do tempo manifestado pela Eq. (1.42), nos informa sobre a dispersão do sistema que pode manifestar diferentes regimes difusivos, os quais podem ser verificados analisando o comportamento assintótico da Eq. (1.42) para tempos curtos ($t \rightarrow 0$)

$$\sigma_x^2 \approx \frac{2\bar{\mathcal{A}}}{3}t^3 + (3 - \gamma)\frac{2\bar{\mathcal{B}}t^{4-\gamma}}{\Gamma(5 - \gamma)} \quad (1.43)$$

e para tempos longos ($t \rightarrow \infty$)

$$\sigma_x^2 \approx \frac{t}{\bar{\mathcal{A}}}\mathbf{E}_{1-\gamma}\left(-\frac{\bar{\mathcal{B}}}{\bar{\mathcal{A}}}t^{1-\gamma}\right). \quad (1.44)$$

Estes comportamentos assintóticos, obtidos do deslocamento quadrático médio, podem ser observados na Fig. (1.3). Note que para tempos curtos, o deslocamento quadrático médio não é dominado pelos valores de γ , já para tempos longos, tem uma forte dependência de γ . Em particular, é interessante notar que o comportamento obtido da Eq. (1.43) é o

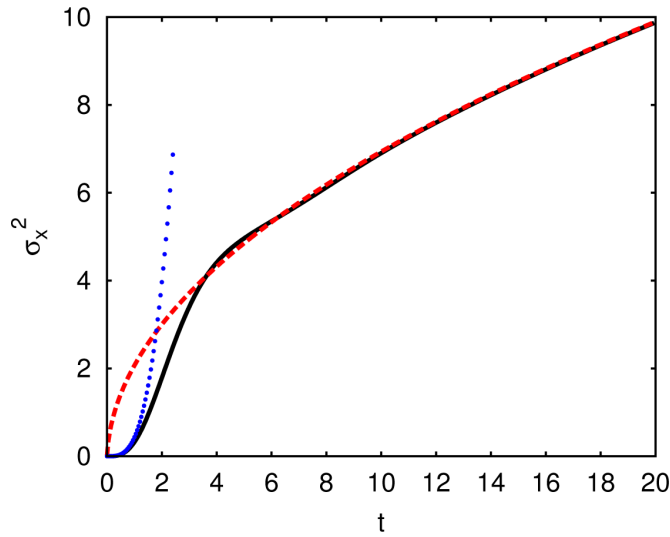


Figura 1.3: Comportamento da variância versus o tempo, considerando por simplicidade, $\gamma = 0,5$, $\bar{\mathcal{A}} = 0,1$ e $\bar{\mathcal{B}} = 1$ na Eq. (1.42). A linha pontilhada representa a expansão assintótica para tempos curtos e a linha tracejada para tempos longos.

mesmo que o encontrado na difusão usual quando consideramos tempos curtos.

É possível considerar outras formas para a Eq. (1.35) ou Eq. (1.36), conduzindo-nos a processos difusivos diferentes e consequentemente a outros regimes difusivos. Por conta disto, estendemos estas equações considerando uma dependência arbitrária no tempo de forma que a transformada de Laplace pode ser realizada, a fim de proporcionar um resultado que pode abranger várias situações. Por simplicidade, consideramos

$$\langle \eta(t)\eta(t') \rangle = \mathcal{B}\Upsilon(|t - t'|), \quad (1.45)$$

onde $\Upsilon(|t|)$ é uma função dependente do tempo com transformada de Laplace definida. Ao considerar a Eq. (1.45), ao invés da Eq. (1.36), na Eq. (1.39), após alguns cálculos é possível mostrar que

$$\mathcal{G}(s) = \frac{1}{s^2 + s(\bar{\mathcal{A}} + \bar{\mathcal{B}}\Upsilon(s))}, \quad (1.46)$$

a qual tem uma transformada inversa de Laplace dada por

$$\mathcal{G}(t) = \frac{1}{\bar{\mathcal{A}}}(1 - e^{-\bar{\mathcal{A}}t}) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-\bar{\mathcal{B}})^n}{\Gamma(1+n)} \int_0^t dt' t'^{n+1} \mathbf{E}_{1,2}^{(n)}(-\bar{\mathcal{A}}t') \Xi_n(t-t'), \quad (1.47)$$

onde

$$\Xi_n(t) = \int_0^t dt_n \Upsilon(t - t_n) \int_0^{t_n} dt_{n-1} \Upsilon(t_n - t_{n-1}) \dots \int_0^{t_2} dt_1 \Upsilon(t_2 - t_1) \Upsilon(t_1). \quad (1.48)$$

Uma escolha típica para Eq. (1.45) é $\Upsilon(|t|) = \mathbf{E}_\gamma(-|t|^\gamma/\tau_\gamma^\gamma)$ que, depois de substituir na Eq. (1.47), nos conduz a

$$\mathcal{G}(t) = \frac{1}{\bar{\mathcal{A}}}(1 - e^{-\bar{\mathcal{A}}t}) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-\bar{\mathcal{B}})^n}{\Gamma(1+n)} \int_0^t dt' t'^{n+1} e^{-\bar{\mathcal{A}}t'} \Delta_n(t-t') \quad (1.49)$$

com

$$\Delta_n(t) = \frac{t^n}{\tau_\gamma^n} \left[\mathbf{E}_{\gamma,\nu}^{(n)} \left(-\frac{t^\gamma}{\tau_\gamma^\gamma} \right) + \frac{t^\gamma}{\tau_\gamma^\gamma} \mathbf{E}_{\gamma,\nu+\gamma}^{(n)} \left(-\frac{t^\gamma}{\tau_\gamma^\gamma} \right) \right] \quad (1.50)$$

e $\nu = 1 + (1 - \gamma)n$, onde τ age como um tempo característico. Os regimes e as influências do ruído nas soluções, obtidas da equação de Langevin, também podem ser evidenciadas pela análise do comportamento assintótico da Eq. (1.49). Para tempos curtos, tem-se

$$\mathcal{G}(t) \approx t - \frac{1}{2} \bar{\mathcal{A}} t^2 + \frac{1}{6 \tau_\gamma^\gamma} (\bar{\mathcal{A}}^2 \tau_\gamma^\gamma - \bar{\mathcal{B}}) t^3 \quad (1.51)$$

e para tempos longos

$$\mathcal{G}(t) \approx t \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\Gamma(1+n)} (-\bar{\mathcal{B}} t^{2-\gamma})^n \mathbf{E}_{1,\bar{\nu}}^{(n)}(-\bar{\mathcal{A}}t), \quad (1.52)$$

com $\bar{\nu} = 2 + (1 - \gamma)n$. Note que para tempos curtos a função de Mittag-Leffler, assim como no caso anterior, não aparece na Eq. (1.51) indicando que ela não é dominada pelos valores de γ , já a Eq. (1.52) tem uma forte dependência de γ . Por outro lado, note que se fizermos $\gamma = 1$ na função de correlação Eq. (1.45), essa, por sua vez, se reduz a uma forma exponencial que descreve um processo padrão de Ornstein-Uhlenbeck [32].

1.3 Equação de difusão usual

A difusão é um processo natural por meio do qual um dado sistema, com determinadas condições iniciais, encaminha-se para o estado de equilíbrio. Em um processo de difusão num conjunto de elementos que se movem, cada elemento realiza uma trajetória aleatória que, ao passar do tempo, vai se difundindo até atingir o equilíbrio. Os fenômenos de difusão, também chamados de fenômenos de transporte, têm sido amplamente estudados

desde que *Adolf Fick* descreveu tais transientes de forma puramente fenomenológica [35]. Do ponto de vista fenomenológico, o procedimento para um modelo matemático usado para descrever a difusão se dá por meio de “leis”. Existem duas leis comuns [36]. A mais usada, conhecida como lei de Fick da difusão, utiliza um coeficiente de difusão, sendo a mais citada na descrição da difusão. A outra, que não tem um nome formal, envolve um coeficiente de transferência de massa. A opção pela lei de Fick nesse trabalho se deu por ser ela geralmente usada na física, físico-química e biologia.

Seja ρ a densidade da substância que se difunde e J a densidade de corrente (quantidade da substância que atravessa uma unidade de área normal à direção do fluxo, por unidade de tempo). Podemos relacionar a corrente, ou densidade de corrente de difusão, com o gradiente da densidade ρ , obedecendo a seguinte lei linear, a enunciada lei de Fick:

$$\mathbf{J} = -\mathcal{D}\nabla\rho, \quad (1.53)$$

sendo $\rho = \rho(\mathbf{r}, t)$ e \mathcal{D} o coeficiente de difusão, ou difusividade, que depende das propriedades do meio. O sinal negativo na frente do coeficiente de difusão indica que a difusão acontece da região de maior densidade para a de menor densidade. Suponha também que a substância difundida não é nem absorvida nem emitida pelo meio, dessa forma, surge uma lei de conservação que implica uma equação de continuidade:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0. \quad (1.54)$$

Combinando a Eq. (1.53) com a equação da continuidade acima e supondo \mathcal{D} constante, obtemos

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = \mathcal{D}\nabla^2\rho. \quad (1.55)$$

Esta equação é a chamada *equação de difusão*.

Vamos supor agora que a substância seja capaz de ser absorvida (destruída) ou emitida (criada), como no caso de um composto químico. Nesse caso, a equação de difusão assume a seguinte forma

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = \mathcal{D}\nabla^2\rho + \delta \quad (1.56)$$

onde δ é a densidade da fonte, sendo $\delta > 0$ para o caso de criação e $\delta < 0$ para absorção de substância. Se o sistema estiver sob a ação de uma força externa, a densidade de corrente terá a forma

$$\mathbf{J} = -\mathcal{D}\nabla\rho + \mu\mathbf{F}\rho, \quad (1.57)$$

com μ representando a mobilidade. Sendo assim, quando μ for constante, a equação de difusão pode ser descrita como

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \mathcal{D} \nabla^2 \rho - \mu \nabla \cdot (\mathbf{F} \rho). \quad (1.58)$$

Em um processo de difusão, nada impede que tenhamos os dois fenômenos ocorrendo simultaneamente. Caso isso ocorra, a equação é escrita na forma:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \mathcal{D} \nabla^2 \rho - \mu \nabla \cdot (\mathbf{F} \rho) + \delta. \quad (1.59)$$

1.4 A equação de Fokker-Planck

A equação de Fokker-Planck foi primeiramente usada por *Fokker* e *Planck* para descrever o movimento de partículas [23]. Considere agora o movimento de partículas de massa m imersa em um líquido. Se tratássemos o problema de forma exata, teríamos que resolver as equações acopladas de movimento para todas as moléculas do fluido e para todas as partículas. Como não podemos, geralmente, fazer isso, usamos a descrição estocástica, ou seja, descrevemos o sistema por meio de variáveis macroscópicas que flutuam de forma estocástica (aleatória). Em uma boa aproximação, quando temos uma partícula imersa essa, por sua vez, está sujeita a uma força viscosa que será proporcional à sua velocidade e a forças $R(t)$, de caráter aleatório, resultantes das colisões das moléculas do líquido com as partículas de massa m [23] e sujeita a uma força externa $F(x)$. Usando a descrição de Paul Langevin (1872-1946) [29, 37], a equação de movimento é escrita como

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = F(x) - \eta \frac{dx}{dt} + R(t), \quad (1.60)$$

sendo η uma constante positiva, que representa o coeficiente de atrito. Para os casos em que a massa da partícula é desprezível (o termo $m d^2 x / dt^2$ pode ser desconsiderado em relação a $\eta dx / dt$), a Eq. (1.60) resulta em

$$\frac{dx}{dt} = f(x) + \zeta(t) \quad (1.61)$$

com $f(x) = F(x)/\eta$ e $\zeta(t) = R(t)/\eta$.

Em nosso estudo, a aleatoriedade de $\zeta(t)$ implica interações em todas as direções e sentidos diversos. Dessa forma, sendo as variáveis $\zeta(t)$ e $\zeta(t')$ independentes para $t \neq t'$,

teremos médias nulas. A Eq. (1.61), juntamente com as propriedades (1.30) e (1.31), é um exemplo de equação de Langevin, de modo a ser de natureza estocástica.

Definida a Eq. (1.61), podemos encontrar a densidade de probabilidade $\rho(x, t, x_0)$ de a partícula ser encontrada entre x e $x + dx$, no instante de tempo t , estando a partícula em um ponto $x = x_0$ no instante inicial $t = t_0$. Dessa forma, utilizando o procedimento abordado em [29], vamos discretizar o tempo em intervalos iguais a τ e denotar por x_n a posição da partícula no instante $t = n\tau$. Assim, a Eq. (1.61) é escrita na forma aproximada

$$x_{n+1} = x_n + \tau f(x_n) + \sqrt{\tau\Gamma}\xi_n \quad (1.62)$$

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

Se tomarmos $\rho_n = \rho(x_n, n\tau, x_0)$ como sendo a distribuição de probabilidades da variável x_n e $g_n(k)$ a função característica correspondente à variável x_n , teremos

$$g_n(k) = \langle e^{ikx_n} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx_n} \rho_n dx_n \quad (1.63)$$

e desse modo

$$g_{n+1}(k) = \langle e^{ikx_{n+1}} \rangle = \langle e^{ik[x_n + \tau f(x_n) + \tau \zeta_n]} \rangle. \quad (1.64)$$

Tendo em vista que x_n e ζ_n são independentes, podemos escrever a equação acima como

$$g_{n+1}(k) = \langle e^{ik[x_n + \tau f(x_n)]} \rangle \langle e^{ik\tau\zeta_n} \rangle. \quad (1.65)$$

A partir desse resultado, obtemos a expansão de $g_{n+1}(k)$ em τ até termos de primeira ordem, pois estamos supondo τ suficientemente pequeno. Empregando a expansão $e^x = 1 + x + (x^2/2!) + \dots$, sendo $x = ik\tau f(x_n)$, temos

$$\langle e^{ikx_n} e^{ik\tau f(x_n)} \rangle \approx \langle e^{ikx_n} \rangle + ik\tau \langle f(x_n) e^{ikx_n} \rangle, \quad (1.66)$$

e para $x = ik\sqrt{\tau\Gamma}\xi_n$, juntamente com as propriedades $\langle \zeta_n \rangle = 0$ e $\langle \zeta_n^2 \rangle = \Gamma/\tau$, obtemos

$$\langle e^{ik\sqrt{\tau\Gamma}\xi_n} \rangle \approx \langle 1 + ik\sqrt{\tau\Gamma}\xi_n + \frac{(ik\sqrt{\tau\Gamma}\xi_n)^2}{2!} \rangle = 1 - \frac{1}{2}k^2\tau\Gamma. \quad (1.67)$$

Retornando à Eq. (1.65) com os resultados obtidos nas Eqs. (1.66) e (1.67), chegamos a

$$g_{n+1}(k) \approx g_n(k) + \tau \left[ik \langle e^{ikx_n} f(x_n) \rangle - \frac{1}{2}k^2\Gamma g_n(k) \right]. \quad (1.68)$$

Por outro lado,

$$ik \langle e^{ikx_n} f(x_n) \rangle = ik \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx_n} f(x_n) \rho_n dx_n = - \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx_n} \frac{d}{dx_n} [f(x_n) \rho_n] dx_n, \quad (1.69)$$

onde foi realizada uma integração por partes e considerada a condição de contorno natural $\rho_n(\pm\infty) = 0$. De forma análoga, após uma dupla integração por partes,

$$-k^2 g_n(k) = (ik)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx_n} \rho_n dx_n = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx_n} \frac{d^2 \rho_n}{dx_n^2} dx_n \quad (1.70)$$

e a Eq. (1.68) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx_{n+1}} \rho_{n+1} dx_{n+1} - \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx_n} \rho_n dx_n &= -\tau \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx_n} \frac{d}{dx_n} [f(x_n) \rho_n] dx_n \\ &+ \frac{1}{2} \tau \Gamma \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx_n} \frac{d^2 \rho_n}{dx_n^2} dx_n, \end{aligned} \quad (1.71)$$

ou melhor,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx_n} \left\{ \frac{\rho_{n+1} - \rho_n}{\tau} + \frac{d}{dx} [f(x_n) \rho_n] - \frac{\Gamma}{2} \frac{d^2 \rho_n}{dx_n^2} \right\} dx_n = 0. \quad (1.72)$$

Para que a equação acima seja válida

$$\frac{\rho_{n+1} - \rho_n}{\tau} = -\frac{d}{dx} [f(x_n) \rho_n] + \frac{\Gamma}{2} \frac{d^2 \rho_n}{dx_n^2}. \quad (1.73)$$

Tomando o limite $\tau \rightarrow 0$ na Eq. (1.73) e reescrevendo ρ_n como $\rho(x, t)$ e $f(x_n)$ como $f(x, t)$, nos conduz a

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = \frac{\Gamma}{2} \frac{\partial^2 \rho(x, t)}{\partial x^2} - \frac{\partial}{\partial x} [f(x, t) \rho(x, t)], \quad (1.74)$$

que no caso tridimensional, fica representada por

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \mathcal{D} \nabla^2 \rho - \mu \nabla \cdot (\mathbf{F} \rho), \quad (1.75)$$

onde $\mathcal{D} = \Gamma/2$. Essa equação é denominada equação de Fokker-Planck que é a equação de evolução temporal da distribuição de probabilidade $\rho(x, t)$. Note que quando não há força externa atuando no sistema, obtemos o caso mais simples da equação de Fokker-Planck,

a equação de difusão usual. Pela semelhança apresentada entre as duas equações, tomamos a liberdade de usar as denominações equação de Fokker-Planck e equação de difusão indistintamente. A resolução da equação de Fokker-Planck significa, pois, resolver a equação de Langevin permitindo encontrar a média de variáveis macroscópicas, lembrando que essa equação não apenas descreve propriedades estacionárias, mas também a dinâmica de sistemas dependentes do tempo.

1.5 Soluções da equação de Fokker-Planck

A difusão usual com aplicação de um campo externo é frequentemente modelada em termos da equação de Fokker-Planck [38–40]. Muitos problemas físicos de transporte acontecem sob a aplicação de um campo externo, por exemplo, uma indução eletrostática exercendo uma força na carga carregada, um potencial periódico que é encontrado em certos problemas de estado sólido ou em modelos de motores moleculares, etc. Como ilustração, apresentaremos a equação de Fokker-Planck sem termo de fonte e sem força externa (difusão usual), com fonte proporcional à densidade e com força linear.

No estudo que segue consideramos somente o caso unidimensional para simplificar os cálculos e a notação, sendo assim, não havendo perda de generalidade. Seja $\rho(x, t)$ a densidade de uma certa substância num meio contínuo fora do equilíbrio. Para encontrarmos a solução da Eq. (1.55), aplicamos a transformada de Fourier, obtendo

$$\frac{\partial \rho(k, t)}{\partial t} = -\mathcal{D}k^2 \rho(k, t), \quad (1.76)$$

onde a solução dessa equação é

$$\rho(k, t) = \rho(k, 0) e^{-\mathcal{D}k^2 t}, \quad (1.77)$$

sendo $\rho(k, 0)$ a transformada de Fourier da condição inicial. Seja $\rho(x, 0) = \hat{f}(x)$. Então,

$$\rho(k, 0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x, 0) e^{ikx} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{f}(x) e^{ikx} dx. \quad (1.78)$$

Substituindo a Eq. (1.78) na Eq. (1.77), obtemos

$$\rho(k, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{f}(x) e^{ikx} e^{-\mathcal{D}k^2 t} dx, \quad (1.79)$$

onde a inversa da transformada de Fourier da Eq. (1.79) é dada por

$$\rho(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \mathcal{G}(x - x', t) \rho(x', 0) \quad (1.80)$$

$$\mathcal{G}(x - x', t) = \frac{1}{(4\pi\mathcal{D}t)^{1/2}} e^{-(x-x')^2/4\mathcal{D}t}. \quad (1.81)$$

A função $\mathcal{G}(x - x', t)$ é a função de Green (A.5) da equação de difusão (1.55), que tem um comportamento gaussiano para diferentes valores do coeficiente de difusão.

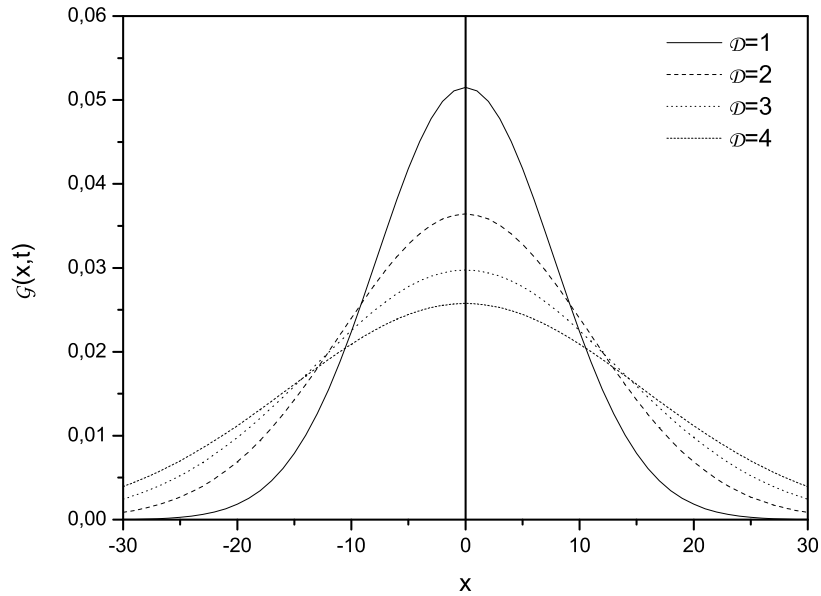


Figura 1.4: Comportamento de $\mathcal{G}(x, t)$ versus x , que ilustra a Eq. (1.81) considerando, por simplicidade, $t = 30$.

Vamos considerar uma condição inicial do tipo fonte pontual $\hat{f}(x) = \rho_0 \delta(x - x')$, estando toda a substância concentrada em $x = x'$ no instante inicial. Então, $\rho(x, t)$ assume a forma

$$\rho(x, t) = \frac{\rho_0}{(4\pi\mathcal{D}t)^{1/2}} e^{-(x-x')^2/4\mathcal{D}t}. \quad (1.82)$$

Para uma condição inicial do tipo gaussiana, $\hat{f}(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \rho'_0 e^{-\alpha(x-x'')^2}$ a densidade é representada por

$$\rho(x, t) = \frac{\rho'_0}{[4\pi\mathcal{D}(t + t_0)]^{1/2}} e^{-(x-x'')^2/4\mathcal{D}(t+t_0)}, \quad (1.83)$$

onde $t_0 = 1/4\mathcal{D}\alpha$. Com estas soluções podemos calcular o segundo momento, que para nós desempenha um papel importante, e conhecendo o segundo momento obter a variância e conseqüentemente saber como as distribuições se alargam [41].

Consideramos agora a equação de Fokker-Planck com um termo de fonte δ , um sorvedouro, admitindo que esse termo seja proporcional à densidade. Dessa forma, teremos $\delta = -\alpha(t)\rho(x, t)$, conduzindo a

$$\frac{\partial\rho(x, t)}{\partial t} = \mathcal{D}\frac{\partial^2\rho(x, t)}{\partial x^2} - \frac{\partial[f(x)\rho(x, t)]}{\partial x} - \alpha(t)\rho(x, t). \quad (1.84)$$

Se ignorarmos os termos difusivo e de arraste, a Eq. (1.84) pode ser reescrita como

$$\frac{\partial\tilde{\rho}}{\partial t} = -\alpha(t)\tilde{\rho}, \quad (1.85)$$

cuja solução é $\tilde{\rho} = \rho_0 \exp[-\int_0^t \alpha(t')dt']$. Esse resultado sugere que a solução seja da forma

$$\rho(x, t) = e^{-\int_0^t \alpha(t')dt'} \hat{\rho}(x, t) \quad (1.86)$$

que, substituída na Eq. (1.84), nos leva a

$$\frac{\partial\hat{\rho}(x, t)}{\partial t} = \mathcal{D}\frac{\partial^2\hat{\rho}(x, t)}{\partial x^2} - \frac{\partial[f(x)\hat{\rho}(x, t)]}{\partial x}. \quad (1.87)$$

Assim, o tratamento da Eq. (1.84) fica reduzido a resolvê-la sem o termo de fonte (ou sorvedouro). Para $f = 0$, a solução está exposta na Eq. (1.80). Portanto, se resolvermos a Eq. (1.80) para $\hat{\rho}$, com a condição inicial $\rho(x, 0) = \rho_0\delta(x)$ e $f = 0$ (veja Fig. (1.5)), obteremos a solução

$$\rho(x, t) = \frac{\rho_0}{(4\pi\mathcal{D}t)^{1/2}} e^{-\int_0^t \alpha(t')dt'} e^{-x^2/4\mathcal{D}t}. \quad (1.88)$$

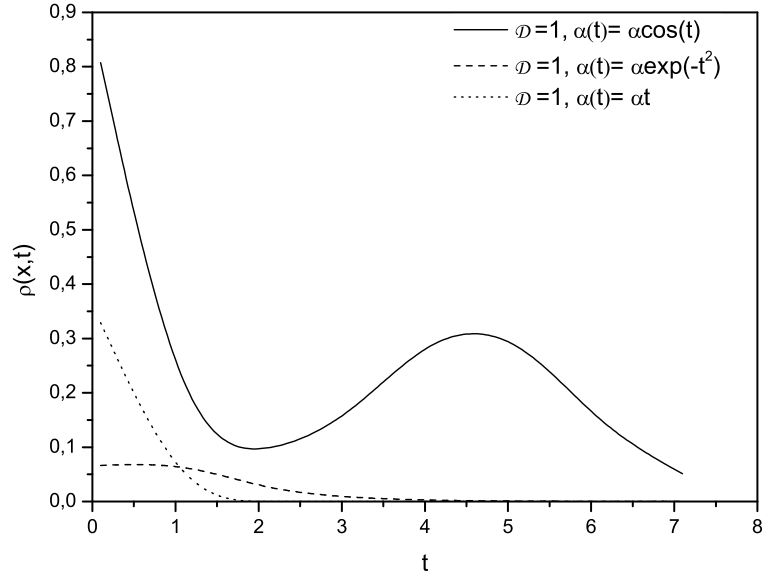


Figura 1.5: Comportamento de $\rho(x, t)$ versus t , que ilustra a Eq. (1.88) considerando, por simplicidade, $\rho_0 = 1$, $x = 0$ para $\alpha(t) = \cos(t)$, $\rho_0 = 1$, $x = 0$, $\alpha = 1$ para $\alpha(t) = \alpha e^{-t^2}$, e $\rho_0 = 1$, $x = 2$, $\alpha = 1$ para $\alpha(t) = \alpha t$.

Agora, como um último exemplo, vamos considerar a equação de Fokker-Planck com um termo de arraste linear, que é um exemplo conhecido como processo de Ornstein-Uhlenbeck [30]. Aqui, as partículas estão sujeitas a um potencial harmônico, implicando um termo de arraste linear, isto é, $f = -\gamma x$. A equação de Fokker-Planck unidimensional correspondente é

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = \gamma \frac{\partial}{\partial x} [x \rho(x, t)] + \mathcal{D} \frac{\partial^2 \rho(x, t)}{\partial x^2}. \quad (1.89)$$

Suponha que nossa condição inicial está concentrada em um ponto, ou seja,

$$\rho(x, 0) = \delta(x - x_0), \quad (1.90)$$

onde usamos $\rho_0 = 1$ e $x_0 \neq 0$, frisando que as diversas posições não são equivalentes.

A solução da Eq. (1.89) pode ser obtida aplicando o método de separação de variáveis e, depois de alguns cálculos, ser representada pelos polinômios de Hermite, ou, é encontrada facilmente utilizando a técnica de transformada de Fourier com respeito a

x [23]. A Eq. (1.89) já transformada é dada por

$$\frac{\partial \tilde{\rho}(k, t)}{\partial t} = -\gamma k \frac{\partial \tilde{\rho}(k, t)}{\partial k} - \mathcal{D} k^2 \tilde{\rho}(k, t), \quad (1.91)$$

onde temos apenas derivadas de primeira ordem. A condição inicial já transformada é

$$\tilde{\rho}(k, 0) = e^{ikx_0}. \quad (1.92)$$

Para resolver a Eq. (1.91), vamos introduzir a função

$$\tilde{\rho}(k, t) = \exp \left[\sum_{n=1}^{\infty} a_n(t) k^n \right], \quad (1.93)$$

que, substituída em (1.91), conduz a

$$\sum_{n=1}^{\infty} k^n \left(\frac{da_n}{dt} + \gamma n a_n \right) + \mathcal{D} k^2 = 0. \quad (1.94)$$

Para $n = 1$, temos a equação

$$\frac{da_1}{dt} + \gamma a_1 = 0 \quad (1.95)$$

com solução

$$a_1(t) = a_1(0) e^{-\gamma t}. \quad (1.96)$$

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

$$\frac{da_2}{dt} + 2\gamma a_2 + \mathcal{D} = 0, \quad (1.97)$$

e apresenta a seguinte solução

$$a_2(t) = -\frac{\mathcal{D}}{2\gamma} (1 - e^{-2\gamma t}) + a_2(0) e^{-2\gamma t}. \quad (1.98)$$

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

$$\frac{da_n}{dt} + \gamma n a_n = 0 \quad (1.99)$$

com soluções

$$a_n(t) = a_n(0) e^{-n\gamma t}. \quad (1.100)$$

Comparando (1.92) com (1.93), verificamos que $a_1(0) = ix_0$ e $a_n(0) = 0$ para valores de $n \geq 2$. Assim,

$$\tilde{\rho}(k, t) = e^{a_1(t)k + a_2(t)k^2} \quad (1.101)$$

e, efetuando a transformada inversa da equação acima, encontramos

$$\rho(x, t) = \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi\mathcal{D}(1 - e^{-2\gamma t})}} \exp \left[-\gamma \frac{(x - x_0 e^{-\gamma t})^2}{2\mathcal{D}(1 - e^{-2\gamma t})} \right]. \quad (1.102)$$

Observe na solução acima, para $t \rightarrow \infty$, obtemos uma solução estacionária. Tal fato pode ser verificado também ao analisarmos a variância que emerge dessa distribuição, pois ela nos dá como a distribuição se alarga.

Cálculo fracionário

Nesse capítulo vamos apresentar, inicialmente, um histórico do cálculo fracionário e, depois, em detalhes os fundamentos teóricos e matemáticos do formalismo que descreve o transporte anômalo, como diferenciais fracionárias e integrais fracionárias. Estas ferramentas podem ser aplicadas a uma ampla variedade de sistemas complexos, sendo indispensável na análise teórica de processos difusivos anômalos, aos quais esse trabalho é dedicado.

2.1 A origem do cálculo fracionário

Historicamente, o conceito de integração e diferenciação de ordem arbitrária, conhecido na linguagem moderna como *cálculo fracionário*, é tão antiga quanto o cálculo usual, com derivadas de ordem inteira. Isaac Newton (1642 – 1727) e Gottfried Wilhelm Leibniz (1646 – 1716), independentemente, desenvolveram as noções de cálculo diferencial e integral no século XVII e, desde então, vêm sendo utilizado nas mais diversas áreas das Ciências. A notação moderna de derivada de ordem inteira foi primeiramente introduzida da idéia de um método simbólico $D^n y = \frac{d^n y}{dx^n}$ para representar a n -ésima derivada da função y , onde n é um inteiro positivo [42]. Em 30 de setembro de 1695, L'Hôpital escreveu uma carta a Leibniz questionando a possibilidade de n ser uma fração, isto é, qual seria o significado de $D^n y = \frac{d^n y}{dx^n}$ se n fosse igual a $1/2$. Leibniz num tom profético afirmou que: $D^{1/2} x$ seria igual a $x\sqrt{dx} : x$. “Este é um aparente paradoxo no qual, um dia, terá aplicações úteis”. Desde então, o cálculo fracionário tem atraído a atenção de matemáticos famosos como Euler (1738), Laplace (1820), Fourier (1822) e Lacroix (1819). Esse último foi o primeiro a mencionar em menos de duas páginas sobre a derivada de ordem arbitrária

em um livro de 700 páginas. Lacroix desenvolveu uma fórmula para n -ésima derivada de $y = x^m$, onde m é um inteiro positivo

$$\frac{d^n y}{dx^n} = \frac{m!}{(m-n)!} x^{m-n}, \quad m \geq n. \quad (2.1)$$

Usando a função Gama [43] para generalizar o fatorial, ele obteve a fórmula para derivada fracionária

$$\frac{d^n y}{dx^n} = \frac{\Gamma(m+1)}{\Gamma(m-n+1)} x^{m-n} \quad (2.2)$$

onde m e n são números arbitrários. No campo do cálculo fracionário, no entanto, o operador D^n tem sido generalizado para todos os valores de n : positivo ou negativo, racional ou irracional, real ou complexo. Para um caso particular da equação acima tomando $m = 1$ e $n = 1/2$, segue o resultado

$$\frac{d^{1/2} y}{dx^{1/2}} = \frac{2\sqrt{x}}{\sqrt{\pi}}. \quad (2.3)$$

É interessante notar que o resultado obtido por Lacroix, no formalismo clássico do período, está de acordo com o método mais aceito nos dias atuais, que é o proposto por Riemann-Liouville que possibilita várias aplicações que serão vistas mais adiante.

Joseph B. J. Fourier (1822), já citado, foi o próximo a contribuir para o estudo das derivadas de ordem fracionária. Em seu estudo, obteve uma representação integral [44] para $f(x)$

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} f(\alpha) d\alpha \int_{-\infty}^{+\infty} \cos p(x-\alpha) dp \quad (2.4)$$

a qual derivou um operador fracionário para n arbitrário dado por

$$\frac{d^n}{dx^n} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} f(\alpha) d\alpha \int_{-\infty}^{+\infty} p^u \cos[p(x-\alpha) + \frac{n\pi}{2}] dp \quad (2.5)$$

onde n seria qualquer quantidade, positiva ou negativa.

Todos estes grandes matemáticos da época mencionaram sobre as derivadas de ordem fracionárias, mas o primeiro a fazer uso delas foi Abel (1823), na solução de uma equação integral que aparece na formulação do problema da tautócrona [45]. A solução de Abel foi descrita na época como “elegante” pelos matemáticos e, talvez, possa ter sido o que atraía a atenção de Liouville que resolveu fazer um amplo estudo do cálculo fracionário.

Liouville iniciou em 1832 com seu resultado bem conhecido para derivadas de ordem inteira $D^n e^{ax} = a^n e^{ax}$ onde $D = d/dx$, $n \in \mathbb{N}$, e estendeu de uma forma natural

para a derivada de ordem arbitrária

$$D^\nu e^{ax} = a^\nu e^{ax}. \quad (2.6)$$

Diante da Eq. (2.6), Liouville assumiu que a derivada de ordem arbitrária de uma função $f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{a_n x}$, com $\operatorname{Re} a_n > 0$, poderia ser escrita na forma

$$D^\nu f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n a_n^\nu e^{a_n x}. \quad (2.7)$$

A Eq. (2.7) é conhecida como a primeira fórmula de Liouville para a derivada fracionária de uma função $f(x)$. Embora a equação acima generalize a derivada de ordem arbitrária ν ela é restrita a funções do tipo descrita pela $f(x)$ definida acima. Devido a isso, Liouville formulou uma segunda definição que leva em conta uma integral relacionada com as funções Gama

$$I = \int_0^{+\infty} u^{a-1} e^{-xu} du, \quad a > 0, \quad x > 0. \quad (2.8)$$

Efetuada uma mudança de variáveis $xu = t$, a equação precedente fica da forma

$$I = x^{-a} \int_0^{+\infty} t^{a-1} e^{-t} dt = x^{-a} \Gamma(a) \quad (2.9)$$

onde aplicando o operador de Liouville D^ν em ambos os lados, obtemos

$$\begin{aligned} D^\nu x^{-a} &= \frac{(-1)^\nu}{\Gamma(a)} \int_0^{+\infty} u^{a+\nu-1} e^{-xu} du \\ &= \frac{(-1)^\nu \Gamma(a+\nu)}{\Gamma(a)} x^{-a-\nu}, \quad a > 0. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Essa segunda definição é útil só para funções do tipo x^{-a} com $a > 0$. Assim as duas definições de Liouville são restritas a certas classes de funções.

G. F. Bernhard Riemann também contribuiu para o cálculo fracionário sugerindo uma generalização da série de Taylor e obter uma fórmula para a integração de ordem fracionária,

$$D^\nu f(x) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_c^x (x-t)^{\nu-1} f(t) dt + \Psi(x) \quad (2.11)$$

onde $\Psi(x)$ é uma função complementar que foi introduzida para reduzir a ambiguidade do limite inferior da integral dando uma definição mais formal para c . Essa existência de

uma função complementar gerou considerável confusão e acabou se tornando ineficiente e demasiadamente complexa. Atualmente, a assim chamada definição de Riemann-Liouville para a integração fracionária é exatamente a dada pela Eq. (2.11) porém sem a função complementar.

2.2 A definição de Riemann-Liouville

Historicamente, o primeiro trabalho ligado à definição da derivada fracionária de Riemann-Liouville foi o de 1869 publicado por Sonin [46]. O ponto de partida de seu trabalho foi a fórmula integral de Cauchy

$$D^n f(z) = \frac{n!}{2\pi i} \int \frac{f(\zeta)}{(\zeta - z)^{n+1}} d\zeta. \quad (2.12)$$

Para generalizar a Eq. (2.12), Sonin tomou a derivada fracionária de $f(z)$. Devemos observar que para tomar a derivada fracionária da Eq. (2.12) não é simplesmente trocar n por ν , porque o integrando da Eq. (2.12) deixa de possuir um pólo e passa a possuir um ponto de ramificação em $z = \zeta$, assim temos que mudar o contorno C para algum contorno modificado do tipo Bromwich [47]. Esse procedimento é bastante elaborado e, portanto, não serão apresentados aqui. Podemos introduzir a idéia de gerar integrais que é análoga a de gerar funções. Quando geramos funções $f(z)$, geramos uma sequência de coeficientes p_n , dependendo da ordem da expansão em uma série de potência $\sum_n p_n z^n$ e, uma integral gerada é uma sequência de integrais que também dependem da ordem da expansão.

Considere uma integral dupla de uma função $f(x)$. Mudando a ordem de integração e trocando os limites de integração, podemos reduzir a uma integração simples

$$\int_0^x dx_1 \int_0^{x_1} f(\tau) d\tau = \int_0^x f(\tau) d\tau \int_\tau^x dx_1 = \int_0^x (x - \tau) f(\tau) d\tau. \quad (2.13)$$

Da mesma forma, pode ser feito para uma integral tripla

$$\begin{aligned} \int_0^x dx_2 \int_0^{x_2} dx_1 \int_0^{x_1} f(\tau) d\tau &= \int_0^x dx_2 \left[\int_0^{x_2} (x_2 - \tau) f(\tau) d\tau \right] \\ &= \int_0^x f(\tau) d\tau \int_\tau^x (x_2 - \tau) dx_2 = \int_0^x \frac{(x - \tau)^2}{2} f(\tau) d\tau. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Fazendo esse mesmo procedimento para n integrais temos

$$\underbrace{\int_0^x dx_{n-1} \int_0^{x_{n-1}} dx_{n-2} \int_0^{x_{n-2}} dx_{n-3} \dots \int_0^{x_1}}_{n \text{ vezes}} f(\tau) d\tau = \int_0^x \frac{(x-\tau)^{n-1}}{(n-1)!} f(\tau) d\tau \quad (2.15)$$

onde substituindo $(n-1)!$ por $\Gamma(n)$, podemos definir a integral fracionária de ordem arbitrária ν como

$${}_c D_x^{-\nu} f(x) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_c^x (x-\tau)^{\nu-1} f(\tau) d\tau \quad \operatorname{Re}(\nu) > 0 \quad (2.16)$$

isto é, a integral fracionária de Riemann-Liouville de ordem ν . Da definição acima, a hipótese de que f é contínua por partes em $(0, \infty)$ é tomada com o intuito de que essas funções tenham comportamento similar a $\ln t$ e t^ν , com $-1 < \nu < 0$ em uma vizinhança da origem que também tenham sua integral fracionária definida [48]. Nesse trabalho, vamos usar a notação $J^\nu f(x)$, introduzida por Gorenflo e Mainardi [49], para representar a integral fracionária Eq. (2.16), isto é,

$${}_c D_x^{-\nu} = J^\nu f(x), \quad (2.17)$$

para ν arbitrário. No caso em que $c > 0$, temos a versão de Riemann para a integral de ordem fracionária, para $c = 0$, temos a versão de Riemann-Liouville e para $c = -\infty$, temos a versão de Liouville.

• Funções da classe de Riemann

Uma condição suficiente para que uma função f seja da classe de Riemann é que

$$f\left(\frac{1}{x}\right) = \mathcal{O}(x^{1-\epsilon}), \quad \epsilon > 0. \quad (2.18)$$

Exemplos de funções desta classe são, constantes e funções do tipo

$$x^a, \quad a > -1. \quad (2.19)$$

• Funções da classe de Liouville

Por outro lado, se $c = -\infty$, a Eq. (2.16) pode ser escrita como

$${}_{-\infty} J_x^\nu f(x) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_{-\infty}^x (x-\tau)^{\nu-1} f(\tau) d\tau \quad \operatorname{Re}(\nu) > 0. \quad (2.20)$$

Uma condição suficiente para que uma função f seja da classe de Liouville é que

$$f(-x) = \mathcal{O}(x^{-\nu-\epsilon}), \quad \epsilon > 0, \quad x \rightarrow \infty, \quad (2.21)$$

onde funções da classe de Liouville são representadas por

$$x^{-a}, \quad a > \nu > 0. \quad (2.22)$$

Funções da classe de Liouville não incluem constantes e, se $-1 < a < 0$, dependendo dos valores de ν , as duas classes podem se sobrepor. Como ficou claro, existe mais de uma definição de integração fracionária e, por conveniência,

$${}_c J_x^\nu f(x) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_c^x (x - \tau)^{\nu-1} f(\tau) d\tau, \quad x > c \quad (2.23)$$

é a versão de Riemann

$${}_{-\infty} J_x^\nu f(x) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_{-\infty}^x (x - \tau)^{\nu-1} f(\tau) d\tau, \quad (2.24)$$

a versão de Liouville e,

$${}_0 J_x^\nu f(x) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^x (x - \tau)^{\nu-1} f(\tau) d\tau \quad (2.25)$$

é a versão de Riemann-Liouville. Além dessas três versões, outra definição de integral fracionária que vem se tornando mais comum é dada por Weyl, isto é,

$${}_x W_\infty^{-\nu} f(x) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_x^{+\infty} (\tau - x)^{\nu-1} f(\tau) d\tau, \quad \operatorname{Re}(\nu) > 0. \quad (2.26)$$

2.3 Definição da integral fracionária

A formulação comum para a integral fracionária pode ser obtida diretamente a partir de uma expressão tradicional da integração repetida de uma função [48], onde a idéia de derivada fracionária ou integral fracionária pode ser descrita de diferentes formas [42]. Aqui, vamos apresentar a definição formal, seguindo a notação moderna introduzida por Gorenflo e Mainardi [49].

Seja X um número estritamente positivo, f uma função contínua por partes em

$[0, X]$. Então se $\nu \geq 1$ existe uma integral de Riemann para todo $t \in [0, X]$ na forma:

$$\int_0^t (t - \xi)^{\nu-1} f(\xi) d\xi. \quad (2.27)$$

Para que a integral acima convirja, existem condições mais gerais, como por exemplo, para que f seja contínua em $(0, X]$ e que tenha comportamento similar a t^λ para $-1 < \lambda < 0$ em torno da origem, se $0 < \text{Re}(\nu) < 1$, a integral acima existe como uma integral imprópria de Riemann, embora para nossos estudos a condição que f seja contínua por partes é suficiente.

Definição 1. Seja $\text{Re}(\nu) > 0$ e f uma função contínua por partes em $(0, \infty)$ integrável em qualquer subintervalo de $[0, \infty)$, então para $t > 0$

$${}_0D_t^{-\nu} f(t) = {}_0J^\nu f(t) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^t (t - \xi)^{\nu-1} f(\xi) d\xi, \quad (2.28)$$

onde $J^\nu = {}_0J^\nu$ denota a integral fracionária de Riemann-Liouville, que em alguns casos podemos recorrer à notação clássica ${}_0D^{-\nu} f(t)$ para a integral de $f(t)$ de ordem ν .

Da definição acima, já havíamos observado que a Eq. (2.28) é uma integral imprópria quando $0 < \text{Re}(\nu) < 1$. A reivindicação de que f seja contínua por partes em $(0, \infty)$ é tomada com o intuito de que funções que tenham comportamento similar a $\ln t$ e t^μ , com $-1 < \mu < 0$ em torno da origem, também tenham sua integral fracionária definida. Dessa forma, definimos \mathbf{C} a classe de funções que satisfazem a definição 1.

Por exemplo, a integral de ordem não inteira ν de $f(x) = x^\mu$ com $\mu > -1$, pela definição precedente, temos que

$$\begin{aligned} J^\nu x^\mu &= \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^x (x - t)^{\nu-1} t^\mu dt \\ &= \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^x \left[x \left(1 - \frac{t}{x} \right) \right]^{\nu-1} t^\mu dt. \end{aligned} \quad (2.29)$$

Note que o lado direito da equação acima é essencialmente a função Beta (A.3.2) e como $\mu + \text{Re}(\nu)$ pode ser negativo [44], observamos através deste exemplo o porquê de termos $t > 0$ em nossa definição da integral fracionária. Introduzindo a mudança de variável

$u = t/x$, podemos reescrever a Eq. (2.29) na forma

$$\begin{aligned} J^\nu x^\mu &= \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^1 (1-u)^{\nu-1} (xu)^\mu du \\ &= \frac{x^{\nu+\mu}}{\Gamma(\nu)} \int_0^1 u^\mu (1-u)^{\nu-1} du \\ &= \frac{x^{\nu+\mu}}{\Gamma(\nu)} B(\mu+1, \nu) = \frac{\Gamma(\mu+1)}{\Gamma(\mu+\nu+1)} x^{\nu+\mu}. \end{aligned} \quad (2.30)$$

Como caso particular, fazendo $\mu = 0$ na equação acima, temos a derivada fracionária de uma constante

$$\begin{aligned} J^\nu x^0 &= \frac{x^0}{\Gamma(\nu+1)} x^\nu \\ &= \frac{K}{\Gamma(\nu+1)} x^\nu, \quad \nu > 0, \end{aligned} \quad (2.31)$$

onde $K = x^0$. Para evitar complicações matemáticas não relacionadas ao cálculo fracionário, assumimos ν como sendo real, por outro lado, ν pode ser imaginário e uma discussão à respeito pode ser encontrada em [50].

2.4 Exemplos de integrais fracionárias

Vamos agora encontrar a integral fracionária de algumas funções elementares tais como e^{at} , $\sin(at)$ e $\cos(at)$, onde a é uma constante e as funções fazem parte da classe \mathbf{C} , ou seja, a classe de funções que satisfazem a definição 1. O leitor as vezes pode se perguntar porque não damos exemplos de funções mais elaboradas ao invés de funções elementares, e a resposta é simples, mesmo o cálculo de integrais fracionárias sendo de funções simples costuma passar por complicações, por exemplo, funções transcendentes conhecidas como função Gama incompleta (A.3.3).

Seja $f(t) = e^{at}$ pertencente a classe \mathbf{C} , com $a \in \mathbb{R}$, temos

$$J^\nu e^{at} = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^t (t-\xi)^{\nu-1} e^{a\xi} d\xi \quad \nu > 0. \quad (2.32)$$

Introduzindo a mudança de variável $x = t - \xi$ podemos escrever

$$J^\nu e^{at} = \frac{e^{at}}{\Gamma(\nu)} \int_0^t x^{\nu-1} e^{-ax} dx \quad \nu > 0. \quad (2.33)$$

Com a mudança de variável $\xi = ax$, a equação acima se torna

$$J^\nu e^{at} = \frac{e^{at}}{\Gamma(\nu)a^\nu} \int_0^t \xi^{\nu-1} e^{-\xi} d\xi \quad (2.34)$$

onde a equação precedente não é uma função elementar, porém podemos fazer uma associação entre ela e a função Gama incompleta, denotada por γ^* e definida por

$$\begin{aligned} \gamma^*(\nu, t) &= \int_0^t \xi^{\nu-1} e^{-\xi} d\xi \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k t^{\nu+k}}{k!(\nu+k)} = e^{-t} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\nu)t^{\nu+k}}{\Gamma(\nu+k+1)} \quad \nu > 0. \end{aligned} \quad (2.35)$$

Considerando (A.3.3), juntamente com as equações anteriores, encontramos a relação

$$\begin{aligned} J^\nu e^{at} &= t^\nu \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(at)^k}{\Gamma(\nu+k+1)} = \frac{t^\nu}{\Gamma(\nu+1)} {}_1F_1(1, \nu+1; at) \\ E_t(\nu, a) &= t^\nu e^{at} \gamma^*(\nu, at). \end{aligned} \quad (2.36)$$

Como o lado direito da equação anterior é a integral fracionária de uma exponencial, tomando $\alpha = 1$ na expressão para a função de Mittag-Leffler (A.28), pode-se obter

$$E_{1, \mu+1}(x) = e^x \gamma^*(\mu, x) \quad (2.37)$$

com o primeiro parâmetro igual a unidade.

Uma aplicação direta da definição 1 as funções seno e cosseno nos conduz, respectivamente, às funções $S_t(\nu, a)$ e $C_t(\nu, a)$, da seguinte maneira

$$\begin{aligned} S_t(\nu, a) &\equiv J^\nu \sin at = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^t \xi^{\nu-1} \sin[a(t-\xi)] d\xi, \quad \nu > 0 \\ C_t(\nu, a) &\equiv J^\nu \cos at = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^t \xi^{\nu-1} \cos[a(t-\xi)] d\xi, \quad \nu > 0. \end{aligned} \quad (2.38)$$

Se ao invés de seguir a integral fracionária das funções seno e cosseno da definição original, procedermos através de resultados derivados da função exponencial usando o fato que

$e^{iat} = \cos at + i \sin at$, podemos escrever a seguinte relação:

$$J^\nu e^{iat} = J^\nu[\cos at] + iJ^\nu[\sin at] \quad (2.39)$$

$$= t^{-\nu} \left[\sum_{k \text{ par}}^{\infty} \frac{(-1)^{k/2}(at)^k}{\Gamma(-\nu + k + 1)} + i \sum_{k \text{ ímpar}}^{\infty} \frac{(-1)^{(k-1)/2}(at)^k}{\Gamma(-\nu) + k + 1} \right]. \quad (2.40)$$

Em resumo, temos que:

$$J^\nu e^{at} = E_t(\nu, a), \quad (2.41)$$

$$J^\nu \sin at = S_t(\nu, a), \quad (2.42)$$

$$J^\nu \cos at = C_t(\nu, a). \quad (2.43)$$

Como podemos ver, a realização destes cálculos é um pouco trabalhoso devido ao núcleo $(t - \xi)^{\nu-1}$. Porém, esse núcleo permite desenvolver técnicas para o cálculo imediato de integrais fracionárias para uma ampla classe de funções. Essas técnicas serão vistas a seguir com a utilização da definição 1.

Seja f uma função complexa e $J^\nu f(t)$ a integral fracionária de ordem ν da função f com $\text{Re}(\nu) > 0$ é possível mostrar que [24]

$$J^\nu [tf(t)] = tJ^\nu f(t) - \nu J^{\nu+1} f(t). \quad (2.44)$$

Pela definição 1, temos que

$$J^\nu [tf(t)] = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^t (t - \xi)^{\nu-1} [\xi f(\xi)] d\xi. \quad (2.45)$$

Se substituirmos o termo entre colchetes no integrando acima por $[t - (t - \xi)]f(\xi) = \xi f(\xi)$, podemos escrever

$$\begin{aligned} J^\nu [tf(t)] &= \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^t (t - \xi)^{\nu-1} [t - (t - \xi)]f(\xi) d\xi \\ &= \frac{t}{\Gamma(\nu)} \int_0^t (t - \xi)^{\nu-1} [f(\xi)] d\xi - \frac{\nu}{\Gamma(\nu + 1)} \int_0^t (t - \xi)^\nu [f(\xi)] d\xi, \end{aligned} \quad (2.46)$$

e, sabendo que

$$\frac{1}{\Gamma(\nu)} = \frac{\nu}{\Gamma(\nu + 1)}, \quad (2.47)$$

resulta em

$$J^\nu [tf(t)] = tJ^\nu f(t) - \nu J^{\nu+1} f(t). \quad (2.48)$$

Similarmente, para as Eqs. (2.41), (2.42) e (2.43) temos que

$$J^\nu [te^{at}] = tE_t(\nu, a) - \nu E_t(\nu + 1, a), \quad \nu > 0 \quad (2.49)$$

$$J^\nu [t \cos at] = tC_t(\nu, a) - \nu C(\nu + 1, a), \quad \nu > 0 \quad (2.50)$$

$$J^\nu [t \sin at] = tS_t(\nu, a) - \nu S_t(\nu + 1, a), \quad \nu > 0. \quad (2.51)$$

A Eq. (2.44) ainda pode ser generalizada fazendo t elevado a uma potência de um número p qualquer, levando-nos a

$$J^\nu [t^p f(t)] = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^t (t - \xi)^{\nu-1} [\xi^p f(\xi)] d\xi. \quad (2.52)$$

Fazendo uma mudança de variável similar a anterior, isto é,

$$\xi^p = [t - (t - \xi)]^p = \sum_{k=0}^p (-1)^k \binom{p}{k} t^{p-k} (t - \xi)^k \quad (2.53)$$

com

$$\binom{-z}{n} = \frac{\Gamma(1-z)}{n!\Gamma(1-z-n)} = (-1)^n \frac{\Gamma(z+n)}{n!\Gamma(z)} = (-1)^n \binom{z+n-1}{n} \quad (2.54)$$

e, combinando as Eq (2.52) e (2.53), temos que

$$\begin{aligned} J^\nu [t^p f(t)] &= \frac{1}{\Gamma(\nu)} \sum_{k=0}^p (-1)^k \binom{p}{k} t^{p-k} \int_0^t (t - \xi)^{\nu+k-1} f(\xi) d\xi \\ &= \frac{1}{\Gamma(\nu)} \sum_{k=0}^p (-1)^k \binom{p}{k} \Gamma(\nu + k) t^{p-k} J^{\nu+k} f(t). \end{aligned} \quad (2.55)$$

Com algumas técnicas é possível encontrar integrais fracionárias de funções ainda mais complicadas, como, para $\nu > 0$ e $\mu > -1$ [45], ou ainda, quando o limite de integração inferior é diferente de zero.

2.5 Transformada de Laplace da integral fracionária

A transformada de Laplace é uma ferramenta indispensável em nossos estudos, em especial nas equações diferenciais de ordem fracionária. Para o cálculo de transformadas de Laplace das integrais fracionárias, temos que ter conhecimento das transformadas das funções elementares e do produto de convolução delas [48].

Seja $f(t)$ uma função definida no intervalo $0 \leq t < \infty$. A transformada de Laplace de $f(t)$ é denotada por $F(s)$ e definida por

$$F(s) \equiv \mathcal{L}[f(t)] = \int_0^{\infty} e^{-st} f(t) dt, \quad (2.56)$$

na qual s , chamado parâmetro da transformada, é tal que $\text{Re}(s) > 0$. Se $f(t)$ é uma função complexa contínua por partes e de ordem exponencial α , existem duas constantes positivas M e μ tais que para todo $t \in [0, \infty)$ vale a relação

$$|f(t)| < M e^{\mu t}. \quad (2.57)$$

Quando $f(t)$ é da classe **C** e de ordem exponencial α , então a integral de Laplace

$$\int_0^{\infty} f(t) e^{-st} dt \quad (2.58)$$

existe para todo s com $\text{Re}(s) > \alpha$.

Em um grande número de problemas práticos, a função $F(s)$ é uma função racional de s , que para alguns casos, a inversão de Laplace é facilitada pelo fato de que a transformada de Laplace representa uma transformação linear. Assim, definimos a transformada inversa de Laplace como

$$f(t) = \mathcal{L}^{-1}\{F(s)\} = \begin{cases} \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} F(s) e^{st} ds & \text{se } t > 0 \\ 0 & \text{se } t < 0, \end{cases} \quad (2.59)$$

onde a integração deve ser efetuada ao longo de uma reta $s = \gamma$ no plano complexo, com $s = x + iy$ e $x, y \in \mathbb{R}$, desde que γ seja escolhido de tal maneira que deixe todas as singularidades de $F(s)$ do lado esquerdo no plano xy . No entanto, nem sempre a transformada de Laplace ou sua inversa existe, mas se $F(s)$ tiver uma transformada inversa de Laplace contínua, esta transformada inversa é única [51].

As funções t^μ ($\mu > -1$), e^{at} , $t^{\mu-1} e^{at}$ ($\mu > 0$), $\cos at$ e $\sin at$ são todas da classe **C** e

de ordem exponencial, sendo assim, alguns cálculos elementares mostram que

$$\mathcal{L}\{t^\mu\} = \frac{\Gamma(\mu + 1)}{s^{\mu+1}}, \quad \mu > -1 \quad (2.60)$$

$$\mathcal{L}\{e^{at}\} = \frac{1}{s - a} \quad (2.61)$$

$$\mathcal{L}\{t^{\mu-1}e^{at}\} = \frac{\Gamma(\mu)}{(s - a)^\mu}, \quad \mu > 0 \quad (2.62)$$

$$\mathcal{L}\{\cos at\} = \frac{s}{s^2 + a^2} \quad (2.63)$$

$$\mathcal{L}\{\sin at\} = \frac{a}{s^2 + a^2}. \quad (2.64)$$

Em geral, a transformada de Laplace do produto de duas funções não é o produto das transformadas, sendo assim, introduzimos o conceito de produto de convolução, isto é, a transformada do produto é o produto das transformadas.

Sejam $f(t)$ e $g(t)$ duas funções de ordem exponencial α e β e com transformadas de Laplace $F(s)$ e $G(s)$, respectivamente, no intervalo $[0, \infty)$. A convolução de $f(t)$ e $g(t)$, denotada por $(f * g)(t)$, é definida por

$$(f * g)(t) = \int_0^t f(t - \tau)g(\tau)d\tau = \int_0^t f(\tau)g(t - \tau)d\tau. \quad (2.65)$$

A transformada de Laplace da equação acima pode ser escrita como

$$\mathcal{L}[(f * g)(t)] = \int_0^\infty e^{-st} dt \int_0^t f(\tau)g(t - \tau)d\tau. \quad (2.66)$$

Introduzindo a mudança de variável $\tau' = t - \tau$ podemos escrever

$$\mathcal{L}[(f * g)(t)] = \int_{-\tau}^\infty d\tau \int_0^t e^{-s(\tau+\tau')} f(\tau)g(\tau')d\tau'. \quad (2.67)$$

Definindo-se $g(t) = 0$ para $t < 0$, o limite superior em vez de t pode ser tomado como ∞ [44], logo

$$\mathcal{L}[(f * g)(t)] = \int_0^\infty g(\tau')e^{-s\tau'} d\tau' \int_0^\infty f(\tau)e^{-s\tau} d\tau = F(s)G(s), \quad (2.68)$$

isto é, a transformada de Laplace do produto de convolução é o produto das transformadas.

A definição 1 de integral fracionária pode ser interpretada como sendo a transformada de Laplace do produto de convolução de duas funções. Tendo isto em mente, podemos escrever

$$\mathcal{L}\{J^\nu f(t)\} = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \mathcal{L}\{t^{\nu-1}\} \mathcal{L}\{f(t)\} \quad (2.69)$$

$$= s^{-\nu} F(s) \quad \nu > 0, \quad (2.70)$$

que para $\nu = 0$ a equação acima não está determinada, contudo temos que

$$\lim_{\nu \rightarrow 0} \mathcal{L} \left\{ \frac{t^{\nu-1}}{\Gamma(\nu)} \right\} = \lim_{\nu \rightarrow 0} \frac{1}{s^\nu} = 1. \quad (2.71)$$

Como exemplo de transformadas de Laplace em funções da classe **C**, temos

$$\mathcal{L}\{J^\nu t^\mu\} = \frac{\Gamma(\mu+1)}{s^{\mu+\nu+1}}, \quad \nu > 0, \quad \mu > -1 \quad (2.72)$$

$$\mathcal{L}\{J^\nu e^{at}\} = \frac{1}{s^\nu (s-a)}, \quad \nu > 0 \quad (2.73)$$

$$\mathcal{L}\{J^\nu t^{\mu-1} e^{at}\} = \frac{\Gamma(\mu)}{s^\nu (s-a)^\mu}, \quad \nu > 0, \quad \mu > 0 \quad (2.74)$$

$$\mathcal{L}\{J^\nu \cos at\} = \frac{1}{s^{\nu-1} (s^2 + a^2)}, \quad \nu > 0 \quad (2.75)$$

$$\mathcal{L}\{J^\nu \sin at\} = \frac{a}{s^\nu (s^2 + a^2)} \quad \nu > 0. \quad (2.76)$$

Diante da transformada de Laplace de integrais fracionárias e do produto de convolução, vamos agora encontrar a transformada de Laplace de integrais fracionárias de derivadas e de derivadas de integrais fracionárias. Suponha então que f e sua derivada Df pertencem à classe **C** de ordem exponencial. Então, pela Eq. (2.69),

$$\mathcal{L}\{J^\nu [Df(t)]\} = s^{-\nu} \mathcal{L}\{Df(t)\} \quad (2.77)$$

$$= s^{-\nu} [sF(s) - f(0)], \quad \nu > 0. \quad (2.78)$$

Assim, encontramos a transformada de Laplace da integral fracionária da derivada que é obviamente também válida se $\nu = 0$.

No caso da transformada de Laplace da derivada da integral fracionária, aplicamos a derivada na Eq. (2.69)

$$\mathcal{L}\{D[J^\nu f(t)]\} = \mathcal{L}\{J^\nu[Df(t)]\} + f(0)\mathcal{L}\left\{\frac{t^{\nu-1}}{\Gamma(\nu)}\right\} \quad (2.79)$$

$$= s^{-\nu}[sF(s) - f(0)] + s^{-\nu}f(0) \quad (2.80)$$

$$= s^{1-\nu}F(s), \quad \nu > 0. \quad (2.81)$$

Sabemos que se $\nu = 0$,

$$\mathcal{L}\{Df(t)\} = sF(s) - f(0). \quad (2.82)$$

Note que para esse caso, se substituirmos diretamente $\nu = 0$ na Eq. (2.79), aparece uma descontinuidade no termo

$$\lim_{\nu \rightarrow 0} \frac{t^{\nu-1}}{\Gamma(\nu)} = 0, \quad (2.83)$$

de onde, comparando a equação acima com a Eq. (2.71), fica claro que os operadores de transformada de Laplace e limite não comutam.

2.6 A derivada fracionária

Há várias formas de se introduzir a derivada de ordem não inteira como uma generalização para a derivada de ordem inteira, dentre elas podemos citar a definição de Riemann-Liouville, que é a mais conhecida e a de Caputo que, apesar de mais restritiva, nos parece mais adequada para o estudo de problemas físicos [52]. Seja $D = d/dx$ o operador diferencial e n um número natural. A derivada de ordem n de uma função f é denotada por $D^n f(x)$ e é bem conhecida. Nessa seção, apresentamos as definições de Riemann-Liouville e Caputo para o operador fracionário, D^β .

2.6.1 Derivada fracionária segundo Riemann-Liouville

A definição da derivada de ordem fracionária, segundo Riemann-Liouville, está baseada essencialmente no fato de a derivada ser a operação inversa da integração, e estabelece que a derivada de ordem fracionária é a derivada de ordem inteira de uma determinada integral de ordem fracionária.

Seja $f(x)$ uma função da classe **C**. Sejam $\text{Re}(\beta) > 0$, n o menor inteiro maior que $\text{Re}(\beta)$ e $\nu = n - \beta$, temos

$$\begin{aligned} {}_0D_x^\beta f(x) &= D^n [J^\nu f(x)] \\ &= \frac{1}{\Gamma(\nu)} \frac{d^n}{dx^n} \int_0^x (x-t)^{\nu-1} f(t) dt, \end{aligned} \quad (2.84)$$

onde $J^\nu f(x)$ é a integral fracionária de Riemann-Liouville e $D^\beta f(x)$ é a derivada fracionária de Riemann-Liouville.

Para ilustrar a definição apresentada, vamos calcular a derivada de ordem β da função $f(x) = x^\mu$, $\mu > -1$. Usando a definição

$${}_0D_x^\beta x^\mu = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \frac{d^n}{dx^n} \int_0^x (x-t)^{\nu-1} t^\mu dt. \quad (2.85)$$

Substituindo t/x por u , a integral pode ser escrita na forma padrão da função Beta:

$$\begin{aligned} {}_0D_x^\beta x^\mu &= \frac{1}{\Gamma(\nu)} \frac{d^n}{dx^n} x^{\mu+\nu} \int_0^1 u^\mu (1-u)^{-1+\nu} du \\ &= \frac{\Gamma(\mu+1)}{\Gamma(\mu-\beta+n+1)} \frac{d^n}{dx^n} x^{\mu+\nu}. \end{aligned} \quad (2.86)$$

Agora, utilizamos a fórmula clássica [53]

$$\frac{d^n x^\mu}{dx^n} = \mu(\mu-1) \dots (\mu-n+1) x^{\mu-n} = \frac{\Gamma(\mu+1)}{\Gamma(\mu-n+1)} x^{\mu-n} \quad (2.87)$$

que resulta em

$${}_0D_x^\beta x^\mu = \frac{\Gamma(\mu+1)}{\Gamma(\mu-\beta+1)} x^{\mu-\beta}, \quad x > 0. \quad (2.88)$$

Para uma outra ilustração, vamos supor que $f(x) = e^{ax}$ com a sendo um número

qualquer, então a derivada fracionária de ordem β é

$$\begin{aligned} {}_0D_x^\beta e^{ax} &= D^n[J^\nu e^{ax}] \\ &= D^n E_x(\nu, a) \\ &= E_x(\nu - n, a) = E_x(-\beta, a) \end{aligned} \quad (2.89)$$

desde que $\nu = n - \beta > 0$.

De maneira análoga, calculamos a derivada fracionária das funções seno e cosseno de ordem β , fornecendo

$${}_0D_x^\beta \sin ax = S_x(-\beta, a) \quad (2.90)$$

$${}_0D_x^\beta \cos ax = C_x(-\beta, a). \quad (2.91)$$

2.6.2 Derivada fracionária segundo Caputo

A derivada fracionária segundo Caputo foi introduzida [54] sendo bastante similar à definição de Riemann-Liouville, porém a ordem das operações é invertida, isto é, inverte a ordem de integração fracionária com a ordem de derivação. Uma das principais vantagens para o uso da representação de Caputo está ligada à solução de equações diferenciais de ordem fracionária. A solução de uma equação diferencial possui constantes de integração que devem ser determinadas a partir de condições iniciais ou condições de contorno para que a solução seja escrita na sua forma mais geral. Apesar da ordem fracionária, equações diferenciais, cuja representação de derivadas é feita a partir da abordagem de Caputo, podem lançar mão de condições iniciais ou condições de contorno que utilizam derivadas de ordem inteira. A vantagem do uso de derivadas de ordem inteira para representar as condições está associada à interpretação física que as mesmas podem possuir. Por exemplo, se a condição é o próprio valor da função (derivada de ordem zero) isso pode corresponder à temperatura de um fluido em mudança de fase. Condições de máximo, mínimo ou superfícies isoladas podem ser expressas por derivadas de primeira ordem iguais a zero [55,56].

Seja $\text{Re}(\beta) > 0$, n o menor inteiro maior que $\text{Re}(\beta)$ e $\nu = n - \beta$. A derivada fracionária de ordem β de f , segundo Caputo [49], é $D_*^\beta f(x) = {}_cJ_x^\nu[D^n f(x)]$, isto é

$$D_*^\beta f(t) = \begin{cases} \frac{1}{\Gamma(n-\beta)} \int_0^t \frac{f^{(n)}(\tau)}{(t-\tau)^{\beta+1-n}} d\tau, & n-1 < \beta < n \\ \frac{d^n}{dt^n} f(t), & \beta = n. \end{cases} \quad (2.92)$$

Ressaltamos que a derivada fracionária de Caputo satisfaz os requisitos de ser zero, quando aplicada a uma constante, e, em geral, para qualquer função de potência de grau inteiro não negativo menor que n . De maneira análoga ao que fizemos para a derivada segundo Riemann-Liouville, a derivada de ordem β da função $f(x) = x^\mu$, para $\mu > -1$ e $\mu \neq 0$ fica dada por

$$D^n x^\mu = \frac{\Gamma(\mu + 1)}{\Gamma(\mu - n + 1)} x^{\mu-n} \quad (2.93)$$

onde utilizando a Eq. (2.30)

$$J^\nu x^{\mu-n} = \frac{\Gamma(\mu - n + 1)}{\Gamma(\mu - n + \nu + 1)} x^{\mu-n+\nu}. \quad (2.94)$$

A partir das equações acima, a derivada fracionária segundo Caputo pode ser escrita como

$$\begin{aligned} D_*^\beta x^\mu &= J^\nu [D^n x^\mu] = J^\nu \left[\frac{\Gamma(\mu + 1)}{\Gamma(\mu - n + 1)} x^{\mu-n} \right] \\ &= \frac{\Gamma(\mu + 1)}{\Gamma(\mu - n + \nu + 1)} x^{\mu-n+\nu}. \end{aligned} \quad (2.95)$$

Tendo em vista que, $\nu = n - \beta$, podemos reescrever a Eq. (2.95) como

$$D_*^\beta x^\mu = \frac{\Gamma(\mu + 1)}{\Gamma(\mu - \beta + 1)} x^{\mu-\beta} \quad (2.96)$$

de modo que recuperamos o resultado encontrado na Eq. (2.88).

2.7 Transformada de Laplace da derivada fracionária

Vamos considerar a transformada de Laplace nas duas formulações, Riemann-Liouville e Caputo. A transformada de Laplace para a derivada fracionária de Riemann-Liouville requer o conhecimento de condições iniciais da integral fracionária $J^{(n-\beta)}$ e suas derivadas

inteiras de ordem $k = 1, 2, \dots, n - 1$, então [49]

$$\begin{aligned}
 \mathcal{L}\{D^\beta f(t)\} &= \mathcal{L}\{D^n [D^{-(n-\beta)} f(t)]\} \\
 &= s^n \mathcal{L}\{D^{-(n-\beta)} f(t)\} - \sum_{k=0}^{n-1} s^{n-k-1} D^k [D^{-(n-\beta)} f(t)] \Big|_{x=0} \\
 &= s^n [s^{-(n-\beta)} F(s)] - \sum_{k=0}^{n-1} s^{n-k-1} D^{k-(n-\beta)} f(0) \\
 &= s^\beta F(s) - \sum_{k=0}^{n-1} D^k J^{n-\beta} f(0^+) s^{n-1-k}
 \end{aligned} \tag{2.97}$$

onde s é a variável transformada. De maneira análoga,

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ s^\beta F(s) - \sum_{k=0}^{n-1} D^k J^{n-\beta} f(0^+) s^{n-1-k} \right\} = D^\beta f(t), \tag{2.98}$$

onde $F(s) = \mathcal{L}\{f(t)\}$ e $n - 1 < \beta < n$. Casos especiais da Eq. (2.97) correspondem a $n = 1$ e $n = 2$. São eles,

$$\mathcal{L}\{D^\beta f(t)\} = s^\beta F(s) - D^{-(1-\beta)} f(0), \quad 0 < \beta \leq 1, \tag{2.99}$$

e

$$\mathcal{L}\{D^\beta f(t)\} = s^\beta F(s) - s D^{-(2-\beta)} f(0) - D^{-(1-\beta)} f(0), \quad 1 < \beta \leq 2. \tag{2.100}$$

Já a derivada fracionária de Caputo parece ser mais adequada, quando utilizamos a técnica de transformada de Laplace para a resolução de equações diferenciais fracionárias, pois requer o conhecimento de condições iniciais da função e suas derivadas de ordem inteira $k = 1, 2, \dots, n - 1$, que têm interpretações físicas. Dessa forma,

$$J^\beta D_*^\beta f(t) = J^\beta J^{n-\beta} D^n f(t) = J^n D^n f(t) = f(t) - \sum_{k=0}^{n-1} f^{(k)}(0^+) \frac{t^k}{k!}. \tag{2.101}$$

De acordo com a Eq. (2.69), temos que

$$\mathcal{L}\{J^\beta f(t)\} = s^{-\beta} F(s) \Leftrightarrow \mathcal{L}^{-1}\{s^{-\beta} F(s)\} = J^\beta f(t), \quad \beta > 0, \tag{2.102}$$

na qual $F(s)$ é a transformada de Laplace de $f(t)$. Aplicando a transformada de Laplace

na Eq. (2.101) e utilizando a equação anterior, podemos escrever

$$\mathcal{L}\{J^\beta D_*^\beta f(t)\} = s^{-\beta} \mathcal{L}\{D_*^\beta f(t)\}. \quad (2.103)$$

Aplicando a transformada de Laplace no último termo da Eq. (2.101), obtemos

$$\mathcal{L}\{J^\beta D_*^\beta f(t)\} = F(s) - \sum_{k=0}^{n-1} f^{(k)}(0) s^{-k-1}, \quad (2.104)$$

onde $\mathcal{L}\{t^k/k!\} = s^{-k-1}$. Com os resultados apresentados acima, podemos obter a expressão para a transformada de Laplace da derivada de Caputo, dada por

$$\mathcal{L}\{D_*^\beta f(t)\} = s^\beta F(s) - \sum_{k=0}^{n-1} f^{(k)}(0) s^{\beta-k-1}, \quad (2.105)$$

e sua inversa fica representada como

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ s^\beta F(s) - \sum_{k=0}^{n-1} f^{(k)}(0) s^{\beta-k-1} \right\} = D_*^\beta f(t). \quad (2.106)$$

A definição da derivada fracionária no sentido de Riemann-Liouville, embora seja a definição mais usada e conhecida, a derivada de uma constante não é nula e, dessa forma, não pode ser interpretada como uma taxa de variação. No entanto, a derivada fracionária de Caputo de uma constante é zero e a transformada de Laplace depende de condições que são fisicamente interpretáveis, o que justifica a sua utilização para resolver equações diferenciais parciais fracionárias [48].

Equação de difusão fracionária linear unidimensional

Nesse capítulo, vamos abordar algumas equações de difusão que envolvem derivadas fracionárias na variável temporal ou na variável espacial, usualmente empregadas na descrição de processos difusivos anômalos. Como veremos, a aplicação de derivadas fracionárias na variável temporal nos leva a uma difusão anômala com o segundo momento finito, isto é, $\langle x^2 \rangle \propto t^\gamma$, em contraste com a derivada fracionária aplicada na variável espacial, que resulta em uma difusão anômala cujo segundo momento não é finito. Nesse contexto, usaremos o formalismo de caminhantes aleatórios com espaço e tempo contínuos, descrito no Cap. (1) para explorar as implicações obtidas pelo uso de derivadas fracionárias na equação de difusão.

3.1 Derivada fracionária aplicada à variável temporal

Começaremos nosso estudo considerando a seguinte equação fracionária de Fokker-Planck:

$$\frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(x, t) = \mathcal{D} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, t) - \frac{\partial}{\partial x} [F(x, t) \rho(x, t)], \quad (3.1)$$

onde o operador $\partial^\gamma / \partial t^\gamma$ representa o operador de derivada fracionária de Caputo, aplicado nesse caso à variável temporal. Como vimos no capítulo anterior, esse operador é definido

como

$$\frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(x, t) = \frac{1}{\Gamma(n - \gamma)} \int_0^t dt' \frac{\rho^{(n)}(x, t')}{(t - t')^{\gamma+1-n}}, \quad (3.2)$$

com $n - 1 < \gamma < n$ e $\rho^{(n)}(x, t)$ sendo a n -ésima derivada de $\rho(x, t)$ em relação ao tempo. Temos ainda a presença do termo de força externa $F(x, t)$ e do coeficiente de difusão \mathcal{D} , que inicialmente consideraremos constante. Mais adiante, veremos situações nas quais \mathcal{D} poderá apresentar uma dependência, por exemplo, com o espaço e com o tempo. Ainda com relação a Eq. (3.1), vale comentar que ela generaliza a equação de difusão usual, conforme vimos acima, mediante a presença do operador fracionário atuando na variável temporal, e que para $\gamma = 1$ recuperamos a equação de difusão usual. Com o intuito de mostrar que a distribuição $\rho(x, t)$ na Eq. (3.1) é normalizável, vamos reescrevê-la na forma

$$\frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(x, t) - \frac{\partial}{\partial x} J(x, t) = 0, \quad (3.3)$$

ou seja, na forma que lembra uma equação de continuidade, com

$$J(x, t) = \mathcal{D} \frac{\partial}{\partial x} \rho(x, t) - F(x, t) \rho(x, t). \quad (3.4)$$

A normalização é verificada quando integramos a Eq. (3.3) sobre todo o espaço e consideramos que $J(x = \pm\infty, t) = 0$, pois estamos admitindo que $\rho(x = \pm\infty, t) = 0$. Assim, esta importante propriedade das densidades de probabilidades continua válida mesmo com a presença do operador de derivada fracionária do tipo Caputo.

Voltando à análise das soluções da Eq. (3.1), vamos desenvolver esta equação considerando diferentes situações para o coeficiente de difusão \mathcal{D} , para a força externa $F(x, t)$ e para as condições de contorno. Inicialmente, consideraremos uma situação caracterizada pela ausência de força externa, com \mathcal{D} constante e a condição inicial $\rho(x, 0) = \tilde{\rho}(x)$. Como condição de contorno, vamos tomar inicialmente $\rho(x = \pm\infty, t) = 0$. Devido a estas considerações, a equação a ser resolvida é

$$\frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(x, t) = \mathcal{D} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, t), \quad (3.5)$$

sujeita às já referidas condições de contorno e inicial. Tal situação é melhor trabalhada se fizermos uso de transformadas integrais. Empregando as transformadas de Fourier e

Laplace na Eq. (3.5), obtemos

$$\rho(k, s) = \frac{\rho(k, 0)}{s + \mathcal{D}s^{1-\gamma}k^2}, \quad (3.6)$$

com $0 < \gamma < 1$, onde empregamos o resultado

$$\mathcal{L} \left\{ \frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(x, t) \right\} = s^\gamma \rho(x, s) + \sum_{i=0}^{n-1} s^{\gamma-i-1} \left[\frac{\partial^{\gamma-1-i}}{\partial t^{\gamma-1-i}} \rho(x, t) \right]_{t=0}, \quad (3.7)$$

que é válido para $n - 1 < \gamma \leq n$.

Agora, para obtermos a solução desejada, temos que inverter ambas as transformadas. Aplicando a inversa da transformada de Fourier e levando em conta o teorema de convolução, obtemos

$$\rho(x, s) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \tilde{\rho}(x - x') \mathcal{G}(x', s), \quad (3.8)$$

onde

$$\mathcal{G}(x, s) = \frac{1}{2s} \left(\frac{s^\gamma}{\mathcal{D}} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[- \left(\frac{s^\gamma}{\mathcal{D}} \right)^{\frac{1}{2}} |x| \right]. \quad (3.9)$$

Em particular, observando a Eq. (3.8), vemos que $\mathcal{G}(x', s)$ é a função de Green associada à condição inicial considerada. Por sua vez, para invertermos a transformada de Laplace Eq. (3.8), relacionaremos a transformada de Laplace com a transformada de Mellin, mediante a identificação do integrando da operação inversa desta transformada com o integrando das funções H de Fox, obtendo então $\rho(x, t)$. Observe que as funções de Fox são definidas como [57](veja (A.4.1))

$$\mathbf{H}_{p \ q}^{m \ n} \left[x \left| \begin{matrix} (a_1, A_1), (a_2, A_2), \dots, (a_p, A_p) \\ (b_1, B_1), (b_2, B_2), \dots, (b_q, B_q) \end{matrix} \right. \right] = \frac{1}{2\pi i} \int_L ds \chi(s) x^s$$

$$\chi(s) = \frac{\prod_{i=1}^m \Gamma(b_i - B_i s) \prod_{i=1}^n \Gamma(1 - a_i + A_i s)}{\prod_{i=m+1}^q \Gamma(1 - b_i + B_i s) \prod_{i=1+n}^p \Gamma(a_i - A_i s)}, \quad (3.10)$$

onde os parâmetros m , n , p e q satisfazem às desigualdades $0 < n \leq p$ e $1 \leq m \leq q$. Assim, aplicando o procedimento discutido acima, após alguns cálculos é possível mostrar

que as transformadas de Laplace e de Mellin estão relacionadas por meio de

$$\rho(x, s') = \frac{1}{\Gamma(1-s')} \int_0^{+\infty} ds s^{-s'} \rho(x, s), \quad (3.11)$$

onde $\rho(x, s')$ representa a função transformada em Mellin e $\rho(x, s)$ representa a função transformada em Laplace. Lembramos que a transformada de Mellin é definida como

$$\rho(x, s') = \int_0^{+\infty} dt t^{s'-1} \rho(x, t) \quad \left(\rho(x, t) = \frac{1}{2\pi i} \int_L \rho(x, s') t^{-s'} ds' \right). \quad (3.12)$$

Assim, utilizando a relação (3.11) na Eq. (3.9), obtemos

$$\mathcal{G}(x, s') = \frac{1}{\gamma|x|} \left(\frac{|x|}{\sqrt{\mathcal{D}}} \right)^{\frac{2}{\gamma}s'} \frac{\Gamma\left(1 - \frac{2}{\gamma}s'\right)}{\Gamma(1-s')}. \quad (3.13)$$

A partir de (3.13), após a inversão da transformada de Mellin, obtemos

$$\mathcal{G}(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\mathcal{D}t^\gamma}} \mathbf{H}_{1,2}^{2,0} \left[\frac{x^2}{4\mathcal{D}t^\gamma} \left| \begin{matrix} (1-\frac{\gamma}{2}, \gamma) \\ (\frac{1}{2}, 1) \end{matrix} \right. \begin{matrix} (0,1) \end{matrix} \right]. \quad (3.14)$$

Esse resultado é obtido mediante a comparação direta entre a integral de inversão de Mellin

$$\mathcal{G}(x, t) = \frac{1}{2\pi i} \int_L \mathcal{G}(x, s') t^{-s'} ds', \quad (3.15)$$

e a forma integral da função H de Fox, anteriormente representada pela relação (3.10). A representação gráfica da Eq. (3.14) é mostrada nas Figs. (3.1) e (3.2) para alguns valores específicos. Com base nesses resultados, concluímos que nossa solução é da forma

$$\rho(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\mathcal{D}t^\gamma}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \tilde{\rho}(x') \mathbf{H}_{1,2}^{2,0} \left[\frac{(x-x')^2}{4\mathcal{D}t^\gamma} \left| \begin{matrix} (1-\frac{\gamma}{2}, \gamma) \\ (\frac{1}{2}, 1) \end{matrix} \right. \begin{matrix} (0,1) \end{matrix} \right]. \quad (3.16)$$

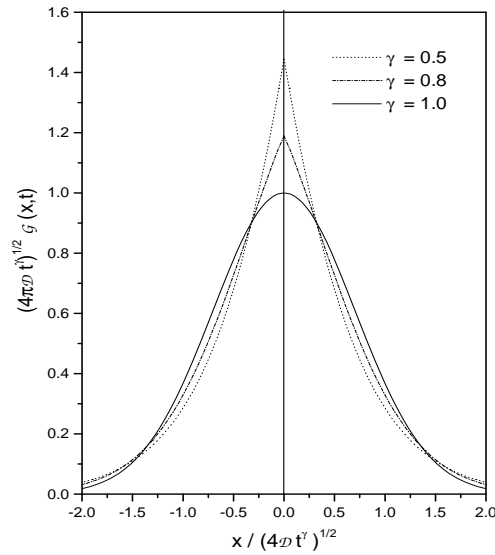


Figura 3.1: Comportamento de $(4\pi Dt^\gamma)^{1/2} \mathcal{G}(x,t)$ versus $x/(4Dt^\gamma)$, que ilustra a Eq. (3.14) para valores típicos de γ (subdifusivo).

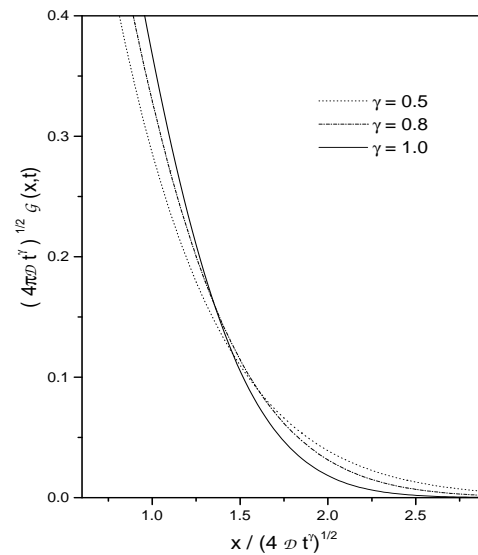


Figura 3.2: Comportamento da Eq. (3.14) para grandes valores dos argumentos.

Vamos agora considerar situações nas quais há a presença de barreiras absorventes e refletoras no sistema. Para estes casos, a aplicação de transformadas integrais não é, ao contrário do caso anterior, apropriada. Por exemplo, a escolha entre transformadas de Fourier e as séries de Fourier origina-se no fato de que, em um caso, o intervalo de variação de x é infinito, ou seja, de $-\infty$ a $+\infty$, e no segundo caso é finito, de 0 a L . Considerando inicialmente o caso de barreiras absorventes, ou seja, situação na qual $\rho(0, t) = \rho(L, t) = 0$, faremos uso de uma transformada finita no intervalo $0 < x < L$. Dada a condição de contorno, vamos considerar que a solução procurada possa ser escrita em termos de uma série em senos de Fourier. Assim, a série

$$\rho(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \mathcal{B}_n(t) \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{L} x \right) \quad (3.17)$$

com

$$\mathcal{B}_n(t) = \frac{2}{L} \int_0^L dx \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{L} x \right) \rho(x, t) \quad (3.18)$$

é apropriada para o tratamento deste caso, pois satisfaz as condições de contorno. Substituindo a Eq. (3.17) na Eq. (3.5), multiplicando ambos os lados por $\operatorname{sen}(n\pi x/L)$, integrando desde 0 a L e identificando $\mathcal{B}_n(t)$, obtemos

$$\frac{d^\gamma}{dt^\gamma} \mathcal{B}_n(t) = -\frac{n^2 \pi^2}{L^2} \mathcal{D} \mathcal{B}_n(t). \quad (3.19)$$

Para resolver a equação acima, aplicaremos uma transformada de Laplace, permitindo-nos uma clara identificação do resultado a ser invertido com as funções de Mittag-Leffler $E_\gamma(x)$. Isto deve-se ao fato de que

$$\begin{aligned} E_\gamma(-t^\gamma) &= \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{1}{s + s^{1-\gamma}} \right\} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-t^\gamma)^n}{\Gamma(1 + n\gamma)}. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Então, após alguns cálculos, podemos mostrar que

$$\mathcal{B}_n(t) = \mathcal{B}_n(0) E_\gamma \left(-\frac{n^2 \pi^2}{L^2} \mathcal{D} t^\gamma \right). \quad (3.21)$$

Agora, considerando uma condição inicial do tipo $\rho(x, 0) = \tilde{\rho}(x)$ e utilizando o resultado acima em (3.17), temos

$$\rho(x, t) = \int_0^L dx' \mathcal{G}(x, x', t) \tilde{\rho}(x')$$

com

$$\mathcal{G}(x, x', t) = \frac{2}{L} \sum_{n=1}^{\infty} \text{sen} \left(\frac{n\pi}{L} x' \right) \text{sen} \left(\frac{n\pi}{L} x \right) \mathbf{E}_{\gamma} \left(-\frac{n^2 \pi^2}{L^2} \mathcal{D}t^{\gamma} \right). \quad (3.22)$$

Para o caso de barreiras refletoras, onde no contorno devemos ter $\partial_x \rho|_{x=0} = \partial_x \rho|_{x=L} = 0$, consideramos que a solução possa ser expressa em termos de uma série em cossenos de Fourier. Assim, aplicando o procedimento do caso anterior, obtemos

$$\rho(x, t) = \frac{1}{L} \int_0^L dx' \tilde{\rho}(x') + \int_0^L dx' \mathcal{G}(x, x', t) \tilde{\rho}(x')$$

com

$$\mathcal{G}(x, x', t) = \frac{2}{L} \sum_{n=1}^{\infty} \cos \left(\frac{n\pi}{L} x' \right) \cos \left(\frac{n\pi}{L} x \right) \mathbf{E}_{\gamma} \left(-\frac{n^2 \pi^2}{L^2} \mathcal{D}t^{\gamma} \right). \quad (3.23)$$

Nesse ponto, é interessante observar que para essa situação podemos obter uma solução estacionária. De fato, considerando $t \rightarrow \infty$ na solução acima, chegamos em $\rho(x, t \rightarrow \infty) \sim \frac{1}{L} \int_0^L dx' \tilde{\rho}(x')$, pois $\mathbf{E}_{\gamma}(-n^2 \pi^2 \mathcal{D}t^{\gamma} / L^2) \rightarrow 0$ quando $t \rightarrow \infty$. Isso se verifica porque a função $\mathbf{E}_{\gamma}(x)$ no intervalo de γ considerado é uma função que decai de forma monotônica sem apresentar oscilações. O fato de termos uma solução estacionária nos permite também o cálculo da função de autocorrelação estacionária [23], que mostra de que forma as soluções geral e inicial estão relacionadas. Essa função é definida como

$$\langle x(t)x(0) \rangle_s = \int_0^L dx \int_0^L dx' x x' \rho(x, t) \rho_s(x), \quad (3.24)$$

onde $\rho_s(x)$ é a solução para o regime estacionário. Considerando, por simplicidade, $\rho(x, 0) = \delta(x - x')$ como nossa condição inicial, obtemos $\rho_s(x) = 1/L$. Com esse resultado e a solução (3.23) encontramos, após alguns cálculos,

$$\langle x(t)x(0) \rangle_s = \frac{L^2}{4} + \frac{8L^4}{\pi^4} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)^4} \mathbf{E}_{\gamma} \left[-\frac{(2n+1)^2}{L^2} \mathcal{D}t^{\gamma} \right]. \quad (3.25)$$

Se tomarmos o limite de tempos longos na equação acima verificaremos que $\langle x(t)x(0) \rangle \sim L^2/4$. Esse resultado foi obtido em [23] para a equação de difusão usual, indicando que a derivada fracionária somente fará com que o sistema relaxe de forma anômala até à situação de equilíbrio.

Para investigar se o processo é anômalo ou usual, voltaremos nossa atenção para a forma do segundo momento advindo da Eq. (3.5), a partir da qual foram discutidos três casos precedentes dependentes do índice γ . Para a situação aqui em consideração, ou seja, àquela na qual há a presença de derivadas não inteiras na variável temporal de uma equação de difusão, o segundo momento se mostra na forma de uma potência de t , ou seja, $\langle x^2 \rangle \propto t^\gamma$. Além disso, é marcante a forma com que a presença do operador de Caputo altera a distribuição de tempo de espera $\omega(t)$. Assim, a presença de operadores diferenciais fracionários na equação de difusão apresenta uma situação na qual as distribuições de probabilidades para o tempo e para o espaço, que emergem da abordagem de caminhantes aleatórios, são alteradas, ou seja, a difusão ocorre de forma anômala. Nesse caso em particular, a alteração ocorreu apenas na distribuição de tempos, já que a derivada fracionária foi aplicada na variável temporal. Mais à frente, veremos a alteração causada na distribuição de saltos quando há aplicação de derivadas fracionárias na variável espacial [25].

Vejamos agora o caso em que o coeficiente de difusão é dado por $\mathcal{D}(x, t) = \mathcal{D}|x|^{-\theta}$. Cabe mencionar aqui que esta dependência espacial no coeficiente de difusão tem sido empregada na investigação de, por exemplo, sistemas turbulentos e difusão em fractais. Ainda considerando $F(x, t) = 0$, $\rho(x, 0) = \tilde{\rho}(x)$ na Eq. (3.1) e utilizando transformadas integrais definidas anteriormente, podemos mostrar que

$$\rho(x, t) = \frac{2 + \theta}{2\Gamma\left(\frac{1}{2+\theta}\right)} \left[\frac{1}{(2 + \theta)^2 \mathcal{D}t^\gamma} \right]^{\frac{1}{2+\theta}} \mathbf{H}_{1,2}^{2,0} \left[\frac{|x|^{2+\theta}}{(2 + \theta)^2 \mathcal{D}t^\gamma} \left| \begin{matrix} (1 - \frac{\gamma}{2+\theta}, \gamma) \\ (1 - \frac{1}{2+\theta}, 1) \end{matrix} \right. \right]_{(0,1)}, \quad (3.26)$$

lembrado que para $\gamma = 1$ e $\theta = 0$ recuperamos a solução gaussiana obtida para o caso usual. Para esse caso, a alteração ocorreu na distribuição de tempos e saltos, porque o coeficiente de difusão tem uma dependência espacial. Se, além da dependência do coeficiente de difusão com o espaço, tivermos a presença de uma força externa do tipo linear, ou seja,

$F(x) = -kx$, obteremos mediante separação de variáveis o resultado

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &= \int_0^{+\infty} d\xi \tilde{\rho}(\xi) \xi^{-\theta-1} \mathcal{G}(x, \xi, t) \\ \mathcal{G}(x, \xi, t) &= \left[\frac{k}{(2+\theta)\mathcal{D}} \right]^{-\frac{(1+\theta)}{(2+\theta)}} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{k|x|^{2+\theta}}{(2+\theta)\mathcal{D}}} \mathbf{L}_n^{-\frac{(1+\theta)}{(2+\theta)}} \left[\frac{k|\xi|^{2+\theta}}{(2+\theta)\mathcal{D}} \right] \times \\ &\times \mathbf{L}_n^{-\frac{(1+\theta)}{(2+\theta)}} \left[\frac{k|x|^{2+\theta}}{(2+\theta)\mathcal{D}} \right] \mathbf{E}_\gamma [-(2+\theta)nk t^\gamma] \frac{\Gamma(1+n)}{\Gamma(1+n-a)}, \end{aligned} \quad (3.27)$$

sendo \mathbf{L}_n as distribuições do tipo Lévy com $\lambda_n = (2+\theta)nk$.

Vale a pena ressaltar que são poucos os potenciais cuja presença na equação de difusão nos conduz a uma solução exata expressa em termos de funções especiais conhecidas. Entretanto, na maioria das situações, somos obrigados a fazer aproximações da situação original devido à dificuldade de encontrarmos uma solução em forma fechada. Nesse sentido, é interessante obter a equação integral relativa à Eq. (3.1) que torna possível uma solução recursiva na forma de uma abordagem perturbativa que pode ser relevante na análise do problema. Assim, vamos reescrever a Eq. (3.1) como

$$\frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(x, t) = \mathcal{D} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, t) - \alpha(x, t), \quad (3.28)$$

com

$$\alpha(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} [F(x, t) \rho(x, t)]. \quad (3.29)$$

Empregando as transformadas de Fourier e Laplace na Eq. (3.28), obtemos

$$\rho(k, s) = \frac{\rho(k, 0)}{s + \mathcal{D}s^{1-\gamma}k^2} - \frac{\alpha(k, s)}{s + \mathcal{D}s^{1-\gamma}k^2}. \quad (3.30)$$

A inversão das transformadas fornece

$$\rho(x, t) = \rho^{(0)}(x, t) - \int_0^t dt' \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \mathcal{G}_\gamma(x - x', t - t') \alpha(x', t') \quad (3.31)$$

com

$$\mathcal{G}_\gamma(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\mathcal{D}t^\gamma}} \mathbf{H}_{1/2}^{2/0} \left[\frac{x^2}{4\mathcal{D}t^\gamma} \left| \begin{matrix} (1-\frac{\gamma}{2}, \gamma) \\ (\frac{1}{2}, 1) \end{matrix} \right. \begin{matrix} (0, 1) \end{matrix} \right]. \quad (3.32)$$

Substituindo $\alpha(x, t)$ na Eq. (3.31), obtemos, via integração por partes,

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &= \rho^{(0)}(x, t) \\ &+ \int_0^t dt' \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \mathcal{G}_\gamma^{(2)}(x - x', t - t') [F(x', t')\rho(x', t')] \end{aligned} \quad (3.33)$$

com

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_\gamma^{(2)}(x, t) &= \frac{d}{dx} \mathcal{G}_\gamma(x, t) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi \mathcal{D} t^\gamma}} \mathbf{H}_{2,3}^{2,1} \left[\frac{x^2}{4 \mathcal{D} t^\gamma} \left| \begin{matrix} (0,2) & (1-\frac{\gamma}{2}, \gamma) \\ (\frac{1}{2}, 1) & (0,1) & (1,2) \end{matrix} \right. \right], \end{aligned} \quad (3.34)$$

onde utilizamos a propriedade (A.27) do apêndice. A Eq. (3.33) é a equação integral associada a Eq. (3.1) quando se tem uma força externa aplicada ao sistema.

3.2 Derivada fracionária aplicada à variável espacial

Até o presente momento tratamos apenas de situações onde foram empregadas derivadas fracionárias na variável temporal, de modo que obtivemos alterações somente na função distribuição de tempos de espera, $\omega(t)$. Além disso, vimos que as soluções obtidas forneciam segundos momentos finitos, embora não fossem, como no caso usual, lineares com o tempo. O emprego de derivadas fracionárias na variável espacial apresenta uma situação onde o segundo momento diverge. Este comportamento é característico de distribuições do tipo Lévy, que têm sido aplicadas, por exemplo, no estudo de sistemas caóticos, na descrição de transporte em plasma turbulento e também em estudos de economia lembrando que estas distribuições apresentam a propriedade da auto-similaridade. Não entraremos em mais detalhes acerca do emprego de distribuições do tipo Lévy em sistemas que apresentam comportamento caótico, pois isto transcende os objetivos dessa tese.

Iniciaremos com a observação de que a distribuição de Lévy

$$L_\mu(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{-ikx - |k|^\mu \mathcal{D}t} \quad (3.35)$$

é solução da equação de difusão

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \mathcal{D} \frac{\partial^\mu \rho}{\partial |x|^\mu} - \frac{\partial}{\partial x} [F(x, t) \rho(x, t)], \quad (3.36)$$

quando consideramos a ausência de força externa e $\rho(x, 0) = \tilde{\rho}(x)$. Para demonstrarmos esse resultado basta utilizarmos o fato de que $\mathcal{F}\{\partial_{|x|}^\mu \rho(x, t)\} \equiv -|k|^\mu \rho(k, t)$, que pode ser visto no apêndice (A.2), onde

$$\mathcal{F}\{\rho(x, t)\} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} \rho(x, t) \quad (3.37)$$

é a transformada de Fourier. Essa consideração conduz a $\rho(x, t) = L_\mu(x)$, confirmando nossa afirmação inicial. Nesse contexto, a Eq. (3.36) pode ser relacionada a distribuição dos saltos no formalismo de CTRW, como já foi mostrado no Cap. (1), para a qual recuperamos o caso usual com $\mu = 2$. Essa distribuição apresenta comportamento assintótico de cauda longa, ou seja, saltos longos possuem uma maior probabilidade de ocorrerem quando comparados com o caso usual. Devido ao fato de não possuírem segundo momento finito, as distribuições de Lévy não obedecem ao teorema central do limite, mas sim sua generalização, conhecida como teorema de Lévy-Gnedenko.

Ainda na ausência de força externa, vamos considerar agora que o coeficiente de difusão apresenta uma dependência temporal do tipo $\mathcal{D}(t) = \mathcal{D}t^{\alpha-1}/\Gamma(\alpha)$. Utilizando transformadas integrais e propriedades das funções de Mittag-Leffler e de Fox H, pode-se mostrar que

$$\rho(x, t) = \frac{\pi}{\mu|x|} \mathbf{H}_{3,3}^{2,1} \left[\frac{|x|}{(\mathcal{D}t^{\alpha+1})^{\frac{1}{\mu}}} \left| \begin{matrix} (1, \frac{1}{\mu}) & (1, \frac{\alpha+1}{\mu}) & (1, \frac{1}{2}) \\ (1,1) & (1, \frac{1}{\mu}) & (1, \frac{1}{2}) \end{matrix} \right. \right] \quad (3.38)$$

(veja Fig. (3.3)). Como esperado, podemos inferir que a Eq. (3.38) tem um comportamento assintótico de cauda longa, a medida que diminuimos o valor de μ .

Se, por outro lado, considerarmos \mathcal{D} constante e $F(x) = -kx$ obtemos, empregando método semelhante ao do caso anterior, a solução

$$\rho(x, t) = \frac{1}{\mu|x|} \mathbf{H}_{1,1}^{2,2} \left[\left(\frac{\alpha\mu}{\overline{\mathcal{D}}(t)} \right)^{\frac{1}{\mu}} |x| \left| \begin{matrix} (1, \frac{1}{\mu}) & (1, \frac{1}{2}) \\ (1,1) & (1, \frac{1}{2}) \end{matrix} \right. \right], \quad (3.39)$$

onde $\overline{\mathcal{D}}(t) = \mathcal{D}[1 - e^{-\alpha\mu t}]$ tem um comportamento semelhante ao anterior.

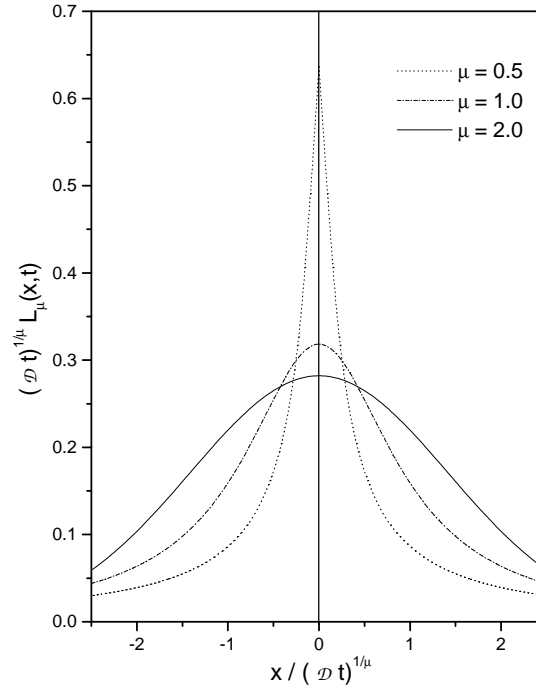


Figura 3.3: Comportamento de $(\mathcal{D}t)^{1/\mu} L_\mu(x, t)$ versus $x/(\mathcal{D}t)^{1/\mu}$, que ilustra a Eq. (3.38) para valores típicos de μ .

Vamos analisar agora a Eq. (3.36) para uma condição inicial do tipo $\rho(x, 0) = \tilde{\rho}(x)$. Repetindo o procedimento empregado acima, tomando a transformada de Laplace e Fourier da Eq. (3.36), temos

$$\rho(k, s) = \frac{\rho(k, 0)}{s + \mathcal{D}|k|^\mu}. \quad (3.40)$$

Invertendo Fourier-Laplace a equação anterior, fica dada por

$$\rho(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \mathcal{G}_\mu(x - x', t - t') \tilde{\rho}(x'), \quad (3.41)$$

onde $\mathcal{G}_\mu(x, t) = L_\mu(x, t)$, e a equação integral associada a Eq. (3.36) é

$$\rho(x, t) = \rho^{(0)}(x, t) - \int_0^t dt' \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \mathcal{G}_\mu^{(2)}(x - x', t - t') F(x', t') \rho(x', t'), \quad (3.42)$$

sendo

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_\mu^{(2)}(x, t) &= -\frac{d}{dx}L_\mu(x, t) \\ &= \int_0^\infty \frac{dk}{\pi} k \sin(kx) e^{-t\mathcal{D}|k|^\mu}. \end{aligned} \quad (3.43)$$

Como no caso mostrado anteriormente para a derivada fracionária na parte temporal, a Eq. (3.42) também pode ser usada para calcular perturbativamente a influência de uma força externa qualquer aplicada ao sistema.

Discutimos, nesse capítulo, as consequências do emprego de derivadas fracionárias na equação de difusão, considerando também dependência espacial e temporal para o coeficiente de difusão, além da presença de uma força externa. Vimos que, quando aplicadas à variável espacial, a derivada fracionária nos conduz às distribuições de Lévy, que levam a um comportamento superdifusivo.

Capítulo 4

Equação de difusão com um termo não-local

A presença das derivadas de ordem fracionárias pode modificar as soluções da equação de difusão. Tais modificações nos levam a obter uma solução que difere da tradicional gaussiana, tendo o comportamento assintótico dado por uma função exponencial alongada ou do tipo lei de potência (distribuições de Lévy). Agora, vamos introduzir um termo não-local na equação de difusão e investigar quais são as consequências produzidas por este termo. Dessa forma, a equação de difusão que vamos analisar nesse capítulo é:

$$\frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(\mathbf{r}, t) = \mathcal{D} \nabla^2 \rho(\mathbf{r}, t) - \int_0^t d\bar{t} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{r}' \mathcal{K}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - \bar{t}) \rho(\mathbf{r}', \bar{t}), \quad (4.1)$$

onde a última parte da equação representa um termo não-local atuando sobre o sistema que depende de $\mathcal{K}(\mathbf{r}, t)$, que na forma unidimensional é dado por $\mathcal{K}(x, t)$. Este termo pode ser relacionado a vários contextos em particular, com processos de reação [58, 59] e com derivadas de ordem fracionárias [10] dependendo da escolha de $\mathcal{K}(x, t)$ e é tal que, para $\mathcal{K}(x, t) = 0$ e $\gamma = 1$, a forma usual da equação de difusão na ausência de forças externas é recuperada. O comportamento da solução é governado pelos termos difusivo e não-local que, dependendo da escolha do último, pode manifestar diferentes regimes difusivos. Dessa forma, um deles é dominado pelo comportamento gaussiano devido ao termo difusivo e o outro depende da escolha de $\mathcal{K}(x, t)$, conforme mencionamos anteriormente. Em particular, para $\mathcal{K}(x, t) \propto \delta(t)/|x|^{1+\mu}$ a solução é assintoticamente governada por uma lei de potência para tempos longos, que está relacionada com as distribuições de Lévy. Nesse sentido, devemos ressaltar que situações caracterizadas pelos dois regimes

têm sido relatadas em vários contextos físicos, por exemplo, sistemas com interações de longo alcance [60] e difusão intracelular [61].

4.1 Equações de difusão e soluções

Investigaremos agora soluções para a Eq. (4.1) com $\gamma = 1$, considerando algumas formas da função $\mathcal{K}(x, t)$ presentes no termo não-local. Particularmente, analisaremos três casos: (i) $\mathcal{K}(x, t) \propto \delta(t)/|x|^{1+\mu}$ com $0 < \mu < 2$ ($\mathcal{K}(k, s) = \tilde{\mathcal{K}}|k|^\mu$), (ii) $\mathcal{K}(x, t) \propto \delta(t)\bar{\mathcal{K}}(x)$, (iii) $\mathcal{K}(x, t) \propto t^{\gamma-1}/|x|^{1+\mu}$ com $0 < \mu < 2$ ($\mathcal{K}(k, s) = \hat{\mathcal{K}}s^{-\gamma}|k|^\mu$). Após o estudo desses casos, discutiremos o caso em que $\mathcal{K}(x, t)$ representa uma função arbitrária, que possui transformada de Fourier e Laplace definidas. A primeira escolha para $\mathcal{K}(x, t)$ tem um comportamento de cauda longa e está relacionada com a derivada espacial de ordem fracionária do tipo Riesz-Weyl [10]. A solução para este caso apresenta dois regimes distintos, sendo que um deles, para tempos longos, pode ser relacionado com as distribuições de Lévy. Esta característica poder ser verificada ao analisarmos a função de Green no limite de tempos longos, como será demonstrado mais tarde. O segundo caso pode ser relevante na investigação da solução quando temos um termo não-local com uma dependência arbitrária na parte espacial. A terceira escolha incorpora uma dependência temporal no termo não-local (discutida no primeiro caso) que pode ser relacionada com uma derivada temporal de ordem fracionária [10], mediante uma escolha apropriada de γ .

Começaremos a análise aplicando a transformada de Fourier ($\mathcal{F}\{\dots\} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ikx} \dots$ e $\mathcal{F}^{-1}\{\dots\} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{ikx} \dots$) na Eq. (4.1) de maneira a obter a equação integro-diferencial

$$\frac{d}{dt}\rho(k, t) = -\mathcal{D}k^2\rho(k, t) - \int_0^t d\bar{t}\mathcal{K}(k, t - \bar{t})\rho(k, \bar{t}) . \quad (4.2)$$

Essa equação integro-diferencial pode ser simplificada utilizando a transformada de Laplace ($\mathcal{L}\{\dots\} = \int_0^\infty dt e^{-st} \dots$ e $\mathcal{L}^{-1}\{\dots\} = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty+c}^{i\infty+c} ds e^{st} \dots$). Assim, após aplicarmos a transformada de Laplace, obtemos a equação algébrica:

$$s\rho(k, s) - \rho(k, 0) = -\mathcal{D}k^2\rho(k, s) - \mathcal{K}(k, s)\rho(k, s) \quad (4.3)$$

cuja solução é dada por $\rho(k, s) = \rho(k, 0)\mathcal{G}(k, s)$, com

$$\mathcal{G}(k, s) = \frac{1}{s + \mathcal{D}k^2 + \mathcal{K}(k, s)} , \quad (4.4)$$

onde $\rho(k, 0)$ é a transformada de Fourier da condição inicial e $\mathcal{G}(k, s)$ é a função de Green [62] da Eq. (4.1) com $\gamma = 1$ no espaço de Fourier-Laplace. Note que a Eq. (4.4) retorna ao caso usual, isto é, à função de Green para o caso livre, quando $\mathcal{K}(k, s) = 0$.

4.1.1 Primeiro caso: $\mathcal{K}(x, t) \propto \delta(t)/|x|^{1+\mu}$

Substituindo a primeira escolha por $\mathcal{K}(x, t)$, que no espaço de Fourier-Laplace é dado por $\mathcal{K}(k, s) = \tilde{\mathcal{K}}|k|^\mu$, obtemos

$$\rho(k, s) = \frac{\rho(k, 0)}{s + \mathcal{D}k^2 + \tilde{\mathcal{K}}|k|^\mu}. \quad (4.5)$$

A Eq. (4.5) pode ser relacionada ao formalismo CTRW [2, 21], considerando-se a distribuição do tempo de espera $\omega(s) = 1/(1 + \tau s)$ e a função densidade de probabilidade de salto $\lambda(k) = 1 - \tau(\mathcal{D}k^2 + \tilde{\mathcal{K}}|k|^\mu)$, em que τ é o tempo de espera característico. O resultado obtido para $\omega(s)$ e $\lambda(k)$ indica que a opção anterior para o termo não-local muda somente a função densidade de probabilidade do salto. Em particular, a escolha para $\mathcal{K}(x, t)$ manifesta na solução um comportamento de cauda longa, quando é considerado o limite de tempos grandes. Aplicando a transformada inversa de Laplace, a Eq. (4.5) fica dada por

$$\rho(k, t) = \rho(k, 0) \exp\left(-\mathcal{D}k^2 t - \tilde{\mathcal{K}}|k|^\mu t\right), \quad (4.6)$$

onde a transformada inversa de Fourier da Eq. (4.6) fornece

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{x} \mathcal{G}(x - \bar{x}, t) \rho(\bar{x}, 0) \\ \mathcal{G}(x, t) &= \frac{1}{2|x|} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{\tilde{\mathcal{K}}t}{(\mathcal{D}t)^{\frac{\mu}{2}}}\right)^n \mathbf{H}_{2,2}^{1,1} \left[\frac{|x|}{\sqrt{\mathcal{D}t}} \left| \begin{matrix} (1-\frac{n\mu}{2}, \frac{1}{2}), (1, \frac{1}{2}) \\ (1, 1), (1, \frac{1}{2}) \end{matrix} \right. \right] \end{aligned} \quad (4.7)$$

sendo $\mathbf{H}_{p,q}^{m,n} \left[x \left| \begin{matrix} (a_1, A_1), \dots, (a_p, A_p) \\ (b_1, B_1), \dots, (b_q, B_q) \end{matrix} \right. \right]$ a função H de Fox [57] (veja Fig.(4.1) e Fig.(4.2)).

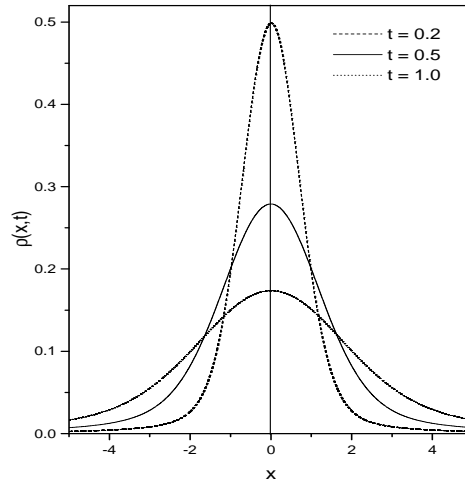


Figura 4.1: Esta figura ilustra o comportamento de $\rho(x, t)$ versus x para diferentes valores de tempo na Eq. (4.7) considerando, por simplicidade, $\mu = 1$, $\mathcal{D} = 1$, $\mathcal{K} = 1$ e a condição inicial $\rho(x, 0) = \delta(x)$.

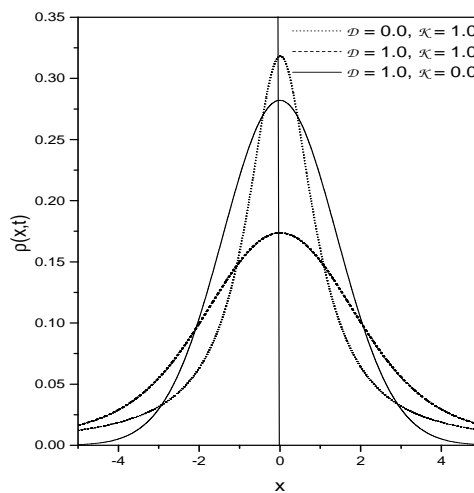


Figura 4.2: Esta figura ilustra o comportamento de $\rho(x, t)$ versus x para diferentes valores de \mathcal{D} e \mathcal{K} na Eq. (4.7) considerando, por simplicidade, $t = 1$, $\mu = 1$ e a condição inicial $\rho(x, 0) = \delta(x)$.

A presença da função H de Fox na solução indica que o termo não-local na Eq. (4.1) produz uma dispersão anômala da solução. Nesse sentido, uma característica importante da solução encontrada acima é a presença de dois regimes, um deles é caracterizado pelo caso usual (isto é, gaussiano) e o outro é dominado assintoticamente por uma lei de potência (isto é, do tipo Lévy). De fato, é possível verificar que para tempos pequenos

$$\mathcal{G}(x, t) \sim \frac{e^{-\frac{x^2}{4\mathcal{D}t}}}{\sqrt{4\pi\mathcal{D}t}}, \quad (4.8)$$

enquanto que para tempos longos

$$\mathcal{G}(x, t) \sim \frac{1}{\mu|x|} \mathbf{H}_{2,2}^{1,1} \left[\frac{|x|}{(\mathcal{K}t)^{\frac{1}{\mu}}} \left| \begin{matrix} (1, \frac{1}{\mu}), (1, \frac{1}{2}) \\ (1, 1), (1, \frac{1}{2}) \end{matrix} \right. \right]. \quad (4.9)$$

A Eq. (4.9) é essencialmente uma distribuição do tipo Lévy comumente encontrada em situações onde temos difusão anômala.

4.1.2 Segundo caso: $\mathcal{K}(x, t) \propto \delta(t)\bar{\mathcal{K}}(x)$

Agora, conduziremos a discussão ao segundo caso, caracterizado por $\mathcal{K}(x, t) = \bar{\mathcal{K}}(x)\delta(t)$, com $\bar{\mathcal{K}}(x)$ arbitrário. Utilizando a Eq. (4.4), com $\mathcal{K}(k, s) = \bar{\mathcal{K}}(k)$, e aplicando a transformada inversa de Laplace, obtemos

$$\rho(k, t) = \rho(k, 0) \exp(-\mathcal{D}k^2t - \bar{\mathcal{K}}(k)t). \quad (4.10)$$

Fazendo uso da transformada inversa de Fourier, juntamente com o teorema de convolução na Eq. (4.10), obtemos como solução

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{x} \rho(\bar{x}, 0) \mathcal{G}(x - \bar{x}, t) \\ \mathcal{G}(x, t) &= \bar{\mathcal{G}}(x, t) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-t)^n}{n!} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_n \bar{\mathcal{K}}(x - x_n) \cdots \\ &\quad \times \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \bar{\mathcal{K}}(x_2 - x_1) \bar{\mathcal{G}}(x_1, t), \end{aligned} \quad (4.11)$$

onde $\rho(x, 0)$ é a condição inicial e

$$\bar{\mathcal{G}}(x, t) = \frac{e^{-\frac{x^2}{4\mathcal{D}t}}}{\sqrt{4\pi\mathcal{D}t}} \quad (4.12)$$

é a função de Green usual obtida a partir da equação de difusão na ausência de forças e termos de reação. De forma análoga ao caso explorado anteriormente, este caso também pode ser relacionado ao formalismo CTRW escolhendo-se a distribuição do tempo de espera $\omega(s) = 1/(1 + \tau s)$ e distribuição dos saltos $\lambda(k) = 1 - \tau(\mathcal{D}k^2 + \overline{\mathcal{K}}(k))$.

4.1.3 Terceiro caso: $\mathcal{K}(x, t) \propto t^{\gamma-1}/|x|^{1+\mu}$

Dando prosseguimento, vamos incorporar uma dependência temporal em $\mathcal{K}(x, t)$ considerando $\mathcal{K}(x, t) \propto t^{\gamma-1}/|x|^{1+\mu}$ ($\mathcal{K}(k, s) = \widehat{\mathcal{K}} s^{-\gamma}|k|^\mu$) o que nos leva a obter a partir da Eq. (4.5),

$$\rho(k, s) = \frac{\rho(k, 0)}{s + \mathcal{D}k^2 + \widehat{\mathcal{K}}s^{-\gamma}|k|^\mu}. \quad (4.13)$$

Note que a Eq. (4.13) retorna ao caso anterior quando tomado $\gamma = 0$ e, ao caso usual, quando $\widehat{\mathcal{K}} = 0$. Por outro lado, a dependência temporal no termo não-local introduz um efeito memória, de forma semelhante ao que ocorre com as equações de difusão fracionárias no tempo. Desse modo, a solução obtida para esse caso (assim como os casos previamente estudados) tem um caráter não-Markoviano. Para encontrar a solução, começamos aplicando a transformada inversa de Laplace. Seguindo o procedimento apresentado por [63], após alguns cálculos é possível mostrar que

$$\rho(k, t) = \rho(k, 0) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\widehat{\mathcal{K}}t^{1+\gamma}|k|^\mu \right)^n \mathbf{E}_{1,1+n\gamma}^{(n)}(-\mathcal{D}k^2t), \quad (4.14)$$

onde $\mathbf{E}_{\mu,\beta}^{(n)}(x)$ é a n -ésima derivada da função de Mittag-Leffler generalizada, isto é, $\mathbf{E}_{\mu,\beta}^{(n)}(x) \equiv \frac{d^n}{dx^n} \mathbf{E}_{\mu,\beta}(x)$ [24]. A transformada inversa de Fourier da Eq. (4.14) é dada por

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{x} \rho(\bar{x}, 0) \mathcal{G}(x - \bar{x}, t) \\ \mathcal{G}(x, t) &= \frac{1}{2|x|} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \left(-\frac{\widehat{\mathcal{K}}t^\gamma}{(\mathcal{D}t)^{\frac{\mu}{2}}} \right)^n \mathbf{H}_{3,3}^{2,1} \left[\frac{|x|}{\sqrt{\mathcal{D}t}} \left| \begin{matrix} (1-\frac{n\mu}{2}, \frac{1}{2}), (1+(1+\gamma-\frac{\mu}{2})n, \frac{1}{2}), (1, \frac{1}{2}) \\ (1,1), (1-(1-\frac{\mu}{2})n, \frac{1}{2}), (1, \frac{1}{2}) \end{matrix} \right. \right]. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Nesse contexto, a solução geral que considera uma forma arbitrária para o termo não-local pode ser encontrada utilizando a transformada inversa de Laplace e o teorema de convolução correspondente [62]. Assim sendo, após alguns cálculos de rotina, podemos

mostrar que

$$\begin{aligned}
 \rho(x, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{x} \rho(\bar{x}, 0) \mathcal{G}(x - \bar{x}, t) \\
 \mathcal{G}(x, t) &= \bar{\mathcal{G}}(x, t) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_n \int_0^t dt_n \bar{\mathcal{K}}(x - x_n, t - t_n) \cdots \\
 &\quad \times \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \int_0^{t_1} dt_1 \bar{\mathcal{K}}(x_2 - x_1, t_2 - t_1) \bar{\mathcal{G}}(x_1, t_1)
 \end{aligned} \tag{4.16}$$

onde $\rho(x, 0)$ é a condição inicial e $\bar{\mathcal{G}}(x, t)$ é dada pela Eq. (4.12). A Eq. (4.16) estende a Eq. (4.11) e pode ser usada para obter soluções aproximadas, quando o termo não-local permite ser considerado como uma perturbação na solução usual.

4.2 Equações de difusão fracionária e soluções

Vamos continuar nossa investigação da Eq. (4.1) considerando uma simetria esférica, isto é, $\mathbf{r} = (r, \theta, \phi)$ e $\int d\mathbf{r} \equiv \int_0^{+\infty} dr r^2 \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta$, onde a derivada fracionária no tempo considerada aqui é a de Caputo [24], com $0 < \gamma \leq 1$ e a solução está sujeita a condição de contorno $\lim_{|\mathbf{r}| \rightarrow \infty} \rho(\mathbf{r}, t) = 0$. Aqui analisamos dois casos: (i) $\mathcal{K}(\mathbf{r}, t) = \bar{\mathcal{K}}(\mathbf{r})\delta(t)$ ($\mathcal{K}(k, s) = \bar{\mathcal{K}}(k)$), o qual pode ser relacionado a derivada fracionária espacial e, (ii) $\mathcal{K}(\mathbf{r}, t)$ ($\bar{\mathcal{K}}(\mathbf{k}, s)$) que tem uma dependência espacial arbitrária. Para resolver a Eq. (4.1), aplicamos a transformada de Fourier ($\mathcal{F}\{\dots\} = \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \dots$ $\mathcal{F}^{-1}\{\dots\} = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \dots$), considerando a condição de contorno mencionada acima e a condição inicial arbitrária $\rho(\mathbf{r}, 0)$ com $\int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}, 0) = 1$, que fornece a equação integral

$$\frac{d^\gamma}{dt^\gamma} \rho(\mathbf{k}, t) = -\mathcal{D}|\mathbf{k}|^2 \rho(\mathbf{k}, t) - \int_0^t dt \bar{\mathcal{K}}(\mathbf{k}, t - \bar{t}) \rho(\mathbf{k}, \bar{t}). \tag{4.17}$$

Esta equação integral pode também ser simplificada usando a transformada de Laplace ($\mathcal{L}\{\dots\} = \int_0^\infty dt e^{-st} \dots$ e $\mathcal{L}^{-1}\{\dots\} = 1/(2\pi i) \int_{-i\infty+c}^{i\infty+c} ds e^{st} \dots$), conduzindo-nos a seguinte equação algébrica:

$$s^\gamma \rho(\mathbf{k}, s) - s^{\gamma-1} \rho(\mathbf{k}, 0) = -\mathcal{D}|\mathbf{k}|^2 \rho(\mathbf{k}, s) - \mathcal{K}(\mathbf{k}, s) \rho(\mathbf{k}, s), \tag{4.18}$$

cuja a solução pode ser escrita como $\rho(\mathbf{k}, s) = \rho(\mathbf{k}, 0)\mathcal{G}(\mathbf{k}, s)$ com

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, s) = \frac{s^{\gamma-1}}{s^\gamma + \mathcal{D}|\mathbf{k}|^2 + \mathcal{K}(\mathbf{k}, s)} \quad (4.19)$$

onde $\rho(\mathbf{k}, 0)$ é a transformada de Fourier da condição inicial e $\mathcal{G}(\mathbf{k}, s)$ é a função de Green [64] da Eq. (4.1) no espaço de Fourier-Laplace. Note que a Eq. (4.19) na ausência de força externa, $\mathcal{K}(\mathbf{k}, s) = 0$, recupera o resultado apresentado em [21].

4.2.1 Primeiro caso: $\mathcal{K}(\mathbf{r}, t) = \bar{\mathcal{K}}(\mathbf{r})\delta(t)$

Substituindo a primeira escolha para $\mathcal{K}(\mathbf{r}, t)$ na Eq. (4.19), o qual no espaço de Fourier-Laplace é dado por $\mathcal{K}(\mathbf{k}, s) = \bar{\mathcal{K}}(\mathbf{k})$, obtemos

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, s) = \frac{s^{\gamma-1}}{s^\gamma + \mathcal{D}|\mathbf{k}|^2 + \bar{\mathcal{K}}(\mathbf{k})}. \quad (4.20)$$

A Eq. (4.20) pode ser relacionada ao formalismo de caminhantes aleatórios [21] considerando como transformada de Laplace da distribuição dos intervalos de tempo $\omega(s) = 1/(1 + (\tau s)^\gamma)$ e como uma aproximação da transformada de Fourier da função densidade de probabilidade de saltos $\lambda(\mathbf{k}) \approx 1 - \tau^\gamma (\mathcal{D}|\mathbf{k}|^2 + \bar{\mathcal{K}}(\mathbf{k}))$, onde τ é um intervalo de tempo característico. O resultado obtido por $\omega(s)$ e $\lambda(\mathbf{k})$ indica que a escolha anterior para o termo não-local muda diretamente a função densidade de probabilidade de saltos. Em particular, dependendo da escolha de $\bar{\mathcal{K}}(\mathbf{r})$ a solução pode manifestar, por exemplo, um comportamento de cauda longa no limite assintótico com um segundo momento divergente. Executando uma transformada inversa de Laplace, a Eq. (4.20) pode ser escrita como [65]

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, t) = \mathbf{E}_\gamma(-\mathcal{D}|\mathbf{k}|^2 t^\gamma) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-t^\gamma \bar{\mathcal{K}}(\mathbf{k}))^n}{\Gamma(1+n)} \mathbf{E}_\gamma^{(n)}(-\mathcal{D}|\mathbf{k}|^2 t^\gamma), \quad (4.21)$$

onde $\mathbf{E}_\gamma(x) = \sum_{n=0}^{\infty} x^n / \Gamma(1+\gamma n)$ é a função de Mittag-Leffler, sendo $\mathbf{E}_\gamma^{(n)}(x) \equiv \frac{d^n}{dx^n} \mathbf{E}_\gamma(x)$ a n -ésima derivada da função de Mittag-Leffler [24]. Aplicando a transformada inversa de Fourier juntamente com o teorema de convolução na Eq. (4.21), obtemos

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(\mathbf{r}, t) &= \bar{\mathcal{G}}(\mathbf{r}, t) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-t^\gamma)^n}{n!} \int d\mathbf{r}_n \bar{\mathcal{K}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n) \cdots \\ &\times \int d\mathbf{r}_1 \bar{\mathcal{K}}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) \tilde{\mathcal{G}}(\mathbf{r}_1, t), \end{aligned} \quad (4.22)$$

com

$$\bar{\mathcal{G}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{4\pi|\mathbf{r}|^3} \mathbf{H}_{1,1}^{1,0} \left[\frac{|\mathbf{r}|}{\sqrt{\mathcal{D}t^\gamma}} \left| \begin{matrix} (1, \frac{\gamma}{2}) \\ (2, 1) \end{matrix} \right. \right] \quad (4.23)$$

e

$$\tilde{\mathcal{G}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{4\pi|\mathbf{r}|^3} \mathbf{H}_{1,0}^{1,1} \left[\frac{|\mathbf{r}|}{\sqrt{\mathcal{D}t^\gamma}} \left| \begin{matrix} (1+n\gamma, \frac{\gamma}{2}) \\ (2, 1) \end{matrix} \right. \right], \quad (4.24)$$

onde $\mathbf{H}_{p,q}^{m,n} \left[x \left| \begin{matrix} (a_1, A_1), \dots, (a_p, A_p) \\ (b_1, B_1), \dots, (b_q, B_q) \end{matrix} \right. \right]$ é a função H de Fox [57]. A presença dessa função na função de Green acima indica que a derivada fracionária no tempo e o termo não-local incorporados na Eq. (4.1) produzem uma difusão anômala. Para esclarecer melhor a influência do termo não-local na solução da equação de difusão fracionária, consideramos a situação ilustrativa dada por $\bar{\mathcal{K}}(\mathbf{r}) \propto 1/|\mathbf{r}|^{3+\mu}$ ($\bar{\mathcal{K}}(\mathbf{k}) = \bar{\mathcal{K}}|\mathbf{k}|^\mu$) com $0 < \gamma \leq 1$. Substituindo $\bar{\mathcal{K}}(\mathbf{r})$ na Eq. (4.22) (veja Fig. (4.3)), é possível obter

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(\mathbf{r}, t) &= \bar{\mathcal{G}}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{\pi^{3/2}|\mathbf{r}|^3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{\mathcal{K}}{\sqrt{\mathcal{D}\mu}} t^{(1-\frac{\mu}{2})\gamma} \right)^n \\ &\times \mathbf{H}_{2,3}^{2,1} \left[\frac{|\mathbf{r}|^2}{4\mathcal{D}t^\gamma} \left| \begin{matrix} (1-\frac{n\mu}{2}, 1), (1+(\gamma-\frac{\mu}{2})n, \gamma) \\ (\frac{3}{2}, 1), (1+(1-\frac{\mu}{2})n, 1), (1, 1) \end{matrix} \right. \right]. \end{aligned} \quad (4.25)$$

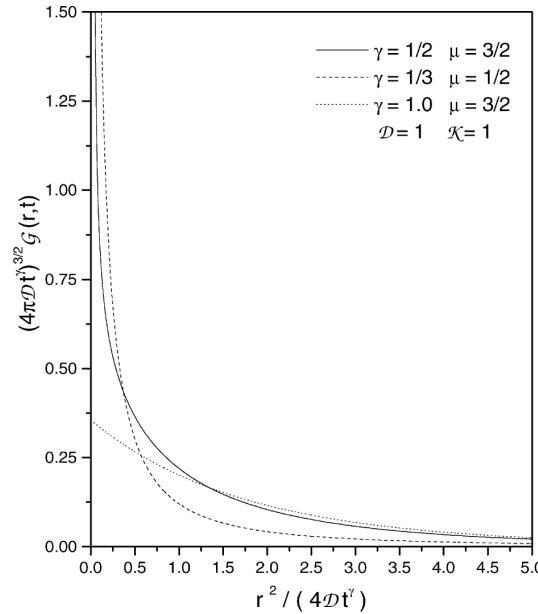


Figura 4.3: Esta figura ilustra o comportamento de $(4\pi\mathcal{D}t^\gamma)^{3/2}\mathcal{G}(r, t)$ versus $r^2/(4\mathcal{D}t^\gamma)$ para Eq. (4.25) considerando valores típicos de γ e μ com $t = 1$.

Note que para $\gamma \neq 1$, como mostrado em Fig. (4.3), temos uma divergência no comportamento na origem que está de acordo com o resultado [66] para as equações de difusão fracionária. Um outro aspecto observado é a presença de dois regimes; um deles é caracterizado por uma exponencial alongada e o outro é assintoticamente dominado por uma lei de potência. Na realidade, é possível verificar que, para tempos curtos ($t \ll (D^{\frac{\mu}{2}}/\mathcal{K})^{2/(\gamma(2-\mu))}$),

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(\mathbf{r}, t) &\sim \frac{1}{(4\pi|\mathbf{r}|^2)^{3/2}} \left(\frac{\gamma}{2}\right)^{\frac{3\gamma}{2(2-\gamma)} - \frac{1}{2}} \frac{2}{\sqrt{2-\gamma}} \left(\frac{|\mathbf{r}|}{\sqrt{Dt^\gamma}}\right)^{\frac{3}{2-\gamma}} \\ &\times \exp \left[- \left(\frac{\gamma}{2}\right)^{\frac{\gamma}{2-\gamma}} \left(\frac{|\mathbf{r}|}{\sqrt{Dt^\gamma}}\right)^{\frac{2}{2-\gamma}} \right] \end{aligned} \quad (4.26)$$

o qual para o caso particular $\gamma = 1$ recuperamos o comportamento gaussiano, enquanto que para tempos longos ($t \gg (D^{\frac{\mu}{2}}/\mathcal{K})^{2/(\gamma(2-\mu))}$)

$$\mathcal{G}(\mathbf{r}, t) \sim \frac{1}{\pi^{3/2}|\mathbf{r}|^3} \mathbf{H}_{2,3}^{2,1} \left[\frac{|\mathbf{r}|^\mu}{2^\mu \mathcal{K} t^\gamma} \left| \begin{matrix} (1, 1), (1, \gamma) \\ (\frac{3}{2}, \frac{\mu}{2}), (1, 1), (1, \frac{\mu}{2}) \end{matrix} \right. \right] \quad (4.27)$$

que é essencialmente uma distribuição de Lévy encontrada em processos difusivos anômalos.

4.2.2 Segundo caso: $\mathcal{K}(\mathbf{r}, t)$ arbitrário

Agora direcionamos nossa atenção para o segundo caso caracterizado por um *kernel* arbitrário $\mathcal{K}(\mathbf{r}, t)$ no termo não-local e assumimos que este *kernel* tem a transformada de Fourier e Laplace definidas. Substituindo o *kernel* na Eq. (4.19) e aplicando a transformada inversa de Fourier e Laplace, obtemos

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(\mathbf{r}, t) &= \bar{\mathcal{G}}(\mathbf{r}, t) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int d\mathbf{r}_n \int_0^t dt_n \bar{\mathcal{K}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n, t - t_n) \cdots \\ &\times \int d\mathbf{r}_1 \int_0^{t_2} dt_1 t_1^{\gamma n} \bar{\mathcal{K}}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, t_2 - t_1) \tilde{\mathcal{G}}(\mathbf{r}_1, t_1), \end{aligned} \quad (4.28)$$

com $\bar{\mathcal{G}}(\mathbf{r}, t)$ e $\tilde{\mathcal{G}}(\mathbf{r}, t)$ dados pelas Eqs. (4.23) e (4.24). A Eq. (4.28) estende os resultados apresentados em [59, 67] e similar aos resultados anteriores podem apresentar diferentes regimes de difusão dependendo da escolha do *kernel* $\mathcal{K}(\mathbf{r}, t)$. Para ilustrar este caso, consideramos um *kernel* com dependência temporal $\mathcal{K}(\mathbf{r}, t) \propto t^{\eta-1} \delta(\mathbf{r})$ ($\mathcal{K}(\mathbf{k}, s) = \hat{\mathcal{K}} s^{-\eta}$).

Substituindo o *kernel* na Eq. (4.19) e usando a Eq. (4.28), após alguns cálculos, é possível mostrar que

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(\mathbf{r}, t) &= \bar{\mathcal{G}}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{\pi^{3/2}|\mathbf{r}|^3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} (-\hat{\mathcal{K}}t^{\gamma+\eta})^n \\ &\times \mathbf{H}_{1,2}^{2,0} \left[\frac{|\mathbf{r}|^2}{4\mathcal{D}t^\gamma} \left| \begin{matrix} (1+(\gamma+\eta)n, \gamma) \\ (\frac{3}{2}, 1), (1+n, 1) \end{matrix} \right. \right] \end{aligned} \quad (4.29)$$

(veja Fig. (4.4)).

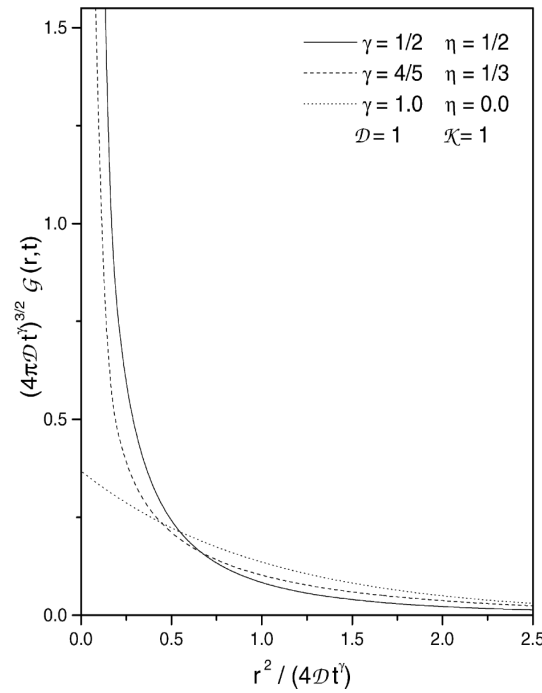


Figura 4.4: Esta figura ilustra o comportamento de $(4\pi Dt^\gamma)^{3/2} \mathcal{G}(r, t)$ versus $r^2/(4Dt^\gamma)$ para Eq. (4.29) considerando valores típicos de γ e η com $t = 1$.

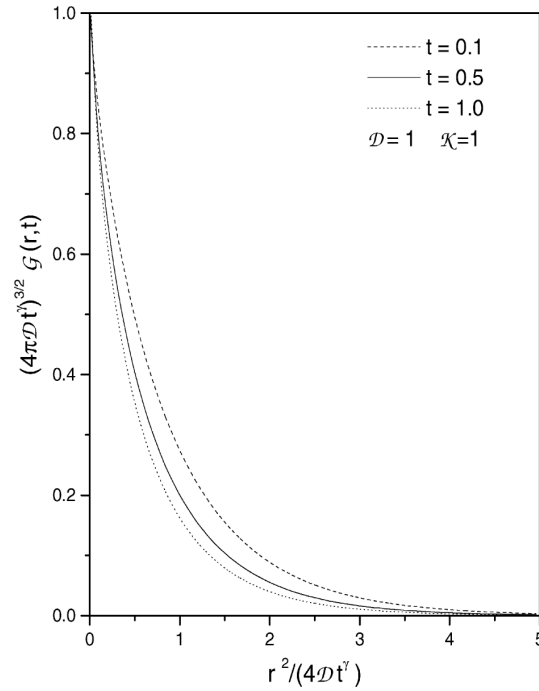


Figura 4.5: Esta figura ilustra o comportamento de $(4\pi Dt^\gamma)^{3/2} \mathcal{G}(r, t)$ versus $r^2/(4Dt^\gamma)$ para Eq. (4.29) considerando $\gamma = 1$ e $\eta = -1/2$ para valores típicos de t .

Observe que Eq. (4.29) relaciona o comportamento na origem o qual não é divergente para $\gamma = 1$ e $-1 < \eta \leq 0$ (veja Fig. (4.5)). Note também que a Eq. (4.29) estende os resultados obtidos em [59], considerando o caso tridimensional com um *kernel* com dependência temporal e espacial, recuperando o caso usual quando $\hat{\mathcal{K}} = 0$ e $\gamma = 1$.

Equação de difusão fracionária em uma região confinada: efeitos de superfície e soluções exatas

Nesse capítulo, daremos continuidade ao estudo iniciado no Cap. 3 a respeito das derivadas de ordem fracionárias, entretanto restringindo a situações que os contornos do sistema definem uma região confinada na qual o sistema pode se difundir. Nestas situações, as superfícies que definem a região podem vir a desempenhar um papel importante no processo difusivo do sistema. Para investigar tais efeitos, vamos considerar condições de contorno que são dependentes do tempo em sistemas que possuem uma, duas ou \mathcal{N} -dimensões espaciais. Particularmente, no caso em que o sistema possui duas ou \mathcal{N} -dimensões espaciais, vamos incorporar à dependência temporal e aspectos não homogêneos na condição de contorno. Especificamente, a equação que vamos analisar nas duas primeiras seções do capítulo é

$$\frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(r, t) = \mathcal{D} \nabla^2 \rho(\bar{r}, t) + \int_0^t d\bar{t} \bar{\mathcal{K}}(t - \bar{t}) \nabla^2 \rho(\bar{r}, t), \quad (5.1)$$

onde \mathcal{D} é um coeficiente de difusão adimensional e a derivada fracionária considerada está na representação de Caputo [24]. Observe que a equação acima pode conter vários regimes de difusão, sendo que em um deles temos a presença de um *kernel* dependente do tempo $\mathcal{K}(t)$, o qual consideramos dado por $\bar{\mathcal{K}}(t) = \mathcal{D}_\alpha t^{\alpha-1} / \Gamma(\alpha)$. A Eq. (5.1) é analisada focando o caso em que $0 < \gamma \leq 1$ com $0 < \alpha + \gamma \leq 1$ ($0 < \alpha$), isto é, caso subdifusivo. Porém, essa equação pode ser analisada considerando outras faixas para os parâmetros

γ e α , por exemplo, $0 < \gamma \leq 1$, com $\alpha > 0$ ou $1 < \gamma < 2$, com $\alpha > 0$. Nessa direção, é interessante mencionar que os resultados encontrados para o caso subdifusivo podem ser estendidos a $1 < \gamma < 2$ incorporando a condição $\partial_t \rho|_{t=0}$. A equação também pode ser relacionada ao formalismo de caminhadas aleatórias contínuas no espaço e tempo CTRW [21] ao considerarmos a função densidade de probabilidade $\psi(k, s) = \omega(s)\lambda(k)$, com a distribuição do intervalo de tempo no espaço de Laplace dada por $\omega(s) = (\mathcal{D} + \mathcal{K}(s))/(\mathcal{D} + \mathcal{K}(s) + \tau s^\gamma)$ e a distribuição de probabilidade dos pulos no espaço de Fourier dada por $\lambda(k) = 1 - \tau k^2$. Por fim, na terceira seção do capítulo, investigaremos as soluções de uma equação de difusão fracionária \mathcal{N} -dimensional com simetria radial dada por

$$\begin{aligned} \frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(r, t) &= \int_0^t dt' \nabla \cdot (\mathcal{D}(r, t-t') \nabla \rho(r, t')) \\ &\quad - \int_0^t dt' \nabla \cdot (\overline{F}(r, t-t') \rho(r, t')), \end{aligned} \quad (5.2)$$

onde $\mathcal{D}(r, t)$ representa o coeficiente de difusão, $\overline{F}(r, t)$ é uma força externa agindo no sistema, e $0 < \gamma \leq 1$ (caso subdifusivo) com a derivada fracionária no tempo, também na representação de Caputo. Inicialmente, vamos considerar um coeficiente de difusão $\mathcal{D}(r, t) = \overline{\mathcal{D}}(t)r^{-\theta}$, onde $\overline{\mathcal{D}}(t) = t^{\eta-1}/\Gamma(\eta-1)$ com $\eta \geq 0$, na ausência de força externa, isto é, $\overline{F}(r, t) = 0$. Em seguida, incorporamos a força externa $\overline{F}(r, t) = -(kr - \mathcal{K}/r^\varepsilon)F'(t)\hat{r}$, onde $F'(t) = t^{\eta-1}/\Gamma(\eta-1)$ e $\varepsilon = 1 + \theta$, considerando primeiramente $k = 0$ e depois o caso para $k \neq 0$.

5.1 Equação de difusão fracionária: caso unidimensional

Vamos iniciar a análise considerando a Eq. (5.1) unidimensional com a condição de contorno dependente do tempo $\rho(0, t) = \Phi_0(t)$ e $\rho(a, t) = \Phi_a(t)$, e a condição inicial $\rho(x, 0) = \tilde{\rho}(x)$. Para esse caso, a Eq. (5.1) pode ser reescrita como

$$\frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(x, t) = \mathcal{D} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, t) + \frac{\mathcal{D}_\alpha}{\Gamma(\alpha)} \int_0^t dt' (t-t')^{\alpha-1} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, t'), \quad (5.3)$$

com $0 < \gamma \leq 1$ e $0 \leq \alpha + \gamma \leq 1$. Essa equação estende a equação de difusão usual pela presença da derivada fracionária e a integral de convolução em um dos termos difusivos. Para estudar os efeitos de superfície na relaxação de sistemas e resolver a Eq. (5.3), usamos a transformada de Laplace e o formalismo das funções de Green. Dessa forma, após alguns

cálculos, é possível obter a solução

$$\begin{aligned} \hat{\rho}(x, s) = & -s^{\gamma-1} \int_0^a dx' \hat{\mathcal{G}}(x, x'; s) \tilde{\rho}(x') + \left[\bar{\Phi}_a(s) \frac{\partial}{\partial x'} \hat{\mathcal{G}}(x, x'; s) \Big|_{x'=a} \right. \\ & \left. - \bar{\Phi}_0(s) \frac{\partial}{\partial x'} \hat{\mathcal{G}}(x, x'; s) \Big|_{x'=0} \right], \end{aligned} \quad (5.4)$$

com $\bar{\Phi}_{0,a}(s) = (\mathcal{D} + \mathcal{D}_\alpha s^{-\alpha}) \Phi_{0,a}(s)$ e a função de Green $\mathcal{G}(x, t; x', t')$ governada pela equação

$$\left(\mathcal{D} + \frac{\mathcal{D}_\alpha}{s^\alpha} \right) \frac{d^2}{dx^2} \hat{\mathcal{G}}(x, x'; s) - s^\gamma \hat{\mathcal{G}}(x, x'; s) = \delta(x - x'), \quad (5.5)$$

que esta sujeita às condições de contorno $\hat{\mathcal{G}}(0, x'; s) = 0$ e $\hat{\mathcal{G}}(a, x'; s) = 0$. Usando as autofunções do problema de Sturm-Liouville relacionadas ao operador espacial da Eq. (5.5), é possível mostrar que

$$\hat{\mathcal{G}}(x, x'; s) = -\frac{2}{a} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(n\pi x'/a) \sin(n\pi x/a)}{s^\gamma + (\mathcal{D} + \mathcal{D}_\alpha s^{-\alpha})(n\pi/a)^2}. \quad (5.6)$$

Para sabermos mais sobre o comportamento do sistema confinado, temos que inverter Laplace na Eq. (5.4), que resulta em

$$\begin{aligned} \rho(x, t) = & -\frac{1}{\Gamma(1-\gamma)} \int_0^t d\bar{t} \frac{1}{(t-\bar{t})^\gamma} \int_0^a dx' \hat{\mathcal{G}}(x, x'; t) \tilde{\rho}(x') \\ & + \int_0^t d\bar{t} \left[\bar{\Phi}_a(t-\bar{t}) \frac{\partial}{\partial x'} \mathcal{G}(x, x'; \bar{t}) \Big|_{x'=a} \right. \\ & \left. - \bar{\Phi}_0(t-\bar{t}) \frac{\partial}{\partial x'} \mathcal{G}(x, x'; \bar{t}) \Big|_{x'=0} \right], \end{aligned} \quad (5.7)$$

com $\bar{\Phi}_{0,a}(t) = \mathcal{D}\Phi_{0,a}(t) + \mathcal{D}_\alpha/\Gamma(\alpha) \int_0^t d\bar{t} (t-\bar{t})^{\alpha-1} \Phi_{0,a}(\bar{t})$ e

$$\mathcal{G}(x, x'; t) = -\frac{2}{a} \sum_{n=1}^{\infty} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{n\pi}{a}x'\right) \mathcal{Y}_n(t, k_n), \quad (5.8)$$

sendo $\mathcal{Y}_n(t, k_n)$ dado por

$$\mathcal{Y}_n(t, k_n) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{t^{\gamma-1}}{m!} (-\mathcal{D}_\alpha t^{\gamma+\alpha} k_n^2)^m \mathbf{H}_{1,2}^{1,1} \left[\mathcal{D} k_n^2 t^\gamma \middle| \begin{matrix} (-m, 1) \\ (0, 1)(1 - (\gamma + \alpha)m - \gamma, \gamma) \end{matrix} \right]. \quad (5.9)$$

Note que $\mathcal{Y}_n(t, k_n)$ é essencialmente uma mistura de dois regimes, um deles governado pela derivada fracionária e o outro dominado pelo *kernel* presente no termo difusivo, onde a função $\mathcal{Y}_n(t, k_n)$ com $\mathcal{D} \neq 0$ e $\mathcal{D}_\alpha = 0$ com $\gamma \neq 1$ fica representada por $\mathcal{Y}_n(t, k_n) = t^{\gamma-1} E_{\gamma, \gamma}(-\mathcal{D} k_n^2 t^\gamma)$ e para $\mathcal{D} = 0$ e $\mathcal{D}_\alpha \neq 0$ por $\mathcal{Y}_n(t, k_n) = t^{\gamma-1} E_{\gamma+\alpha, \gamma}(-\mathcal{D}_\alpha k_n^2 t^{\gamma+\alpha})$.

O primeiro termo da Eq. (5.7) dá a evolução temporal do sistema para uma condição inicial arbitrária e o segundo termo representa o efeito de superfície. A representação gráfica de $\rho(x, t)$ e $\mathcal{G}(x, x'; t)$ é mostrada abaixo para alguns valores específicos.

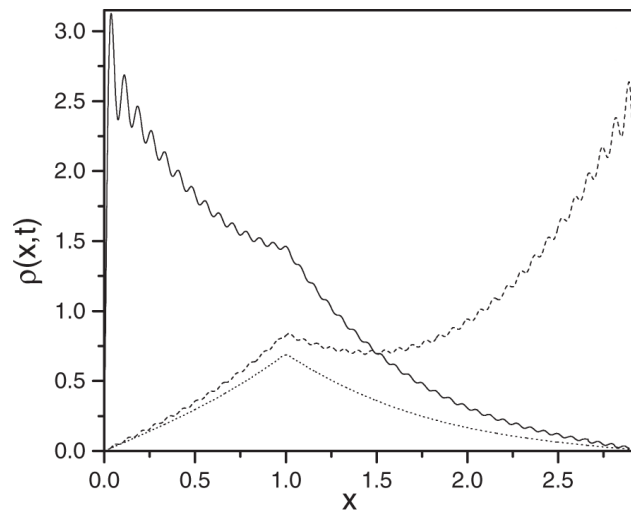


Figura 5.1: Comportamento de $\rho(x, t)$ versus x , que ilustra a Eq. (5.7) considerando, por simplicidade, $\gamma = 1/2$, $\mathcal{D} = 1$, $\mathcal{D}_\alpha = 0$, $a = 3$, $t = 0.1$ e $\rho(x, 0) = \delta(x - 1)$.

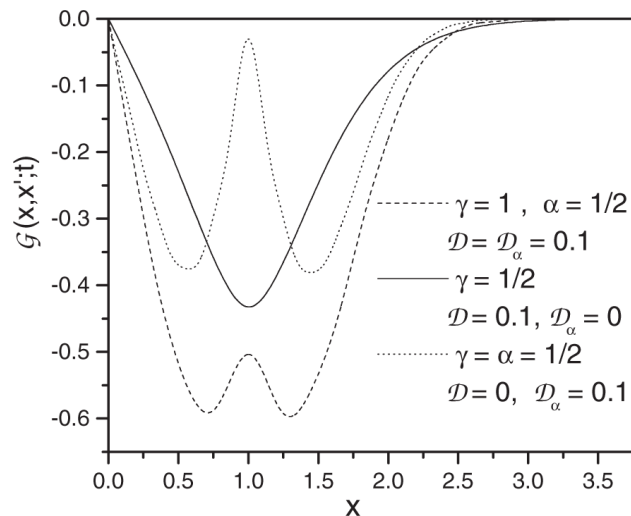


Figura 5.2: Comportamento de $\mathcal{G}(x, x'; t)$ versus x , que ilustra a Eq. (5.8) considerando, por simplicidade, $a = 5$, $x' = 1$, e $t = 1$.

A linha preenchida na Fig. (5.1) corresponde à solução da Eq. (5.7) sujeita às condições de contorno $\rho(0, t) = \Phi(1 + t^{-\eta}/\Gamma(1 - \eta))$ ($\Phi = 1$ e $\eta = 1/2$) e $\rho(a, t) = 0$. A linha pontilhada corresponde à solução também da Eq. (5.7) para $\rho(0, t) = \rho(a, t) = 0$, e a linha tracejada corresponde à solução da Eq. (5.7) com a condição de contorno $\rho(0, t) = 0$ e $\rho(a, t) = \Phi(1 + t^{-\eta}/\Gamma(1 - \eta))$ ($\Phi = 1$ e $\eta = 1/2$).

Nessa direção, as figuras (5.1) e (5.2) mostram o comportamento não-usual (oscilação e acumulação de alguma substância analisada próxima às superfícies), as quais podem ser úteis, por exemplo, para investigar sistemas com condições de contorno governadas por uma equação cinética relacionada a um processo de adsorção-dessorção [68, 69]. Para o caso especial no qual $\Phi_0(t) = \Phi_a(t) = 0$, a solução da equação recai na solução encontrada em [70]. Este comportamento inesperado está relacionado com a presença da derivada fracionária, com a dependência temporal do *kernel* e com as condições de contorno que mudam a dinâmica do sistema.

5.2 Equação de difusão fracionária: caso bidimensional

Vamos agora analisar o caso bidimensional da Eq. (5.3) com simetria cilíndrica e sujeita às condições de contorno $\rho(a, \theta, t) = \tilde{\Phi}_a(\theta, t)$ e $\rho(b, \theta, t) = \tilde{\Phi}_b(\theta, t)$, ou seja, uma situação não homogênea onde temos uma condição de contorno com dependência angular. Dessa forma, empregando o mesmo procedimento anterior, a solução da Eq. (5.3) pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \rho(r, \theta, t) = & -\frac{1}{\Gamma(1 - \gamma)} \int_0^t d\bar{t} \frac{1}{(t - \bar{t})^\gamma} \int_0^{2\pi} d\theta' \int_a^b dr' r' \mathcal{G}(r, \theta; r', \theta'; t) \tilde{\rho}(r', \theta') \\ & + \int_0^t dt' \int_0^{2\pi} d\theta' \left[b \tilde{\Phi}_b(\theta', t - t') \frac{\partial}{\partial r'} \mathcal{G}(r, \theta; r', \theta'; t) \Big|_{r'=b} \right. \\ & \left. - a \tilde{\Phi}_a(\theta', t') \frac{\partial}{\partial r'} \mathcal{G}(r, \theta; r', \theta'; t - t') \Big|_{r'=a} \right], \end{aligned} \quad (5.10)$$

com $\tilde{\Phi}_{a,b}(t) = \mathcal{D}\tilde{\Phi}_{a,b}(t) + \mathcal{D}_\alpha/\Gamma(\alpha) \int_0^t d\bar{t} (t - \bar{t})^{\alpha-1} \tilde{\Phi}_{a,b}(\bar{t})$ e a função de Green fica dada por

$$\mathcal{G}(r, \theta; r', \theta'; t) = -\frac{\pi}{2} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} N_{mn} \Psi_{mn}(r) \Psi_{mn}(r') \cos(m(\theta - \theta')) \mathcal{Y}_{mn}(k_{mn}, t), \quad (5.11)$$

sendo $\Psi_{mn}(r) = J_m(k_{mn}r)\mathcal{N}_m(k_{mn}a) - J_m(k_{mn}a)\mathcal{N}_m(k_{mn}r)$, representado em termos das funções de Bessel de primeira e segunda espécie e k_{mn} são soluções da equação de autovalores

$$J_m(k_{mn}b)\mathcal{N}_m(k_{mn}a) - J_m(k_{mn}a)\mathcal{N}_m(k_{mn}b) = 0$$

e

$$N_{mn} = k_{mn}^2 / (\varepsilon_m \{ [J_m(k_{mn}a)/J_m(k_{mn}b)]^2 - 1 \}),$$

com $\varepsilon_m = 2$ para $m = 0$ e $\varepsilon_m = 1$ para $m \neq 0$ (veja Fig. (5.3)). Similar à Eq. (5.7), o último termo da Eq. (5.10) representa o efeito de superfície, o qual dá a evolução temporal do sistema para uma condição inicial arbitrária.

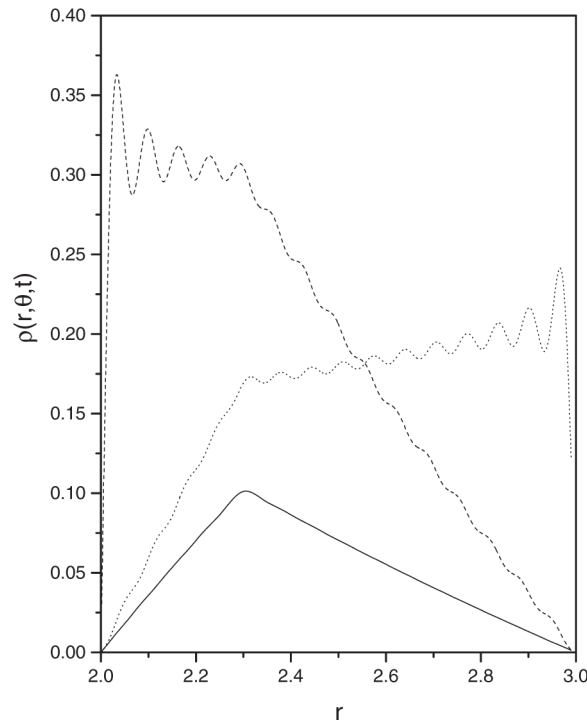


Figura 5.3: Comportamento de $\rho(r, \theta, t)$ versus r , que ilustra a Eq. (5.10) considerando, por simplicidade, $\gamma = 1/2$, $\mathcal{D} = 1$, $\mathcal{D}_\alpha = 0$, $\rho(r, \theta, 0) = (2/r)\delta(r - \tilde{r})$ com $\tilde{r} = 2.3$, $a = 2$, $b = 3$ e $t = 1$.

A linha preenchida corresponde à solução da Eq. (5.10) sujeita às condições de contorno $\rho(a, \theta, t) = \rho(b, \theta, t) = 0$. A linha pontilhada corresponde à solução também da Eq. (5.10) para $\rho(a, \theta, t) = 0$ e $\rho(b, \theta, t) = 2/(3\pi)$, e a linha tracejada corresponde à solução com condições de contorno $\rho(a, \theta, t) = 1/\pi$ e $\rho(b, \theta, t) = 0$.

Uma aplicação do formalismo acima pode ser encontrada naqueles sistemas que envolvem amostras de cristais líquidos confinados entre duas superfícies cilíndricas con-

cêntricas. Estes problemas têm sido investigados em conexão com a instabilidade flexo-elétrica [71], com a análise de instabilidade da orientação do diretor [72] e a transição de Fréedericksz ocorrendo na ausência de campo elétrico externo [73].

5.3 Equação de difusão fracionária: caso \mathcal{N} -dimensional

Vamos considerar a Eq. (5.2) com ausência de força externa sujeita as condições de contorno $\rho(a, t) = \phi_a(t)$ e $\rho(b, t) = \phi_b(t)$, com a condição inicial dada por uma função arbitrária $\rho(r, 0) = \bar{\rho}(r)$, que é inicialmente normalizada, isto é, $\int_0^\infty dr r^{\mathcal{N}-1} \rho(r, t) = 1$. Para o caso \mathcal{N} -dimensional, considerando uma dependência espacial e temporal no coeficiente de difusão $\mathcal{D}(r, t) = \bar{\mathcal{D}}(t)r^{-\theta}$, a Eq. (5.2) pode ser reescrita como

$$\frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(r, t) = \frac{1}{r^{\mathcal{N}-1}} \int_0^t dt' \frac{\partial}{\partial r} \left(\bar{\mathcal{D}}(t-t') r^{\mathcal{N}-1-\theta} \frac{\partial}{\partial r} \rho(r, t') \right), \quad (5.12)$$

com $0 < \gamma \leq 1$ e $\bar{\mathcal{D}}(t) = t^{\eta-1}/\Gamma(\eta-1)$. A presença da derivada fracionária no tempo e a dependência temporal e espacial do coeficiente de difusão, como já visto anteriormente, estende a equação de difusão usual e pode exibir diferentes regimes de difusão. Além disso, é interessante notar que, para uma dependência do tempo adequada no coeficiente de difusão, a solução pode exibir também diferentes regimes difusivos. Para obter a solução da Eq. (5.12) e investigar como as condições de contorno podem mudar a relaxação do sistema, nesse trabalho, usamos o formalismo das funções de Green juntamente com a transformada de Laplace sendo possível mostrar que a solução é dada por

$$\begin{aligned} \rho(r, s) = & -s^{\gamma-1} \int_a^b dr' r'^{\mathcal{N}-1} \mathcal{G}(r, r'; s) \bar{\rho}(r) \\ & + \bar{\mathcal{D}}(s) \left[b^{\mathcal{N}-\theta-1} \phi_b(s) \frac{\partial}{\partial r'} \mathcal{G}(r, r'; s) \Big|_{r'=b} \right. \\ & \left. - a^{\mathcal{N}-\theta-1} \phi_a(s) \frac{\partial}{\partial r'} \mathcal{G}(r, r'; s) \Big|_{r'=a} \right], \end{aligned} \quad (5.13)$$

onde o último termo representa o efeito de superfície e determina a existência de uma solução estacionária. A função de Green $\mathcal{G}(r, r'; s)$, apresentada na equação acima, é obtida resolvendo a equação

$$\frac{1}{r^{\mathcal{N}-1}} \frac{d}{dr} \left(\bar{\mathcal{D}}(s) r^{\mathcal{N}-\theta-1} \frac{d}{dr} \mathcal{G}(r, r'; s) \right) - s^\gamma \mathcal{G}(r, r'; s) = \frac{1}{r^{\mathcal{N}-1}} \delta(r-r'), \quad (5.14)$$

sujeita às condições de contorno $\mathcal{G}(r, r'; s)|_{r=b} = 0$ e $\mathcal{G}(r, r'; s)|_{r=a} = 0$.

Usando as autofunções do problema de Sturm-Liouville que emergem da equação $\partial_r(r^{N-1-\theta}\partial_r\psi_n(k_n, r)) = -k_n^2 r^{N-1}\psi_n(k_n, r)$ com $\psi_n(k_n, r)|_{r=a} = \psi_n(k_n, r)|_{r=b} = 0$, a função de Green para esse caso fica dada por

$$\mathcal{G}(r, r'; s) = -\frac{1}{2+\theta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{N_n}{s^\gamma + \overline{\mathcal{D}}(s)k_n^2} \psi_n(k_n, r')\psi_n(k_n, r) \quad (5.15)$$

com

$$\begin{aligned} \psi_n(k_n, r) &= r^{\frac{1}{2}(2+\theta-\mathcal{N})} \left[J_{|\alpha|} \left(\frac{2k_n}{2+\theta} r^{\frac{1}{2}(2+\theta)} \right) \mathcal{N}_{|\alpha|} \left(\frac{2k_n}{2+\theta} a^{\frac{1}{2}(2+\theta)} \right) \right. \\ &\quad \left. - J_{|\alpha|} \left(\frac{2k_n}{2+\theta} a^{\frac{1}{2}(2+\theta)} \right) \mathcal{N}_{|\alpha|} \left(\frac{2k_n}{2+\theta} r^{\frac{1}{2}(2+\theta)} \right) \right], \end{aligned} \quad (5.16)$$

onde $\alpha = \mathcal{N}/(2+\theta) - 1$. As funções $J_\alpha(x)$ e $\mathcal{N}_\alpha(x)$ são as funções de Bessel de primeira e segunda espécie. Os autovalores k_n são determinados usando a equação

$$\begin{aligned} &J_{|\alpha|} \left(\frac{2k_n}{2+\theta} b^{\frac{1}{2}(2+\theta)} \right) \mathcal{N}_{|\alpha|} \left(\frac{2k_n}{2+\theta} a^{\frac{1}{2}(2+\theta)} \right) \\ &- J_{|\alpha|} \left(\frac{2k_n}{2+\theta} a^{\frac{1}{2}(2+\theta)} \right) \mathcal{N}_{|\alpha|} \left(\frac{2k_n}{2+\theta} b^{\frac{1}{2}(2+\theta)} \right) = 0 \end{aligned} \quad (5.17)$$

e

$$N_n = \frac{\pi^2 k_n^2}{J_{|\alpha|}^2 \left(\frac{2k_n}{2+\theta} a^{\frac{1}{2}(2+\theta)} \right) / J_{|\alpha|}^2 \left(\frac{2k_n}{2+\theta} b^{\frac{1}{2}(2+\theta)} \right) - 1}. \quad (5.18)$$

Aplicando a transformada inversa de Laplace nas Eqs. (5.13) e (5.15) com $\overline{\mathcal{D}}(s) = \mathcal{D}/s^\eta$ ($\overline{\mathcal{D}}(t) = \mathcal{D}t^{\eta-1}/\Gamma(\eta-1)$), obtemos

$$\begin{aligned} \rho(r, t) &= -\frac{1}{\Gamma(1-\gamma)} \int_0^t dt' \frac{1}{(t-t')^{\gamma-1}} \int_a^b dr' r'^{N-1} \mathcal{G}(r, r'; s) \overline{\rho}(r) \\ &\quad + \int_0^t dt' \overline{\mathcal{D}}(t-t') \left\{ b^{N-\theta-1} \int_0^{\bar{t}} dt' \phi_b(\bar{t}-t') \frac{\partial}{\partial r'} \mathcal{G}(r, r'; t') \right\} \Bigg|_{r'=b} \\ &\quad - a^{N-\theta-1} \int_0^{\bar{t}} dt' \phi_a(\bar{t}-t') \frac{\partial}{\partial r'} \mathcal{G}(r, r'; t') \Bigg|_{r'=a} \end{aligned} \quad (5.19)$$

com

$$\mathcal{G}(r, r'; t) = -\frac{t^{\gamma-1}}{2+\theta} \sum_{n=1}^{\infty} N_n \psi_n(k_n, r') \psi_n(k_n, r) E_{\gamma+\eta, \gamma}(-\mathcal{D}k_n^2 t^{\gamma+\eta}), \quad (5.20)$$

onde $E_{\alpha, \beta}(x) = \sum_{n=0}^{\infty} x^n / \Gamma(\beta + \alpha n)$ é a função de Mittag-Leffler generalizada (A.4.2). Na Fig. (5.4), é mostrado o comportamento da Eq. (5.19) para alguns parâmetros específicos.

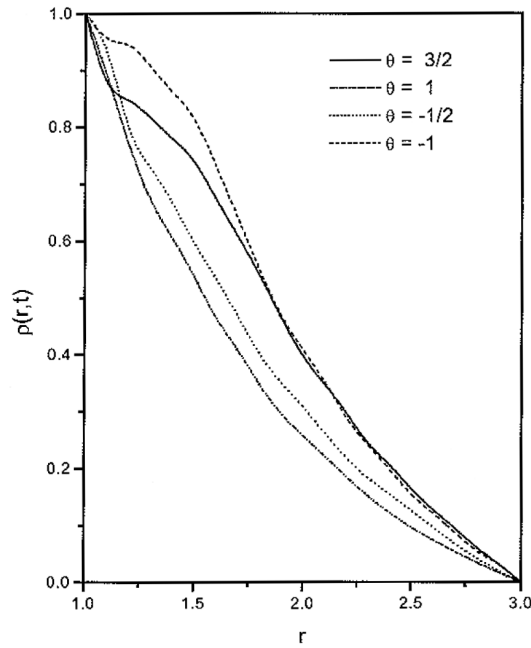


Figura 5.4: Comportamento de $\rho(r, t)$ versus r obtido da Eq. (5.19) para valores típicos de θ , fazendo $\phi_a(t) = 1$ e $\phi_b(t) = 0$. Consideramos, por simplicidade, $\mathcal{D} = 1$, $\mathcal{N} = 2$, $a = 1$, $b = 3$, $t = 1$, $\gamma + \eta = 1/2$, e a condição inicial $\rho(r, 0) = \delta(r - 3/2) / r^{\mathcal{N}-1}$.

Note que o valor de θ modifica o processo difusivo do sistema e para $\theta < 0$ a difusão é mais rápida do que $\theta > 0$. Em particular, é interessante também observar que a dependência temporal no coeficiente de difusão produz uma dispersão anômala da solução e dependendo da escolha, diferentes regimes difusivos podem ser obtidos como mencionado anteriormente. Esta difusão anômala pode ser melhor verificada através da variância, isto é, $\sigma^2 = \langle (r - \langle r \rangle)^2 \rangle$. Para o caso em que temos a condição de contorno e a condição inicial caracterizada por $\rho(a, t) = \rho(b, t) = 0$ e $\rho(r, 0) = \delta(r - \tilde{r}) / t^{\mathcal{N}-1}$ com $\theta = 0$, é possível

expressar a variância da seguinte forma [74]

$$\sigma^2(t) = \langle r^2 \rangle - (2 - \mathcal{S}(t))\langle r \rangle^2 \quad (5.21)$$

com

$$\begin{aligned} \langle r^2 \rangle &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{N_n}{\pi k_n^2} \left(b^{\frac{\mathcal{N}}{2}+1} \frac{J_{|\alpha|}(k_n a)}{J_{|\alpha|}(k_n b)} - a^{\frac{\mathcal{N}}{2}+1} \right) \psi_n(\tilde{r}, k_n) E_{\gamma+\eta}(-\mathcal{D}k_n^2 t^{\gamma+\eta}) \\ &\quad - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2\mathcal{N}N_n}{\pi k_n^4} \left(b^{\frac{\mathcal{N}}{2}-1} \frac{J_{|\alpha|}(k_n a)}{J_{|\alpha|}(k_n b)} - a^{\frac{\mathcal{N}}{2}-1} \right) \\ &\quad \times \psi_n(\tilde{r}, k_n) E_{\gamma+\eta}(-\mathcal{D}k_n^2 t^{\gamma+\eta}), \end{aligned} \quad (5.22)$$

$$\begin{aligned} \langle r \rangle &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{N_n}{\pi k_n^2} \left(b^{\frac{\mathcal{N}}{2}} \frac{J_{|\alpha|}(k_n a)}{J_{|\alpha|}(k_n b)} - a^{\frac{\mathcal{N}}{2}} \right) \psi_n(\tilde{r}, k_n) E_{\gamma+\eta}(-\mathcal{D}k_n^2 t^{\gamma+\eta}) \\ &\quad - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{N_n}{\pi k_n^4} \left(b^{\frac{\mathcal{N}}{2}-1} \frac{J_{|\alpha|}(k_n a)}{J_{|\alpha|}(k_n b)} - a^{\frac{\mathcal{N}}{2}-1} \right) \\ &\quad \times \psi_n(\tilde{r}, k_n) E_{\gamma+\eta}(-\mathcal{D}k_n^2 t^{\gamma+\eta}) \end{aligned} \quad (5.23)$$

e

$$\mathcal{S}(t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{N_n}{\pi k_n^2} \left(b^{\frac{\mathcal{N}}{2}-1} \frac{J_{|\alpha|}(k_n a)}{J_{|\alpha|}(k_n b)} - a^{\frac{\mathcal{N}}{2}-1} \right) \psi_n(\tilde{r}, k_n) E_{\gamma+\eta}(-\mathcal{D}k_n^2 t^{\gamma+\eta}) \quad (5.24)$$

(veja Figs. (5.5) e (5.6)).

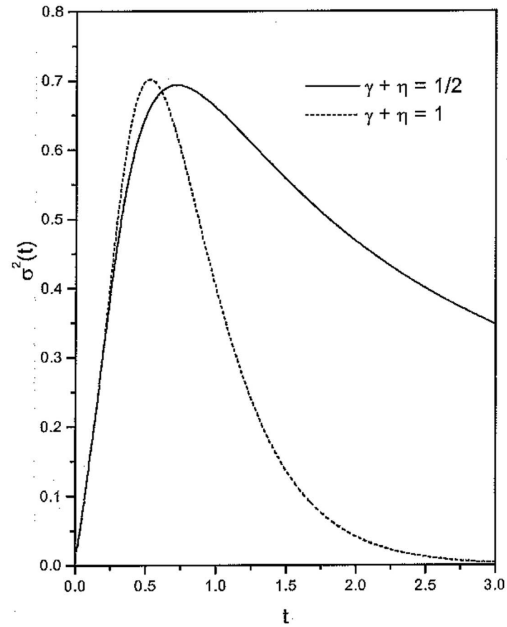


Figura 5.5: Comportamento de $\sigma^2(t)$ versus t , obtido da Eq. (5.21) para valores típicos de $\gamma + \eta$, considerando $\mathcal{D} = 1$, $\mathcal{N} = 1$, $a = 1$, $b = 3$, e $\rho(r, 0) = \delta(r - 2)/r^{\mathcal{N}-1}$.

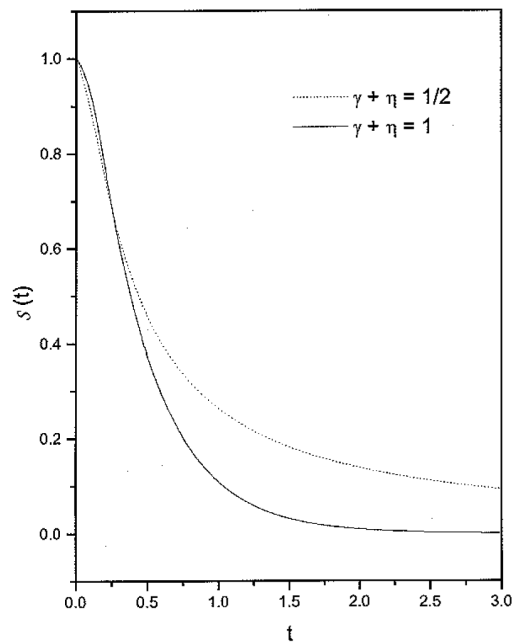


Figura 5.6: Comportamento de $S(t)$ versus t obtido da Eq. (5.24) para valores de $\gamma + \eta$, considerando $\Phi_a(t) = 1$, $\Phi_b(t) = 0$, $\mathcal{D} = 1$, $\mathcal{N} = 1$, $a = 1$, $b = 3$, e a condição inicial $\rho(r, 0) = \delta(r - 2)/r^{\mathcal{N}-1}$.

Note que a quantidade $\mathcal{S}(t) = \int_a^b dr r^{\mathcal{N}-1} \rho(r, t)$ é a probabilidade de sobrevivência [75], isto é, está relacionada com a quantidade de partículas que estão presentes na região definida pelo intervalo $a \leq r \leq b$. Dessa forma, a quantidade $1 - \mathcal{S}(t)$ dá a quantidade de partículas absorvidas pela superfície, ou seja, removidas do sistema.

Agora, vamos incorporar em nossa análise a força externa $\bar{F}(r, t) = (\mathcal{K}/r^\varepsilon)F'(t)\hat{r}$ ($\varepsilon = 1 + \theta$), a qual pode ser derivada de uma lei de potência e tem o potencial logarítmico como caso particular e termos de reação representados por $\tilde{\alpha}(r, t)$. Empregando os procedimentos anteriores, a solução da Eq. (5.12) sujeita a força externa e ao termo de reação, fica dada por

$$\begin{aligned} \rho(r, t) = & -\frac{1}{\Gamma(1-\gamma)} \int_0^t dt' \frac{1}{(t-t')^{\gamma-1}} \int_a^b dr r'^{\mathcal{N}-1} \tilde{\mathcal{G}}(r, r'; t') \bar{\rho}(r) \\ & - \int_0^t dt' \int_a^b dr r'^{\mathcal{N}-1} \tilde{\mathcal{G}}(r, r'; t-t') \tilde{\alpha}(r', t') \\ & + \int_0^t dt' \bar{\mathcal{D}}(t-t') \left\{ b^{\mathcal{N}-\theta-1} \int_0^{\bar{t}} dt' \phi_b(\bar{t}-t') \frac{\partial}{\partial r'} \tilde{\mathcal{G}}(r, r'; t') \Big|_{r=b} \right. \\ & \left. - a^{\mathcal{N}-\theta-1} \int_0^{\bar{t}} dt' \phi_a(\bar{t}-t') \frac{\partial}{\partial r'} \tilde{\mathcal{G}}(r, r'; t') \Big|_{r=a} \right\} \end{aligned} \quad (5.25)$$

com a função de Green representada por

$$\tilde{\mathcal{G}}(r, r'; t) = -\frac{t^{\gamma-1} r^{\frac{\mathcal{K}}{\mathcal{D}}}}{2+\theta} \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{N}_n \tilde{\psi}_n(k_n, r') \tilde{\psi}(k_n, r) \mathbf{E}_{\gamma+\eta, \gamma}(-\mathcal{D}k_n^2 t^\gamma), \quad (5.26)$$

onde

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(k_n, r) = & r^{\frac{1}{2}(2+\theta-\mathcal{N}-\frac{\mathcal{K}}{\mathcal{D}})} \left[J_{|\nu|} \left(\frac{2k_n}{2+\theta} r^{\frac{1}{2}(2+\theta)} \right) \mathcal{N}_{|\nu|} \left(\frac{2k_n}{2+\theta} a^{\frac{1}{2}(2+\theta)} \right) \right. \\ & \left. - J_{|\nu|} \left(\frac{2k_n}{2+\theta} a^{\frac{1}{2}(2+\theta)} \right) \mathcal{N}_{|\nu|} \left(\frac{2k_n}{2+\theta} r^{\frac{1}{2}(2+\theta)} \right) \right], \end{aligned} \quad (5.27)$$

com $\nu = (\mathcal{N} + \mathcal{K}/\mathcal{D})/(2 + \theta) - 1$. Os k_n são obtidos da Eq. (5.17) substituindo o índice α das funções de Bessel pelo índice ν com o fator de normalização

$$\tilde{N}_n = \frac{\pi^2 k_n^2}{J_{|\nu|}^2 \left(\frac{2k_n}{2+\theta} a^{\frac{1}{2}(2+\theta)} \right) / J_{|\nu|}^2 \left(\frac{2k_n}{2+\theta} b^{\frac{1}{2}(2+\theta)} \right) - 1}. \quad (5.28)$$

Esse resultado estende os resultados apresentados em [22,70,76] para o caso \mathcal{N} -dimensional, e recupera o resultado obtido em [77] para $\eta = 0$. Aplicando o limite $b \rightarrow \infty$ na Eq. (5.25) e também considerando a condição de contorno $\rho(\infty, t) = 0$, obtemos um resultado interessante dado por

$$\begin{aligned} \rho(r, t) &= -\frac{1}{\Gamma(1-\gamma)} \int_0^t d\tilde{t} \frac{1}{(t-\tilde{t})^\gamma} \int_0^\infty d\tilde{r} \tilde{r}^{\mathcal{N}-1} \tilde{\rho}(\tilde{r}) \mathcal{G}(r, \tilde{r}; s) \\ &- \int_0^t dt' \int_a^\infty dr' r'^{\mathcal{N}-1} \tilde{\mathcal{G}}(r, r'; t-t') \alpha(r', t') \\ &- \alpha^{\mathcal{N}-\theta-1} \int_0^t d\bar{t} \int_0^{\bar{t}} dt' \mathcal{D}(t-\bar{t}) \phi_a(\bar{t}-t') \left. \frac{\partial}{\partial r'} \tilde{\mathcal{G}}(r, r'; t') \right|_{r'=a}, \end{aligned} \quad (5.29)$$

com a função de Green

$$\mathcal{G}(r, \tilde{r}; t) = -\frac{2t^{\gamma-1}}{2+\theta} \int_0^\infty dk \frac{k \psi_n(\tilde{r}, k_n) \psi_n(r, k_n) E_{\gamma+\eta, \gamma}(-k_n^2 t^{\gamma+\eta})}{J_{|\nu|}^2 \left(\frac{2k}{2+\theta} a^{\frac{1}{2}(2+\theta)} \right) + \mathcal{N}_{|\nu|}^2 \left(\frac{2k}{2+\theta} a^{\frac{1}{2}(2+\theta)} \right)}. \quad (5.30)$$

Note que esta solução é restrita ao intervalo $a \leq r < \infty$ e pode ser estendida para o intervalo $0 \leq r < \infty$. Nesta direção, precisamos tomar o limite de $a \rightarrow 0$ e a restrição $2+\theta-\mathcal{N}-\mathcal{K}/\mathcal{D} > 0$ na Eq. (5.30), para preservar a condição de contorno $\mathcal{G}(0, \tilde{r}, t) = 0$ e $\mathcal{G}(\infty, \tilde{r}, t) = 0$ para a função de Green. Essas condições nos conduz à função de Green

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(r, \tilde{r}; t) &= -\frac{2t^{\gamma-1}}{2+\theta} (r\tilde{r})^{\frac{1}{2}(2+\theta-\mathcal{N}-\frac{\mathcal{K}}{\mathcal{D}})} \int_0^\infty dk k J_{|\nu|} \left(\frac{2k}{2+\theta} r^{\frac{1}{2}(2+\theta)} \right) \\ &\times J_{|\nu|} \left(\frac{2k}{2+\theta} \tilde{r}^{\frac{1}{2}(2+\theta)} \right) E_{\gamma+\eta, \gamma}(-k_n^2 t^\gamma). \end{aligned} \quad (5.31)$$

Para o caso $\nu = 1/2$ e $\eta = 0$, a equação acima pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(r, \tilde{r}; t) &= -\frac{1}{2t} \sqrt{\frac{t^\gamma}{\mathcal{D}}} (r\tilde{r})^{\frac{1}{2}(\frac{1}{2}(2+\theta)-\mathcal{N}-\frac{\mathcal{K}}{\mathcal{D}})} \\ &\times \left\{ \mathbf{H}_{1,1}^{1,0} \left[\frac{2}{(2+\theta)\sqrt{\mathcal{D}t^\gamma}} \left| r^{\frac{1}{2}(2+\theta)} - \tilde{r}^{\frac{1}{2}(2+\theta)} \right| \right]_{(0,1)}^{\left(\frac{\gamma}{2}, \frac{\gamma}{2}\right)} \right. \\ &- \left. \mathbf{H}_{1,1}^{1,0} \left[\frac{2}{(2+\theta)\sqrt{\mathcal{D}t^\gamma}} \left| r^{\frac{1}{2}(2+\theta)} + \tilde{r}^{\frac{1}{2}(2+\theta)} \right| \right]_{(0,1)}^{\left(\frac{\gamma}{2}, \frac{\gamma}{2}\right)} \right\}, \end{aligned} \quad (5.32)$$

que em uma forma mais simplificada, fazendo $\gamma = 1$ e $\eta = 0$, temos

$$\mathcal{G}(r, \tilde{r}; t) = \frac{1}{(2 + \theta)\mathcal{D}t} (r\tilde{r})^{\frac{1}{2}(2+\theta-\mathcal{N}-\frac{\mathcal{K}}{\mathcal{D}})} e^{-\frac{1}{(2+\theta)^2\mathcal{D}t}(r^{2+\theta}+\tilde{r}^{2+\theta})} I_{|\nu|} \left(\frac{(r\tilde{r})^{2+\theta}}{(2 + \theta)^2\mathcal{D}t} \right), \quad (5.33)$$

sendo I_ν a função de Bessel modificada (veja Fig. (5.7)).

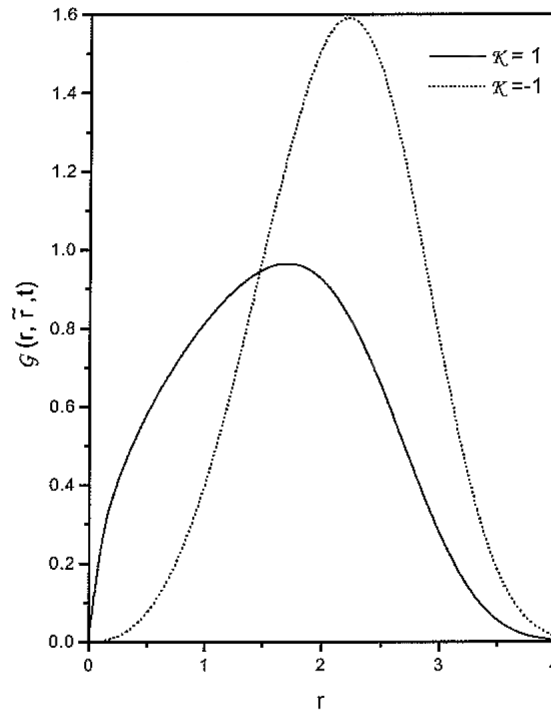


Figura 5.7: Comportamento de $\mathcal{G}(r, \tilde{r}, t)$ versus r o qual ilustra a Eq. (5.33) para valores típicos de \mathcal{K} considerando, por simplicidade, $\mathcal{D} = 1$, $\mathcal{N} = 2$, $t = 1$, $\tilde{r} = 1$ e $\theta = 1$.

A força externa calculada acima pode ser estendida incorporando um termo linear, isto é, $-kr$, o qual resulta em $\overline{F}(r, t) = -(kr - \mathcal{K}/r^\varepsilon)F'(t)\hat{r}$ onde $F'(t) = t^{\eta-1}/\Gamma(\eta - 1)$ com $\varepsilon = 1 + \theta$. A solução para este caso é formalmente dada por (5.25) com a função de Green

$$\mathcal{G}(r, \bar{r}, t) = -r^{\frac{\mathcal{K}}{\mathcal{D}}} e^{-\frac{kr^{2+\theta}}{(2+\theta)\mathcal{D}}} t^{\gamma-1} \sum_{n=1}^{\infty} \overline{N}_n \overline{\psi}_n(r, \lambda_n) \overline{\psi}_n(\bar{r}, \lambda_n) E_{\gamma+\eta, \gamma}(-\mathcal{D}\lambda_n^2 t^{\gamma+\eta}), \quad (5.34)$$

onde

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_n(r, \lambda_n) &= \Phi\left(\bar{\lambda}_n, \beta; \frac{kr^{2+\theta}}{(2+\theta)\mathcal{D}}\right) \Psi\left(\bar{\lambda}_n, \beta; \frac{ka^{2+\theta}}{(2+\theta)\mathcal{D}}\right) \\ &- \Phi\left(\bar{\lambda}_n, \beta; \frac{ka^{2+\theta}}{(2+\theta)\mathcal{D}}\right) \Psi\left(\bar{\lambda}_n, \beta; \frac{kr^{2+\theta}}{(2+\theta)\mathcal{D}}\right), \end{aligned} \quad (5.35)$$

com $\bar{\lambda}_n = \lambda_n/(2+\theta)k$, $\beta = (\mathcal{K} + \mathcal{N}\mathcal{D})/((2+\theta)D)$, sendo $\Phi(\alpha, \beta; x)$ a função hipergeométrica confluyente. Os autovalores λ_n são determinados pela equação

$$\begin{aligned} &\Phi\left(\bar{\lambda}_n, \beta; \frac{kb^{2+\theta}}{(2+\theta)\mathcal{D}}\right) \Psi\left(\bar{\lambda}_n, \beta; \frac{ka^{2+\theta}}{(2+\theta)\mathcal{D}}\right) \\ &- \Phi\left(\bar{\lambda}_n, \beta; \frac{ka^{2+\theta}}{(2+\theta)\mathcal{D}}\right) \Psi\left(\bar{\lambda}_n, \beta; \frac{kb^{2+\theta}}{(2+\theta)\mathcal{D}}\right) = 0 \end{aligned} \quad (5.36)$$

e a condição de normalização é dada por

$$\bar{N}_n = \frac{1}{\int_a^b dr r^{\mathcal{N}-1-\frac{\mathcal{K}}{\mathcal{D}}} e^{-\frac{kr^{2+\theta}}{(2+\theta)\mathcal{D}}} \bar{\psi}_n(r, \lambda_n)}. \quad (5.37)$$

Note que Eq. (5.34) pode ser estendida no intervalo $0 \leq r < \infty$ tomando o limite de $a \rightarrow 0$, $b \rightarrow \infty$ com a condição de contorno $\lim_{b \rightarrow \infty} \rho(b, t) = 0$. Nessa direção, após alguns cálculos, é possível mostrar que a solução pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \rho(r, t) &= -\frac{1}{\Gamma(1-\gamma)} \int_0^t dt \frac{1}{(t-\tilde{t})^\gamma} \int_0^\infty d\tilde{r} \tilde{r}^{\mathcal{N}-1} \bar{\rho}(\tilde{r}) \mathcal{G}(r, \tilde{r}; s) \\ &- \alpha^{\mathcal{N}-\theta-1} \int_0^t d\bar{t} \int_0^{\bar{t}} dt' \mathcal{D}(t-\bar{t}) \phi_a(\bar{t}-t') \frac{\partial}{\partial r'} \mathcal{G}(r, r'; t') \Big|_{r'=a}, \end{aligned} \quad (5.38)$$

onde a função de Green passa a ser representada pela equação

$$\mathcal{G}(r, r'; t) = -r^{\frac{\mathcal{K}}{\mathcal{D}}} t^{\gamma-1} e^{-\frac{kr^{2+\theta}}{(2+\theta)\mathcal{D}}} \sum_{n=1}^{\infty} \hat{N}_n \hat{\psi}_n(r, \lambda_n) \hat{\psi}_n(r', \lambda_n) E_{\gamma+\eta, \gamma}(-\mathcal{D}\lambda_n^2 t^{\gamma+\eta}), \quad (5.39)$$

com a autofunção

$$\hat{\psi}_n(r, \lambda_n) = L_n^\xi \left(\frac{kr^{2+\theta}}{(2+\theta)\mathcal{D}} \right) \quad (5.40)$$

e

$$\hat{N}_n = \left(\frac{k}{(2+\theta)\mathcal{D}} \right)^{\frac{\mathcal{K}+\mathcal{N}\mathcal{D}}{(2+\theta)\mathcal{D}}} \frac{(2+\theta)\Gamma(n+1)}{\Gamma\left(\frac{\mathcal{K}+\mathcal{N}\mathcal{D}}{(2+\theta)\mathcal{D}} + n\right)}, \quad (5.41)$$

onde $\xi = (\mathcal{K} + \mathcal{N}\mathcal{D})/[(2 + \theta)\mathcal{D}] - 1$, com L_n^ξ , sendo os polinômios associados de Laguerre, e $\lambda_n = (2 + \theta)nk$. É interessante notar que a solução para os casos analisados acima podem apresentar uma solução estacionária dependendo da escolha da função dependente do tempo $\phi_a(t)$ e $\phi_b(t)$. Esta característica indica que a derivada fracionária no tempo e a forma da dependência temporal do coeficiente de difusão podem descrever sistemas com relaxação anômala os quais têm como solução estacionária o caso usual.

Discussões e Conclusões

Nessa tese, abordamos extensões da equação de difusão que empregam derivadas fracionárias tanto na variável espacial como na variável temporal. Também consideramos a equação de difusão na presença de um termo não-local, que pode ser relacionado a vários contextos, em particular, com derivadas de ordem fracionária. Outro fato que devemos ressaltar diz respeito às condições de contorno que usamos na análise das equações, consideramos condições de contorno que se estendem por todo espaço como no caso das situações trabalhadas nos Cap. (1), Cap. (3) e Cap. (4) e condições de contorno que limitam a região do espaço onde o sistema pode se difundir, como no caso do Cap. (5). Nesse último caso, consideramos condições de contorno que são dependentes do tempo e da posição, isto é, um sistema confinado por superfícies não homogêneas, o que nos permite investigar como a superfície pode influenciar na difusão dos componentes do sistema.

Os resultados encontrados ao resolvermos as equações de difusão diferiram dos resultados encontrados com a equação de difusão usual e nos conduzem a uma situação em que as soluções sofrem uma dispersão anômala, fato verificado através da variância $\sigma^2 \sim t^\gamma$ ou propriamente pela distribuição que muitas vezes fica dada em termos das funções H de Fox ou contém a função de Mittag-Leffler. No caso em que a variância não é finita, temos um comportamento do tipo lei de potência para a solução que pode ser identificada com as distribuições de Lévy. Este comportamento das equações de difusão fracionárias podem ser explicado dentro do contexto de caminhantes aleatórios com espaço e tempo contínuos, que têm como consequência a mudança das distribuições de tempo entre saltos e mudanças no comprimento dos saltos, sendo possível relacionar uma equação similar de difusão ao formalismo do CTRW, como foi demonstrado no Cap. (1). Ainda no Cap. (1) foi verificado que quando consideramos um ruído aditivo na equação de Langevin, esta pode apresentar diferentes regimes difusivos dependendo da escolha da função de correlação a qual é considerada a variável estocástica.

No Cap. (2), apresentamos um histórico do cálculo fracionário e em seguida os fundamentos teóricos e matemáticos do formalismo que foram essenciais para essa tese, que descrevem o transporte anômalo através de diferenciais fracionárias e integrais fracionárias.

No Cap. (3), mostramos as consequências do emprego de derivadas fracionárias na equação de difusão, considerando também dependência espacial e temporal para o coeficiente de difusão, além da presença de uma força externa. Vimos que, quando a derivada fracionária é aplicada na variável temporal, temos alteração na distribuição de tempo de espera $\omega(t)$ relacionado ao formalismo de CTRW, que pôde ser analisado através do cálculo do segundo momento da equação de difusão fracionária no tempo. Quando a derivada fracionária é aplicada à variável espacial, a alteração ocorre na distribuição do comprimento dos saltos e a derivada fracionária no espaço nos conduz às distribuições de Lévy, que apresentam comportamento superdifusivo com o segundo momento divergente.

No Cap. (4), especificamente na sua primeira parte, foi desenvolvida a equação de difusão considerando algumas formas da função $\mathcal{K}(x, t)$, presentes no termo não-local da mesma. A diferença crucial entre os resultados desse trabalho e os até então obtidos está na presença de regimes diferenciados de dispersão da solução. Esta característica é evidente, por exemplo, para o primeiro caso investigado. Nesse cenário, para tempos pequenos, têm-se a condição usual de dispersão da solução, enquanto para tempos longos, a dispersão é caracterizada por uma função de Fox, cujo comportamento assintótico, é uma lei de potência, de forma semelhante ao observado nas distribuições de Lévy. Para o segundo caso, dependendo da escolha de $\bar{\mathcal{K}}(x)$, a solução pode manifestar diferentes comportamentos no limite assintótico, como por exemplo, para tempos longos o segundo momento pode divergir. No último caso, foi incorporada uma dependência temporal que pode estar relacionada à derivada fracionária no tempo, conforme a escolha de γ . A dependência do termo não-local na variável do tempo introduz diferentes regimes de solução que não estão presentes no primeiro e no segundo casos e, conseqüentemente, nas situações analisadas por [21, 78].

A segunda parte do Cap. (4) levou em conta a presença de um termo não-local em simetria esférica. Primeiro consideramos o termo não-local com $\mathcal{K}(\mathbf{r}, t) = \bar{\mathcal{K}}(\mathbf{r})\delta(t)$, onde $\bar{\mathcal{K}}(\mathbf{r})$ é um *kernel* arbitrário com transformada de Fourier bem definida e, em seguida, consideramos um *kernel* arbitrário $\mathcal{K}(\mathbf{r}, t)$ com transformada de Laplace e Fourier bem definidas. Para o primeiro caso, obtivemos uma solução analítica para uma situação ilustrativa onde $\bar{\mathcal{K}}(\mathbf{r}) \propto 1/|\mathbf{r}|^{3+\mu}$ ($\bar{\mathcal{K}}(\mathbf{k}) = \bar{\mathcal{K}}|\mathbf{k}|^\mu$) com $0 < \gamma < 1$ que exibiu uma dispersão anômala. Nessa direção, uma das características marcantes em nossos resultados é a pre-

sença de diferentes regimes difusivos da solução o qual $\bar{\mathcal{K}}(\mathbf{r})$, para tempos curtos, teve uma dispersão do tipo exponencial alongada, enquanto para tempos longos, a dispersão foi caracterizada por uma função de Fox H, cujo comportamento assintótico é uma lei de potência do tipo distribuição de Lévy. Subsequentemente, encontramos uma solução geral para o caso representado por um *kernel* com dependência temporal e espacial. Para ilustrar a solução geral, consideramos um *kernel* com dependência temporal $\mathcal{K}(\mathbf{r}, t) \propto t^{\eta-1} \delta(\mathbf{r})$, o qual introduziu diferentes regimes para a solução que não estão presentes no primeiro cenário caracterizado por um *kernel* com dependência espacial. Um outro aspecto relevante a respeito da Eq. (4.1) é a relação com a equação de difusão fracionária de ordem distribuída e a distribuição de Lévy truncada [79].

No Cap. (5), o caso em que as condições de contorno restringem o sistema à uma região confinada, foi possível analisar como a difusão pode ser afetada pelos contornos. Particularmente, uma das consequências diretas que obtivemos na solução foi a presença de termos adicionais, tais termos são essencialmente devidos à superfície que contorna o sistema, que não estavam presentes quando consideramos situações que cobrem todo o espaço. A primeira situação analisada foi o caso unidimensional, caracterizado por uma condição de contorno dependente do tempo, que mostrou a influência da condição de contorno dependente do tempo na difusão de um sistema para uma condição inicial arbitrária. Esse fato é muito interessante e muda outras quantidades relacionadas a esses processos, tal como a primeira passagem do tempo o qual pode ter um comportamento anômalo. Em seguida, foi analisado o caso bidimensional com simetria cilíndrica e com condições de contorno dependente do tempo e não homogênea, que similar ao caso unidimensional, os processos difusivos e as quantidades relacionadas foram modificadas. Um outro ponto, interessante com relação aos resultados obtidos, foi a relação com outros cenários físicos, tais como problemas de ancoramento em cristais líquidos em uma região cilíndrica e fenômenos de adsorção. Por último, foi analisado o caso \mathcal{N} -dimensional com simetria radial, primeiramente na ausência de força externa, com dependência espacial e temporal no coeficiente de difusão e com o termo de reação sujeito a uma condição de contorno dependente do tempo. A solução obtida para esse caso mostrou um comportamento anômalo, o qual pôde ser verificado analisando a distribuição ou o deslocamento quadrático médio. A probabilidade de sobrevivência também manifestou um comportamento não usual, em particular, para a condição de contorno dada por $\rho(a, t) = \rho(b, t) = 0$, o comportamento assintótico de $\mathcal{S}(t)$ apresentou uma forte dependência com γ . Em seguida, foi incorporado a força externa que desempenha um papel importante no processo difusivo afetando a dispersão da distribuição e, conseqüentemente, do sistema.

Nossas perspectivas futuras são de investigar generalizações da equação de Schrodinger baseadas em derivadas fracionárias, na presença de termos não-locais e/ou com a massa dependente da posição. Investigar o efeito memória no comportamento assintótico presente na equação de Langevin generalizada quando consideramos novas situações caracterizadas por ruídos aditivos. Investigar conexões dos processos difusivos com a termodinâmica e a mecânica estatística, por outro lado, a estatística quântica que emerge desse formalismo também deve ser investigada e aplicada a sistemas físicos de interesse, como, sistemas vítreos, entre outros. Por fim, acredita-se que esse trabalho venha a ser útil, em geral, na discussão de sistemas que tenham processos anômalos de difusão e transporte.

Funções especiais

A.1 Operador fracionário de Riemann-Liouville

A integral fracionária de Riemann-Liouville é dada por [80]

$${}_0\mathcal{D}_t^{-\alpha}y(x, t) = \frac{\partial^{-\alpha}}{\partial t^{-\alpha}}y(x, t) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^t \frac{y(x, s)}{(t-s)^{1-\alpha}} ds, \quad (\text{A.1})$$

com $\alpha > 0$, e a derivada fracionária de Riemann-Liouville

$$\frac{\partial^{1-\alpha}}{\partial t^{1-\alpha}}y(x, t) = \frac{\partial}{\partial t} \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^t \frac{y(x, s)}{(t-s)^{1-\alpha}} ds. \quad (\text{A.2})$$

Quando temos $0 < \alpha < 1$, a relação da derivada se torna

$${}_0\mathcal{D}_t^{1-\alpha}[y(x, t)] = \frac{\partial^{1-\alpha}}{\partial t^{1-\alpha}}y(x, t) + \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{\partial^{-\alpha}}{\partial t^{-\alpha}}y(x, t)|_{t=0} \right\} \quad (\text{A.3})$$

e

$${}_0\mathcal{D}_t^{-\alpha} = \frac{\partial^{-\alpha}}{\partial t^{-\alpha}}y(x, t). \quad (\text{A.4})$$

A.2 Operador fracionário de Riesz/Weyl

O operador fracionário de Weyl é uma representação do operador fracionário de Riemann-Liouville onde o índice $t_0 = -\infty$ ao invés de $t_0 = 0$. Dessa forma, a transfor-

mada de Fourier fica dada por

$$\mathcal{F}\{-\infty \mathcal{D}_x^\mu y(x, t)\} \equiv -|k|^\mu y(k, t), \quad (\text{A.5})$$

a qual tem aplicações em cálculo fracionário. Em uma dimensão, o operador de Weyl é equivalente ao operador de Riesz, o qual preserva a propriedade em dimensões mais altas. Matematicamente, a expressão do operador de Riemann-Liouville é uma convolução de Laplace, enquanto que o operador de Riesz/Weyl representa uma convolução de Fourier [21].

A.3 Funções gama, beta e gama incompleta

A.3.1 Função gama

A função gama é uma extensão da função fatorial e pode ser definida através da integral imprópria

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty e^{-t} t^{z-1} dt, \quad (\text{A.6})$$

que converge uniformemente para $\text{Re}(z) > 0$. Da equação acima se verifica imediatamente que $\Gamma(1) = 1$ e prova-se por integração por partes e indução finita que

$$\Gamma(n+1) = n! \quad (\text{A.7})$$

para todo $n \in \mathbb{N}$, $n \geq 1$. Graficamente a função gama para o intervalo $-3 < z < 3$ é representada na Fig. (A.1).

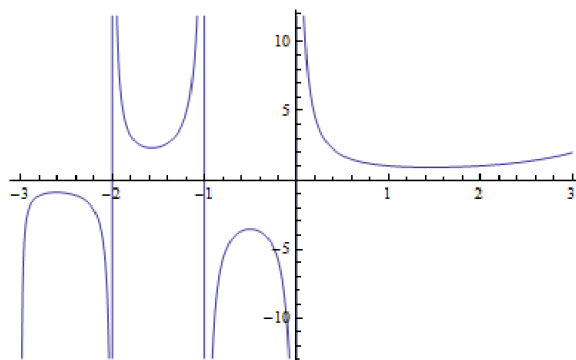


Figura A.1: Função Gama

Introduzindo a mudança de variável $t = ax$ com $a > 0$ e trocando z por $z + 1$, na

Eq. (A.6), obtemos

$$\int_0^{\infty} e^{-ax} dx = \frac{\Gamma(z+1)}{a^{z+1}} \quad (\text{A.8})$$

onde, substituindo z por $x+y$ na integral (A.6), temos

$$\Gamma(x+y) = \int_0^{\infty} e^{-t} t^{x+y-1} dt, \quad x > 0, \quad y > 0. \quad (\text{A.9})$$

Fazendo uma nova mudança de variável $s = t/(1+p)$ com $p > -1$, depois multiplicando ambos os lados por $p^{x-1}/(1+p)^{x+y}$ e integrando em relação a p , obtemos

$$\Gamma(x+y) = \int_0^{\infty} p^{x-1} (1-p)^{-x-y} dp = \int_0^{\infty} e^{-s} s^{x+y-1} \left(\int_0^{\infty} e^{-ps} p^{x-1} dp \right) ds. \quad (\text{A.10})$$

A integral entre parênteses é dada pela Eq. (A.8), onde

$$\int_0^{\infty} e^{-ps} p^{x-1} dp = s^{-x} \Gamma(x) \quad (\text{A.11})$$

de onde segue

$$\Gamma(x+y) = \int_0^{\infty} p^{x-1} (1-p)^{-x-y} dp = \Gamma(x)\Gamma(y). \quad (\text{A.12})$$

A.3.2 Função beta

A função Beta $B(x, y)$, também chamada de integral de Euler de primeiro tipo é definida pela integral

$$B(x, y) = \int_0^1 t^{x-1} (1-t)^{y-1} dt, \quad \operatorname{Re}(x) > 0, \quad \operatorname{Re}(y) > 0 \quad (\text{A.13})$$

que graficamente, pode ser representada no intervalo $0 \leq x \leq 2$ e $0 \leq y \leq 2$ (veja A.2).

Introduzindo a mudança de variável $t = p/(1+p)$ na Eq. (A.12), obtemos

$$\Gamma(x+y) = \int_0^1 t^{x-1} (1-t)^{y-1} dt = \Gamma(x)\Gamma(y), \quad (\text{A.14})$$

onde a representação integral fica equivalente a função Beta precedente, e as funções Beta e Gama ficam ligadas pela fórmula

$$B(x, y) = \frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{\Gamma(x+y)}. \quad (\text{A.15})$$

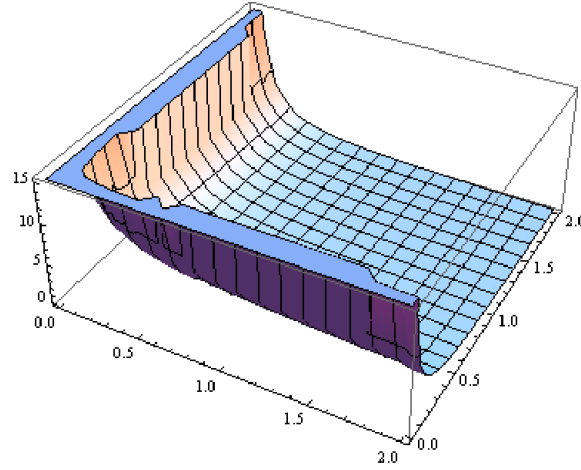


Figura A.2: Função Beta

Agora, introduzindo a mudança de variável da forma $t = \cos^2 \theta$ na Eq. (A.14), temos

$$2\Gamma(x+y) \int_0^{\pi/2} (\cos^{2x-1} \theta)(\sin^{2y-1} \theta) d\theta = \Gamma(x)\Gamma(y). \quad (\text{A.16})$$

Redefinindo os parâmetros na Eq. (A.16) para $\mu = x - 1/2$ e $\nu = y - 1/2$, podemos reescrever essa equação na forma

$$\Gamma\left(\mu + \frac{1}{2}\right) \Gamma\left(\nu + \frac{\pi}{2}\right) = 2\Gamma(\nu + \mu + 1) \int_0^{\pi/2} (\cos^{2\mu} \theta)(\sin^{2\nu} \theta) d\theta. \quad (\text{A.17})$$

A.3.3 Função gama incompleta

Muitas das funções especiais que, frequentemente, aparecem no estudo do cálculo fracionário estão intimamente relacionadas com a função gama incompleta. Aqui, vamos nos restringir apenas às respectivas definições e propriedades simples, visto que o objetivo principal é fazer sua conexão com as funções de Mittag-Leffler.

A função gama incompleta, $\gamma^*(\alpha, x)$, é uma função inteira na variável x contendo um parâmetro e pode ser definida pela seguinte integral

$$\gamma^*(\alpha, x) = \int_0^x e^{-t} t^{\alpha-1} dt \quad (\text{A.18})$$

com $\text{Re} > 0$, ou ainda, em termos da função hipergeométrica confluyente [81], ${}_1F_1(a, c, x)$, dada por

$$\gamma^*(\alpha, x) = \frac{x^\alpha}{\alpha} {}_1F_1(\alpha, \alpha + 1, -x) \quad (\text{A.19})$$

onde a representação em série da função hipergeométrica confluyente é

$${}_1F_1(a, c, x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(a)_k}{(c)_k} \frac{x^k}{k!} \quad (\text{A.20})$$

com $(a)_k$ sendo o símbolo de Pochhammer [44]. A explicação da notação ${}_1F_1$ é a seguinte: o 1 à esquerda de F indica a presença de um símbolo de Pochhammer no numerador e o 1 à direita indica a presença de um símbolo de Pochhammer no denominador.

Utilizando a definição da função gama incompleta e tomando $\alpha = 1$ na expressão da função de Mittag-Leffler, é possível relacionar a função de Mittag-Leffler com a gama incompleta da seguinte forma [81]

$$E_{1, \mu+1}(x) = e^x \gamma^*(\mu, x), \quad (\text{A.21})$$

que em termos da função hipergeométrica confluyente fica

$$\begin{aligned} E_{1, \mu} &= \frac{e^x}{\Gamma(\mu)} {}_1F_1(\mu - 1, \mu, -x) \\ &= \frac{1}{\Gamma(\mu)} {}_1F_1(1, \mu, x). \end{aligned}$$

A.4 Funções de Fox e de Mittag-Leffler

A.4.1 Funções de Fox

A classe das funções de Fox ou Função H compreende uma larga classe de funções especiais conhecidas em física matemática, tais como funções de Bessel, funções hipergeométricas, funções Meijer, etc. Recentemente, as funções de Fox vêm sendo ligadas à transformada de Mellin, que tem sido reconhecida em trabalhos de teoria de probabilidades e em cálculos fracionários, assim como em suas aplicações [3, 82–84]. De acordo com a notação padrão, a função de Fox é definida como

$$\mathbf{H}_{p,q}^{m,n}(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\mathcal{L}} \mathcal{H}_{p,q}^{m,n}(s) z^s ds, \quad (\text{A.22})$$

onde $\mathcal{H}_{p,q}^{m,n}$ é chamado de *kernel* e \mathcal{L} é um caminho adequado no plano complexo \mathfrak{C} . Este *kernel* pode ser representado através das funções Γ da seguinte forma:

$$\mathcal{H}_{p,q}^{m,n}(s) = \frac{A(s)B(s)}{C(s)D(s)}, \quad (\text{A.23})$$

com

$$A(s) = \prod_{j=1}^m \Gamma(b_j - \beta_j s), \quad B(s) = \prod_{j=1}^n \Gamma(1 - a_j + \alpha_j s), \quad (\text{A.24})$$

$$C(s) = \prod_{j=m+1}^q \Gamma(1 - b_j + \beta_j s), \quad D(s) = \prod_{j=n+1}^p \Gamma(a_j - \alpha_j s) \quad (\text{A.25})$$

sendo $0 \leq n \leq p$, $1 \leq m \leq q$, $\{a_j, b_j\} \in \mathfrak{C}$, $\{\alpha_j, \beta_j\} \in \mathfrak{R}^+$. A representação integral das funções de Fox envolvendo produtos e relações da função Γ , é conhecida como sendo do tipo integral de Mellin-Barnes. Uma notação compacta pode ser usada para representá-la como

$$\mathbf{H}_{p,q}^{m,n}(z) = \mathbf{H}_{p,q}^{m,n} \left[z \left| \begin{array}{l} (a_j, \alpha_j)_{j=1,\dots,p} \\ (b_j, \beta_j)_{j=1,\dots,q} \end{array} \right. \right]. \quad (\text{A.26})$$

A condição para a existência da função \mathbf{H} pode ser feita examinando a convergência da integral (A.22), a qual depende da seleção do contorno \mathcal{L} e uma exata relação entre os parâmetros $\{a_i, \alpha_i\} (i = 1 \dots, p)$ e $\{b_j, \beta_j\} (j = 1 \dots, q)$ [85]. Algumas das suas propriedades [21] foram empregadas em capítulos anteriores, como a derivada da função de Fox

$$\frac{d}{dx} \left\{ x^\alpha \mathbf{H}_{p,q}^{m,n} \left[(ax)^\beta \left| \begin{array}{l} (a_P, A_P) \\ (b_q, B_q) \end{array} \right. \right] \right\} = x^{\alpha-1} \mathbf{H}_{m,n+1}^{p+1,q+1} \left[(ax)^\beta \left| \begin{array}{l} (-\alpha, \beta), (a_P, A_P) \\ (b_q, B_q), (\nu - \alpha, \beta) \end{array} \right. \right]. \quad (\text{A.27})$$

A.4.2 Funções de Mittag-Leffler

As funções especiais mais importantes usadas no cálculo fracionário são as de Mittag-Leffler, que fornecem uma possível generalização da função exponencial e da função erro. Esta função depende apenas de um parâmetro, em geral, um parâmetro real ou complexo. Há mais ou menos cinquenta anos, Agarwal [86] generalizou a função de Mittag-Leffler a partir da introdução de um outro parâmetro; esta generalização conhecida como função de Mittag-Leffler com dois parâmetros, tem uma vasta aplicabilidade no estudo de equações diferenciais fracionárias.

Vamos considerar a função de Mittag-Leffler com dois parâmetros, $\alpha > 0$ e $\beta > 0$, definida pelo seguinte desenvolvimento em série:

$$E_{\alpha,\beta}(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\Gamma(\alpha k + \beta)}. \quad (\text{A.28})$$

Esta por sua vez, é reduzida à clássica função de Mittag-Leffler, no caso em que o parâmetro $\beta = 1$. As funções de Mittag-Leffler se relaciona com a função Erro através do seguinte teorema:

Teorema: Para todo $z \in \mathfrak{C}$, temos

$$E_{\frac{1}{2},1}(iz) = e^{-z^2} [1 + \operatorname{erf}(iz)] = e^{-z^2} [\operatorname{erfc}(-iz)]. \quad (\text{A.29})$$

Em problemas envolvendo difusão anômala, as funções de Mittag-Leffler são usadas geralmente nas inversas de Laplace. Uma inversa conhecida na literatura [24] é dada por

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{j! u^{\alpha-\beta}}{(u^\alpha + a)^{j+1}} \right\} = t^{\alpha j + \beta - 1} E_{\alpha,\beta}^{(j)}(-at^\alpha) \quad (\text{A.30})$$

onde a derivada da função de Mittag-Leffler tem a forma

$$E_{\alpha,\beta}^{(j)}(y) = \frac{d^j E_{\alpha,\beta}(y)}{dy^j} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(j+n)! y^n}{n! \Gamma[\alpha(j+n) + \beta]}. \quad (\text{A.31})$$

A função de Mittag-Leffler pode se relacionar com a função de Fox através da equação

$$E_{\alpha,\beta}^{(j)}(y) = H_{1,2}^{1,1} \left[-y \left| \begin{array}{c} (0, 1) \\ \{1 - (\alpha j + \beta), \alpha\} \end{array} \right. \right], \quad (\text{A.32})$$

sendo que para $\alpha = 1$, a função de Mittag-Leffler recai no caso particular

$$e^y = H_{0,1}^{1,0} \left[-y \left| \begin{array}{c} (-) \\ (0, 1) \end{array} \right. \right]. \quad (\text{A.33})$$

A.5 Funções de Green

Estas funções podem ser usadas na resolução de equações diferenciais que podem ou não conter termos de fonte, onde podemos facilitar a solução da equação usufruindo desta

técnica. As funções de Green aparecem em várias áreas da Física, como em Física de Partículas Elementares, e em todos os casos elas estão associadas à “influência” que um ponto do espaço exerce sobre outro, podendo essa influência ser eletromagnética, gravitacional, ou nucleares forte e fraca. Em particular, elas são extremamente importantes em teorias quânticas de campo, como Eletrodinâmica Quântica e Cromodinâmica Quântica [87].

A.5.1 Problema de Sturm-Liouville

Vamos supor que queremos resolver a equação diferencial não homogênea

$$Lu(x) \equiv \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{du(x)}{dx} \right] - q(x)u(x) = \varphi(x) \quad (\text{A.34})$$

no intervalo $a \leq x \leq b$ com uma função especificada conhecida $\varphi(x)$ e com condições de contorno em $x = a$ e $x = b$. Como $Lu = 0$ é a forma auto-adjunta da equação de um problema de Sturm-Liouville, vamos nos referir a L como o operador de Sturm-Liouville. Multiplicando o operador diferencial linear de segunda ordem uma hora por um fator v qualquer e outra hora por um fator u qualquer, temos

$$\begin{aligned} vLu(x) &= \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{du(x)}{dx} \right] - q(x)u(x) = \varphi(x) \\ uLv(x) &= \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{dv(x)}{dx} \right] - q(x)v(x) = \varphi(x). \end{aligned} \quad (\text{A.35})$$

Subtraindo uma da outra, obtemos

$$\int_a^b dx [vLu - uLv] = \left[p \left(v \frac{du}{dx} - u \frac{dv}{dx} \right) \right]_a^b, \quad (\text{A.36})$$

onde este é o conhecido *teorema de Green*.

Para resolver (A.34) para uma fonte comum $\varphi(x)$, introduzimos a chamada função de Green $G(x, x')$, na qual a solução para uma fonte pontual em x' é:

$$LG(x, x') = \delta(x - x'), \quad (\text{A.37})$$

sendo $\delta(x - x')$ a função delta de Dirac. Aplicando o teorema de Green (A.36) a $u(x)$ e $v(x) = G(x, x')$ e usando (A.34) e (A.37), juntamente com a integral da função delta,

trocando x por x' , a equação se torna

$$u(x) = \int_a^b dx' G(x, x') \varphi(x') - \left[p(x') \left(G(x, x') \frac{du(x')}{dx'} - u(x') \frac{d}{dx'} G(x, x') \right) \right]_{x'=a}^b. \quad (\text{A.38})$$

Agora de posse desta equação, podemos escolher uma condição de contorno que anule os termos desconhecidos. Supomos que $u(a)$ e $u(b)$ são dados, assim podemos escolher como condição de contorno

$$G(a, x') = G(b, x') = 0, \quad (\text{A.39})$$

esta condição elimina da Eq. (A.38) a quantidade desconhecida $du(x')/dx'$ em $x' = a, b$ e reduz a equação para

$$u(x) = \int_a^b dx' G(x', x) \varphi(x') + \left[p(x') u(x') \frac{d}{dx'} G(x', x) \right]_{x'=a}^b. \quad (\text{A.40})$$

Esta é a solução da Eq. (A.34) em termos de quantidades conhecidas.

A.5.2 Expansão das funções de Green em autofunções

Muitos problemas em física envolvem, de uma ou de outra maneira, operadores diferenciais do tipo Sturm-Liouville:

$$Lu_n = \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{du_n(x)}{dx} \right] - qu_n(x) = -\lambda_n \rho(x) u_n, \quad (\text{A.41})$$

onde $p(x)$ e $u_n(x)$ são não negativas. Podemos estudar a expansão das funções de Green em autofunções usando o operador de Sturm-Liouville acima. Em cada caso, podemos escolher as condições de contorno de forma que seja possível eliminar valores desconhecidos. Para equação acima escolhemos condições de contorno gerais

$$Au_n(a) + Bu'_n(a) = 0 \quad (\text{A.42})$$

$$Cu_n(b) + Du'_n(b) = 0. \quad (\text{A.43})$$

Suponha agora que desejamos resolver a equação diferencial não homogênea

$$Lu + \lambda \rho u = \varphi(x), \quad (\text{A.44})$$

com as condições de contorno

$$Au(a) + Bu'(a) = X \quad (\text{A.45})$$

$$Cu(b) + Du'(b) = Y. \quad (\text{A.46})$$

Aqui $\varphi(x)$ é uma função dada, assim como, X e Y são constantes dadas. Precisamos então encontrar uma função $G(x, x')$ que satisfaz a equação diferencial

$$LG(x, x') + \lambda \rho G(x, x') = \delta(x - x'). \quad (\text{A.47})$$

Desse modo, encontrando a função de Green, encontramos também a solução da equação diferencial não homogênea (A.47). As condições de contorno são

$$AG(a, x') + B \frac{d}{dx} G(x, x') \Big|_{x=a} = 0 \quad (\text{A.48})$$

$$CG(b, x') + D \frac{d}{dx} G(x, x') \Big|_{x=b} = 0. \quad (\text{A.49})$$

Em termos da função de Green $G(x, x')$, que é simétrica, a solução de (A.44) com condições de contorno dadas por (A.45) e (A.46) é

$$u(x) = \int_a^b dx' G(x, x') \varphi(x') \quad (\text{A.50})$$

$$- \left[p(x) \left(G(x, x') \frac{du(x')}{dx'} - u(x') \frac{d}{dx'} G(x, x') \right) \right]_{x'=a}^b \quad (\text{A.51})$$

onde é fácil verificar que a solução de (A.47), juntamente com (A.48) e (A.49) pode ser dada pela série

$$\mathcal{G}(x, x') = \sum_n \gamma_n(x') u_n(x). \quad (\text{A.52})$$

Dessa forma, com a Eq. (A.47) e a condição de ortogonalidade, encontramos $\mathcal{G}(x, x')$ dado

por

$$G(x, x') = \sum_n \frac{u_n(x)u_n(x')}{\lambda - \lambda_n}, \quad (\text{A.53})$$

onde $u_n(x)$ são as autofunções de (A.41).

A equação geral acima para $\mathcal{G}(x, x')$ é um belo resultado, mas, infelizmente, envolve uma série infinita. Assim, para facilitar um dado problema, escolhemos condições de contorno de tal forma que a $\mathcal{G}(x, x')$ se anule nas extremidades, podendo ser desenvolvida em uma série de funções ortogonais convenientes, como por exemplo, uma série em seno de Fourier.

Referências Bibliográficas

- [1] D. Campos, V. Mndez e J. Fort, Phys. Rev. E **69**, 031115 (2004); B. O’Shaughnessy e I. Procaccia, Phys. Rev. Lett. **54**, 455 (1985); R. Metzler, W. G. Glckle, T. F. Nonnenmacher, Physica A **211**, 13 (1994); L. Acedo e S. B. Yuste, Phys. Rev. E **57**, 5160 (1998).
- [2] D. S. F. Crothers, D. Holland Y. P. Kalmykov e W. T. Coffey, J. Mol. Liq. **114**, 27 (2004); H. Schriessel e A. Blumen, Fractals **3**, 483 (1995).
- [3] R. Hilfer, *Applications of Fractional Calculus in Physics* (World Scientific, Singapore, 2000).
- [4] R. Metzler, E. Barkai e J. Klafter, Physica A **266**, 343 (1999).
- [5] S. S. Plotkin e P. G. Wolynes, Phys. Rev. Lett. **80**, 5015 (1998).
- [6] L. F. Richardson, Proc. Roy. Soc. London, Ser. A **110**, 709 (1926).
- [7] A. N. Komolgorov, C. R. Dokl. Acad. Sci. URSS **30**, 301 (1941).
- [8] Z. S. Khan e S. W. Morris, Phys. Rev. Lett. **94**, 048002 (2005).
- [9] T. Kosztoowicz, K. Dworecki e St. Mrwczyski, Phys. Rev. Lett. **94**, 170602 (2005).
- [10] R. C. Lua e A. Y. Grosberg, Phys. Rev. E **72**, 061918 (2005).
- [11] A. Iomin, Phys. Rev. E **73**, 61918 (2006).
- [12] S. Fedotov e A. Iomin, Phys. Rev. Lett. **98**, 118101 (2007).

- [13] M. Muskat, *The Flow of Homogeneous Fluid Through Porous Media* (McGraw-Hill, New York, 1937); P. Y. Polubarinova-Kochina, *Theory of Ground Water Movement* (Princeton University Press, Princeton, 1962).
- [14] V. Plerou, et al., Phys. Rev. E **62**, R3023 (2000).
- [15] C.-K. Peng, J. Mietus, J. M. Hausdorff, S. Havlin, H. E. Stanley e A. L. Goldberger, Phys. Rev. Lett. **70**, 1343 (1993).
- [16] H. Sher e E. W. Montroll, Phys. Rev. B **12**, 2455 (1975).
- [17] E. K. Lenzi, N. G. C. Astrath, R. Rossato e L. R. Evangelista, Braz. J. Phys. **39**, no. 2A (2009).
- [18] A. Ott et al., Phys. Rev. Lett. **65**, 2201 (1990).
- [19] C. Tsallis e E. K. Lenzi, Chem. Phys. **284**, 341 (2002) [Erratum 287, 295 (2003)]; L. C. Malacarne, I. T. Pedron, R. S. Mendes e E. K. Lenzi, Phys. Rev. E **63**, 30101R (2001); L. Borland, Phys. Rev. E **57**, 6634 (1998); N. Goldenfeld, *Lectures on phase transitions e the renormalization group* (Addison-Wesley Publishing Company, Inc., Reading, 1992).
- [20] M.F. Shlesinger, G. M. Zaslavsky e U. Frisch, *Lévy flights e related topics in physics* (Springer-Verlag, Berlin, 1994).
- [21] R. Metzler e J. Klafter, Phys. Rep. **339**, 1 (2000).
- [22] L. S. Lucena, L. R. da Silva, L. R. Evangelista, M. K. Lenzi, R. Rossato e E. K. Lenzi, Chem. Phys. **344**, 90 (2008).
- [23] H. Risken, *The Fokker-Planck Equation*, (Springer, New York, 1984); C. W. Gardiner, *Handbook of Stochastic Methods: For Physics, Chemistry e the Natural Sciences* (Springer Series in Synergetics, New York, 1996).
- [24] I. Podlubny, *Fractional Differential Equations* (Academic Press, San Diego, 1999).
- [25] H. V. Ribeiro, R. Rossato, A. A. Tateishi, E. K. Lenzi e R. S. Mendes, Acta Scientiarum. Technology, (*In press*).
- [26] E. W. Montroll e J. G. Weiss, Math. Phys. **6**, 167 (1965).

- [27] E. W. Montroll e M. F. shlesinger, in *Studies in Statistical Mechanics*, edited by J. L. Lebowitz e E. W. Montroll, Vol. 11, p. 5 (North-Holland, Amsterdam, 1984).
- [28] E. K. Lenzi, R. S. Mendes e C. Tsallis, *Phys. Rev. E* **67**, 031104 (2003).
- [29] T. Tomé e M. J. Oliveira, *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade* (Edusp, São Paulo, 2001).
- [30] G. E. Uhlenbeck e L. S. Ornstein, *Phys. Rev.* **36**, 823 (1930).
- [31] S. Burov e E. Barkai, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 070601 (2008).
- [32] A. D. Vinales e M. A. Despósito, *Phys. Rev. E* **75**, 042102 (2007).
- [33] M. A. Despósito e A. D. Vinales, *Phys. Rev. E* **77**, 031123 (2008).
- [34] A. D. Vinales, K. G. Wang e M. A. Despósito, *Phys. Rev. E* **80**, 011101 (2009).
- [35] A. Fick., *Annalen der Physik*, v. **170**, 59 (1855).
- [36] E. L. Cussler. *Diffusion - Mass Transfer in Fluid Systems* (Cambridge University Press, New York, 1984).
- [37] L. E. Reichl, *A Modern Course in Statistical Physics*, second edition (John Wiley & Sons Inc, New York, 1997).
- [38] N. Wax, *Selected Papers on Noise and Stochastic Processes* (Dover, New York, 1954).
- [39] S. R. Groot e P. Mazur, *Non-equilibrium Thermodynamics* (North-Holland, Amsterdam, 1969).
- [40] N. G. Van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry* (North-Holland, Amsterdam, 1981).
- [41] M. F. Andrade, *Equações de Difusão Fracionárias e Não-Lineares: Soluções e Difusão Anômala* (Dissertação de Mestrado, Universidade Estadual de Maringá, 2006).
- [42] L. Debnath e D. Bhatta, *Integral Transforms and their Applications* (Taylor & Francis, London, 2007).

- [43] R. Courant e F. John, *Introduction to Calculus and Analysis* (Springer Verlag, Berlin, 2000).
- [44] R. F. Camargo, *Cálculo Fracionário e Aplicações* (Tese de Doutorado, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2005).
- [45] K.S. Miller e B. Ross, *An Introduction to the Fractional Calculus and Fractional Differential Equations* (John Wiley & Sons, New York, Wiley-Interscience, 1993).
- [46] N. Ya. Sonin, *Moscow Mat. Sb.*, **6**, 1 (1869).
- [47] R. F. Camargo, *Do Teorema de Cauchy ao Método de Cagniard* (Dissertação de Mestrado, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2005).
- [48] D. C. Rosendo, *Sobre a função de Mittag-Leffler* (Dissertação de Mestrado, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2008).
- [49] R. Gorenflo e Mainardi, *Fractional Calculus: Integral and a Differential Equations of Fractional Order* (CISM, Lectures Notes, 233-276, 2000).
- [50] E. R. Love, *J. London Math. Soc.*, **3**, 241 (1971).
- [51] E. Butkov, *Física Matemática* (Editora LTC, Rio de Janeiro, 1988).
- [52] R. Figueiredo Camargo, Ary O. Chiacchio e E. Capelas de Oliveira, *J. Math. Phys.*, **49**, 033505 (2008).
- [53] I. T. Pedron, *Estudos em difusão anômala* (Tese de Doutorado, Universidade Estadual de Maringá, 2003).
- [54] M. Caputo, *Vibrations of an Infinite Viscoelastic Layer with a Dissipative Memory*, *J. Acoust. Soc. Amer.*, **56**, 897 (1974).
- [55] L. A. D. Isfer, *Aplicações de Técnicas de Identificação e Controle Fracionário à Indústria Petroquímica* (Dissertação de Mestrado, Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto, 2006).
- [56] G. M. Teixeira, *Aplicação de Equações Diferenciais Fracionárias ao Controle de Colunas de Absorção* (Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2010).

- [57] A. M. Mathai, R. K. Saxena e H. J. Haubold, *The H-function with Application in Statistics and other Disciplines* (Wiley Eastern, New Delhi, 1978).
- [58] B. I. Henry, T. A. M. Langlands e S. L. Wearne, *Phys. Rev. E* **74**, 031116 (2006).
- [59] A. Schot, M. K. Lenzi, L. R. Evangelista, L. C. Malacarne, R. S. Mendes e E. K. Lenzi, *Phys. Lett. A* **366**, 346 (2007).
- [60] V. Latora, A. Rapisarda e S. Ruffo, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 2104 (1999); V. Latora, A. Rapisarda e C. Tsallis, *Phys. Rev. E* **64**, 056134 (2001).
- [61] A. Caspi, R. Granek, e M. Elbaum, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 5655 (2000); A. Caspi, R. Granek e M. Elbaum, *Phys. Rev. E* **66**, 011916 (2002).
- [62] E. K. Lenzi, M. K. Lenzi, R. Rossato e L. C. M. Filho, *Acta Scientiarum. Technology*, v. **31**, n. 1, p. 2838 (2009).
- [63] T. A. M. Langlands, *Physica A* **367**, 136 (2006).
- [64] M. P. Horse, H. Feshbachm, *Methods of theoretical Physics* (McGraw-Hill, New York, 1953).
- [65] E. K. Lenzi, M. K. Lenzi, R. Rossato, L. R. Evangelista e L. R. da Silva, *Phys. Lett. A* **372**, 6121-6124 (2008).
- [66] Y. E. Ryabov, *Phys. Rev. E* **68**, 030102 (2003).
- [67] E. K. Lenzi, B. F. Oliveira, L. R. da Silva e L. R. Evangelista, *J. Math. Phys.* **49**, 032108 (2008).
- [68] R. S. Zola, E. K. Lenzi, L. R. Evangelista e G. Barbero, *Phys. Rev. E* **75**, 042601 (2007); C. A. Yednak, F. C. Freire, E. K. Lenzi e L. R. Evangelista, *Phys. Rev. E* **72**, 042701 (2005).
- [69] G. Barbero e L. R. Evangelista, *Adsorption Phenomena and Anchoring Energy in Nematic Liquid Crystals* (Taylor & Francis, London, 2006).
- [70] R. Rossato, M. K. Lenzi, L. R. Evangelista e E. K. Lenzi, *Phys. Rev. E* **76**, 032102 (2007).
- [71] I. K. Kotov, M. V. Khazimullin e A. P. Krekhova, *Mol. Cryst. Liq. Cryst. Sci. Technol., Sect. A* **366**, 2737 (2001).

- [72] H. Tsuru, J. Phys. Soc. Jpn. **59**, 1600 (1990).
- [73] D. R. M. Williams e A. Halperin, Phys. Rev. E **48**, R2366 (1993).
- [74] E. K. Lenzi, R. Rossato, M. K. Lenzi, L. R. da Silva e G. Gonçalves, Z. Naturforsch. **65a**, 423 (2010).
- [75] S. Redner, *A Guide to First-Passage Processes* (Cambridge University Press, Cambridge (2001).
- [76] T. Bickel, Physica A **377**, 24 (2007).
- [77] E. K. Lenzi, R. S. Mendes, J. S. Andrade Jr., L. R. da Silva e L. S. Lucena, Phys. Rev. E **71**, 052101 (2005).
- [78] L. C. Malacarne, R. S. Mendes, E. K. Lenzi e M. K. Lenzi, Phys. Rev. E **74**, 042101 (2006).
- [79] A. V. Chechkin, R. Gorenflo e I. M. Sokolov, Phys. Rev. E **66**, 046129 (2002); I. M. Sokolov, A. V. Chechkin e J. Klafter, Acta Phys. Pol. B **35**, 1323 (2004); F. Mainardi e G. Pagnini, J. Comput. Appl. Math. **207**, 245 (2007); A. V. Chechkin, J. Klafter e I. M. Sokolov, Europhys. Lett **63**, 326 (2003).
- [80] B. I. Henry e T. A. M. Langlands, Phys. Rev. E **74**, 031116 (2006).
- [81] E. Capelas de Oliveira, *Funções Especiais com Aplicações* (Editora Livraria da Física, São Paulo, 2005).
- [82] V. V. Anh e N. N. Leonenko, J. Statistics. Phys. **104**, 1349 (2001).
- [83] A. A. Kilbas e M. Saigo, J. Appl. Math. Stochastic Anal, **12**, 191 (1999).
- [84] A. A. Kilbas e M. Saigo, *H-transform. Theory and Applications* (CRC Press, Boca Raton, FL, 2004).
- [85] F. Mainardi, G. Pagnini e R. K. Saxena, J. Comput. Appl. Math, **178**, (2005)
- [86] R. P. Argawal, C. R. Scances Acad. Sci., **236**, 2031 (1953).
- [87] K. D. Machado, *Teoria do Eletromagnetismo* (UEPG, Ponta Grossa-PR 2000).