
UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ
PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Roberto Rossato

**Soluções e Aplicações da Equação de Difusão Fracionária
a Problemas de Contorno**

Maringá
27 de Fevereiro de 2009

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ
PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Roberto Rossato

**Soluções e Aplicações da Equação de Difusão Fracionária
a Problemas de Contorno**

*Dissertação Apresentada
ao Departamento de Física
da Universidade Estadual
de Maringá.*

Orientador: Prof. Dr. Luiz Roberto Evangelista

Co-Orientador: Prof. Dr. Ervin Kaminski Lenzi

Maringá
2009

Sumário

| | |
|--|-----------|
| Resumo | 6 |
| Introdução | 7 |
| 1 Movimento Browniano | 9 |
| 1.1 Equação de Langevin | 9 |
| 1.2 Caminhante aleatório com espaço e tempo contínuo | 11 |
| 1.3 Equação de difusão usual | 12 |
| 1.4 A equação de Fokker-Planck | 13 |
| 1.5 Soluções da equação de Fokker-Planck | 16 |
| 2 Equação de difusão fracionária linear unidimensional | 22 |
| 2.1 Derivadas fracionárias aplicadas à variável temporal | 22 |
| 2.2 Equação de difusão: derivadas fracionárias no espaço | 32 |
| 3 Equação de difusão com um termo não-local | 36 |
| 3.1 Equações de difusão e soluções | 37 |
| 3.1.1 Primeiro caso: $\mathcal{K}(x, t) \propto \delta(t)/ x ^{1+\mu}$ | 38 |
| 3.1.2 Segundo caso: $\mathcal{K}(x, t) \propto \delta(t)\bar{\mathcal{K}}(x)$ | 40 |
| 3.1.3 Terceiro caso: $\mathcal{K}(x, t) \propto t^{\gamma-1}/ x ^{1+\mu}$ | 41 |
| 4 Equação de difusão fracionária em uma região confinada: efeitos de superfície e soluções exatas | 43 |
| 4.1 Equação de difusão fracionária: Caso unidimensional | 44 |
| 4.2 Equação de difusão fracionária: Caso bidimensional | 46 |

| | |
|--|-----------|
| Discussões e Conclusões | 49 |
| A Funções Especiais | 51 |
| A.1 Operador fracionário de Riemann-Liouville | 51 |
| A.2 Operador fracionário de Riesz/Weyl | 51 |
| A.3 Funções de Fox e Mittag-Leffler | 52 |
| A.3.1 Funções de Fox | 52 |
| A.3.2 Mittag-Leffler | 53 |
| A.4 Funções de Green | 54 |
| A.4.1 Problema de Sturm-Liouville | 54 |
| A.4.2 Expansão das funções de Green em autofunções | 55 |

Lista de Figuras

| | | |
|-----|--|----|
| 1.1 | <i>Comportamento de $\mathcal{G}(x, t)$ versus x, que ilustra a Eq. (1.44) considerando, por simplicidade, $t = 30$.</i> | 18 |
| 1.2 | <i>Comportamento de $\rho(x, t)$ versus t, que ilustra a Eq. (1.51) 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> | 19 |
| 2.1 | <i>Comportamento de $(4\pi\mathcal{D}t^\gamma)^{1/2}\mathcal{G}(x, t)$ versus $x/(4\mathcal{D}t^\gamma)$, ilustra a Eq. (2.14) para valores típicos de γ (subdifusivo).</i> | 26 |
| 2.2 | <i>Comportamento da Eq. (2.14) para grandes valores dos argumentos.</i> | 27 |
| 2.3 | <i>Comportamento de $(\mathcal{D}t)^{\frac{1}{\mu}}L_\mu(x, t)$ versus $x/(\mathcal{D}t)^{\frac{1}{\mu}}$, ilustra a Eq. (2.40) para valores típicos de μ.</i> | 34 |
| 3.1 | <i>Esta figura ilustra o comportamento de $\rho(x, t)$ versus x para diferentes valores de tempo considerando, por simplicidade, $\mu = 1, \mathcal{D} = 1, \mathcal{K} = 1$ e a condição inicial $\rho(x, 0) = \delta(x)$.</i> | 38 |
| 3.2 | <i>Esta figura ilustra o comportamento de $\rho(x, t)$ versus x para diferentes valores de \mathcal{D} e \mathcal{K} considerando, por simplicidade, $t = 1, \mu = 1$ e a condição inicial $\rho(x, 0) = \delta(x)$.</i> | 39 |
| 4.1 | <i>Comportamento de $\rho(x, t)$ versus x, que ilustra a Eq. (4.8) 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> | 46 |
| 4.2 | <i>Comportamento de $\mathcal{G}(x, x'; t)$ versus x, que ilustra a Eq. (4.6) considerando, por simplicidade, $a = 5, x' = 1, e t = 1$.</i> | 47 |

- 4.3 *Comportamento de $\rho(r, \theta, t)$ versus r , que ilustra a Eq. (4.9) 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 $t = 1$ 48*

Agradecimentos

Primeiramente a Deus, por estar sempre ao meu lado.

À minha tia Izabel de F. Andrian, quem me acolheu e me acompanhou durante esses anos.

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

Ao Professor Doutor Ervin Kaminski Lenzi, pela paciência, amizade, confiança e orientação.

À minha namorada Karla K. de Oliveira Oyama, por me compreender e me ajudar nas horas difíceis.

Ao CNPq, pelo apoio financeiro.

Aos professores da pós-graduação que contribuíram para o meu mestrado.

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

À Akiko, por todo esforço, paciência e auxílio.

A todos que me ajudaram.

Resumo

Dedicamos esta dissertação ao estudo das equações de difusão que generalizam a equação de difusão usual pela presença de derivadas fracionárias vinculadas à variável espacial e/ou temporal ou termos não-locais. Também consideramos o efeito dos contornos sobre o sistema difusivo por meio de condições de contorno que são não-homogêneas e dependentes do tempo. Para estas equações, sejam elas com derivadas fracionárias ou com termos não-locais, obtivemos soluções exatas utilizando o formalismo de função de Green e mostramos que elas exibem uma dispersão anômala.

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

Introdução

A compreensão da difusão e, 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 à física, à engenharia, à biologia, à 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], lei de Richardson [6], lei de Kolmogorov [7] (estas duas leis aplicam-se ao estudo de turbulência), transporte axial de materiais granulares [8], transporte de substância em um solvente de um vaso para outro através de uma membrana [9] e na translocação assimétrica do DNA [10]; no transporte através de um meio poroso [11], nas flutuações de sistemas financeiros [12], nas batidas do coração [13], em semicondutores amorfos [14], em micelas dissolvidas em água salgada [15], entre outras. Nas situações em que temos uma difusão anômala (por exemplo, nas mencionadas acima), podemos ter o segundo momento finito [16] ou não [16, 17]. A difusão anômala com o segundo momento finito, $\langle r^2 \rangle \sim t^\gamma$, geralmente tem como característica $\gamma < 1$ e $\gamma > 1$, correspondendo a sub- e superdifusão, respectivamente. Neste contexto, algumas equações representativas na descrição deste fenômeno são as equações de difusão que empregam derivadas fracionárias temporais [2, 18], a equação de meios porosos $\partial_t \rho = \mathcal{D} \partial_x^2 \rho^\nu$ (que é não-linear) [16] e a equação usual de difusão com coeficientes dependentes de variáveis de posição ou de tempo [19]. Por sua vez, a difusão anômala quando não possui o segundo momento finito é caracterizada pelas distribuições do tipo Lévy [17]. Dentro deste contexto, temos a equação de difusão com derivadas fracionárias na variável espacial [17, 18] cuja solução é dada em termos das distribuições de Lévy [17, 18], que satisfazem o teorema de Lévy-Gnedenko, i.e., uma generalização do teorema central do limite.

De um ponto de vista formal, a partir da discussão 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. Neste sentido, pretendemos nessa dissertação dedicar nossos esforços ao estudo das equações de difusão fracionárias lineares na presença de uma força externa ("drift"). Assim, focaliza-

remos nossa atenção em equações de difusão que estão contidas na equação abaixo:

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

Na equação acima, a derivada fracionária temporal é considerada na representação de Caputo [20], a derivada fracionária espacial é considerada na representação de Riesz/Weyl [20], $F(\mathbf{r}, t)$ 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. Ressalte-se que os *kernels* $\tilde{\mathcal{K}}(t)$ e $\mathcal{K}(t, \mathbf{r})$ presentes na Eq. (1) representam outra forma, além das derivadas de ordem fracionárias, de introduzir a presença de memória na equação de difusão ou Fokker-Planck.

Assim, pretendemos nesta dissertação estudar a Eq. (1) levando em conta vários cenários no intuito de compreender suas propriedades formais para futuras aplicações. Particularmente, dividimos nosso trabalho essencialmente em quatro capítulos. O primeiro deles é dedicado à compreensão dos formalismos que são usualmente empregados na descrição de um processo estocástico. Dentre esses formalismos temos, por exemplo, a equação de Langevin e o formalismo de caminhantes aleatórios com espaço e tempo contínuos (CTRW). Estes formalismos são úteis na compreensão dos processos usuais e terão um papel importante no estudo das equações de difusão fracionárias. No segundo capítulo, abordaremos as equações de difusão fracionárias lineares unidimensionais, que empregam derivadas fracionárias tanto a operadores relacionados à variável temporal como à variável espacial. Isto significa que neste capítulo vamos estudar a Eq. (1) em uma dimensão com $\tilde{\mathcal{K}}(t) = \delta(t)$ e $\mathcal{K}(t, \mathbf{r}) = 0$ na presença de forças externas, levando em conta condições de contorno do tipo $\rho(\pm\infty, t) = 0$. No terceiro capítulo, consideraremos a presença do termo não local, i.e., $\mathcal{K}(t, \mathbf{r}) \neq 0$ e estudaremos seus efeitos sobre a solução da equação de difusão usual na ausência de forças externas. Para este caso também consideraremos condições de contorno do tipo $\rho(\pm\infty, t) = 0$. No quarto e último capítulo, investigaremos como as soluções da equação de difusão são influenciadas pelos seus contornos. Para tal consideraremos a Eq. (1) na ausência de termos não locais, $\tilde{\mathcal{K}}(t) = \mathcal{D}\delta(t) + \mathcal{K}(t)$ e forças externas com $\mu = 2$ em uma região confinada. Nossa análise será feita considerando o caso em uma dimensão e depois o caso bidimensional com simetria cilíndrica. As condições de contorno consideradas para este caso são dependentes do tempo e de variáveis de posição. Por fim, apresentamos nossas conclusões a respeito dos resultados que obtivemos ao analisar as situações que são compreendidas pela Eq. (1) e apontamos algumas perspectivas futuras.

Capítulo 1

Movimento Browniano

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

1.1 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 conforme veremos nesse capítulo, 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). 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

$$m \frac{dv}{dt} = -\alpha v + F(t), \quad (1.1)$$

onde

$$v = \frac{dx}{dt} \quad (1.2)$$

é a velocidade e x a posição da partícula. O primeiro termo do lado direito da Eq. (1.1) 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. Por ou-

tro 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:

$$\langle F(t) \rangle = 0 \quad (1.3)$$

e

$$\langle F(t)F(t') \rangle = B\delta(t - t'), \quad (1.4)$$

pois estamos considerando que as colisões das partículas com as moléculas do líquido sejam independentes. A função δ aparece porque a energia média das partículas não pode ser finita como deveria, conforme a lei de equipartição. Reescrevendo a Eq. (1.1), obtemos

$$\frac{dv}{dt} = -\gamma v + \zeta(t), \quad (1.5)$$

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 (1.3) e (1.4) temos

$$\langle \zeta(t) \rangle = 0 \quad (1.6)$$

e

$$\langle \zeta(t)\zeta(t') \rangle = \Gamma\delta(t - t'), \quad (1.7)$$

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

A escolha feita acima, equações (1.6) e (1.7) (ou (1.3) e (1.4)), recebe o nome de *ruído branco*, porque a distribuição espectral [19] dada pela transformada de Fourier da Eq. (1.7) é independente da frequência w . Se a distribuição espectral depende da frequência, chamamos 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 ser o browniano típico que conhecemos. Por exemplo, a escolha de um ruído dependente da concentração [16] 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. (1.1) juntamente com a propriedade (1.7) é possível obter a dispersão do sistema, que caracteriza a forma como se difunde. Esta, por sua vez, é dada por

$$\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \left(v_0^2 - \frac{b}{2\gamma} \right) \frac{(1 - e^{-\gamma t})^2}{\gamma^2} + \frac{b}{\gamma^2} t - \frac{b}{\gamma^3} (1 - e^{-\gamma t}). \quad (1.8)$$

Para um estado estacionário, i.e., $\gamma t \gg 1$, a equação acima se reduz a

$$\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle \approx 2\mathcal{D}t \quad (1.9)$$

sendo $\mathcal{D} = b/2\gamma^2 = K_B T/m\gamma$ [21]. Neste 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, conforme vamos discutir nos capítulos que seguem.

1.2 Caminhante aleatório com espaço e tempo contínuo

O formalismo de caminhantes aleatórios com espaço e tempo contínuos CTRW [22, 23], de forma análoga à equação de Langevin, descreve o movimento de partículas individuais (ou qualquer outra quantidade conservada, como distribuição de probabilidade). Este formalismo é baseado em distribuições de probabilidade que governam o movimento microscópico das partículas.

Vamos considerar o movimento de uma partícula no espaço, por simplicidade também unidimensional. No formalismo CTRW, a partícula executa um pulso de comprimento e direção arbitrária x em um intervalo de tempo t a $t + dt$. Os pulsos são estatisticamente independentes e executados em intervalos de tempo aleatórios, os quais devem ser definidos estatisticamente. Desta forma, o CTRW é baseado na idéia que o comprimento dos pulsos, assim como os intervalos de tempo entre dois sucessivos pulsos são descritos por uma função densidade de probabilidade PDF $\psi(x, t)$. De $\psi(x, t)$ podemos obter a distribuição relacionada ao comprimento do pulso:

$$\lambda(x) = \int_0^{+\infty} dt \psi(x, t) \quad (1.10)$$

e a distribuição relacionada ao intervalo de tempo

$$w(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi(x, t). \quad (1.11)$$

Na Eq. (1.10), $\lambda(x)dx$ representa a probabilidade de ocorrer um pulso no comprimento entre $(x, x + dx)$ e $w(t)dt$, na Eq. (1.11), a probabilidade de ocorrerem pulsos entre o tempo $(t, t + dt)$. Com estas definições podemos formular o CTRW pela equação [18]

$$\eta(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \int_0^{+\infty} dt' \eta(x', t') \psi(x - x', t - t') + \delta(x)\delta(t) \quad (1.12)$$

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. (1.12) denota a condição inicial, que foi escolhida aqui sendo do tipo $\delta(x)$. Consequentemente, a probabilidade $\rho(x, t)$ de a partícula estar na posição x em um tempo t é dada por

$$\rho(x, t) = \int_0^t dt' \eta(x, t') \Psi(t - t'), \quad (1.13)$$

onde

$$\Psi(t) = 1 - \int_0^t w(t') dt' \quad (1.14)$$

é a probabilidade cumulativa. No espaço de Fourier-Laplace, a Eq. (1.13) se torna

$$\rho(k, s) = \frac{1 - w(s)}{s} \frac{1}{1 - \psi(k, s)}, \quad (1.15)$$

que é o propagador geral do CTRW. Desta forma, fazendo escolhas adequadas para a distribuição dos tempos entre saltos e para a distribuição do comprimento dos saltos, podemos relacionar a equação acima com a equação de difusão no espaço de Fourier-Laplace [24].

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 [25]. Do ponto de vista fenomenológico, o procedimento para um modelo matemático usado para descrever a difusão se dá através de “leis”. Existem duas leis comuns [26]. A mais usada, conhecida como a chamada 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 neste 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 à seguinte lei linear, a enunciada lei de Fick:

$$\mathbf{J} = -\mathcal{D}\nabla\rho, \quad (1.16)$$

sendo $\rho = \rho(\mathbf{r}, t)$ e \mathcal{D} o coeficiente de difusão, ou difusividade, que dependerá 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, desta forma, surge uma lei de conservação que implica uma equação de continuidade

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0. \quad (1.17)$$

Combinando a Eq. (1.16) com a equação da continuidade acima e supondo \mathcal{D} constante, obtemos

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \mathcal{D} \nabla^2 \rho. \quad (1.18)$$

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. Neste caso, a equação de difusão assume a seguinte forma

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \mathcal{D} \nabla^2 \rho + \delta \quad (1.19)$$

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

$$\mathbf{J} = -\mathcal{D} \nabla \rho + \mu \mathbf{F} \rho, \quad (1.20)$$

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

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \mathcal{D} \nabla^2 \rho - \mu \nabla \cdot (\mathbf{F} \rho). \quad (1.21)$$

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

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \mathcal{D} \nabla^2 \rho - \mu \nabla \cdot (\mathbf{F} \rho) + \delta. \quad (1.22)$$

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[19]. Considere agora o movimento de partículas de massa m imersa em um líquido. Se nós tratássemos o problema de forma exata, teria-

mos 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 (aleatórias). Em uma boa aproximação, quando temos uma partícula imersa, esta por sua vez, está sujeita a uma força viscosa que será proporcional à sua velocidade e a forças $R(t)$, de caráter aleatório, resultante das colisões das moléculas do líquido com as partículas de massa m [19]. Suponhamos também que a partícula está sujeita a uma força externa $F(x)$. Usando a descrição de Paul Langevin (1872-1946) [27, 28], a equação de movimento é escrita como

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = F(x) - \eta \frac{dx}{dt} + R(t) \quad (1.23)$$

sendo η uma constante positiva, que representa o coeficiente de atrito. Para os casos em que a massa da partícula é desprezível (o termo $m d^2x/dt^2$ pode ser desconsiderado em relação a $\eta dx/dt$) a Eq. (1.23) resulta em

$$\frac{dx}{dt} = f(x) + \zeta(t) \quad (1.24)$$

onde $f(x) = F(x)/\eta$ 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 média nulas. A Eq. (1.24), juntamente com as propriedades (1.6) e (1.7), é um exemplo de equação de Langevin, de modo a ser de natureza estocástica.

Definida a Eq. (1.24), 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 $t = t_0$. Desta forma, utilizando o procedimento abordado em[28], 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. (1.24) é escrita na forma aproximada

$$x_{n+1} = x_n + \tau f(x_n) + \sqrt{\tau\Gamma}\xi_n \quad (1.25)$$

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

$$g_n(k) = \langle e^{ikx_n} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx_n} \rho_n dx_n \quad (1.26)$$

desse modo

$$g_{n+1}(k) = \langle e^{ikx_{n+1}} \rangle = \langle e^{ik[x_n + \tau f(x_n) + \tau \zeta_n]} \rangle. \quad (1.27)$$

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

$$g_{n+1}(k) = \langle e^{ik[x_n + \tau f(x_n)]} \rangle \langle e^{ik\tau\zeta_n} \rangle. \quad (1.28)$$

A partir deste resultado, vamos obter 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

$$\langle e^{ikx_n} e^{ik\tau f(x_n)} \rangle \approx \langle e^{ikx_n} \rangle + ik\tau \langle f(x_n) e^{ikx_n} \rangle, \quad (1.29)$$

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

$$\langle e^{ik\sqrt{\tau\Gamma}\xi_n} \rangle \approx \langle 1 + ik\sqrt{\tau\Gamma}\xi_n + \frac{(ik\sqrt{\tau\Gamma}\xi_n)^2}{2!} \rangle = 1 - \frac{1}{2}k^2\tau\Gamma. \quad (1.30)$$

Retornando à Eq. (1.28) com os resultados obtidos nas Eqs. (1.29) e (1.30), chegamos a

$$g_{n+1}(k) \approx g_n(k) + \tau \left[ik \langle e^{ikx_n} f(x_n) \rangle - \frac{1}{2}k^2\Gamma g_n(k) \right]. \quad (1.31)$$

Por outro lado,

$$ik \langle e^{ikx_n} f(x_n) \rangle = ik \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx_n} f(x_n) \rho_n dx_n = - \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx_n} \frac{d}{dx_n} [f(x_n) \rho_n] dx_n, \quad (1.32)$$

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,

$$-k^2 g_n(k) = (ik)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx_n} \rho_n dx_n = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx_n} \frac{d^2 \rho_n}{dx_n^2} dx_n \quad (1.33)$$

e a Eq. (1.31) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx_{n+1}} \rho_{n+1} dx_{n+1} - \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx_n} \rho_n dx_n &= -\tau \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx_n} \frac{d}{dx_n} [f(x_n) \rho_n] dx_n \\ &+ \frac{1}{2} \tau \Gamma \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx_n} \frac{d^2 \rho_n}{dx_n^2} dx_n, \end{aligned} \quad (1.34)$$

ou melhor,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx_n} \left\{ \frac{\rho_{n+1} - \rho_n}{\tau} + \frac{d}{dx} [f(x_n)\rho_n] - \frac{\Gamma}{2} \frac{d^2 \rho_n}{dx_n^2} \right\} dx_n = 0. \quad (1.35)$$

Para que a equação acima seja válida

$$\frac{\rho_{n+1} - \rho_n}{\tau} = -\frac{d}{dx} [f(x_n)\rho_n] + \frac{\Gamma}{2} \frac{d^2 \rho_n}{dx_n^2}. \quad (1.36)$$

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

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = \frac{\Gamma}{2} \frac{\partial^2 \rho(x, t)}{\partial x^2} - \frac{\partial}{\partial x} [f(x, t)\rho(x, t)], \quad (1.37)$$

que no caso tridimensional, fica representada por

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \mathcal{D} \nabla^2 \rho - \mu \nabla \cdot (\mathbf{F} \rho), \quad (1.38)$$

onde $\mathcal{D} = \Gamma/2$. Esta 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, tomaremos 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 esta 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 (FPE)[29, 30, 31]. Muitos problemas físicos de transporte acontecem sob a aplicação de um campo externo, por exemplo, uma indução elétrica exercendo uma força na carga carregada, um potencial periódico 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 consideraremos 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. (1.18), aplicamos a transformada de Fourier obtendo

$$\frac{\partial \rho(k, t)}{\partial t} = -\mathcal{D}k^2 \rho(k, t), \quad (1.39)$$

onde a solução desta equação é

$$\rho(k, t) = \rho(k, 0)e^{-\mathcal{D}k^2 t}, \quad (1.40)$$

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

$$\rho(k, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x, 0)e^{ikx} dx = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{f}(x)e^{ikx} dx. \quad (1.41)$$

Substituindo a Eq. (1.41) na Eq. (1.40), obtemos

$$\rho(k, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{f}(x)e^{ikx} e^{-\mathcal{D}k^2 t} dx, \quad (1.42)$$

onde a inversa da transformada de Fourier da Eq. (1.42) é dada por

$$\rho(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \mathcal{G}(x - x', t) \rho(x', 0) \quad (1.43)$$

$$\mathcal{G}(x - x', t) = \frac{1}{(4\pi\mathcal{D}t)^{1/2}} e^{-(x-x')^2/4\mathcal{D}t}. \quad (1.44)$$

A função $\mathcal{G}(x - x', t)$ é a função de Green da equação de difusão (1.18), que tem um comportamento gaussiano para diferentes valores do coeficiente de difusão.

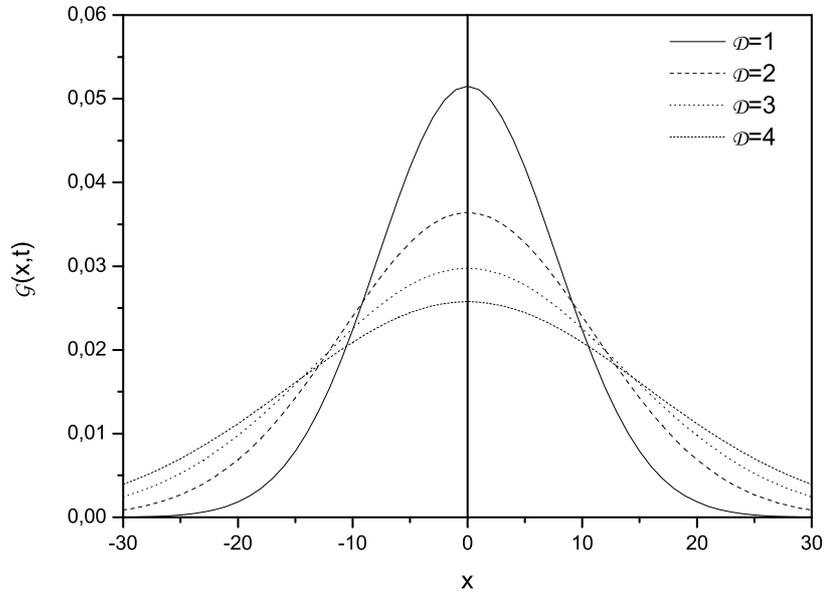


Figura 1.1: Comportamento de $\mathcal{G}(x, t)$ versus x , que ilustra a Eq. (1.44) considerando, por simplicidade, $t = 30$.

Vamos considerar uma solução 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

$$\rho(x, t) = \frac{\rho_0}{(4\pi\mathcal{D}t)^{1/2}} e^{-\frac{(x-x')^2}{4\mathcal{D}t}}. \quad (1.45)$$

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

$$\rho(x, t) = \frac{\rho'_0}{[4\pi\mathcal{D}(t+t_0)]^{1/2}} e^{-\frac{(x-x'')^2}{4\mathcal{D}(t+t_0)}}, \quad (1.46)$$

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 [32].

Consideramos agora a equação de Fokker-Planck com um termo de fonte δ , um sorvedouro, admitindo que este termo seja proporcional à densidade. Dessa forma, teríamos $\delta = -\alpha(t)\rho(x, t)$, se $\alpha(t) > 0$, resultando em

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = \mathcal{D} \frac{\partial^2 \rho(x, t)}{\partial x^2} - \frac{\partial [f(x)\rho(x, t)]}{\partial x} - \alpha(t)\rho(x, t). \quad (1.47)$$

Se ignorarmos os termos difusivo e de arraste, a Eq. (1.47) pode ser escrita como

$$\frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial t} = -\alpha(t)\tilde{\rho}, \quad (1.48)$$

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

$$\rho(x, t) = e^{-\int_0^t \alpha(t')dt'} \hat{\rho}(x, t) \quad (1.49)$$

que, substituída na Eq. (1.47), nos leva a

$$\frac{\partial \hat{\rho}(x, t)}{\partial t} = \mathcal{D} \frac{\partial^2 \hat{\rho}(x, t)}{\partial x^2} - \frac{\partial [f(x)\hat{\rho}(x, t)]}{\partial x}. \quad (1.50)$$

Assim, o tratamento da Eq. (1.47) fica reduzido a resolvê-la sem o termo de fonte (ou sorvedouro). Para $f = 0$, a solução está exposta na Eq. (1.43). Portanto, se resolvermos a Eq. (1.43) para $\hat{\rho}$, com a condição inicial $\rho(x, 0) = \rho_0 \delta(x)$ e $f = 0$, obteremos a solução

$$\rho(x, t) = \frac{\rho_0}{(4\pi\mathcal{D}t)^{1/2}} e^{-\int_0^t \alpha(t')dt'} e^{-x^2/4\mathcal{D}t}. \quad (1.51)$$

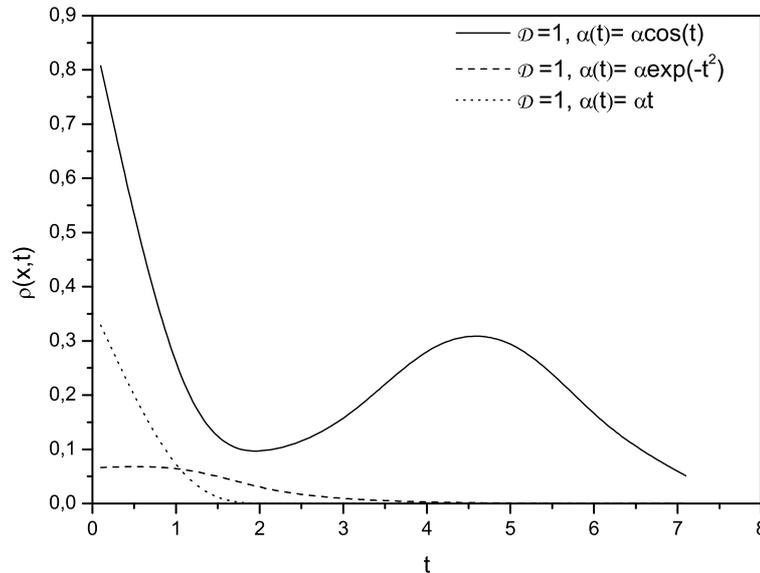


Figura 1.2: Comportamento de $\rho(x, t)$ versus t , que ilustra a Eq. (1.51) considerando, por simplicidade, $\rho_0 = 1, x = 0$ para $\alpha(t)=\cos(t)$, $\rho_0 = 1, x = 0$, $\alpha = 1$ para $\alpha(t) = \alpha e^{-t^2}$, e $\rho_0 = 1, x = 2, \alpha = 1$ para $\alpha(t) = \alpha t$.

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 [21]. Aqui, as partículas estão sujeitas a um potencial harmônico, implicando um termo de arraste linear, isto é, $\mathbf{F} = -\gamma\mathbf{r}$. A equação de Fokker-Planck unidimensional correspondente é

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = \gamma \frac{\partial}{\partial x} [x\rho(x, t)] + \mathcal{D} \frac{\partial^2 \rho(x, t)}{\partial x^2}. \quad (1.52)$$

Aqui, vamos supor que nossa condição inicial está concentrada em um ponto, ou seja,

$$\rho(x, 0) = \delta(x - x_0), \quad (1.53)$$

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

A solução da Eq. (1.52) 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 [19]. A Eq. (1.52) já transformada é dada por

$$\frac{\partial \tilde{\rho}(k, t)}{\partial t} = -\gamma k \frac{\partial \tilde{\rho}(k, t)}{\partial k} - \mathcal{D} k^2 \tilde{\rho}(k, t), \quad (1.54)$$

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

$$\tilde{\rho}(k, 0) = e^{ikx_0}. \quad (1.55)$$

Para resolver a Eq. (1.54), vamos introduzir a função

$$\tilde{\rho}(k, t) = \exp \left[\sum_{n=1}^{\infty} a_n(t) k^n \right], \quad (1.56)$$

que, substituída em (1.54), conduz a

$$\sum_{n=1}^{\infty} k^n \left(\frac{da_n}{dt} + \gamma n a_n \right) + \mathcal{D} k^2 = 0. \quad (1.57)$$

Para $n = 1$, temos a equação

$$\frac{da_1}{dt} + \gamma a_1 = 0 \quad (1.58)$$

com solução

$$a_1(t) = a_1(0)e^{-\gamma t}. \quad (1.59)$$

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

$$\frac{da_2}{dt} + 2\gamma a_2 + \mathcal{D} = 0, \quad (1.60)$$

e apresenta a seguinte solução

$$a_2(t) = -\frac{\mathcal{D}}{2\gamma}(1 - e^{-2\gamma t}) + a_2(0)e^{-2\gamma t}. \quad (1.61)$$

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

$$\frac{da_n}{dt} + \gamma n a_n = 0 \quad (1.62)$$

com soluções

$$a_n(t) = a_n(0)e^{-n\gamma t}. \quad (1.63)$$

Comparando (1.55) com (1.56), verificamos que $a_1(0) = ix_0$ e $a_n(0) = 0$ para valores de $n \geq 2$. Assim,

$$\tilde{\rho}(k, t) = e^{a_1(t)k + a_2(t)k^2} \quad (1.64)$$

e, efetuando a transformada inversa da equação acima, encontramos

$$\rho(x, t) = \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi\mathcal{D}(1 - e^{-2\gamma t})}} \exp\left[-\gamma \frac{(x - x_0 e^{-\gamma t})^2}{2\mathcal{D}(1 - e^{-2\gamma t})}\right]. \quad (1.65)$$

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

Equação de difusão fracionária linear unidimensional

Neste 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, i.e., $\langle x^2 \rangle \propto t^\gamma$, em contraste com a derivada fracionária aplicada na variável espacial, que resulta em uma difusão anômala cujo segundo momento não é finito. Neste contexto, usaremos o formalismo de caminhantes aleatórios descrito no capítulo anterior para explorar as implicações obtidas pelo uso de derivadas fracionárias na equação de difusão.

2.1 Derivadas fracionárias aplicadas à variável temporal

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

$$\frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(x, t) = \mathcal{D} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, t) - \frac{\partial}{\partial x} [F(x, t) \rho(x, t)] , \quad (2.1)$$

onde o operador $\partial^\gamma / \partial t^\gamma$ representa o operador de derivada fracionária de Caputo, aplicado neste caso à variável temporal. Este operador é definido como

$$\frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(x, t) = \frac{1}{\Gamma(n - \gamma)} \int_0^t dt' \frac{\rho^{(n)}(x, t')}{(t - t')^{\gamma+1-n}} , \quad (2.2)$$

com $n - 1 < \gamma < n$ e $\rho^{(n)}(x, t)$ é 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 à Eq. (2.1), 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. (2.1) é normalizável, vamos reescrevê-la na forma

$$\frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(x, t) - \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{J}(x, t) = 0, \quad (2.3)$$

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

$$\mathbf{J}(x, t) = \mathcal{D} \frac{\partial}{\partial x} \rho(x, t) - F(x, t) \rho(x, t). \quad (2.4)$$

A normalização é verificada quando integramos a Eq. (2.3) sobre todo o espaço e consideramos que $\mathbf{J}(x = \pm\infty, t) = 0$, 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. (2.1), 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

$$\frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(x, t) = \mathcal{D} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, t), \quad (2.5)$$

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. (2.5), obtemos

$$\rho(k, s) = \frac{\rho(k, 0)}{s + \mathcal{D} s^{1-\gamma} k^2}, \quad (2.6)$$

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

$$\mathcal{L} \left\{ \frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(x, t) \right\} = s^\gamma \rho(x, s) + \sum_{i=0}^{n-1} s^{\gamma-i-1} \left[\frac{\partial^{\gamma-1-i}}{\partial t^{\gamma-1-i}} \rho(x, t) \right]_{t=0}, \quad (2.7)$$

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

$$\hat{\rho}(x, s) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \tilde{\rho}(x - x') \mathcal{G}(x', s), \quad (2.8)$$

onde

$$\mathcal{G}(x, s) = \frac{1}{2s} \left(\frac{s^\gamma}{\mathcal{D}} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[- \left(\frac{s^\gamma}{\mathcal{D}} \right)^{\frac{1}{2}} |x| \right]. \quad (2.9)$$

Em particular, observando a Eq. (2.8) 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, relacionaremos a transformada de Laplace com a transformada de Mellin, invertendo esta transformada (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 [33]

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

$$\chi(s) = \frac{\prod_{i=1}^m \Gamma(b_i - B_i s) \prod_{i=1}^n \Gamma(1 - a_i + A_i s)}{\prod_{i=m+1}^q \Gamma(1 - b_i + B_i s) \prod_{i=1+n}^p \Gamma(a_i - A_i s)}. \quad (2.10)$$

Assim, aplicando o procedimento discutido acima, após alguns cálculos é possível mostrar que as transformadas de Laplace e de Mellin estão relacionadas uma com a outra por meio de

$$\rho(x, s') = \frac{1}{\Gamma(1 - s')} \int_0^\infty ds s^{-s'} \rho(x, s), \quad (2.11)$$

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

$$\rho(x, s') = \int_0^\infty dt t^{s'-1} \rho(x, t) \quad \left(\rho(x, t) = \frac{1}{2\pi i} \int_L \rho(x, s') t^{-s'} ds' \right). \quad (2.12)$$

Assim, utilizando a relação (2.11) na Eq. (2.9), obtemos

$$\mathcal{G}(x, s') = \frac{1}{\gamma|x|} \left(\frac{|x|}{\sqrt{\mathcal{D}}} \right)^{\frac{2}{\gamma}s'} \frac{\Gamma\left(1 - \frac{2}{\gamma}s'\right)}{\Gamma(1 - s')}. \quad (2.13)$$

A partir de (2.13), após a inversão da transformada de Mellin, obtemos

$$\mathcal{G}(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\mathcal{D}t^\gamma}} \mathbf{H}_{1,2}^{2,0} \left[\frac{x^2}{4\mathcal{D}t^\gamma} \left| \begin{matrix} (1-\frac{\gamma}{2}, \gamma) \\ (\frac{1}{2}, 1) \end{matrix} \right. \right]_{(0,1)}. \quad (2.14)$$

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

$$\mathcal{G}(x, t) = \frac{1}{2\pi i} \int_L \mathcal{G}(x, s') t^{-s'} ds', \quad (2.15)$$

e a forma integral das funções H de Fox anteriormente representadas pela relação (2.10). A representação gráfica da Eq. (2.14) é mostrada abaixo para alguns valores específicos. Com base nesses resultados, concluímos que nossa solução é da forma:

$$\rho(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\mathcal{D}t^\gamma}} \int_{-\infty}^\infty dx' \tilde{\rho}(x') \mathbf{H}_{1,2}^{2,0} \left[\frac{(x-x')^2}{4\mathcal{D}t^\gamma} \left| \begin{matrix} (1-\frac{\gamma}{2}, \gamma) \\ (\frac{1}{2}, 1) \end{matrix} \right. \right]_{(0,1)}. \quad (2.16)$$

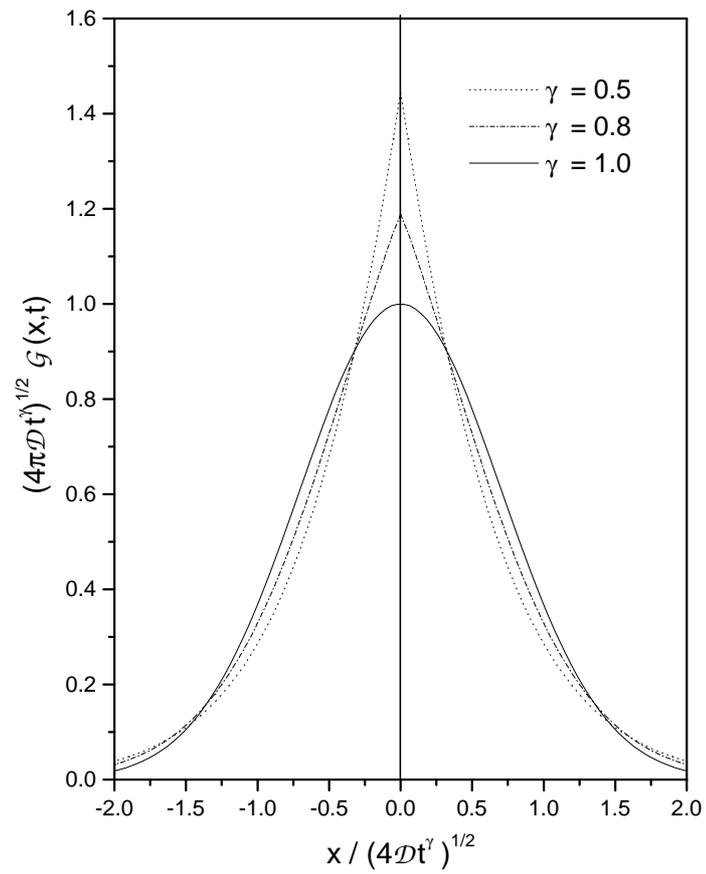


Figura 2.1: Comportamento de $(4\pi Dt^\gamma)^{1/2} G(x,t)$ versus $x/(4Dt^\gamma)^{1/2}$, ilustra a Eq. (2.14) para valores típicos de γ (subdifusivo).

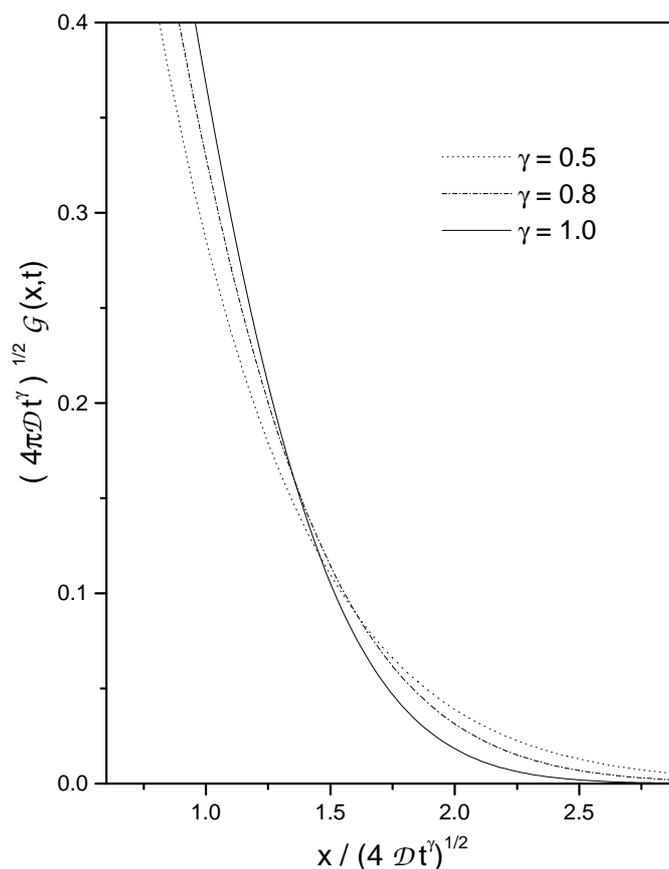


Figura 2.2: Comportamento da Eq. (2.14) para grandes valores dos argumentos.

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

$$\rho(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \mathcal{B}_n(t) \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{L} x \right) \quad (2.17)$$

com

$$\mathcal{B}_n(t) = \frac{2}{L} \int_0^L dx \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{L} x \right) \rho(x, t) \quad (2.18)$$

é apropriada para o tratamento deste caso, pois satisfaz as condições de contorno. Substituindo a Eq. (2.17) na Eq. (2.5), multiplicando ambos os lados por $\operatorname{sen}(n\pi x/L)$, integrando desde 0 a L e identificando $\mathcal{B}_n(t)$, obtemos

$$\frac{d^\gamma}{dt^\gamma} \mathcal{B}_n(t) = -\frac{n^2 \pi^2}{L^2} \mathcal{D} \mathcal{B}_n(t). \quad (2.19)$$

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

$$\begin{aligned} E_\gamma(-t^\gamma) &= \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{1}{s + s^{1-\gamma}} \right\} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-t^\gamma)^n}{\Gamma(1 + n\gamma)}. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Então, após alguns cálculos, podemos mostrar que

$$\mathcal{B}_n(t) = \mathcal{B}_n(0) E_\gamma \left(-\frac{n^2 \pi^2}{L^2} \mathcal{D} t^\gamma \right). \quad (2.21)$$

Agora, considerando uma condição inicial do tipo $\rho(x, 0) = \tilde{\rho}(x)$ e utilizando o resultado acima em (2.17) temos

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

com

$$\mathcal{G}(x, x', t) = \frac{2}{L} \sum_{n=1}^{\infty} \text{sen} \left(\frac{n\pi}{L} x' \right) \text{sen} \left(\frac{n\pi}{L} x \right) \text{E}_{\gamma} \left(-\frac{n^2 \pi^2}{L^2} \mathcal{D}t^{\gamma} \right). \quad (2.22)$$

Por outro lado, 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

$$\mathcal{G}(x, x', t) = \frac{2}{L} \sum_{n=1}^{\infty} \cos \left(\frac{n\pi}{L} x' \right) \cos \left(\frac{n\pi}{L} x \right) \text{E}_{\gamma} \left(-\frac{n^2 \pi^2}{L^2} \mathcal{D}t^{\gamma} \right). \quad (2.23)$$

Neste ponto, é interessante observar que para esta 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 $\text{E}_{\gamma}(-n^2 \pi^2 \mathcal{D}t^{\gamma} / L^2) \rightarrow 0$ quando $t \rightarrow \infty$. Isto se verifica porque a função $\text{E}_{\gamma}(x)$ 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 [19], que mostra de que forma as soluções geral e inicial estão relacionadas. Esta função é definida como

$$\langle x(t)x(0) \rangle_s = \int_0^L dx \int_0^L dx' x x' \rho(x, t) \rho_s(x), \quad (2.24)$$

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 este resultado e a solução (2.23) encontramos, após alguns cálculos,

$$\langle x(t)x(0) \rangle_s = \frac{L^2}{4} + \frac{8L^4}{\pi^4} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)^4} \text{E}_{\gamma} \left[-\frac{(2n+1)^2}{L^2} \mathcal{D}t^{\gamma} \right]. \quad (2.25)$$

Se tomarmos o limite de tempos longos na equação acima verificaremos que $\langle x(t)x(0) \rangle \sim L^2/4$. Este resultado foi obtido em [19] 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.

Voltando nossa atenção agora para a forma do segundo momento da Eq. (2.5) a partir da qual foram discutidos três casos precedentes dependentes do índice γ , o segundo momento diz se um processo difusivo é anômalo ou usual. Para a situação que aqui está em consideração, ou seja, aquela 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 $\omega(t)$. Neste sentido, utilizando os conceitos de caminhantes aleatórios anteriormente discutidos, chegamos em uma distribuição de probabilidades para a parte temporal da forma

$$w(t) = \frac{1}{\tau_0} \left(\frac{t}{\tau_0} \right)^{\gamma-1} E_{\gamma,\gamma} \left(-\frac{t^\gamma}{\tau_0^\gamma} \right), \quad (2.26)$$

onde τ_0 é uma constante e $E_{\gamma,\beta}(t)$ é a função de Mittag-Leffler generalizada

$$E_{\gamma,\beta}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{\Gamma(n\gamma + \beta)}. \quad (2.27)$$

Vemos que agora a distribuição apresenta uma dependência com o parâmetro γ , que pode dar forma tanto a processos subdifusivos quanto a superdifusivos. 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. Neste 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.

Veamos 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 $F(x, t) = 0$ na Eq. (2.1) e utilizando transformadas integrais definidas anteriormente, podemos mostrar que

$$\rho(x, t) = \frac{2 + \theta}{2\Gamma\left(\frac{1}{2+\theta}\right)} \left[\frac{1}{(2 + \theta)^2 \mathcal{D} t^\gamma} \right]^{\frac{1}{2+\theta}} \mathbf{H}_{1,2}^{2,0} \left[\frac{|x|^{2+\theta}}{(2 + \theta)^2 \mathcal{D} t^\gamma} \left| \begin{matrix} (1 - \frac{\gamma}{2+\theta}, \gamma) \\ (1 - \frac{1}{2+\theta}, 1) \end{matrix} \right. \right]_{(0,1)}, \quad (2.28)$$

lembrado que para $\gamma = 1$ e $\theta = 0$ recuperamos a solução gaussiana obtida para o caso usual. Para este caso, a alteração ocorreu na distribuição de tempos e saltos, porque o coeficiente de difusão tem uma dependência espacial. Mais à frente veremos a alteração causada na distribuição de saltos quando há aplicação de derivadas fracionárias na variável espacial. Se, além desta 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

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &= \int_0^\infty d\xi \tilde{\rho}(\xi) \xi^{-\theta-1} \mathcal{G}(x, \xi, t) \\ \mathcal{G}(x, \xi, t) &= \left[\frac{k}{(2+\theta)\mathcal{D}} \right]^{-\frac{(1+\theta)}{(2+\theta)}} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{k|x|^{2+\theta}}{(2+\theta)\mathcal{D}}} \mathbf{L}_n^{-\frac{(1+\theta)}{(2+\theta)}} \left[\frac{k|\xi|^{2+\theta}}{(2+\theta)\mathcal{D}} \right] \times \\ &\times \mathbf{L}_n^{-\frac{(1+\theta)}{(2+\theta)}} \left[\frac{k|x|^{2+\theta}}{(2+\theta)\mathcal{D}} \right] \mathbf{E}_\gamma [-(2+\theta)nk t^\gamma] \frac{\Gamma(1+n)}{\Gamma(1+n-a)}, \end{aligned} \quad (2.29)$$

com $\lambda_n = (2+\theta)nk$.

Da discussão feita acima percebemos 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. Neste sentido, é interessante obter a equação integral relativa à Eq. (2.1) 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. (2.1) como

$$\frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(x, t) = \mathcal{D} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, t) - \alpha(x, t), \quad (2.30)$$

com

$$\alpha(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} [F(x, t)\rho(x, t)]. \quad (2.31)$$

Empregando transformadas de Fourier e Laplace na Eq. (2.30) obtemos

$$\rho(k, s) = \frac{\rho(k, 0)}{s + \mathcal{D}s^{1-\gamma}k^2} - \frac{\alpha(k, s)}{s + \mathcal{D}s^{1-\gamma}k^2}. \quad (2.32)$$

A inversão destas transformadas fornece

$$\rho(x, t) = \rho^{(0)}(x, t) - \int_0^t dt' \int_{-\infty}^{\infty} dx' \mathcal{G}_\gamma(x - x', t - t') \alpha(x', t') . \quad (2.33)$$

com

$$\mathcal{G}_\gamma(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\mathcal{D}t^\gamma}} \mathbf{H}_{1\ 2}^{2\ 0} \left[\frac{x^2}{4\mathcal{D}t^\gamma} \left| \begin{matrix} (1-\frac{\gamma}{2}, \gamma) \\ (\frac{1}{2}, 1) \end{matrix} \right. \right] . \quad (2.34)$$

Substituindo $\alpha(x, t)$ na Eq. (2.33), obtemos, via integração por partes,

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &= \rho^{(0)}(x, t) \\ &+ \int_0^t dt' \int_{-\infty}^{\infty} dx' \mathcal{G}_\gamma^{(2)}(x - x', t - t') [F(x', t') \rho(x', t')] . \end{aligned} \quad (2.35)$$

com

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_\gamma^{(2)}(x, t) &= \frac{d}{dx} \mathcal{G}_\gamma(x, t) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi\mathcal{D}t^\gamma}} \mathbf{H}_{2\ 3}^{2\ 1} \left[\frac{x^2}{4\mathcal{D}t^\gamma} \left| \begin{matrix} (0, 2) & (1-\frac{\gamma}{2}, \gamma) \\ (\frac{1}{2}, 1) & (0, 1) & (1, 2) \end{matrix} \right. \right] , \end{aligned} \quad (2.36)$$

onde utilizamos a propriedade (A.2) do apêndice. A Eq. (2.35) é a forma integral correspondente à Eq. (2.1) e pode ser empregada no cálculo da influência de uma força externa aplicada ao sistema.

2.2 Equação de difusão: derivadas fracionárias no espaço

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 econofísica 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 desta dissertação.

Iniciaremos com a observação de que a distribuição de Lévy

$$L_\mu(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{-ikx - |k|^\mu \mathcal{D}t} \quad (2.37)$$

é solução da equação de difusão

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \mathcal{D} \frac{\partial^\mu \rho}{\partial |x|^\mu} - \frac{\partial}{\partial x} [F(x, t) \rho(x, t)], \quad (2.38)$$

quando consideramos a ausência de força externa. 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 vista no apêndice (A.2), onde

$$\mathcal{F}\{\rho(x, t)\} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} \rho(x, t) \quad (2.39)$$

é a transformada de Fourier. Esta consideração conduz a $\rho(x, t) = L_\mu(x)$, confirmando nossa afirmação inicial. Neste contexto, aplicando o procedimento do capítulo anterior relativo a caminhantes aleatórios na Eq. (2.38) obtemos que a distribuição relacionada ao comprimento dos saltos é agora dada por $\lambda(k) = 1 - \sigma^\mu |k|^\mu$, com $\sigma^\mu = \mathcal{D}/\tau^\mu$, para a qual recuperamos o caso usual com $\mu = 2$. Esta distribuição apresenta comportamento assintótico de cauda longa, ou seja, saltos longos possuem uma maior probabilidade de ocorrerem quando comparados com o caso usual.

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

$$\rho(x, t) = \frac{\pi}{\mu|x|} \mathbf{H}_{3,3}^{2,1} \left[\frac{|x|}{(\mathcal{D}t^{\alpha+1})^{\frac{1}{\mu}}} \left| \begin{matrix} (1, \frac{1}{\mu}) & (1, \frac{\alpha+1}{\mu}) & (1, \frac{1}{2}) \\ (1,1) & (1, \frac{1}{\mu}) & (1, \frac{1}{2}) \end{matrix} \right. \right] \quad (2.40)$$

(veja Fig.(2.3)). Como esperado, podemos inferir que a Eq. (2.40) tem um comportamento assintótico de cauda longa a medida que diminuimos o valor de μ .

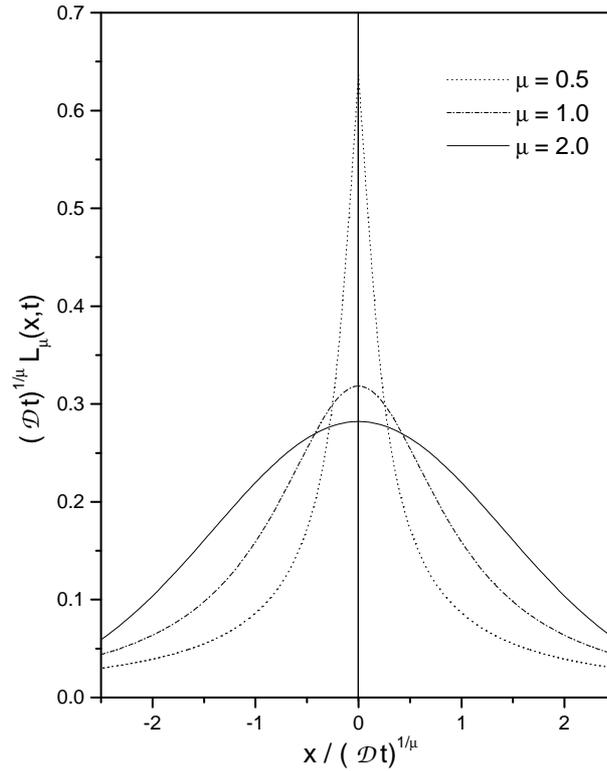


Figura 2.3: Comportamento de $(\mathcal{D}t)^{1/\mu} L_\mu(x,t)$ versus $x/(\mathcal{D}t)^{1/\mu}$, ilustra a Eq. (2.40) para valores típicos de μ .

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

$$\rho(x,t) = \frac{1}{\mu|x|} \mathbf{H}_{11}^{22} \left[\left(\frac{\alpha\mu}{\overline{\mathcal{D}}(t)} \right)^{1/\mu} |x| \begin{matrix} (1, \frac{1}{\mu}) & (1, \frac{1}{2}) \\ (1,1) & (1, \frac{1}{2}) \end{matrix} \right], \quad (2.41)$$

onde $\overline{\mathcal{D}}(t) = \mathcal{D}[1 - \exp(-\alpha\mu t)]$ com um comportamento semelhante ao anterior. Vamos analisar agora a Eq. (2.38) 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 equação (2.38), temos

$$\rho(k, s) = \frac{\rho(k, 0)}{s + \mathcal{D}|k|^\mu} . \quad (2.42)$$

Invertendo a equação anterior, sua solução fica dada por

$$\rho(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \mathcal{G}_\mu(x - x', t - t') \tilde{\rho}(x') , \quad (2.43)$$

onde $\mathcal{G}_\mu(x, t) = L_\mu(x, t)$, e a equação integral associada a Eq. (2.38) é

$$\rho(x, t) = \rho^{(0)}(x, t) - \int_0^t dt' \int_{-\infty}^{\infty} dx' \mathcal{G}_\mu^{(2)}(x - x', t - t') F(x', t') \rho(x', t') , \quad (2.44)$$

sendo

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_\mu^{(2)}(x, t) &= -\frac{d}{dx} L_\mu(x, t) \\ &= \int_0^\infty \frac{dk}{\pi} k \sin(kx) e^{-t\mathcal{D}|k|^\mu} . \end{aligned} \quad (2.45)$$

Como no caso mostrado anteriormente para a derivada fracionária na parte temporal, a Eq. (2.44) também pode ser usada para calcular perturbativamente a influência de uma força externa qualquer aplicada ao sistema.

Discutimos, neste 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 apresentam comportamento superdifusivo.

Capítulo 3

Equação de difusão com um termo não-local

No capítulo anterior vimos como 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. Desta forma, a equação de difusão que vamos analisar neste capítulo é:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x, t) = \mathcal{D}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\rho(x, t) - \int_0^t d\bar{t} \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{x} \mathcal{K}(x - \bar{x}, t - \bar{t})\rho(\bar{x}, \bar{t}) \quad (3.1)$$

onde a última parte da equação acima representa um termo não-local atuando sobre o sistema que depende de $\mathcal{K}(x, t)$. Este termo pode ser relacionado a vários contextos em particular, com processos de reação [34, 35] e com derivadas de ordem fracionárias [10] dependendo da escolha de $\mathcal{K}(x, t)$ e é tal que, para $\mathcal{K}(x, t) = 0$, 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. Desta forma, um deles é dominado pelo comportamento gaussiano devido ao termo difusivo e o outro é dependente 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. Neste sentido, devemos ressaltar que situações caracterizadas pelos dois regimes têm sido relatadas em vários contextos físicos, como, por exemplo, sistemas com interações de longo alcance [36] e difusão intracelular [37]. A Eq. (3.1) ainda pode ser relacionada com as equações fracionárias de ordem distribuída [38].

3.1 Equações de difusão e soluções

Investigaremos agora soluções para a Eq. (3.1) considerando algumas formas da função $\mathcal{K}(x, t)$ presentes no termo não-local da mesma. 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 $0 < \mu < 2$ ($\mathcal{K}(k, s) = \tilde{\mathcal{K}}s^{-\gamma}|k|^\mu$) e após o estudo destes 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 poderá 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 poderá ser relacionada com uma derivada temporal de ordem fracionária [10] mediante uma escolha apropriada de γ . Começaremos nossa 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. (3.1) de maneira a obter a equação integro-diferencial

$$\frac{d}{dt}\rho(k, t) = -\mathcal{D}k^2\rho(k, t) - \int_0^t d\bar{t}\mathcal{K}(k, t - \bar{t})\rho(k, \bar{t}). \quad (3.2)$$

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

$$s\rho(k, s) - \rho(k, 0) = -\mathcal{D}k^2\rho(k, s) - \mathcal{K}(k, s)\rho(k, s) \quad (3.3)$$

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

$$\mathcal{G}(k, s) = \frac{1}{s + \mathcal{D}k^2 + \mathcal{K}(k, s)}, \quad (3.4)$$

onde $\rho(k, 0)$ é a transformada de Fourier da condição inicial e $\mathcal{G}(k, s)$ é a função de Green da Eq. (3.1) no espaço de Fourier-Laplace. Note que a Eq. (3.4) retorna ao caso usual, isto é, à função de Green para o caso livre, quando $\mathcal{K}(k, s) = 0$.

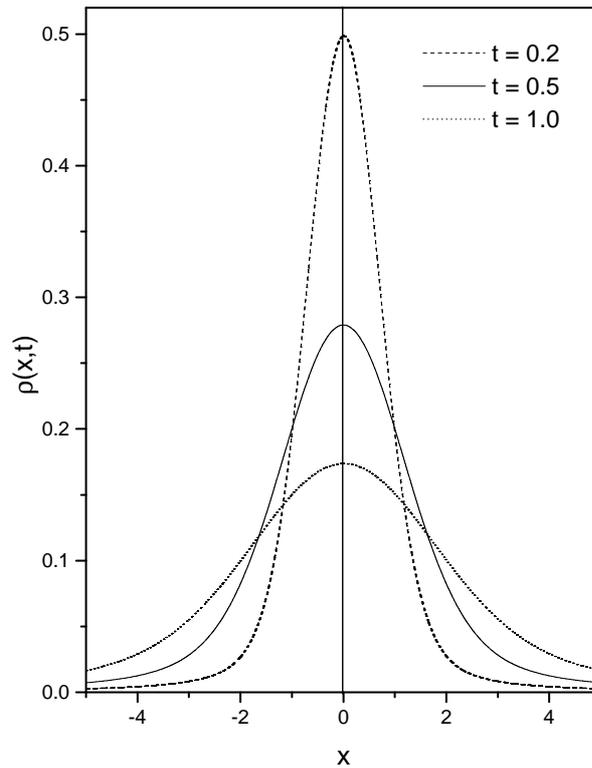


Figura 3.1: Esta figura ilustra o comportamento de $\rho(x, t)$ versus x para diferentes valores de tempo considerando, por simplicidade, $\mu = 1$, $\mathcal{D} = 1$, $\mathcal{K} = 1$ e a condição inicial $\rho(x, 0) = \delta(x)$.

3.1.1 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

$$\rho(k, s) = \frac{\rho(k, 0)}{s + \mathcal{D}k^2 + \tilde{\mathcal{K}}|k|^\mu}. \quad (3.5)$$

Aplicando a transformada inversa de Laplace, a Eq. (3.5) fica dada por

$$\rho(k, t) = \rho(k, 0) \exp\left(-\mathcal{D}k^2 t - \tilde{\mathcal{K}}|k|^\mu t\right), \quad (3.6)$$

onde a transformada inversa de Fourier da Eq. (3.6) é

$$\rho(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{x} \mathcal{G}(x - \bar{x}, t) \rho(\bar{x}, 0)$$

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

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 [33] (veja Fig.(3.1) e Fig.(3.2)).

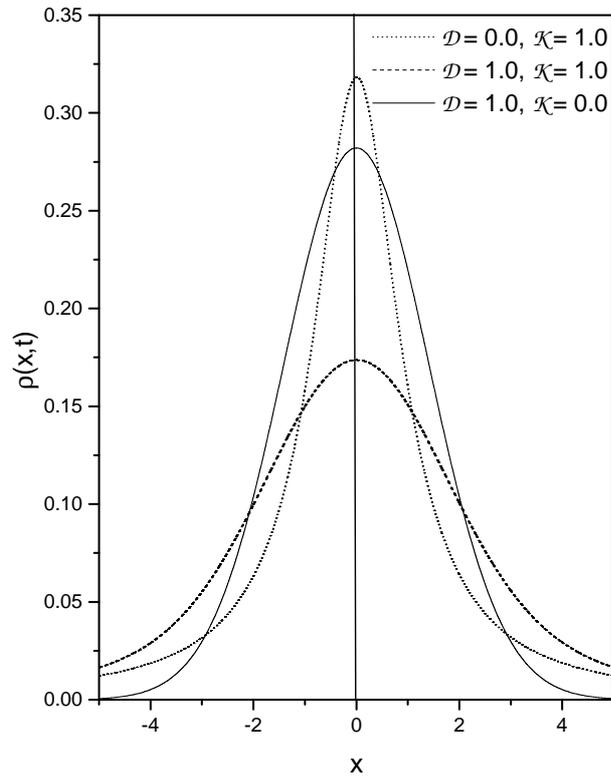


Figura 3.2: Esta figura ilustra o comportamento de $\rho(x, t)$ versus x para diferentes valores de \mathcal{D} e \mathcal{K} considerando, por simplicidade, $t = 1$, $\mu = 1$ e a condição inicial $\rho(x, 0) = \delta(x)$.

A presença desta função na solução indica que o termo não-local na Eq. (3.1) produz uma dispersão anômala da solução. Neste sentido, uma característica importante da solução encontrada acima é a presença de dois regimes, um deles é caracterizado pelo caso usual

(i.e., Gaussiano) e o outro é dominado assintoticamente por uma lei de potência (i.e., do tipo Lévy). A Eq. (3.5) pode ser relacionada ao formalismo CTRW (Continuous Time Random Walk) [2] considerando-se a distribuição do tempo de espera $\omega(s) = 1/(1 + \tau s)$ e a função densidade de probabilidade de salto $\lambda(k) = 1 - \tau(\mathcal{D}k^2 + \tilde{\mathcal{K}}|k|^\mu)$, onde 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, esta escolha para $\mathcal{K}(x, t)$ manifesta na solução um comportamento de cauda longa quando consideramos o limite de tempos grandes. De fato, é possível verificar que para tempos pequenos

$$\mathcal{G}(x, t) \sim \frac{e^{-\frac{x^2}{4\mathcal{D}t}}}{\sqrt{4\pi\mathcal{D}t}} \quad (3.7)$$

enquanto que para tempos longos

$$\mathcal{G}(x, t) \sim \frac{1}{\mu|x|} \mathbf{H}_{2,2}^{1,1} \left[\frac{|x|}{(\mathcal{K}t)^{\frac{1}{\mu}}} \left| \begin{matrix} (1, \frac{1}{\mu}), (1, \frac{1}{2}) \\ (1, 1), (1, \frac{1}{2}) \end{matrix} \right. \right] \quad (3.8)$$

A Eq. (3.8) é essencialmente uma a distribuição do tipo Lévy comumente encontrada em situações onde temos difusão anômala.

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

Agora, conduziremos nossa 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. (3.4), com $\mathcal{K}(k, s) = \bar{\mathcal{K}}(k)$, e aplicando a transformada inversa de Laplace, obtemos

$$\rho(k, t) = \rho(k, 0) \exp(-\mathcal{D}k^2 t - \bar{\mathcal{K}}(k)t). \quad (3.9)$$

Fazendo uso da transformada inversa de Fourier, juntamente com o teorema de convolução, na Eq. (3.9), obtemos como solução

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{x} \rho(\bar{x}, 0) \mathcal{G}(x - \bar{x}, t) \\ \mathcal{G}(x, t) &= \bar{\mathcal{G}}(x, t) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-t)^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dx_n \bar{\mathcal{K}}(x - x_n) \cdots \\ &\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \bar{\mathcal{K}}(x_2 - x_1) \bar{\mathcal{G}}(x_1, t), \end{aligned} \quad (3.10)$$

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

$$\bar{\mathcal{G}}(x, t) = \frac{e^{-\frac{x^2}{4\mathcal{D}t}}}{\sqrt{4\pi\mathcal{D}t}} \quad (3.11)$$

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 $\lambda(k) = 1 - \tau(\mathcal{D}k^2 + \mathcal{K}(k))$.

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

Dando prosseguimento em nossa análise, vamos incorporar uma dependência temporal em $\mathcal{K}(x, t)$ considerando $\mathcal{K}(x, t) \propto t^{\gamma-1}/|x|^{1+\mu}$ ($\mathcal{K}(k, s) = \hat{\mathcal{K}} s^{-\gamma}|k|^\mu$) que nos leva a obter a partir da Eq. (3.5)

$$\rho(k, s) = \frac{\rho(k, 0)}{s + \mathcal{D}k^2 + \hat{\mathcal{K}}s^{-\gamma}|k|^\mu}. \quad (3.12)$$

Note que a Eq. (3.12) retorna ao caso anterior quando tomado $\gamma = 0$ e ao caso usual quando $\hat{\mathcal{K}} = 0$. Por outro lado, esta dependência no termo não-local introduz um efeito memória, de forma semelhante ao que ocorre com as equações temporais fracionárias de difusão. Deste modo, a solução obtida para este 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 [39], após alguns cálculos é possível mostrar que

$$\rho(k, t) = \rho(k, 0) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\hat{\mathcal{K}}t^{1+\gamma}|k|^\mu \right)^n \mathbf{E}_{1,1+n\gamma}^{(n)}(-\mathcal{D}k^2t), \quad (3.13)$$

onde $\mathbf{E}_{\mu,\beta}^{(n)}(x)$ é a n -ésima derivada da função de Mittag-Leffler generalizada, isto é, $\mathbf{E}_{\mu,\beta}^{(n)}(x) \equiv \frac{d^n}{dx^n} \mathbf{E}_{\mu,\beta}(x)$ [20]. A transformada inversa de Fourier da Eq. (3.13) é dada por

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{x} \rho(\bar{x}, 0) \mathcal{G}(x - \bar{x}, t) \\ \mathcal{G}(x, t) &= \frac{1}{2|x|} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \left(-\frac{\hat{\mathcal{K}}t^\gamma}{(\mathcal{D}t)^{\frac{\mu}{2}}} \right)^n \mathbf{H}_{3,3}^{2,1} \left[\frac{|x|}{\sqrt{\mathcal{D}t}} \left| \begin{matrix} (1-\frac{n\mu}{2}, \frac{1}{2}), (1+(1+\gamma-\frac{\mu}{2})n, \frac{1}{2}), (1, \frac{1}{2}) \\ (1, 1), (1-(1-\frac{\mu}{2})n, \frac{1}{2}), (1, \frac{1}{2}) \end{matrix} \right. \right]. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Neste 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 da Convolução correspondente. Assim sendo, após alguns cálculos de rotina, podemos mostrar que

$$\begin{aligned}
 \rho(x, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{x} \rho(\bar{x}, 0) \mathcal{G}(x - \bar{x}, t) \\
 \mathcal{G}(x, t) &= \bar{\mathcal{G}}(x, t) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dx_n \int_0^t dt_n \bar{\mathcal{K}}(x - x_n, t - t_n) \cdots \\
 &\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \int_0^{t_2} dt_1 t_1^n \bar{\mathcal{K}}(x_2 - x_1, t_2 - t_1) \bar{\mathcal{G}}(x_1, t_1)
 \end{aligned} \tag{3.15}$$

onde $\rho(x, 0)$ é a condição inicial e $\bar{\mathcal{G}}(x, t)$ é dada pela Eq. (3.11). A Eq. (3.15) estende a Eq. (3.10) e pode ser usada para obter soluções aproximadas quando o termo não-local permite ser considerado como uma perturbação na solução usual.

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

Neste capítulo daremos continuidade ao estudo iniciado no Cap. 2 a respeito das derivadas de ordem fracionárias, entretanto nos 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 ou duas dimensões espaciais. Particularmente, no caso em que o sistema possui duas dimensões espaciais vamos incorporar à dependência temporal e aspectos não homogêneos na condição de contorno. Especificamente, a equação que vamos analisar neste capítulo é

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

Observe que ela contém dois regimes de difusão, sendo que em um deles temos a presença de um *kernel* $\mathcal{K}(t)$ o qual, dependendo da escolha, pode introduzir diferentes regimes difusivos e recuperar as equações de difusão fracionárias de ordem distribuídas. Ela pode ser relacionada ao formalismo de caminhadas aleatórias contínuas no tempo CTRW [18] ao considerarmos a função densidade de probabilidade $\psi(k, s) = \phi(s)\lambda(k)$, com a distribuição do intervalo de tempo no espaço de Laplace dada por $\phi(s) = (\mathcal{D} + \mathcal{K}(s))/(\mathcal{D} + \mathcal{K}(s) + \tau s^\gamma)$ e a distribuição de probabilidade dos pulos dada por $\lambda(k) = 1 - \tau k^2$ no espaço de Fourier. Vamos iniciar nossa análise considerando uma equação de difusão fracionária, levando em conta a derivada fracionária de Caputo [20], onde $\bar{\mathcal{K}}(t)$ é um *kernel* dependente do tempo o qual nós consideramos dado por $\bar{\mathcal{K}}(t) = \mathcal{D}_\alpha t^{\alpha-1}/\Gamma(\alpha)$. Inicialmente, abordaremos o caso unidimensional sujeito às condições de contorno $\rho(0, t) = \Phi_0(t)$ e $\rho(a, t) = \Phi_a(t)$, onde $\Phi_0(t)$ e $\Phi_a(t)$ são duas funções arbitrárias dependentes do tempo. Em seguida, abordaremos o caso com simetria cilíndrica, ou seja, bidimensional respei-

tando as condições de contorno $\rho(a, \theta, t) = \tilde{\Phi}_a(\theta, t)$ e $\rho(b, \theta, t) = \tilde{\Phi}_b(\theta, t)$.

4.1 Equação de difusão fracionária: Caso unidimensional

Para o caso unidimensional, com $\bar{K}(t) = \mathcal{D}_\alpha t^{\alpha-1}/\Gamma(\alpha)$, a Eq. (4.1) pode ser reescrita como

$$\frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(x, t) = \mathcal{D} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, t) + \frac{\mathcal{D}_\alpha}{\Gamma(\alpha)} \int_0^t dt' (t-t')^{\alpha-1} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, t'), \quad (4.2)$$

com $0 < \gamma \leq 1$ e $0 \leq \alpha + \gamma \leq 1$. Esta equação estende a equação de difusão usual pela presença da derivada fracionária e a integral de convolução em um dos termos difusivo. Para resolver a equação acima vamos aplicar a transformada de Laplace e utilizar o formalismo de funções de Green. Desta forma, após alguns cálculos é possível obter a solução para a Eq. (4.2) no espaço, como segue

$$\begin{aligned} \hat{\rho}(x, s) &= -s^{\gamma-1} \int_0^a dx' \hat{\mathcal{G}}(x, x'; s) \tilde{\rho}(x') + \left[\bar{\Phi}_a(s) \frac{\partial}{\partial x'} \hat{\mathcal{G}}(x, x'; s) \Big|_{x'=a} \right. \\ &\quad \left. - \bar{\Phi}_0(s) \frac{\partial}{\partial x'} \hat{\mathcal{G}}(x, x'; s) \Big|_{x'=0} \right], \end{aligned} \quad (4.3)$$

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

$$\left(\mathcal{D} + \frac{\mathcal{D}_\alpha}{s^\alpha} \right) \frac{d^2}{dx^2} \hat{\mathcal{G}}(x, x'; s) - s^\gamma \mathcal{G}(x, x'; s) = \delta(x - x'), \quad (4.4)$$

estando sujeita às condições de contorno $\mathcal{G}(0, x'; s) = 0$ e $\mathcal{G}(a, x'; s) = 0$. Usando as autofunções do problema de Sturm-Liouville relacionadas ao operador espacial da Eq. (4.4), é possível mostrar que

$$\hat{\mathcal{G}}(x, x'; s) = -\frac{2}{a} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(n\pi x'/a) \sin(n\pi x/a)}{s^\gamma + (\mathcal{D} + \mathcal{D}_\alpha s^{-\alpha})(n\pi/a)^2}. \quad (4.5)$$

Para sabermos mais sobre o comportamento do sistema confinado, temos que inverter a Eq. (4.5), que resulta em

$$\mathcal{G}(x, x'; t) = -\frac{2}{a} \sum_{n=1}^{\infty} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{n\pi}{a}x'\right) \mathcal{Y}_n(t, k_n), \quad (4.6)$$

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

$$\mathcal{Y}_n(t, k_n) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{t^{\gamma-1}}{m!} (-\mathcal{D}_\alpha t^{\gamma+\alpha} k_n^2)^m \mathbf{H}_{1,2}^{1,1} \left[\mathcal{D} k_n^2 t^\gamma \left| \begin{matrix} (-m, 1) \\ (0, 1)(1 - (\gamma + \alpha)m - \gamma, \gamma) \end{matrix} \right. \right], \quad (4.7)$$

onde $k_n = n\pi/a$ e $\mathbf{H}_{p,q}^{m,n}$ é a função H de Fox. 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. De fato, a função $\mathcal{Y}_n(t, k_n)$ é representada por $\mathcal{Y}_n(t, k_n) = t^{\gamma-1} E_{\gamma,\gamma}(-\mathcal{D} k_n^2 t^\gamma)$ para $\mathcal{D} \neq 0$ e $\mathcal{D}_\alpha = 0$, com $\gamma \neq 1$, e $\mathcal{Y}_n(t, k_n) = t^{\gamma-1} E_{\gamma+\alpha,\gamma}(-\mathcal{D}_\alpha k_n^2 t^{\gamma+\alpha})$ para $\mathcal{D} = 0$ e $\mathcal{D}_\alpha \neq 0$. Aplicando a transformada inversa de Laplace na Eq. (4.3), obtemos

$$\begin{aligned} \rho(x, t) = & -\frac{1}{\Gamma(1-\gamma)} \int_0^t d\bar{t} \frac{1}{(t-\bar{t})^\gamma} \int_0^a dx' \hat{\mathcal{G}}(x, x'; t) \tilde{\rho}(x') \\ & + \int_0^t d\bar{t} \left[\bar{\Phi}_a(t-\bar{t}) \frac{\partial}{\partial x'} \mathcal{G}(x, x'; t) \Big|_{x'=a} \right. \\ & \left. - \bar{\Phi}_0(t-\bar{t}) \frac{\partial}{\partial x'} \mathcal{G}(x, x'; \bar{t}) \Big|_{x'=0} \right], \end{aligned} \quad (4.8)$$

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

O primeiro termo da Eq. (4.8) 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.

A linha preenchida em Fig.(4.1) corresponde à solução da Eq. (4.8) 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 é solução também da Eq. (4.8) para $\rho(0, t) = \rho(a, 0) = 0$, e a linha quebradiça corresponde à solução com a condição de contorno $\rho(0, t) = 0$ e $\rho(a, t) = \Phi(1 + t^{-\eta}/\Gamma(1-\eta))$ ($\Phi = 1$ e $\eta = 1/2$).

As figuras (4.1) e (4.2) 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 [40, 41]. Para o caso especial no qual $\Phi_0(t) = \Phi_a(t) = 0$ a solução da equação recai na solução encontrada em [42]. 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.

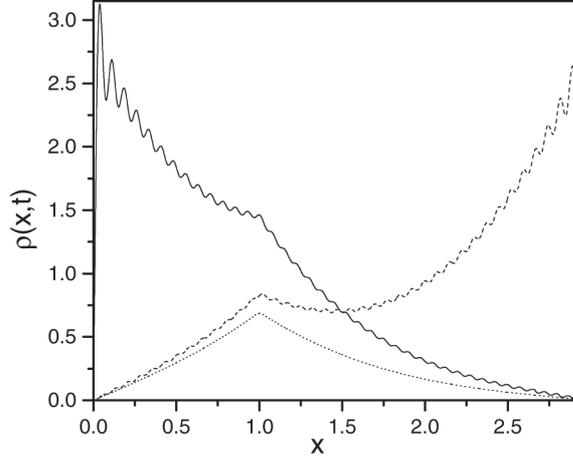


Figura 4.1: Comportamento de $\rho(x,t)$ versus x , que ilustra a Eq. (4.8) considerando, por simplicidade, $\gamma = 1/2$, $\mathcal{D} = 1$, $\mathcal{D}_\alpha = 0$, $a = 3$, $t = 0.1$ e $\rho(x,0) = \delta(x-1)$.

4.2 Equação de difusão fracionária: Caso bidimensional

Vamos agora analisar o caso bidimensional da Eq. (4.2) com simetria cilíndrica e sujeita às condições de contorno $\rho(a, \theta, t) = \tilde{\Phi}_a(\theta, t)$ e $\rho(b, \theta, t) = \tilde{\Phi}_b(\theta, t)$. Empregando o mesmo procedimento anterior, a solução da Eq. (4.2) pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \rho(r, \theta, t) = & -\frac{1}{\Gamma(1-\gamma)} \int_0^t d\bar{t} \frac{1}{(t-\bar{t})^\gamma} \int_0^{2\pi} d\theta' \int_a^b dr' r' \mathcal{G}(r, \theta; r', \theta'; t) \tilde{\rho}(r', \theta') \\ & + \int_0^t dt' \int_0^{2\pi} d\theta' \left[b \tilde{\Phi}_b(\theta', t-t') \frac{\partial}{\partial r'} \mathcal{G}(r, \theta; r', \theta'; t') \Big|_{r'=b} \right. \\ & \left. - a \tilde{\Phi}_a(\theta', t') \frac{\partial}{\partial r'} \mathcal{G}(r, \theta; r', \theta'; t-t') \Big|_{r'=a} \right], \end{aligned} \quad (4.9)$$

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 nossa função de Green fica dada por

$$\mathcal{G}(r, \theta; r', \theta'; t) = -\frac{\pi}{2} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \mathcal{N}_{mn} \Psi_{mn}(r) \Psi_{mn}(r') \cos(m(\theta - \theta')) \mathcal{Y}_{mn}(k_{mn}, t), \quad (4.10)$$

sendo $\Psi_{mn}(r) = J_m(k_{mn}r)N_m(k_{mn}a) - J_m(k_{mn}a)N_m(k_{mn}r)$ representado em termos das funções de Bessel de primeira e segunda espécie e k_{mn} são soluções da equação de autovalores $J_m(k_{mn}b)N_m(k_{mn}a) - J_m(k_{mn}a)N_m(k_{mn}b) = 0$. Similar à Eq. (4.8), o último termo da Eq. (4.9) representa o efeito de superfície, o qual dá a evolução temporal do sistema para uma condição inicial arbitrária. Uma ilustração gráfica de $\rho(r, \theta, t)$ pode ser

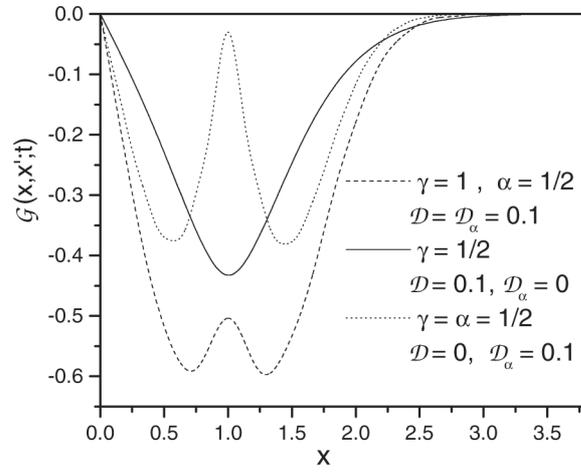


Figura 4.2: Comportamento de $\mathcal{G}(x, x'; t)$ versus x , que ilustra a Eq. (4.6) considerando, por simplicidade, $a = 5$, $x' = 1$, e $t = 1$.

vista abaixo.

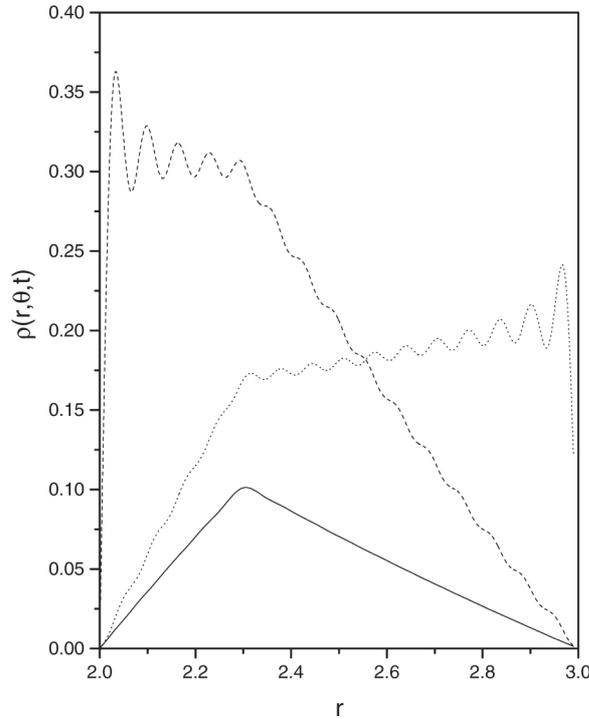


Figura 4.3: Comportamento de $\rho(r, \theta, t)$ versus r , que ilustra a Eq. (4.9) considerando, por simplicidade, $\gamma = 1/2$, $\mathcal{D} = 1$, $\mathcal{D}_\alpha = 0$, $\rho(r, \theta, 0) = (2/r)\delta(r - \tilde{r})$ com $\tilde{r} = 2.3$, $a = 2$, $b = 3$, e $t = 1$.

A linha preenchida corresponde à solução da Eq. (4.9) sujeita às condições de contorno $\rho(a, \theta, t) = \rho(b, \theta, t) = 0$. A linha pontilhada é solução também da Eq. (4.9) para $\rho(a, \theta, t) = 0$ e $\rho(b, \theta, t) = 2/(3\pi)$, e a linha quebradiça 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 concêntricas. Estes problemas têm sido investigados em conexão com a instabilidade flexo-elétrica [43], com a análise de instabilidade da orientação do diretor [44], e a transição de Fréedericksz ocorrendo na ausência do campo elétrico externo [45].

Discussões e Conclusões

Nesta dissertação abordamos extensões da equação de difusão que empregam derivadas fracionárias tanto na variável espacial como na variável temporal, conforme apresentado nos capítulos anteriores. 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 fracionárias. Outro fato que devemos ressaltar diz respeito às condições de contorno que usamos na análise destas equações, consideramos condições de contorno que se estendem por todo espaço como no caso das situações trabalhadas nos Cap. 2 e Cap. 3 e condições de contorno que limitam a região do espaço onde o sistema pode se difundir, como no caso do Cap. 4. Neste 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 estas equações de difusão diferem dos resultados encontrados com a equação de difusão usual e nos conduzem a uma situação em que as soluções sofrem uma dispersão anômala, fato este verificado através da variância que fica dada por $\sigma^2 \sim t^\gamma$ 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 não-usual das equações de difusão fracionárias pode ser explicado dentro do contexto de caminhantes aleatórios com espaço e tempo contínuos. De fato, estas equações têm como consequência a mudança das distribuições de tempo entre saltos que passa a adquirir um comportamento diferente do usual, caracterizado por uma relaxação exponencial, ou a mudança da distribuição de tamanho com que os saltos são dados. No caso em que as condições de contorno restringiam 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 que não estavam presentes quando consideramos situações que cobrem todo o espaço. Tais termos são essencialmente devidos à superfície que contorna o sistema.

Nossas perspectivas futuras são de investigar generalizações da equação de Schrödinger baseadas em derivadas fracionárias, presença de termos não-locais e/ou com a massa dependente da posição. Investigar conexões dos processos difusivos com a termodinâmica e a mecânica estatística, por outro lado, a estatística quântica que emerge deste formalismo também deverá ser investigada e aplicada a sistemas físicos de interesse, por exemplo, sistemas vítreos entre outros.

Funções Especiais

A.1 Operador fracionário de Riemann-Liouville

A integral fracionária de Riemann-Liouville é dada por [46]

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

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

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

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 $t_0 = -\infty$. Desta forma, a transformada 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 (A.5) 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 [18].

A.3 Funções de Fox e Mittag-Leffler

A.3.1 Funções de Fox

A classe das funções de Fox ou Função H, compreendem 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 [47, 3, 48, 49]. De acordo com a notação padrão, a função de Fox é definida como

$$\mathbf{H}_{p,q}^{m,n}(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\mathcal{L}} \mathcal{H}_{p,q}^{m,n}(s) z^s ds, \quad (\text{A.6})$$

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:

$$\mathcal{H}_{p,q}^{m,n}(s) = \frac{A(s)B(s)}{C(s)D(s)}, \quad (\text{A.7})$$

com

$$A(s) = \prod_{j=1}^m \Gamma(b_j - \beta_j s), \quad B(s) = \prod_{j=1}^n \Gamma(1 - a_j + \alpha_j s), \quad (\text{A.8})$$

$$C(s) = \prod_{j=m+1}^q \Gamma(1 - b_j + \beta_j s), \quad D(s) = \prod_{j=n+1}^p \Gamma(a_j - \alpha_j s) \quad (\text{A.9})$$

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

$$\mathbf{H}_{p,q}^{m,n}(z) = \mathbf{H}_{p,q}^{m,n} \left[z \left| \begin{array}{l} (a_j, \alpha_j)_{j=1,\dots,p} \\ (b_j, \beta_j)_{j=1,\dots,q} \end{array} \right. \right]. \quad (\text{A.10})$$

A condição para a existência da função \mathbf{H} pode ser feita examinando a convergência da integral (A.6), 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 $\{b_j, \beta_j\} (j = 1 \dots, q)$ [50]. Algumas das suas propriedades [18] foram empregadas em capítulos anteriores.

A.3.2 Mittag-Leffler

As funções especiais mais importantes usadas em cálculo fracionário são as funções 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 [51] generalizou a função de Mittag-Leffler a partir da introdução de um outro parâmetro; esta generalização é conhecida como função de Mittag-Leffler com dois parâmetros, tendo 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:

$$E_{\alpha,\beta}(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\Gamma(\alpha k + \beta)}. \quad (\text{A.11})$$

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

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

$$E_{\frac{1}{2},1}(iz) = e^{-z^2} [1 + \operatorname{erf}(iz)] = e^{-z^2} [\operatorname{erfc}(-iz)]. \quad (\text{A.12})$$

Em problemas envolvendo difusão anômala, as funções de Mittag-Leffler são usadas geralmente nas inversas de Laplace. Uma inversa conhecida na literatura [20] é dada por

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{j! u^{\alpha-\beta}}{(u^\alpha + a)^{j+1}} \right\} = t^{\alpha j + \beta - 1} E_{\alpha,\beta}^{(j)}(-at^\alpha). \quad (\text{A.13})$$

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

$$E_{\alpha,\beta}^{(j)}(y) = \frac{d^j E_{\alpha,\beta}(y)}{dy^j} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(j+n)! y^n}{n! \Gamma[\alpha(j+n) + \beta]}. \quad (\text{A.14})$$

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

$$E_{\alpha,\beta}^{(j)}(y) = H_{1,2}^{1,1} \left[-y \left| \begin{matrix} (0, 1) \\ \{1 - (\alpha j + \beta), \alpha\} \end{matrix} \right. \right], \quad (\text{A.15})$$

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

$$e^y = H_{0,1}^{1,0} \left[-y \left| \begin{matrix} (-) \\ (0, 1) \end{matrix} \right. \right]. \quad (\text{A.16})$$

A.4 Funções de Green

Este é um método de 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 [52].

A.4.1 Problema de Sturm-Liouville

Vamos supor que queremos resolver a equação diferencial não homogênea

$$Lu(x) \equiv \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{du(x)}{dx} \right] - q(x)u(x) = \varphi(x) \quad (\text{A.17})$$

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

$$\begin{aligned} vLu(x) &= \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{du(x)}{dx} \right] - q(x)u(x) = \varphi(x) \\ uLu(x) &= \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{du(x)}{dx} \right] - q(x)u(x) = \varphi(x), \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

subtraindo uma da outra

$$\int_a^b dx [vLu - uLv] = \left[p \left(v \frac{du}{dx} - u \frac{dv}{dx} \right) \right]_a^b, \quad (\text{A.19})$$

onde este é o conhecido *teorema de Green*.

Para resolver (A.17) para uma fonte comum $\varphi(x)$, nós introduzimos a chamada função de Green $G(x, x')$, na qual a solução para uma fonte pontual em x' :

$$LG(x, x') = \delta(x - x'), \quad (\text{A.20})$$

sendo $\delta(x - x')$ a função delta de Dirac. Aplicando o teorema de Green (A.19) a $u(x)$ e $v(x) = G(x, x')$ e usando (A.17), (A.20) e juntamente com a integral da função delta, trocando x por x' , a equação se torna

$$\begin{aligned} u(x) &= \int_a^b dx' G(x, x') \varphi(x') \\ &- \left[p(x') \left(G(x, x') \frac{du(x')}{dx'} - u(x') \frac{d}{dx'} G(x, x') \right) \right]_{x'=a}^b. \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

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

$$G(a, x') = G(b, x') = 0, \quad (\text{A.22})$$

esta condição elimina da Eq. (A.21) a quantidade desconhecida $du(x')/dx'$ em $x' = a, b$ e reduz a equação para

$$u(x) = \int_a^b dx' G(x', x) \varphi(x') + \left[p(x') u(x') \frac{d}{dx'} G(x', x) \right]_{x'=a}^b. \quad (\text{A.23})$$

Esta é a solução da Eq. (A.17) em termos de quantidades conhecidas.

A.4.2 Expansão das funções de Green em autofunções

Muitos problemas em física envolvem, de uma ou de outra maneira, operadores diferenciais do tipo Sturm-Liouville:

$$Lu_n = \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{du_n(x)}{dx} \right] - qu_n(x) = -\lambda_n \rho(x) u_n, \quad (\text{A.24})$$

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 nós podemos escolher as condições de contorno de forma que seja possível eliminar valores desconhecidos. Para equação acima escolhemos condições de contorno do tipo gerais

$$Au_n(a) + Bu'_n(a) = 0 \quad (\text{A.25})$$

$$Cu_n(b) + Du'_n(b) = 0 \quad (\text{A.26})$$

Suponha agora que nós desejamos resolver a equação diferencial não homogênea

$$Lu + \lambda\rho u = \varphi(x), \quad (\text{A.27})$$

com as condições de contorno

$$Au(a) + Bu'(a) = X \quad (\text{A.28})$$

$$Cu(b) + Du'(b) = Y. \quad (\text{A.29})$$

Aqui $\varphi(x)$ é uma função dada, assim como, X e Y são constantes dadas. Nós precisamos então encontrar uma função $G(x, x')$ que satisfaz a equação diferencial

$$LG(x, x') + \lambda\rho G(x, x') = \delta(x - x'). \quad (\text{A.30})$$

Deste modo, encontrando a função de Green, encontramos também a solução da equação diferencial não homogênea (A.30). As condições de contorno são

$$AG(a, x') + B \frac{d}{dx} G(x, x') \Big|_{x=a} = 0 \quad (\text{A.31})$$

$$CG(b, x') + D \frac{d}{dx} G(x, x') \Big|_{x=b} = 0. \quad (\text{A.32})$$

Em termos destas funções de Green $G(x, x')$, que é simétrica, a solução de (A.27) com condições de contorno dadas por (A.28) e (A.29) é

$$u(x) = \int_a^b dx' G(x, x') \varphi(x') \quad (\text{A.33})$$

$$- \left[p(x) \left(G(x, x') \frac{du(x')}{dx'} - u(x') \frac{d}{dx'} G(x, x') \right) \right]_{x'=a}^b ; \quad (\text{A.34})$$

onde é fácil verificar que a solução de (A.30), juntamente com (A.31) e (A.32) para $\mathcal{G}(x, x')$ é dada pela série

$$\mathcal{G}(x, x') = \sum_n \gamma_n(x') u_n(x). \quad (\text{A.35})$$

Desta forma, com a Eq. (A.30) e a condição de ortogonalidade, encontramos $\mathcal{G}(x, x')$ dado por

$$G(x, x') = \sum_n \frac{u_n(x) u_n(x')}{\lambda - \lambda_n}, \quad (\text{A.36})$$

onde $u_n(x)$ são as autofunções de (A.24).

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 senos de Fourier.

Referências Bibliográficas

- [1] D. Campos, V. Méndez and J. Fort, Phys. Rev. E **69**, 031115 (2004); B. O’Shaughnessy and I. Procaccia, Phys. Rev. Lett. **54**, 455 (1985); R. Metzler, W. G. Glöckle, T. F. Nonnenmacher, Physica A **211**, 13 (1994); L. Acedo and S. B. Yuste, Phys. Rev. E **57**, 5160 (1998).
- [2] D. S. F. Crothers, D. Holland Y. P. Kalmykov and W. T. Coffey, J. Mol. Liq. **114**, 27 (2004); H. Schriessel and 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 and S. W. Morris, Phys. Rev. Lett. **94**, 048002 (2005).
- [9] T. Kosztowicz, K. Dworecki, and St. Mrówczyński, Phys. Rev. Lett. **94**, 170602 (2005).
- [10] R. C. Lua and A. Y. Grosberg, Phys. Rev. E **72**, 061918 (2005).
- [11] 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).
- [12] V. Plerou, P. Gopikrishnan, L. A. N. Amaral, et al., Phys. Rev. E **62**, R3023 (2000).
- [13] C.-K. Peng, J. Mietus, J. M. Hausdorff, S. Havlin, H. E. Stanley and A. L. Goldberger, Phys. Rev. Lett. **70**, 1343 (1993).
- [14] H. Sher, E. W. Montroll, Phys. Rev. B **12**, 2455 (1975).

- [15] A. Ott et al., *Phys. Rev. Lett.* **65**, 2201 (1990).
- [16] 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 and the renormalization group* (Addison-Wesley Publishing Company, Inc., Reading, 1992).
- [17] M.F. Shlesinger, G. M. Zaslavsky e U. Frisch, *Lévy flights and related topics in physics* (Springer-Verlag, Berlin, 1994).
- [18] R. Metzler e J. Klafter, *Phys. Rep.* **339**, 1 (2000).
- [19] H. Risken, *The Fokker-Planck Equation*, (Springer, New York, 1984); C. W. Gardiner, *Handbook of Stochastic Methods: For Physics, Chemistry and the Natural Sciences* (Springer Series in Synergetics, New York, 1996).
- [20] I. Podlubny, *Fractional Differential Equations* (Academic Press, San Diego, 1999).
- [21] Uhlenbeck, G. E. and Ornstein, L. S. *Phys. Rev.* **36**, 823 (1930).
- [22] Montroll, E. W. and Weiss, G. J. *Math. Phys.* **6**, 167 (1965).
- [23] E. W. Montroll and M. F. shlesinger, in *Studies in Statistical Mechanics*, edited by J. L. Lebowitz and E. W. Montroll (North-Holland, Amsterdam, 1984), Vol. 11, p. 5.
- [24] R. Balescu, *Phys. Rev. E* **51**, 5 (1995).
- [25] A. Fick., *Annalen der Physik*, vol. 170, p. 59-86, 1855.
- [26] E. L. Cussler. *Diffusion - Mass Transfer in Fluid Systems*. Cambridge University Press, New York, 1984.
- [27] L. E. Reichl., *A Modern Course in Statistical Physics*, second edition. John Wiley & Sons Inc, New York, 1997.
- [28] Tomé, Tânia., *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade*, Edusp, (São Paulo, 2001).
- [29] N. Wax, *Selected Papers on Noise and Stochastic Processes*, Dover, New York, (1954).
- [30] S. R. Groot, P. Mazur, *Non-equilibrium Thermodynamics*, North-Holland, Amsterdam, (1969).
- [31] N. G. Van Kampen., *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*, North-Holland, Amsterdam, (1981).

- [32] Andrade. M. F., *Equações de Difusão Fracionárias e Não-Lineares: Soluções e Difusão Anômala*.
- [33] A. M. Mathai, R. K. Saxena and H. J. Haubold., *The H-function with Application in Statistics and other Disciplines* (Wiley Eastern, New Delhi, 1978).
- [34] B. I. Henry, T. A. M. Langlands, and S. L. Wearne, Phys. Rev. E **74**, 031116 (2006).
- [35] A. Schot, M. K. Lenzi, L. R. Evangelista, L. C. Malacarne, R. S. Mendes and E. K. Lenzi, Phys. Lett. A **366**, 346 (2007).
- [36] V. Latora, A. Rapisarda and S. Ruffo, Phys. Rev. Lett. **83**, 2104 (1999); V. Latora, A. Rapisarda and C. Tsallis, Phys. Rev. E **64**, 056134 (2001).
- [37] A. Caspi, R. Granek, and M. Elbaum, Phys. Rev. Lett. **85**, 5655 (2000); A. Caspi, R. Granek, and M. Elbaum, Phys. Rev. E **66**, 011916 (2002).
- [38] A. V. Chechkin, R. Gorenflo, and I. M. Sokolov, Phys. Rev. E **66**, 046129 (2002); I. M. Sokolov, A. V. Chechkin, and J. Klafter, Acta Phys. Pol. B **35**, 1323 (2004); F. Mainardi and G. Pagnini, J. Comput. Appl. Math. **207**, 245 (2007).
- [39] T. A. M. Langlands, Physica A **367**, 136 (2006).
- [40] R. S. Zola, E. K. Lenzi, L. R. Evangelista, and G. Barbero, Phys. Rev. E **75**, 042601 (2007); C. A. Yednak, F. C. Freire, E. K. Lenzi, and L. R. Evangelista, Phys. Rev. E **72**, 042701 (2005).
- [41] G. Barbero and L. R. Evangelista, *Adsorption Phenomena and Anchoring Energy in Nematic Liquid Crystals* (Taylor & Francis, London, 2006).
- [42] R. Rossato, M. K. Lenzi, L. R. Evangelista, and E. K. Lenzi, Phys. Rev. E **76**, 032102 (2007).
- [43] I. K. Kotov, M. V. Khazimullin, and A. P. Krekhova, Mol. Cryst. Liq. Cryst. Sci. Technol., Sect. A **366**, 2737 (2001).
- [44] H. Tsuru, J. Phys. Soc. Jpn. **59**, 1600 (1990).
- [45] D. R. M. Williams and A. Halperin, Phys. Rev. E **48**, R2366 (1993).
- [46] B. I. Henry and T. A. M. Langlands, Phys. Rev. E **74**, 031116 (2006).
- [47] V. V. Anh, N. N. Leonenko, J. Statistics. Phys. **104**, 1349-1387, (2001).
- [48] A. A. Kilbas, M. Saigo, *On the H functions*, J. Appl. Math. Stochastic Anal, **12**, 191-204, (1999).
- [49] A. A. Kilbas, M. Saigo, *H-transform. Theory and Applications*, CRC Press, Boca Raton, FL, (2004).

-
- [50] Francesco Mainardi, Gianni Pagnini and R. K. Saxena, *J. Comput. Appl. Math*, **178**, (2005)
- [51] R. P. Argawal, *A Propos d'une Note de M. Pierre Humbert*, *C. R. Scances Acad. Sci.*, **236**, 2031-2032, (1953).
- [52] Machado, Kleber Daum., *Teoria do Eletromagnetismo*, UEPG, (Ponta Grossa-PR) 2000.