
UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ
PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Aluizio Torres da Silva

**Problemas de Contorno Envolvendo as
Equações de Difusão Normal, Fracionária e
Fracionária Não-Linear**

*Tese apresentada à Pós-
Graduação em Física da
Universidade Estadual de
Maringá para obtenção do
título de Doutor em Física.*

Orientador: Prof. Dr. Ervin Kaminski Lenzi

Co-Orientador: Prof. Dr. Luiz Roberto Evangelista

Maringá
2009

Agradecimentos

Deus, que é caminho, verdade e vida, por ter mantido esta chama acesa e na direção desejada, mesmo quando ventos desfavoráveis tentaram apagá-la e obstáculos que impediam de trafegar no caminho correto se interpuseram, meu louvor e ação de graças.

À Imaculada Conceição de Maria, por ter orientado-me no rumo correto em minhas decisões, minha eterna devoção.

À minha família, pela compreensão dos momentos em que necessitei para os meus estudos, principalmente à Cidinha, esta companheira de todas as horas.

Ao departamento de Física, pela compreensão e apoio durante o transcorrer dos estudos.

À Akiko, pela paciência e por ser prestativa em todos os momentos.

Aos colegas Roberto e Rodolfo, que sempre me auxiliaram em minhas dúvidas.

Ao meu co-orientador, Prof. Luiz Evangelista, que nunca me negou a sua ajuda, mesmo quando os momentos não eram satisfatórios, sempre me deu força nesta etapa da minha vida, só Deus poderá retribuir-lhe; obrigado meu amigo e professor.

Ao meu orientador Prof. Ervin, por ser essa pessoa maravilhosa que me deu força, apoio e ajuda sempre que necessitei.

"Über Diffusion"

"...Diffusion von Wasser durch Membranen nicht nur ein wesentlicher Faktoren des Lebens ist, sondern auch einen extrem interessanten physikalischen Prozess darstellt, der viel mehr Beachtung durch Physiker erfahren sollte als es bisher der Fall ist ..."

Adolf Fick (1829 - 1901)

Sumário

1	Difusão	14
1.1	Introdução	14
1.2	Difusão unidimensional	19
1.2.1	Aplicação da transformada de Fourier à equação de difusão	20
1.3	Equação de difusão e a função de Green	26
2	Difusão Anômala	30
2.1	Introdução	30
2.2	Equação linear fracionária unidimensional: derivada no tempo	32
2.2.1	Meio finito (limitado): barreiras absorventes	36
2.2.2	Meio finito (limitado): barreiras refletoras	37
2.2.3	Sistema Infinito	38
2.3	Equação linear fracionária unidimensional: derivada no espaço	42
3	Equação de difusão fracionária não linear com força externa e termo absorvente	46
3.1	Introdução	46
3.2	Equação de difusão fracionária não linear com dependência temporal	49
3.3	Equação de difusão fracionária não linear com dependência espacial	51

4	Equação de difusão fracionária com simetria radial	60
4.1	Introdução	60
4.2	Equação de difusão fracionária	62
5	Conclusão e considerações finais	71
A	Funções Especiais	73
A.1	Operador Fracionário de Riemann-Liouville	73
A.2	Derivada Fracionária de Caputo	75
A.3	Função H	76
A.4	Funções de Mittag-Leffler	78
A.5	Função de Green	79
A.5.1	Problema de Sturm-Liouville	80
A.5.2	Expansão da Função de Green em Autofunções	81
B	Passeio aleatório	84
C	Difusão Fracionária Radial em um Cilindro	87
	Bibliografia	97

Lista de Figuras

1.1	<i>Um tubo estreito de comprimento infinito com água, onde foi introduzida uma quantidade de corante em uma posição z_0.</i>	21
1.2	<i>As curvas mostram a evolução temporal da distribuição $\rho(z, t)$ no regime difusivo unidimensional. (a) a distribuição para diferentes intervalos de tempos; (b) para valor diferentes do coeficiente de difusão; (c) é a área que está variando; (d) para diferentes valores de massa.</i>	25
1.3	<i>Volume V delimitado por uma superfície S.</i>	26
1.4	<i>O gráfico descreve o comportamento da função $G(r, t)$ em relação a r para diferentes intervalos de tempo.</i>	29
2.1	<i>Comportamento de $(4\pi Dt^\gamma)^{1/2} \mathcal{G}_\gamma(x, t)$ versus $x/(4Dt^\gamma)$, para valores típicos de γ. Para γ igual a 0,5 e 0,8 difusão anômala e para γ igual 1,0 difusão normal.</i>	42
2.2	<i>Comportamento de $(Dt)^{\frac{1}{\mu}} L_\mu(x, t)$ versus $x/(Dt)^{\frac{1}{\mu}}$, para valores típicos de μ. A derivada fracionária na variável espacial caracteriza um processo superdifusivo do tipo Lévy.</i>	42

3.1	Mostra o comportamento de $[\Phi(t)]^d \rho(r, t)$ versus $r/\Phi(t)$ para valores característicos de μ, μ', θ e η na ausência de termo absorvente (fonte). Por simplicidade, estamos considerando $n = 1$ e $d = 1$. Observa-se que, dependendo da escolha específica destes parâmetros, podemos ter uma cauda compacta (a) ($b = -1$) ou uma cauda longa (b) ($b = 1$).	56
4.1	Comportamento de $\mathcal{G}(r, t)$ versus r obtido a partir da Eq. (4.9) para um valor típico de γ e η . Para simplificar, estamos considerando $D = 1, t = 1, \mathcal{N} = 3, a = 1$ e $b = 3$	66
4.2	Comportamento de $\mathcal{S}(t)$ versus t a fim de ilustrar a Eq. (4.15) para valores típicos de \mathcal{N}, θ e γ . Por simplicidade, consideramos as condições de contorno $\rho(a, t) = 0$ e $\rho(b, t) = 0, D = 1, a = 1, b = 3$, e $\rho(r, 0) = \delta(r - 3/2)/r^{\mathcal{N}-1}$	70
B.1	Modelo de caminhantes aleatórios com espaço e o tempo contínuos (CTRW). À esquerda, processo CTRW sobre uma rede em duas dimensões, uma generalização da situação Browniana. O tempo de espera é simbolizado por círculos, onde o diâmetro de cada círculo é proporcional ao tempo de espera que deve ser gasto em um determinado sítio, antes que o evento do próximo salto ocorra. O comprimento dos saltos tem valor fixo. À direita, temos o diagrama (x, t) de um processo CTRW unidimensional [13].	85
C.1	Difusão em um cilindro de raio R	87
C.2	Varição da concentração com a distância, conforme a Eq. C.21	96
C.3	A amostra total difundida em relação ao parâmetro β , conforme a Eq. C.29	96
C.4	O segundo momento da distribuição da concentração em função do parâmetro β , conforme a Eq. (C.32).	97

Resumo

Este trabalho versa sobre difusão anômala, dando ênfase a problemas de contorno envolvendo as equações de difusão normal, fracionária e fracionária não linear. Investigamos várias equações de difusão que estendem do caso usual até a difusão fracionária não linear em \mathcal{N} -dimensões, para a qual consideramos um coeficiente de difusão com dependência espacial e temporal. Para essas equações, obtivemos uma nova classe de soluções, que está relacionada com o comportamento da cauda da função. A solução desta equação pode ser expressa em termos das funções q -exponenciais e q -logarítmicas, presentes no contexto da termoestatística generalizada (formalismo de Tsallis). Também consideramos uma força externa e um termo de fonte cuja solução obtida mostra uma difusão não usual na distribuição e, dependendo da escolha dos parâmetros, pode apresentar uma cauda longa ou compacta, que pode estar relacionada à difusão anômala. Neste sentido, pensando no formalismo de caminhantes aleatórios, correspondem uma mudança na distribuição do tempo de espera entre saltos. Em um segundo momento, analisamos um contexto com equação de difusão fracionária em \mathcal{N} -dimensões com simetria radial, limitada a uma região e sujeita às condições de contornos pertinentes. Também estudamos a mudança originada nesta equação pela inclusão do coeficiente de difusão com dependência temporal e o termo de reação e, com isso, produzindo diferentes regimes difusivos na solução. Esperamos que os resultados encontrados sejam úteis para estudar sistemas onde a difusão anômala esteja presente.

Abstract

This work is concerned with anomalous diffusion, emphasizing boundary-value problems involving normal, fractional and fractional non-linear diffusion equations. We investigate several diffusion equations that extend the usual case to the fractional non-linear diffusion equation in \mathcal{N} -dimensions, for which we consider a diffusion coefficient with spatial and time dependencies. For these equations, we obtain a new class of solutions, which is related to the behavior of the tail of the function. The solutions of these equations can be expressed in terms of q-exponential and q-logarithmic functions, present in the context of the generalized thermostatistics (Tsallis formalism). In addition, we consider the effect of an external force and a source term whose obtained solution exhibits an unusual spreading in the distribution and, depending on the choice of parameters, may lead to long or compact tail, which can be related to anomalous diffusion. In this sense, having in mind the random walk formalism, this scenario may correspond to a change in the distribution of waiting time between jumps. In a second moment, we analyze a framework with fractional diffusion equation in \mathcal{N} -dimensions with radial symmetry, confined to a limited region and subjected to appropriate boundary conditions. We study furthermore the changes arising from the inclusion of a time dependent diffusion coefficient and a reaction term in this equation, thus producing different diffusion regimes in the solution. We expect that the obtained results may be useful for studying systems where anomalous diffusion is present.

Introdução

Neste trabalho, é desenvolvido um estudo sobre difusão anômala, e pretendemos estabelecer de uma forma geral uma classe de soluções para a equação de difusão não linear em \mathcal{N} -dimensões com derivada fracionária na variável temporal, e também considerando a simetria radial do problema em estudo, bem com a ligação destas equações com outros formalismos, tais como: caminhante aleatório com tempo contínuo e a abordagem de Langevin. A difusão anômala é um tema muito amplo e seu estudo envolve várias vertentes; neste sentido, vamos situar os tópicos desenvolvidos neste estudo partindo da difusão normal.

O processo de difusão é um fenômeno muito comum na natureza e, em geral, ocorre quando um sistema encaminha-se para o estado de equilíbrio. Seja ela normal ou anômala, é o resultado de um movimento totalmente irregular em nível microscópico, devido às interações entre seus constituintes e o meio no qual estes estão, mas apresentando uma regularidade macroscópica. Um dos processos difusivos muito comuns na natureza, é o movimento Browniano.

A difusão pode ser vista como um processo no qual potencial químico tende a se igualar em todos os pontos do sistema com o passar do tempo; ela deve ocorrer das regiões onde o potencial químico de uma dada substância é maior para as regiões onde este potencial seja menor, tais como: a difusão de um soluto num solvente, de fumaça através do ar, dos nêutrons num reator nuclear, dos elétrons através de um condutor, do calor através de uma superfície. Em todos esses processos, ocorre a difusão de uma substân-

cia através de outra quando o sistema não está em equilíbrio. Uma grande variedade de problemas difusivos na natureza, normalmente os referidos como difusão normais, são satisfatoriamente descritos pelo equação linear de Fokker-Planck [1].

Entretanto, existem situações em que o processo difusivo se diferencia das características de um movimento Browniano, ou seja, da difusão normal. Neste caso, a difusão será considerada anômala, pois houve um desvio no seu comportamento. Um marco no estudo da difusão anômala é o tratado de Richardson sobre difusão turbulenta, de 1926 [2]. Já no contexto da teoria de transportes, esse tipo de difusão tem sido mais largamente estudado desde o final da década de 60. Por outro lado, questões relacionadas à difusão anômala têm-se mostrado de grande interesse e aplicação em várias áreas do conhecimento, tais como: física, engenharia, biologia e economia. Esse tipo de difusão ocorre tipicamente em situações como transporte de um fluido através de um meio poroso [3], histograma obtido a partir das batidas do coração de um indivíduo saudável [4], nas flutuações de sistemas financeiros [5] e micelas dissolvidas em água salgada [6]. Na maioria das vezes em que está presente a difusão anômala, como aquelas mencionadas acima, podem ocorrer duas situações:

- (i) a variância pode não ser finita, por exemplo, a do tipo Lévy, embora apresente um índice bem definido que caracteriza o comportamento anômalo;
 - (ii) a difusão anômala correlacionada, que apresenta um segundo momento ($\langle z^2 \rangle$) finito .
- Uma grande parte dos processos de difusão que se comportam de maneira anômala tem como característica

$$\langle z^2 \rangle \propto t^\mu$$

onde $\langle z^2 \rangle$ é o deslocamento quadrático médio ou segundo momento, com $\mu < 1$ para um processo sub-difusivo, $\mu = 1$ descrevendo um processo de difusão normal e $\mu > 1$ correspondendo ao processo de superdifusão. A equação dinâmica que interpola tanto o processo de difusão que se comporta de maneira anômala, do tipo correlacionado (segundo momento finito), bem como o de Lévy, em que o segundo momento diverge, na presença

de uma força externa $F(r, t)$ e de um termo de fonte externa $\alpha(t)$ [7], é da forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho(r, t) &= \frac{\partial}{\partial |r|} \left\{ D(r, t) [\rho(r, t)]^\gamma \frac{\partial^{\mu-1}}{\partial |r|^{\mu-1}} [\rho(r, t)]^\nu \right\} \\ &- \frac{\partial}{\partial t} \{ F(r) \rho(r, t) \} + \alpha(t) [\rho(r, t)]^{\mu'} \end{aligned}$$

onde $\rho(r, t)$ é a função densidade de probabilidade, $D(r, t)$ é o coeficiente de difusão dependente do espaço e do tempo, $\partial^{\mu-1}/\partial |r|^{\mu-1}$ é a derivada fracionária de Riemann-Liouville, $F(r)$ é uma força externa, $\alpha(t)$ um termo de reação e $\nu, \gamma, \theta, \mu, \mu' \in \mathbb{R}$.

Caminhos aleatórios, equação mestra e equações generalizadas de Langevin podem ser relacionadas à difusão anômala correlacionada (segundo momento finito) e de Lévy. Entretanto, o emprego de equações diferenciais parciais à descrição da difusão anômala proporciona um tratamento mais simples quando fontes (ou sumidouros) e campos externos forem aplicados ao sistema.

De forma geral, a difusão usual é descrita por um modelo local, ou seja, em pequenas escalas de tempo; a evolução da função densidade em uma dada posição é afetada apenas por pontos próximos no espaço. Em alguns casos, porém, essa suposição não se aplica, levando a inconsistências na definição do coeficiente de difusão. Dito de outra maneira, mesmo em pequenas escalas de tempo a evolução da função densidade em uma dada posição pode ser afetada por pontos distantes no espaço, caso, por exemplo, do transporte turbulento na camada limite convectiva. Uma ferramenta que pode ser usada para descrever esta última classe de fenômenos é baseada no cálculo fracionário, no qual operadores diferenciais não locais podem ser empregados para levar em conta as correlações espaciais. Este procedimento, que leva a equações de difusão fracionárias, tem sido amplamente investigado para descrever difusão anômala. As equações de difusão fracionárias são frequentemente consideradas como um procedimento alternativo para modelos de caminhada aleatória com tempo contínuo, equações de Langevin generalizadas ou equações mestra generalizadas. Assim, equações de difusão fracionárias, ou equações de Fokker-Planck fracionárias, têm sido consideradas por diversos autores com

diferentes propósitos, seja com derivadas fracionárias temporais, com derivadas fracionárias espaciais ou mesmo incluindo derivadas fracionárias temporais e espaciais, com termo absorvente (fonte) e força externa aplicada ao sistema [8]. A termoestatística generalizada, baseada na entropia não extensiva de Tsallis, aparenta ser um ambiente natural tanto para a difusão anômala correlacionada como para a difusão anômala do tipo Lévy [9].

A estrutura deste trabalho está desenvolvida na seguinte forma: No primeiro capítulo, faz-se uma abordagem da difusão normal utilizando diferentes ferramentas, tais como: método de separação de variáveis, aplicação da transformada de Fourier e usando as propriedades da função de Green. Mas, em ambos os casos, obtemos o mesmo resultado que é uma distribuição gaussiana [10–12].

No segundo capítulo, abordamos o processo difusivo anômalo que emprega derivadas fracionárias tanto nas variáveis temporais quanto espacial. No primeiro caso, trabalhamos com a difusão anômala correlacionada, que possui o segundo momento finito e que emprega a derivada de Riemann-Liouville, cuja aplicação ocorre em várias situações de interesse físico, tais como, relaxação ao equilíbrio em sistemas com memória temporal longa (por exemplo, cadeias de polímeros e membranas) [13], na descrição de transporte anômalo em sistemas desordenados [14] e modelagem de processos dinâmicos não markovianos em proteínas [15]; neste processo difusivo, suas soluções estão associadas a uma distribuição do tipo Boltzmann-Gibbs [16]. No segundo caso, trabalhamos com um processo difusivo cujo segundo momento não é finito, sendo caracterizado pelas distribuições de Lévy, solução que satisfaz o teorema de Lévy-Gnedenko [17], e está relacionada com a distribuição que emerge da termoestatística não extensiva.

No terceiro capítulo, dedicamos nosso trabalho ao estudo de soluções para a equação de difusão fracionária não linear em \mathcal{N} -dimensões, que surge a partir da equação da continuidade pela incorporação de um termo absorvente. A solução obtida mostra uma difusão não usual na distribuição e que também apresenta uma cauda compacta ou longa que pode estar relacionada à difusão anômala. Além disso, expressamos nosso resultado em termos das funções q -exponencial e q -logarítmica presentes no formalismo de Tsallis [18].

Finalmente, no quarto capítulo, fazemos aplicações da equação fracionária na

difusão anômala, e a ligação dela com outros formalismos; a motivação para esse estudo é compreender suas aplicações num contexto onde reina um comportamento não convencional [19].

Em resumo, o objetivo deste trabalho foi o de procurar soluções exatas para a equação de difusão fracionária em dois contextos gerais. No primeiro, consideramos um sistema infinito com simetria radial, tanto na presença de fontes (campos externos) quanto na ausência desses termos, para uma situação descrita por uma equação não-linear. No segundo contexto, a equação de difusão fracionária foi resolvida para um sistema limitado por duas superfícies cilíndricas. Nesse último caso, as paredes que limitam o sistema apresentam condições de contorno inomogêneas e o fenômeno de adsorção pôde ser incorporado ao formalismo. Este trabalho foi todo ele desenvolvido no Departamento de Física da Universidade Estadual de Maringá, no âmbito do grupo de física teórica.

Capítulo 1

Difusão

Um fenômeno físico muito importante é o da difusão de alguma substância através de outra. Como exemplos, a difusão de um soluto num solvente, de fumaça através do ar, dos nêutrons num reator nuclear, dos elétrons através de um condutor, do calor através de uma superfície. Todos esses processos envolvem difusão, e assim, é relevante obter uma equação que os descreva.

1.1 Introdução

Fisicamente, ocorre difusão de uma substância através de outra quando o sistema não está em equilíbrio. Por exemplo – como se discute na seção 1.2.1– quando colocamos algumas gotas de corante em água, vemos que inicialmente a água muda de cor apenas numa região pequena, mas, com o passar do tempo, toda a água fica colorida e homogênea. Outro exemplo ocorre com um perfume aberto num canto de uma sala. Após um certo tempo, toda a sala fica perfumada. Tanto o corante como o perfume se difundem através de um meio e, quando esse meio fica homogêneo, a difusão cessa. Por fim, outro exemplo ocorre com a corrente elétrica, que circula até que seja alcançado um equilíbrio de cargas entre os condutores.

No fenômeno da difusão, a distribuição espacial de moléculas não deve ser homogênea; deve existir uma diferença de potencial químico que pode se traduzir em um gradiente

ou diferença de concentração entre dois pontos do sistema. Portanto, uma grandeza relevante ao nosso estudo é a concentração ou, também, a densidade da substância em questão. Essa grandeza deve ser medida em **quantidade** por unidade de volume, sendo **quantidade** uma grandeza relevante associada à substância específica. Nos casos do corante e do perfume, essa **quantidade** seria a massa, e o número de elétrons para a corrente elétrica. Esta concentração, que pode variar tanto no tempo como na posição, pode ser representada, de uma forma geral, por

$$\rho = \rho(\mathbf{r}, t)$$

onde \mathbf{r} reúne toda a parte espacial. Nosso objetivo é obter uma equação diferencial que envolva essa grandeza.

A primeira equação que podemos extrair envolve a seguinte verificação física: se tivermos um certo volume V fechado (mas não necessariamente fixo) no espaço e se nesse volume for colocada uma substância com densidade ρ , os processos difusivos que ocorrem dentro do volume serão tais que a quantidade total de substância permanece constante, sendo, todavia, permitida a variação tanto do volume V quanto de $\rho(\mathbf{r}, t)$. Vamos considerar uma quantidade pequena dessa substância, que representaremos por ΔQ e que pode ser escrita como

$$\rho = \frac{\Delta Q}{\Delta V} \implies \Delta Q = \rho \Delta V$$

onde ΔV é o pequeno volume ocupado por essa substância. Formalmente, $\Delta Q \rightarrow 0$ e $\Delta V \rightarrow 0$. Esse ΔV não é fixo e ele pode variar à medida que a substância se difunde.

A situação física de conservação da quantidade de substância, descrita acima, pode ser expressa matematicamente como

$$\frac{d}{dt} \Delta Q = 0$$

que resulta na equação

$$\Delta V \frac{d\rho}{dt} + \rho \frac{d}{dt} \Delta V = 0 \quad (1.1)$$

Como a derivada temporal total de ρ é dada por

$$\frac{d\rho(\mathbf{r}, t)}{dt} = \frac{\partial\rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \frac{\partial\rho(\mathbf{r}, t)}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial\rho(\mathbf{r}, t)}{\partial y} \frac{dy}{dt} + \frac{\partial\rho(\mathbf{r}, t)}{\partial z} \frac{dz}{dt} \quad (1.2)$$

e como

$$\nabla\rho = \mathbf{i} \frac{\partial\rho}{\partial x} + \mathbf{j} \frac{\partial\rho}{\partial y} + \mathbf{k} \frac{\partial\rho}{\partial z}$$

a expressão (1.2) fica

$$\frac{d\rho(\mathbf{r}, t)}{dt} = \frac{\partial\rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla\rho \quad (1.3)$$

onde \mathbf{v} é a velocidade com que essa massa da substância se difunde. Lembrando que o divergente de \mathbf{v} é

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z}$$

obtemos

$$\frac{d}{dt} \Delta V = \Delta V \nabla \cdot \mathbf{v} \quad (1.4)$$

Reunindo as equações (1.1), (1.2) e (1.3), encontramos

$$\frac{\partial\rho(\mathbf{v}, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla\rho + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (1.5)$$

Utilizando a relação vetorial

$$\nabla \cdot (\psi \mathbf{A}) = \mathbf{A} \cdot \nabla\psi + \psi \nabla \cdot \mathbf{A}$$

podemos escrever

$$\nabla \cdot [\rho \mathbf{v}] = \rho \nabla \cdot \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho \quad (1.6)$$

e, com isso temos

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

que independe do volume considerado. A grandeza

$$\mathbf{j} = \rho \mathbf{v}$$

é uma **corrente** de difusão, e ela é a quantidade de substância que passa através de uma certa área do meio na unidade de tempo. Ela é uma grandeza vetorial, pois é necessário representar a direção e o sentido dessa **corrente**. Com esta definição, obtemos

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (1.7)$$

que vale para qualquer volume e geometria considerado. Fisicamente, isso significa o seguinte: como não há nenhuma fonte ou sorvedouro que faça com que em algum ponto a substância que se difunde seja criada ou destruída, se num certo volume infinitesimal (agora considerado fixo) a densidade aumenta com o tempo, é porque uma certa quantidade de substância entrou através da superfície fechada que envolve esse volume. Por outro lado, se a densidade diminui, um pouco da substância sai através da superfície que delimita o volume. Portanto, quando $\frac{\partial \rho}{\partial t} > 0$, há um fluxo de substância direcionado para dentro do volume, e quando $\frac{\partial \rho}{\partial t} < 0$, o fluxo é direcionado para fora.

O divergente, que está relacionado a uma função vetorial, **mede o fluxo** dessa função através de uma dada área que delimita uma certa região no espaço, que pode ser fechada ou aberta. Quanto maior for o divergente, maior será o fluxo da grandeza representada pela função vetorial, e se for positivo, esse fluxo será para fora da região, enquanto que,

se for negativo, o fluxo ocorrerá para dentro da região. Portanto, quando no volume infinitesimal a **corrente** de difusão é direcionada para dentro do volume, entra um pouco de substância no volume, e o divergente da **corrente** de difusão é negativo. Quando a **corrente** é direcionada para fora do volume, sai um pouco de substância, e o divergente é positivo. A conclusão é que os sinais de $\nabla \cdot \mathbf{j}$ e de $\frac{\partial \rho}{\partial t}$ são opostos. Além disso, a substância que entra ou que sai não se perde; ela passa através da superfície fechada que delimita o volume infinitesimal, para dentro ou para fora. Portanto, para cada volume infinitesimal vale a Eq. (1.7), que é chamada equação de continuidade. Essa equação exprime o fato de que não há perda de substância dentro de um volume V ; o que ocorre são transferências de substância entre os volumes infinitesimais dentro de V .

Como a difusão ocorre das regiões de maior concentração, ou maior densidade, para as de menor concentração, ou menor densidade, então aparece a **corrente** de difusão, que representa esta passagem da substância através do meio. O gradiente de uma função define a direção e o sentido da maior variação **positiva** da função. Assim, podemos relacionar a corrente, ou densidade de corrente, de difusão, com o gradiente da densidade ρ , com sinal trocado, ou seja,

$$\mathbf{j} = -D\nabla\rho \quad (1.8)$$

onde D é o coeficiente de difusão. O sinal negativo da Eq. (1.8) significa que a difusão ocorre na direção de diminuição da concentração da substância. A Eq. (1.8) é conhecida com a primeira lei de Fick, é uma equação fenomenológica válida para uma grande classe de fenômenos de difusão. A primeira lei de Fick, que relaciona o fluxo da substância com o gradiente de concentração, descreve o processo de difusão sob condições de *estado estacionário*, ou seja, o gradiente de concentração não varia com o tempo. No entanto, no estudo da difusão, tem-se interesse na variação da concentração da substância com o tempo e com distância.

A segunda lei de Fick representa a velocidade de alteração da concentração de soluto

em função do tempo e do deslocamento. Esses dois fatores são importantes na determinação do coeficiente de difusão de qualquer soluto em diferentes sistemas. Através da união da equação da continuidade (1.7) e da primeira lei de Fick Eq. (1.8), temos,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \nabla^2 \rho \quad (1.9)$$

que é a *equação da difusão*, na ausência de reação.

1.2 Difusão unidimensional

Considerando um sistema de coordenadas espaciais unidimensional, a equação da difusão se escreve:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(z, t) = D \frac{\partial^2}{\partial z^2} \rho(z, t) \quad (1.10)$$

Supondo uma solução separável na forma $\rho(z, t) = Z(z)T(t)$, obtemos

$$\frac{1}{T} \frac{dT}{dt} = D \left(\frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dz^2} \right) = -\beta^2$$

onde $-\beta^2$ é uma constante de separação, o sinal de menos na constante é para satisfazer as condições de contorno, que requer a existência de um regime estacionário para tempos longos. Agora temos duas equações diferenciais para serem revolvidas separadamente

$$\frac{1}{T} \frac{dT}{dt} = -\beta^2 \quad (1.11)$$

e

$$D \frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dz^2} = -\beta^2 \quad (1.12)$$

Fazendo $\beta = \omega_\beta \sqrt{D}$, a solução de (1.12) pode ser escrita na forma geral:

$$Z(z) = Ae^{i\omega_\beta z} + Be^{-i\omega_\beta z} \quad (1.13)$$

e a solução completa será:

$$\rho(z, t) = Z(z)T(t) = [Ae^{i\omega_\beta z} + Be^{-i\omega_\beta z}]T_0 e^{-\beta^2 t} \quad (1.14)$$

Incorporando T_0 às outras constantes, obtemos

$$\rho(z, t) = [A \cos \omega_\beta z + B \sin \omega_\beta z] e^{-\beta^2 t} \quad (1.15)$$

Estas são as soluções típicas da equação de difusão (1.10) em uma dimensão. Dependendo das condições de contorno, uma solução geral pode ser obtida na forma:

$$\rho(z, t) = \sum_{\beta} [A \cos \omega_\beta z + B \sin \omega_\beta z] e^{-\beta^2 t} \quad (1.16)$$

A solução (1.16) é relevante, por exemplo, em um sistema físico limitado ao longo da direção z e com $\rho(z, t)$ podendo assumir valores bem definidos no contorno [12, 20, 21].

1.2.1 Aplicação da transformada de Fourier à equação de difusão

As soluções para cada problema em particular dependem das condições auxiliares. Consideremos, por exemplo, o processo difusivo que ocorre num sistema cilíndrico muito

longo, que vamos considerar como sendo infinito e que tem uma área de seção lateral A , e está cheio de água. No instante $t = 0$, introduzimos no cano uma certa quantidade de corante em um certo ponto z_0 (distante de ambos os extremos do cano). Desejamos achar a concentração do corante em um instante qualquer posterior.

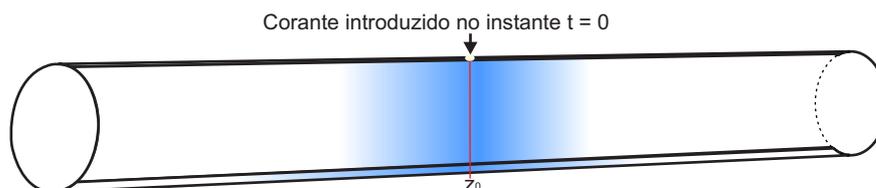


Figura 1.1: Um tubo estreito de comprimento infinito com água, onde foi introduzida uma quantidade de corante em uma posição z_0 .

Podemos idealizar o problema físico supondo um cano infinitamente longo conforme a Fig. 1.1. Além disso, como o diâmetro é pequeno, podemos desconsiderar as variações da concentração do corante sobre uma seção reta do cano e a concentração pode ser tratada como função somente de duas variáveis, z e t :

$$\rho = \rho(z, t) \quad (1.17)$$

Esta função satisfaz à equação de difusão em uma dimensão (1.10). As condições iniciais podem ser idealizadas pela afirmativa de que $\rho(z, 0)$ é nula em todos os pontos, exceto sobre a seção reta definida por $z = z_0$, onde foram introduzidos M gramas do corante. Assim, para expressar a densidade no tempo inicial é conveniente recorrer às funções delta de Dirac, ou seja,

$$\rho(z, 0) = \frac{M}{A} \delta(z - z_0) \quad (1.18)$$

onde M é a massa do corante e A é a área de seção transversal do cano.

As condições de contorno para este problema podem ser formuladas por meio da exigência

$$\rho(+\infty, t) = \rho(-\infty, t) = 0$$

Podemos resolver a equação (1.18) mediante a integração da densidade em todo o volume, ou seja,

$$\int_V \rho(z, 0) dV = M \quad (1.19)$$

que dá a massa total do corante.

A transformada de Fourier da densidade é

$$\widehat{\varrho}(k, t) = \widehat{\varrho}\{\rho(z, t)\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(z, t) e^{ikz} dz \quad (1.20)$$

Aplicando a transformada de Fourier à equação diferencial parcial da difusão (1.10), obtemos para a primeira derivada temporal

$$\begin{aligned} \widehat{\mathfrak{S}}\left\{\frac{\partial \rho}{\partial t}\right\} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikz} \frac{\partial \rho}{\partial t} dz = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial t} (\rho e^{ikz}) dz \\ &= \frac{d}{dt} \left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \rho e^{ikz} dz \right\} = \frac{d\widehat{\varrho}(k, t)}{dt} \end{aligned} \quad (1.21)$$

Para a segunda derivada espacial, temos:

$$\widehat{\mathfrak{S}}\left\{\frac{\partial^2 \rho}{\partial z^2}\right\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikz} \frac{\partial^2 \rho}{\partial z^2} dz \quad (1.22)$$

Usando a propriedade da derivada da transformada de Fourier, que diz que

$$\widehat{\mathfrak{S}}\{f''(x)\} = -k^2 \widehat{\mathfrak{S}}\{f(x)\}$$

obtemos

$$\widehat{\mathfrak{S}}\left\{\frac{\partial^2 \rho}{\partial z^2}\right\} = -k^2 \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikz} \rho dz = -k^2 \widehat{\varrho}(k, t) \quad (1.23)$$

Reunindo as equações (1.21) e (1.23), temos

$$\frac{d\widehat{\varrho}(k, t)}{dt} = -Dk^2 \widehat{\varrho}(k, t) \quad (1.24)$$

cuja solução é dada por

$$\widehat{\varrho}(k, t) = \widehat{\varrho}(k, 0) e^{-Dk^2 t} \quad (1.25)$$

Para encontrar a transformada da função no tempo inicial, precisamos calcular

$$\widehat{\varrho}(k, 0) = \widehat{\mathfrak{S}}\rho(z, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(z, 0) e^{ikz} dz \quad (1.26)$$

ou seja

$$\widehat{\varrho}(k, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{M}{A} \delta(z - z_0) e^{ikz} dz = \frac{M}{A\sqrt{2\pi}} e^{ikz_0} \quad (1.27)$$

A solução da equação (1.25) fica na forma:

$$\widehat{\varrho}(k, t) = \frac{M}{A\sqrt{2\pi}} e^{ikz_0} e^{-Dk^2 t} \quad (1.28)$$

Para achar a solução em termos da densidade ρ , devemos calcular a transformada inversa de Fourier

$$\rho(z, t) = \check{\varrho}\{\widehat{\varrho}(k, t)\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \widehat{\varrho}(k, t) e^{-ikz} dk$$

isto é,

$$\rho(z, t) = \frac{M}{2A\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-Dk^2t - ik(z-z_0)} dk \quad (1.29)$$

Após completar os quadrados da exponencial, obtemos a solução final, na forma:

$$\rho(z, t) = \frac{M}{A\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{(z)^2}{4Dt}} \quad (1.30)$$

e a densidade se comporta com uma distribuição Gaussiana em relação a z , sendo que a sua largura aumenta enquanto que a altura diminui, à medida que o tempo passa [11, 22, 23].

O gráfico da solução obtida está ilustrado na Fig. 1.2 em algumas situações de interesse

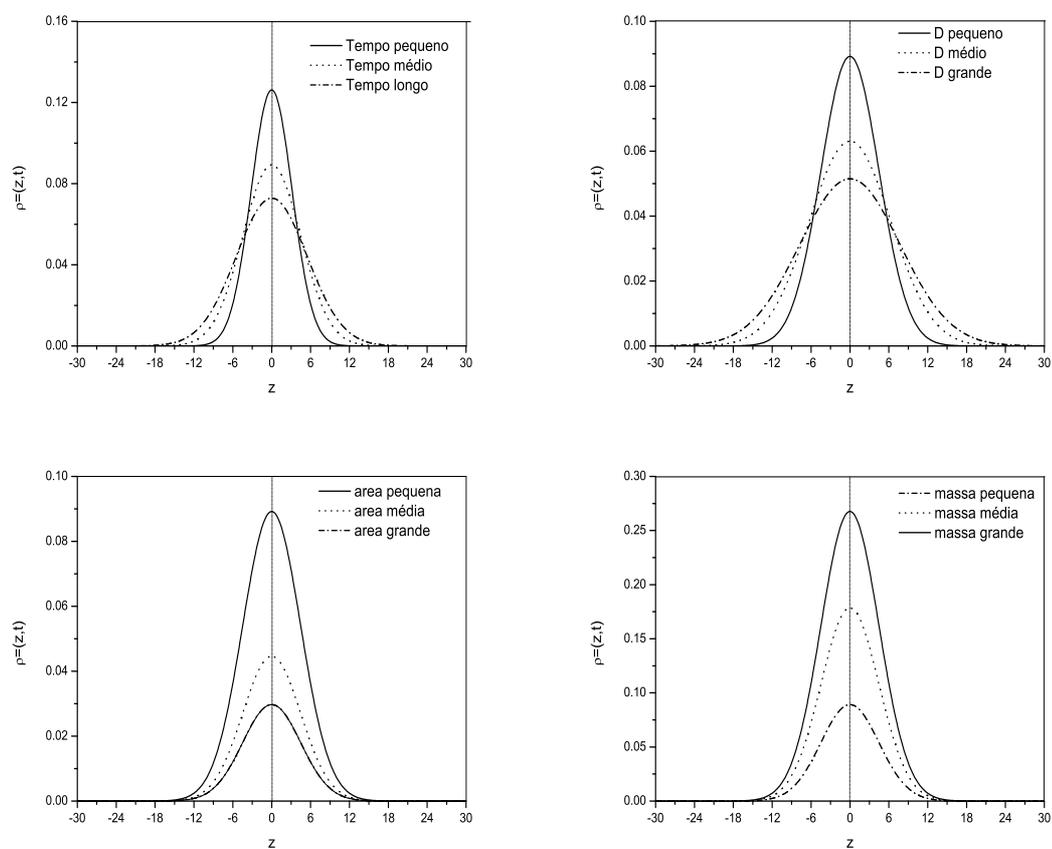


Figura 1.2: As curvas mostram a evolução temporal da distribuição $\rho(z, t)$ no regime difusivo unidimensional. (a) a distribuição para diferentes intervalos de tempos; (b) para valor diferentes do coeficiente de difusão; (c) é a área que está variando; (d) para diferentes valores de massa.

1.3 Equação de difusão e a função de Green

Outra maneira de resolver o mesmo problema difusivo, é utilizando a função de Green, que trata equações diferenciais não homogêneas sujeitas às condições de contorno apropriadas. Nesta situação, queremos determinar a difusão de uma dada substância sobre um volume V , delimitado por uma superfície S , conforme a Fig.1.3. Para esta situação, a equação tem a forma:

$$\nabla^2 \rho(r, t) - \kappa \frac{\partial \rho(r, t)}{\partial t} = -4\pi \tilde{\rho}(r, t) \quad (1.31)$$

onde κ é uma constante. Para resolver este problema, introduzimos a função de Green

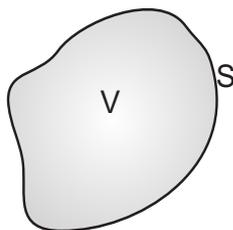


Figura 1.3: Volume V delimitado por uma superfície S .

$G(r, t; r', t')$. Assim, a Eq. (1.31) adquire a forma:

$$\nabla^2 G(r, t; r', t') - \kappa \frac{\partial G(r, t; r', t')}{\partial t} = \delta(r - r') \delta(t - t') \quad (1.32)$$

sujeita às condições de contorno

$$G(r, t; r', t') = 0 \quad \text{para } r \text{ sobre } S$$

e

$$\frac{\partial G(r, t; r', t')}{\partial n} = 0 \quad \text{para } r \text{ sobre } S$$

e também a condição inicial

$$G(r, t; r', t') = 0 \quad t < t'$$

Desejamos encontrar a solução para o processo de difusão em toda região do espaço, isto é, quando $S \rightarrow \infty$. Nesta situação, a função de Green depende somente das coordenada r e t porque as coordenadas $r' = 0$ e $t' = 0$. A Eq. (1.32) fica

$$\nabla^2 G(r, t) - \kappa \frac{\partial}{\partial t} G(r, t) = \delta(r) \delta(t) \quad (1.33)$$

Desta forma, a condição inicial é

$$G(r, t) = 0, \quad t < 0$$

Para resolver a (1.33), usando a transformada de Fourier nas coordenadas espaciais, escrevemos:

$$G(r, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 k e^{(ik \cdot r)} \tilde{G}(k, t) \quad (1.34)$$

$$\tilde{G}(k, t) = \int d^3 r e^{(-ik \cdot r)} G(r, t) \quad (1.35)$$

e

$$\delta(r) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 k e^{(ik \cdot r)} \quad (1.36)$$

A substituição das expressões acima na Eq. (1.33), fornece:

$$-k^2 \tilde{G}(k, t) - \kappa \frac{\partial}{\partial t} \tilde{G}(k, t) = \delta(t) \quad (1.37)$$

Para $t > 0$, a solução desta equação é

$$\tilde{G}(k, t) = Ae^{-\kappa k^2 t} \quad (1.38)$$

Para $t < 0$ e a condição inicial $G(r, t) = 0$, integrando (1.37) com relação a um intervalo de tempo t de duração muito pequeno em torno de $t = 0$, encontramos

$$\tilde{G}(k, 0 + \epsilon) - \tilde{G}(k, 0 - \epsilon) = -\kappa \quad (1.39)$$

Fazendo $A = -\kappa$, a Eq. (1.38) fica

$$\tilde{G}(k, t) = \begin{cases} 0, & t < 0 \\ -\kappa e^{-\kappa k^2 t}, & t > 0 \end{cases} \quad (1.40)$$

Substituindo o resultado acima na equação (1.34), completando os quadrados e fazendo a integral Gaussiana, encontramos

$$\begin{aligned} G(r, t) &= \frac{-\kappa}{(2\pi)^3} \int d^3 k e^{ik \cdot r - \kappa k^2 t} = \frac{-\kappa}{(2\pi)^3} e^{-r^2/4\kappa t} \int d^3 k e^{-\kappa t(k - ir/2\kappa t)^2} \\ &= -\frac{\kappa}{(4\pi\kappa t)^{3/2}} e^{-\frac{r^2}{4\kappa t}} \end{aligned} \quad (1.41)$$

Consequentemente, obtemos

$$G(r, t; r', t') = \begin{cases} 0, & t < t' \\ -\frac{\kappa}{[4\pi\kappa(t-t')]^{3/2}} \exp\left[-\frac{|r-r'|^2}{4\kappa(t-t')}\right], & t > t' \end{cases} \quad (1.42)$$

Essa função de Green tem uma característica bem conhecida: é uma gaussiana conforme mostra a Fig. 1.4, que descreve a maneira como o processo difusivo ocorre em três intervalos de tempo $(t - t')$ diferentes [10].

Concluimos que uma grande parte dos fenômenos de difusão normal é satisfatoriamente descrita pela equação linear de Fokker-Plank (1.10). E que cada processo é

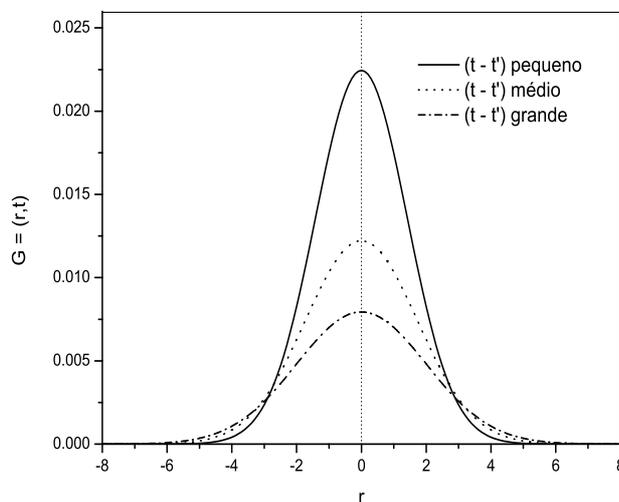


Figura 1.4: O gráfico descreve o comportamento da função $G(r, t)$ em relação a r para diferentes intervalos de tempo.

corretamente caracterizado pelo fato de que $\langle z^2 \rangle \propto t$.

Recentemente, vários trabalhos têm focado suas atenções no mesmo tipo de equação linear com derivada fracionária, tanto no tempo, i.e., na forma geral

$$\frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(z, t) = D \frac{\partial^2}{\partial z^2} \rho(z, t)$$

quanto no espaço, ou seja,

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(z, t) = D \frac{\partial^\mu}{\partial |z|^\mu} \rho(z, t).$$

Estas duas generalizações da equação de Fokker-Planck têm sido usadas para estudar sistemas difusivos anômalos. Nos próximos capítulos, nos dedicaremos ao estudo da difusão anômala com derivadas fracionárias e também à equação de difusão não-linear com derivada fracionária.

Difusão Anômala

Neste capítulo, nos dedicamos ao estudo destas equações que empregam derivadas fracionárias tanto na variável temporal quanto na variável espacial. Neste sentido, faremos uma análise do segundo momento, o qual nos mostrará um alargamento não usual para a nossa distribuição quando empregarmos derivadas fracionárias temporais. Para o segundo caso – i.e., no caso da derivada fracionária na parte espacial, o segundo momento não é finito. Em particular, esta situação dá forma às chamadas distribuições de Lévy que, como veremos, têm um extenso raio de aplicação. Veremos também como o emprego de derivadas fracionárias na equação de difusão altera as funções tempo de espera entre saltos $w(t)$ e comprimento de saltos $\lambda(x)$.

2.1 Introdução

De forma geral, a difusão usual é descrita por um modelo local, ou seja, em pequenas escalas de tempo, a evolução da função densidade em uma dada posição é afetada apenas por pontos próximos no espaço. Em alguns casos, porém, essa suposição não se aplica, levando a inconsistências na definição do coeficiente de difusão. Dito de outra maneira, mesmo em pequenas escalas de tempo a evolução da função densidade em uma dada posição pode ser afetada por pontos distantes no espaço [13], por exemplo, do transporte turbulento na camada limite convectiva. Uma ferramenta que pode ser usada para

descrever esta última classe de fenômenos é baseada no cálculo fracionário, no qual operadores diferenciais não locais podem ser empregados para levar em conta as correlações espaciais. Este procedimento, que leva à equações de difusão fracionária, tem sido amplamente investigado para descrever difusão anômala. As equações de difusão fracionária são frequentemente consideradas como um procedimento alternativo para modelos de caminhada aleatória com tempo contínuo, equações de Langevin generalizadas ou equações mestra generalizadas. Assim, equações de difusão fracionárias, ou equações de Fokker-Planck fracionárias, têm sido consideradas por diversos autores com diferentes propósitos, seja com derivadas fracionárias temporais, com derivadas fracionárias espaciais ou mesmo incluindo derivadas fracionárias temporais e espaciais.

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

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x, t) = D \frac{\partial^\mu}{\partial |x|^\mu} \rho(x, t) \quad (2.1)$$

cujas soluções são as distribuições de Lévy

$$L_\mu(|x|, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp[-ikx - D_\mu |k|^\mu t] \quad (2.2)$$

sendo D_μ uma constante e μ um número real ($\mu \in \mathbb{R}$). Estas distribuições não possuem segundo momento finito e caracterizam a difusão anômala do tipo Lévy (superdifusão).

Além de derivadas fracionárias, podemos generalizar ainda mais a equação de difusão acrescentando não linearidade e dependência espacial ao coeficiente de difusão, ou mesmo um termo de arraste, ou seja

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ D(x) \frac{\partial^\mu}{\partial |x|^\mu} [\rho(x, t)]^\nu - F(x) \rho(x, t) \right\} \quad (2.3)$$

onde $\nu, \mu \in \mathbb{R}$, $D(x) \propto |x|^{-\theta}$ e $F(x) = -dV(x)/dx$ é uma força externa associada ao potencial $V(x)$. Portanto, a equação (2.3) pode ser usada para descrever uma ampla classe de processos de difusão anômala, visto que ela contém, como um caso particular, a equação para meios porosos e a superdifusão de Lévy, bem como uma mistura de ambas.

2.2 Equação linear fracionária unidimensional: derivada no tempo

Consideremos a equação fracionária de Fokker-Planck, do tipo:

$$\frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(x, t) = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, t) - \frac{\partial}{\partial x} [F(x, t) \rho(x, t)] \quad (2.4)$$

onde $\partial^\gamma / \partial t^\gamma$ corresponde à derivada fracionária de Caputo (Apêndice A.2), aplicada à variável temporal. O operador de derivada fracionária de Caputo parece ser mais apropriado para estudo de equações diferenciais de ordem fracionária porque a transformada de Laplace da derivada fracionária de Caputo depende de condições iniciais que possuem interpretação física. Já a derivada fracionária segundo Riemann-Liouville depende de condições dadas em termos de ${}_a D_t^\alpha f(t)|_{t=0}$. Outra importante diferença entre estas duas abordagens é que a derivada fracionária de Caputo de uma constante é zero, o que não ocorre com a definição de Riemann-Liouville. Isto justifica a utilização da derivada de Caputo, e não a de Riemann-Liouville, quando estamos interessados em resolver uma equação diferencial parcial de ordem fracionária. Este operador é definido como [31]:

$$\frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(x, t) = \frac{1}{\Gamma(n - \gamma)} \int_0^t dt' \frac{\rho^{(n)}(x, t')}{(t - t')^{\gamma+1-n}} \quad (2.5)$$

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 D , que inicialmente consideraremos constante. Mais à frente, veremos situações nas quais D tem uma dependência com o espaço, com o tempo e até mesmo com a distribuição. Ainda com relação à equação (2.4), observamos que ela generaliza a equação usual de difusão, conforme vimos no primeiro capítulo, mediante a presença do operador fracionário atuando na variável temporal, e que para $\gamma = 1$ recuperamos a equação usual de difusão. Com o intuito de mostrar que a distribuição $\rho(x, t)$ na Eq. (2.4) é normalizável, vamos reescrevê-la na forma

$$\frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(x, t) - \frac{\partial}{\partial x} \mathcal{J}(x, t) = 0 \quad (2.6)$$

ou seja, na forma de uma equação de continuidade, com uma corrente dada por

$$\mathcal{J}(x, t) = D \frac{\partial}{\partial x} \rho(x, t) - F(x, t) \rho(x, t) \quad (2.7)$$

A normalização é verificada quando integramos a Eq. (2.6) sobre todo o espaço e consideramos que $\mathcal{J}(x = \pm\infty, t) = 0$, pois estamos considerando que $\rho(x = \pm\infty, t) = 0$. Assim, esta importante propriedade, de podermos normalizar a distribuição, continua válida mesmo com a presença do operador de derivada fracionária do tipo Caputo. Este fato não seria verificado se usássemos uma derivada fracionária do tipo Riemann-Liouville.

Voltando à análise da equação (2.4), vamos investigar suas soluções e explorar através dessas soluções as consequências de usarmos derivadas fracionárias na variável temporal. Neste ponto, cabe observar que as soluções da equação (2.4) podem ser obtidas por meio de vários métodos os quais serão empregados de acordo com a nossa comodidade. É interessante lembrar também que o procedimento a ser adotado estará relacionado com as condições de contorno impostas ao sistema e às simetrias que ele apresenta. Assim, dependendo da situação que pretendemos analisar, vamos empregar o método que melhor aproveita as condições impostas sobre o sistema.

Inicialmente, vamos considerar uma situação caracterizada pela ausência de força externa, com D constante e a condição inicial $\rho(x, 0) = \tilde{\rho}(x)$. Como condição de contorno, vamos considerar inicialmente $\rho(x = \pm\infty, t) = 0$. Devido a estas considerações, a equação a ser resolvida fica na forma

$$\frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(x, t) = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, t) \quad (2.8)$$

Ao considerarmos tal condição de contorno, o uso das transformadas de Laplace e Fourier simplificará o nosso problema. Assim, tomando as transformadas de Laplace e Fourier da

equação obtemos

$$\rho(k, s) = \frac{\rho(k, 0)}{s + Ds^{1-\gamma}k^2}, \quad (2.9)$$

com $0 < \gamma < 1$. Para a obtermos a Eq. (2.9) usamos a relação:

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

que é válida para $n - 1 < \gamma < n$. Agora, para obtermos a solução desejada temos que inverter ambas as transformadas. Realizando inicialmente a inversão em Fourier, levando em conta o teorema de convolução, obtemos

$$\hat{\rho}(x, s) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \tilde{\rho}(x - x') \mathcal{G}(x', s) \quad (2.10)$$

com

$$\mathcal{G}(x, s) = \frac{1}{2s} \left(\frac{s^\gamma}{D} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[- \left(\frac{s^\gamma}{D} \right)^{\frac{1}{2}} |x| \right] \quad (2.11)$$

Observando a Eq. (2.11), vemos que $\mathcal{G}(x, s)$ é a função de Green associada à condição inicial considerada. Assim, o papel de $\mathcal{G}(x, s)$ é fazer com que a nossa condição inicial evolua até um tempo t qualquer, que neste caso depende do parâmetro x . Já para invertermos a transformada de Laplace, faremos uso do seguinte procedimento: relacionaremos a transformada de Laplace com a transformada de Mellin, inverteremos esta transformada (Mellin) mediante a identificação dessa integral com a integral das funções H de Fox, obtendo então $\rho(x, t)$. As funções de Fox (Apêndice A.3) são definidas como

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

$$\chi(s) = \frac{\prod_{i=1}^m \Gamma(b_i - B_i s) \prod_{i=1}^n \Gamma(1 - a_i + A_i s)}{\prod_{i=m+1}^q \Gamma(1 - b_i + B_i s) \prod_{i=1+n}^p \Gamma(a_i - A_i s)} \quad (2.12)$$

A transformada de Laplace de $\rho(x, t)$ em relação ao tempo é

$$\rho(x, s) = \int_0^{\infty} dt e^{-st} \rho(x, t) \quad (2.13)$$

e a transformada de Mellin da mesma função em relação à variável temporal é

$$\rho(x, s') = \int_0^{\infty} dt t^{s'-1} \rho(x, t) \quad (2.14)$$

com

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

Ambas as transformadas de Laplace e de Mellin estão relacionadas uma com a outra, por meio da relação:

$$\rho(x, s') = \frac{1}{\Gamma(1-s')} \int_0^{\infty} ds s^{-s'} \rho(x, s) \quad (2.15)$$

Usando esta última equação em (2.11), obtemos

$$\mathcal{G}(x, s') = \frac{1}{\gamma|x|} \left(\frac{|x|}{\sqrt{D}} \right)^{\frac{2}{\gamma}s'} \frac{\Gamma\left(1 - \frac{2}{\gamma}s'\right)}{\Gamma(1-s')} \quad (2.16)$$

Invertendo a transformada de Mellin da Eq. (2.16), obtemos

$$\mathcal{G}(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt^\gamma}} \mathbf{H}_{1,2}^{2,0} \left[\frac{x^2}{4Dt^\gamma} \left| \begin{matrix} (1-\frac{\gamma}{2}, \gamma) \\ (\frac{1}{2}, 1) \end{matrix} \right. \right]_{(0,1)} \quad (2.17)$$

Esta última igualdade é obtida por comparação direta da integral resultante da inversão de Mellin com a representação integral dada acima para a função de Fox. Substituindo esta equação em (2.10), temos a solução para uma condição inicial genérica como segue:

$$\rho(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt^\gamma}} \int_{-\infty}^{\infty} dx' \tilde{\rho}(x') \mathbf{H}_{1,2}^{2,0} \left[\frac{(x-x')^2}{4Dt^\gamma} \left| \begin{matrix} (1-\frac{\gamma}{2}, \gamma) \\ (\frac{1}{2}, 1) \end{matrix} \right. \right]_{(0,1)}. \quad (2.18)$$

2.2.1 Meio finito (limitado): barreiras absorventes

No caso da condição de contorno ser definida em um intervalo finito, por exemplo, $\rho(0, t) = \rho(L, t) = 0$, com x definido no intervalo $[0, L]$, podemos usar o procedimento de separação de variáveis. Tal situação é caracterizada fisicamente por termos barreiras absorventes em $x = 0$ e $x = L$. Para obtermos a solução para a equação (2.4) com tais condições de contorno vamos usar uma transformada finita. Em particular, estamos considerando que a nossa solução pode ser expressa em termos de uma série de Fourier. Assim,

$$\rho(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \mathcal{B}_n(t) \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{L} x \right) \quad (2.19)$$

com

$$\mathcal{B}_n(t) = \frac{2}{L} \int_0^L dx \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{L} x \right) \rho(x, t) \quad (2.20)$$

é a solução apropriada para o tratamento deste caso, pois satisfaz a condição de contorno. Substituindo (2.19) em (2.8), multiplicando ambos os lados por $\operatorname{sen}(nx\pi)/L$ e integrando desde 0 a L e identificando $\mathcal{B}_n(t)$, obtemos

$$\frac{d^\gamma}{dt^\gamma} \mathcal{B}_n(t) = -\frac{n^2 \pi^2}{L^2} D \mathcal{B}_n(t) \quad (2.21)$$

Para resolver a equação acima, vamos aplicar uma transformada de Laplace, o que nos permitirá o uso da função $E_\alpha(x)$ de Mittag-Leffler. Isto se deve ao fato de que

$$E_\alpha \left[-\left(\frac{t}{\tau} \right)^\alpha \right] = \mathcal{L}^{-1} \left(\frac{1}{s + \tau^{-\alpha} s^{1-\alpha}} \right)$$

As funções $E_\alpha(x)$ de Mittag-Leffler constituem uma possível generalização da função exponencial, e são definidas como

$$E_\alpha(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{\Gamma(n\alpha + 1)} \quad (2.22)$$

Com isso, podemos escrever

$$\mathcal{B}_n(t) = \mathcal{B}_n(0) \mathbf{E}_\gamma \left(-\frac{n^2 \pi^2}{L^2} D t^\gamma \right) \quad (2.23)$$

Substituindo a solução acima em (2.19), levando em conta uma condição inicial genérica $\rho(x, 0) = \tilde{\rho}(x)$, temos

$$\rho(x, t) = \int_0^L dx' \mathcal{G}(x, x', t) \tilde{\rho}(x') \quad (2.24)$$

com

$$\mathcal{G}(x, x', t) = \frac{2}{L} \sum_{n=0}^{\infty} \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{L} x' \right) \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{L} x \right) \mathbf{E}_\gamma \left(-\frac{n^2 \pi^2}{L^2} D t^\gamma \right).$$

2.2.2 Meio finito (limitado): barreiras refletoras

Se ao invés de barreiras absorventes tivéssemos barreiras refletoras, isto é, $\partial_x \rho|_{x=0} = \partial_x \rho|_{x=L} = 0$ as mudanças na solução acima seriam a troca seno (sen) pelo cosseno (cos) e a presença de uma solução estacionária. Assim, escrevemos de forma direta a solução para este caso, como segue abaixo,

$$\rho(x, t) = \frac{1}{L} \int_0^L dx' \tilde{\rho}(x') + \int_0^L dx' \mathcal{G}(x, x', t) \tilde{\rho}(x') \quad (2.25)$$

com

$$\mathcal{G}(x, x', t) = \frac{2}{L} \sum_{n=0}^{\infty} \cos \left(\frac{n\pi}{L} x' \right) \cos \left(\frac{n\pi}{L} x \right) \mathbf{E}_\gamma \left(-\frac{n^2 \pi^2}{L^2} D t^\gamma \right)$$

para uma condição inicial do tipo $\rho(x, 0) = \tilde{\rho}(x)$. Observe que, ao considerarmos a distribuição acima no limite de tempos longos, obtemos a solução estacionária

$$\rho(x, t \rightarrow \infty) \sim \frac{1}{L} \int_0^L dx' \tilde{\rho}(x') = \rho_s(x)$$

Este fato nos permite determinar a função de autocorrelação estacionária usando a equação (2.25). Assim, usando a definição da função de autocorrelação estacionária e considerando, por simplicidade, $\rho(x, 0) = \delta(x - x')$, obtemos

$$\begin{aligned} \langle x(t)x(0) \rangle_s &= \int_0^L dx \int_0^L dx' x x' \rho(x, t) \rho_s(x) \\ &= \frac{L}{4} + \frac{8}{\pi^4} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(1+2n)^4} \mathbf{E}_{\gamma} \left(-\frac{(2n+1)^2 \pi^2}{L^2} D t^{\gamma} \right) \end{aligned} \quad (2.26)$$

Tomando o limite de tempos longos na equação (2.26), verificamos que $\langle x(t)x(0) \rangle_s \sim 1/4$. Este resultado coincide com o obtido com a equação de difusão usual, o que indica que a derivada fracionária somente fará com que o sistema relaxe de forma anômala até à situação de equilíbrio.

2.2.3 Sistema Infinito

Agora vamos investigar as implicações advindas do emprego de derivadas fracionárias na equação de difusão. Neste sentido, ao observamos a solução (2.17) vemos que o segundo momento não varia linearmente com o tempo, mas sim com uma potência do tempo, isto é, $\langle x^2 \rangle \propto t^{\gamma}$. Este tipo de comportamento para o segundo momento é um comportamento típico de um sistema que exhibe difusão anômala. Usando conceitos de caminhantes aleatórios, é possível demonstrar que a densidade de probabilidade relativa à parte temporal tem o seguinte aspecto

$$w(t) = \frac{1}{\tau_0} \left(\frac{t}{\tau_0} \right)^{\gamma-1} \mathbf{E}_{\gamma, \gamma} \left(-\frac{t^{\gamma}}{\tau_0^{\gamma}} \right) \quad (2.27)$$

onde τ_0 é uma constante e $\mathbf{E}_{\alpha, \beta}$ é a função de Mittag-Leffler generalizada

$$\mathbf{E}_{\alpha, \beta}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{\Gamma(n\alpha + \beta)} \quad (2.28)$$

quando consideramos a equação de difusão na ausência de força externa. Observe que de acordo com os valores de γ temos a distribuição mais concentrada em tempos curtos ou em tempos longos, o que nos levaria a um processo do tipo subdifusivo ou superdifusivo. Assim, a presença desta função nas soluções acima é uma consequência das mudanças produzidas na função densidade de probabilidade de tempo de espera pela derivada fracionária.

Neste contexto, podemos também ter a presença de forças externas e/ou um coeficiente dependente do espaço e do tempo. Neste sentido, obteremos aqui a solução para

i) uma força linear, isto é, $F(x) = -kx$;

ii) um coeficiente de difusão do tipo $D(x) = D|x|^{-\theta}$.

Na primeira situação, podemos obter sua solução usando o método da separação de variáveis, com as seguintes condições de contorno: $\rho(0, t) = \rho(\infty, t) = 0$, e a condição inicial $\rho(x, 0) = \tilde{\rho}(x)$. Assim, a solução obtida fica expressa em termos do polinômios de Hermite, como segue,

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &= \sqrt{\frac{k}{2\pi D}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2^n n!} H_n \left(\sqrt{\frac{kx_0^2}{2D}} \right) H_n \left(\sqrt{\frac{kx^2}{2D}} \right) \\ &\times \exp \left(-\frac{kx^2}{2D} \right) E_{\gamma+\alpha} \left(-\lambda_n^2 t^{\alpha+\gamma} \right) \end{aligned} \quad (2.29)$$

onde $\lambda_n = nk$. Para a segunda situação, a equação de difusão fica dada por

$$\frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(x, t) = \frac{D}{\Gamma(\alpha)} \int_0^t dt' \frac{\partial}{\partial |x|} \left\{ (t-t')^{\alpha-1} |x|^{-\theta} \frac{\partial}{\partial |x|} \rho(x, t') \right\} \quad (2.30)$$

na ausência de força externa. Para investigar as soluções desta equação vamos considerar, por simplicidade, que x seja não negativo com as seguintes condições de contorno: $\rho(0, t) = \rho(\infty, t) = 0$, e a condição inicial $\rho(x, 0) = \tilde{\rho}(x)$. Então, após alguns cálculos,

podemos mostrar que

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &= \frac{2x^{\frac{1+\theta}{2}}}{2+\theta} \int_0^\infty dk k J_{\frac{1+\theta}{2+\theta}} \left(\frac{2k}{2+\theta} x^{\frac{2+\theta}{2}} \right) \\ &\times \int_0^\infty dx' \tilde{\rho}(x') x'^{\frac{1+\theta}{2}} J_{\frac{1+\theta}{2+\theta}} \left(\frac{2k}{2+\theta} x'^{\frac{2+\theta}{2}} \right) \mathbf{E}_{\gamma+\alpha} (-Dk^2 t^{\gamma+\alpha}) \end{aligned} \quad (2.31)$$

Em particular, para $\gamma + \alpha = 1$, a equação (2.31) pode ser reduzida para

$$\rho(x, t) = \int_0^\infty dx' \frac{(xx')^{\frac{1}{2}(1+\theta)}}{(2+\theta)Dt} \tilde{\rho}(x') \mathbf{I}_{\frac{1+\theta}{2+\theta}} \left(\frac{2x^{\frac{1}{2}(2+\theta)} x'^{\frac{1}{2}(2+\theta)}}{(2+\theta)^2 Dt} \right) e^{-\frac{x^{2+\theta} + x'^{2+\theta}}{(2+\theta)^2 Dt}} \quad (2.32)$$

Retornemos à equação (2.8). Vamos transformá-la em uma equação integral, que pode ser muito útil dependendo do potencial a ser analisado, permitindo uma solução recursiva sob forma de uma teoria perturbativa. Neste sentido, cabe ressaltar que são poucos os tipos de forças externas que nos permitem uma solução exata para o problema, o que torna importante o desenvolvimento de uma teoria perturbativa. Ao desenvolvermos os nossos procedimentos de cálculos, vamos considerar o termo que contém a força externa como um termo de fonte. Então, temos

$$\frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(x, t) = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, t) - \alpha(x, t) \quad (2.33)$$

com

$$\alpha(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} [F(x, t) \rho(x, t)] \quad (2.34)$$

Repetindo o procedimento de cálculo para o caso livre, obtemos a transformada de Fourier-Laplace da Eq. (2.33) na forma:

$$\rho(k, s) = \frac{\rho(k, 0)}{s + Ds^{1-\gamma} k^2} - \frac{\alpha(k, s)}{s + Ds^{1-\gamma} k^2} \quad (2.35)$$

Invertendo ambas as transformadas, temos

$$\rho(x, t) = \rho^{(0)}(x, t) - \int_0^t dt' \int_{-\infty}^{\infty} dx' \mathcal{G}_\gamma(x - x', t - t') \alpha(x', t') \quad (2.36)$$

com

$$\mathcal{G}_\gamma(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt^\gamma}} \mathbf{H}_{1\ 2}^{2\ 0} \left[\frac{x^2}{4Dt^\gamma} \left| \begin{matrix} (1-\frac{\gamma}{2}, \gamma) \\ (\frac{1}{2}, 1) \end{matrix} \right. \begin{matrix} (0, 1) \end{matrix} \right] \quad (2.37)$$

Substituindo $\alpha(x, t)$ na equação (2.36) e integrando por partes, obtemos

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &= \rho^{(0)}(x, t) \\ &+ \int_0^t dt' \int_{-\infty}^{\infty} dx' \mathcal{G}_\gamma^{(2)}(x - x', t - t') {}_0D_t^{1-\gamma} [F(x', t') \rho(x', t')] \end{aligned} \quad (2.38)$$

onde

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_\gamma^{(2)}(x, t) &= \frac{d}{dx} \mathcal{G}_\gamma(x, t) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi Dt^\gamma}} \mathbf{H}_{2\ 3}^{2\ 1} \left[\frac{x^2}{4Dt^\gamma} \left| \begin{matrix} (0, 2) & (1-\frac{\gamma}{2}, \gamma) \\ (\frac{1}{2}, 1) & (0, 1) & (1, 2) \end{matrix} \right. \right] \end{aligned} \quad (2.39)$$

A Eq. (2.38) é justamente a equação que procuramos e é a forma integral correspondente à Eq. (2.4) que pode ser usada, por exemplo, para calcular perturbativamente a influência de uma força externa aplicada ao sistema. A Fig. 2.1 mostra o comportamento de $(4\pi Dt^\gamma)^{1/2} \mathcal{G}_\gamma(x, t)$ em relação a $x/(4Dt^\gamma)$ e, na Fig. 2.2, é mostrado o comportamento de $(Dt)^{\frac{1}{\mu}} L_\mu(x, t)$ em relação $x/(Dt)^{\frac{1}{\mu}}$, para valores típicos de μ .

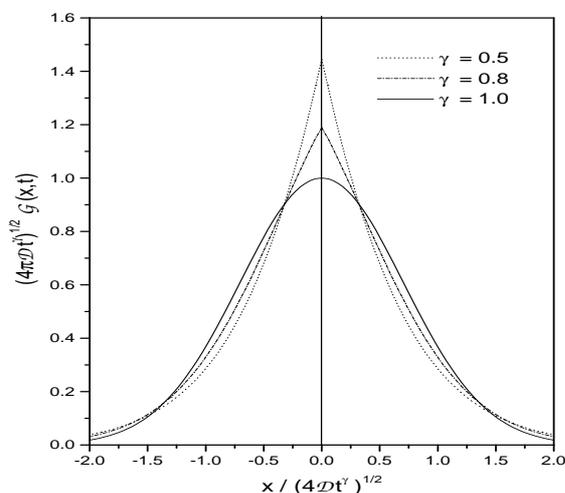


Figura 2.1: Comportamento de $(4\pi Dt^\gamma)^{1/2} \mathcal{G}_\gamma(x, t)$ versus $x / (4Dt^\gamma)^{1/2}$, para valores típicos de γ . Para γ igual a 0,5 e 0,8 difusão anômala e para γ igual 1,0 difusão normal.

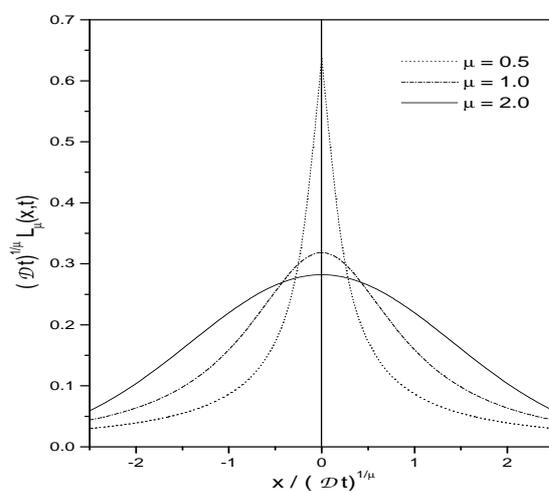


Figura 2.2: Comportamento de $(Dt)^{1/\mu} L_\mu(x, t)$ versus $x / (Dt)^{1/\mu}$, para valores típicos de μ . A derivada fracionária na variável espacial caracteriza um processo superdifusivo do tipo Lévy.

2.3 Equação linear fracionária unidimensional: derivada no espaço

Agora vamos analisar a equação de difusão que emprega derivada fracionária na parte espacial. Em particular, faremos um desenvolvimento análogo ao da seção anterior.

Assim, começaremos observando que a distribuição de Lévy

$$L_\mu(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{-ikx - |k|^\mu Dt} \quad (2.40)$$

é solução da equação de difusão

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial^\mu \rho}{\partial |x|^\mu} - \frac{\partial}{\partial x} [F(x, t)\rho] \quad (2.41)$$

quando consideramos a ausência de força externa. Para provarmos tal afirmação, basta usarmos o fato de que

$$\mathcal{F}\{\partial_{|x|}^\mu \rho(x, t)\} \equiv -|k|^\mu \rho(k, t)$$

onde

$$\mathcal{F}\{\rho(x, t)\} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} \rho(x, t) \quad (2.42)$$

é a transformada de Fourier. Em particular, para verificarmos a última afirmativa, basta empregarmos a definição

$$\frac{\partial^\mu}{\partial |x|^\mu} \rho(x, t) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin\left(\frac{\mu\pi}{2}\right) \Gamma(1 + \mu) \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\rho(x', t)}{|x - x'|^{\mu+1}} \quad (2.43)$$

Em contraste com o resultado que obtivemos ao empregarmos derivadas fracionárias na variável temporal, as distribuições que emergem ao aplicarmos derivadas fracionárias na variável espacial não têm o segundo momento finito. Isto implica que elas não seguem o teorema central do limite, mas sim sua generalização conhecida como teorema de Lévy-Gnedenko. Podemos obter mais informação da equação acima analisando-a sob o enfoque de caminhantes aleatórios. Neste caso, o que acontece é uma mudança nos comprimentos dos saltos provocada pelo emprego da derivada fracionária na variável espacial. Em particular, o caminhante passa a efetuar saltos longos. A densidade de probabilidade que caracteriza os saltos então adquire um comportamento de cauda longa, caracterizando um

processo superdifusivo do tipo Lévy.

De forma analoga à seção anterior, podemos ter situações que envolvem a presença de forças externas e/ou um coeficiente que depende do espaço e do tempo. Por exemplo, para o caso em que temos a presença de uma força linear a solução para a equação (2.41) é dada por

$$\rho(x, t) = \frac{\pi}{\mu x} \mathbf{H}_{3,3}^{2,1} \left[\frac{x}{(Dt^{\alpha+1})^{\frac{1}{\mu}}} \left| \begin{matrix} (1, \frac{1}{\mu}) & (1, \frac{\alpha+1}{\mu}) & (1, \frac{1}{2}) \\ (1,1) & (1, \frac{1}{\mu}) & (1, \frac{1}{2}) \end{matrix} \right. \right] \quad (2.44)$$

Em uma situação mais simples, em que o coeficiente de difusão depende somente do tempo, isto é, $D(t) = Dt^{\alpha-1}/\Gamma(\alpha)$, incorporada à situação descrita acima, a solução fica dada por

$$\rho(x, t) = \frac{1}{\mu x} \mathbf{H}_{1,1}^{2,2} \left[\left(\frac{\alpha\mu}{D} \right)^{\frac{1}{\mu}} x \left| \begin{matrix} (1, \frac{1}{\mu}) & (1, \frac{1}{2}) \\ (1,1) & (1, \frac{1}{2}) \end{matrix} \right. \right] \quad (2.45)$$

Vamos agora analisar a equação (2.41) considerando uma condição inicial do tipo $\rho(x, 0) = \tilde{\rho}(x)$ e que $V(x)$ seja um potencial genérico que permita o desenvolvimento de uma série perturbativa. Repetindo o procedimento da seção anterior, vamos transformar a equação (2.41) em uma equação integral. Assim, tomando a transformada de Laplace e Fourier da equação (2.41), obtemos

$$\rho(k, s) = \frac{\rho(k, 0)}{s + D|k|^\mu} \quad (2.46)$$

Invertendo a equação acima, obtemos

$$\rho(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \mathcal{G}_\mu(x - x', t - t') \tilde{\rho}(x') \quad (2.47)$$

onde $\mathcal{G}_\mu(x, t) = L_\mu(x, t)$. E a equação integral associada a Eq. (2.41) é

$$\rho(x, t) = \rho^{(0)}(x, t) - \int_0^t dt' \int_{-\infty}^{\infty} dx' \mathcal{G}_\mu^{(2)}(x - x', t - t') F(x', t') \rho(x', t') \quad (2.48)$$

onde

$$\mathcal{G}_\mu^{(2)}(x, t) = -\frac{d}{dx}L_\mu(x, t) = \int_0^\infty \frac{dk}{\pi} k \sin(kx) e^{-tD|k|^\mu} \quad (2.49)$$

A Eq. (2.49) pode ser usada para calcular perturbativamente a influência de uma força externa qualquer aplicada ao sistema.

O emprego de derivadas fracionárias na equação de difusão gera alterações nas funções distribuição de tempo de espera e de comprimento de saltos, dependendo se são aplicadas na variável temporal ou espacial, respectivamente. Além disso, as distribuições de Lévy apresentam um comportamento superdifusivo, devido à maior frequência com que saltos longos ocorrem, [24–30].

Equação de difusão fracionária não linear com força externa e termo absorvente

Neste capítulo, vamos analisar as soluções da equação da difusão generalizada, que contém derivadas fracionárias espaciais e termos não lineares. Também vamos considerar a presença de uma força externa e de termos absorventes. As soluções encontradas têm dois comportamentos: cauda compacta e cauda longa; para a segunda situação, no limite assintótico, podemos relacionar a solução com a distribuição de Lévy ou Tsallis.

3.1 Introdução

A equação de difusão fracionária não linear, que é uma generalização da equação de difusão normal, devido à sua abrangência em situações físicas relacionadas à difusão anômala, tem atraído a atenção de muito pesquisadores, e tem sido aplicada com sucesso em várias situações físicas [14, 32–47]. A equação de difusão fracionária que vamos analisar contém uma força externa aplicada, bem como um termo de reação devido às interações moleculares do sistema [1, 7, 48–58]. Os principais resultados deste capítulo foram publicados na Ref. [18].

Como há uma grande variedade de cenários que podem ser descritos por essa equação, então torna-se interessante investigar suas propriedades e soluções, a fim de abranger

novas situações, onde os processos de difusão dos fenômenos físicos não são normais, como por exemplo, no deslocamento de um fluido viscoso sobre um menos viscoso, em um reservatório de petróleo. Esse problema requer uma abordagem mais ampla, a fim de se obter um comportamento não linear das interfaces consideradas, e também as características fractais ou multifractais das rochas porosas em que o petróleo está imerso. Em particular, a geoestatística destes reservatórios será bem descrita por um movimento Browniano fracionário e movimento fracionário de Lévy [59]. Assim, pretendemos estabelecer de uma forma geral algumas classes de soluções para a equação de difusão não linear em d -dimensões com derivada fracionária na coordenada espacial e com uma simetria radial:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho(r, t) &= \frac{D(t)}{r^{d-1}} \frac{\partial^{\mu'}}{\partial r^{\mu'}} \left\{ r^{d-1} \left[r^{-\theta} [\rho(r, t)]^\gamma \left| \frac{\partial^\mu}{\partial r^\mu} (r^{-\eta} [\rho(r, t)]^\nu) \right|^n \right] \right\} \\ &- \frac{1}{r^{d-1}} \frac{\partial}{\partial r} [r^{d-1} F(r, t) \rho(r, t)] - \bar{\alpha}(t) \rho(r, t) \end{aligned} \quad (3.1)$$

onde $D(t)$ é o coeficiente de difusão dependente do tempo, $F(r, t)\rho$ representa uma força externa aplicada ao sistema e o último termo da equação está relacionado com um termo de reação. Os operadores fracionários ($\partial_r^{\mu'}$ e ∂_r^μ), aplicados na variável espacial, são os operadores de Riemann-Liouville. A Eq. (3.1) pode ser obtida pela incorporação do termo de reação não linear $\bar{\alpha}(t)\rho$ bem como o termo absorvente na equação da continuidade

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

A força externa aqui considerada $F(r, t)$ depende da distribuição do sistema $\rho(r, t)$. Para alguns casos particulares dos parâmetros μ e μ' , esta força externa pode assumir a forma

$$F(r, t) = -k(t)r + \frac{k_\zeta}{r^\zeta} \quad (3.2)$$

Esta força externa incorporada na Eq. (3.1) nos leva a uma extensão de alguns casos bem conhecidos como os processos de Ornstein-Uhlenbeck e de Rayleigh [71] e a equação de Burgers [72]. Outros casos particulares da equação acima podem ser encontrados

em [1, 7, 58, 73, 74]. Além disso, o potencial relacionado a esta força externa tem como caso particular o potencial logarítmico, utilizado, por exemplo, para estabelecer a conexão entre o coeficiente de difusão fracionária e a mobilidade generalizada [75]. A presença do termo de reação é particularmente interessante nos processos catalíticos heterogêneos, sistemas desordenados [76–78], coagulação de espécies e reação irreversível de primeira ordem [79]. Ele também aparece quando um elemento radioativo, localizável em processos biológicos, sofre decaimento radioativo e é transportado através de um meio poroso e no fluxo de calor que envolve a produção de calor [80]. Para $\bar{\alpha}(t) = 0$, podemos observar na Eq. (3.1) que

$$\int_0^{\infty} dr r^{d-1} \rho(r, t)$$

é independente do tempo (por isso, se ρ é normalizada em $t = 0$, assim continuará a ser para sempre). Ao escrever essa equação na forma

$$\partial_t \rho = -r^{1-d} \partial_r \mathcal{J}$$

e admitirmos as condições de contorno

$$\mathcal{J}(\infty, t) = 0$$

podemos mostrar que

$$\int_0^{\infty} dr r^{d-1} \rho(r, t)$$

é uma constante de movimento.

Iniciamos nossa análise, considerando $\mu' = 1$ na Eq. (3.1) e também a presença de uma força externa do tipo

$$F(r, t) = -k(t)r \tag{3.3}$$

com o coeficiente de difusão dependente do tempo. Na sequência, vamos estender o resultado para $\mu' \neq 1$. Após estes desenvolvimentos, passamos a analisar casos quando consideramos valores especiais dos parâmetros μ e μ' , na presença de uma força externa na forma (3.2), com o coeficiente de difusão constante e sem levar em consideração o termo absorvente $\bar{\alpha}(t)\rho$. Além disso, vamos relacionar os resultados obtidos com a distribuição de Lévy ou o formalismo de Tsallis.

3.2 Equação de difusão fracionária não linear com dependência temporal

Analisaremos as soluções dependente do tempo para a Eq. (3.1) considerando uma força externa do tipo Eq. (3.3) e um coeficiente de difusão dependente do tempo, como dissemos anteriormente. As soluções são obtidas por meio do método de similaridade, o que torna possível a redução dessas equações diferenciais a equações ordinárias cuja forma explícita depende das condições de contorno ou das restrições impostas na forma de leis de conservação. Desta forma, podemos restringir nossa investigação para soluções do tipo

$$\bar{\rho}(r, t) = \left[\frac{1}{\Phi(t)} \right]^d \tilde{\rho} \left[\frac{r}{\Phi(t)} \right] \quad (3.4)$$

As soluções obtidas a partir deste procedimento satisfazem as condições de contorno $\rho(\infty, t) = 0$, as condições iniciais e a condição de normalização quando $\bar{\alpha}(t) = 0$. Antes de analisar as soluções da Eq. (3.1), vamos considerar que

$$\rho(r, t) = \exp \left[- \int_0^t d\tilde{t} \bar{\alpha}(\tilde{t}) \right] \bar{\rho}(r, t)$$

onde $\bar{\rho}(r, t)$ é uma função a ser determinada e é formalmente dada pela Eq. (3.4). Pela substituição de $\rho(r, t)$ na Eq. (3.1) podemos obter

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho}(r, t)}{\partial t} &= \frac{\bar{D}(t)}{r^{d-1}} \frac{\partial^{\mu'}}{\partial r^{\mu'}} \left\{ r^{d-1} \left[r^{-\theta} \bar{\rho}(r, t)^\gamma \left| \frac{\partial^\mu}{\partial r^\mu} [r^{-\eta} \bar{\rho}(r, t)^\nu] \right|^n \right] \right\} \\ &+ \frac{1}{r^{d-1}} \frac{\partial}{\partial r} \left[r^{d-1} \left(k(t)r \right) \bar{\rho}(r, t) \right] \end{aligned} \quad (3.5)$$

onde

$$\bar{D}(t) = D(t) \exp \left[(1 - n\nu - \gamma) \int_0^t dt \tilde{\alpha}(\tilde{t}) \right]$$

Vamos considerar que

$$z = \frac{r}{\Phi(t)}$$

e aplicar o método de similaridade na Eq. (3.5), ou seja, considerando que a solução é dada pela Eq. (3.4), podemos reduzir a equação de difusão (3.5) a duas equações diferenciais ordinárias usando uma constante de separação \bar{k} , determinada pela condição de normalização. Assim, obtemos

$$\frac{d^{\mu'}}{dz^{\mu'}} \left\{ z^{d-1-\theta} [\tilde{\rho}(z)]^\gamma \left| \frac{d^\mu}{dz^\mu} [z^{-\eta} [\tilde{\rho}(z)]^\nu] \right|^n \right\} = \bar{k} \frac{d}{dz} \left[z^d \tilde{\rho}(z) \right] \quad (3.6)$$

e

$$\dot{\Phi}(t) = -\bar{k}D(t) \left[\Phi(t) \right]^{2-\xi} - k(t)\Phi(t) \quad (3.7)$$

onde

$$\xi = d(\gamma + n\nu - 1) + 1 + \theta + (\eta + \mu)n + \mu'$$

Ao resolver a equação Eq. (3.7) em relação $\Phi(t)$, obtemos

$$\frac{\Phi(t)}{\Phi(0)} = \left[1 + k' \int_0^t dt \widetilde{D}(\tilde{t}) e^{(\xi-1) \int_0^t dt' k(t')} \right]^{(1/(\xi-1))} e^{-\int_0^t dt' k(t')} \quad (3.8)$$

com

$$k' = \frac{(1 - \xi)\bar{k}}{[\Phi(0)]^{\xi-1}}$$

Apresença de $\Phi(0)$ pode estar relacionada a uma distribuição que tem uma forma inicial dada. Também notamos que soluções semelhantes para a função dependente do tempo foram encontradas para diferentes equações de difusão não linear [1, 7, 56–58]. Este fato indica que diferentes equações de difusão têm propagação anômala similar na distribuição de probabilidade.

3.3 Equação de difusão fracionária não linear com dependência espacial

Para analisar o comportamento espacial, vamos realizar uma integração na Eq. (3.6), que nos leva a

$$\frac{d^{\mu'-1}}{dz^{\mu'-1}} \left\{ z^{d-1-\theta} [\tilde{\rho}(z)]^\gamma \left| \frac{d^\mu}{dz^\mu} [z^{-\eta} [\tilde{\rho}(z)]^\nu] \right|^n \right\} = \bar{k} z^d \tilde{\rho}(z) + \mathcal{C} \quad (3.9)$$

a partir da qual podemos analisar muitas situações diferentes. A nossa análise inicialmente será para o caso: $\mu' = 1$, com $\mu, \theta, \gamma, \eta$ e ν arbitrários e $\mathcal{C} = 0$, de modo a satisfazer a condição de contorno

$$\rho(\infty, t) = 0$$

Impondo estas condições, a Eq. (3.9) fica na forma

$$\left| \frac{d^\mu}{dz^\mu} [z^{-\eta} [\tilde{\rho}(z)]^\nu] \right|^n = \bar{k} z^{1+\theta} [\tilde{\rho}(z)]^{1-\gamma} \quad (3.10)$$

É um trabalho árduo encontrar uma solução geral para uma equação de difusão não linear como a Eq. (3.10), que contém derivada fracionária na variável espacial, e considerando ainda condições de contorno na forma $\rho(\infty, t) = 0$. Assim, para encontrar a solução de uma forma menos trabalhosa, vamos utilizar o ansatz

$$\tilde{\rho}(z) = \mathcal{N} z^{\alpha/\nu} (1 + bz)^{\beta/\nu} \quad (3.11)$$

Pela substituição do ansatz na Eq. (3.10) e usando a definição de derivada fracionária de Riemann-Liouville, ou seja

$$\frac{d^\delta}{dz^\delta} \left[z^\alpha (1 + bz)^\beta \right] = \frac{\Gamma[\alpha + 1]}{\Gamma[\alpha + 1 - \delta]} \frac{z^{\alpha-\delta}}{(1 + bz)^{\delta-\beta}} \quad (3.12)$$

para

$$\delta = \alpha + \beta + 1$$

podemos obter

$$\frac{\alpha}{\nu} = \frac{[1 + \theta(\eta + \mu)n][1 + \mu\theta + (1 + \mu)n]}{(\gamma + 1)[1 + \theta + (\eta + 2\mu)n]}$$

$$\frac{\beta}{\nu} = \frac{n\mu[1 + \theta + (1 + \mu)n]}{(\gamma + 1)[1 + \theta + (\eta + 2\mu)n]}$$

$$\nu = \frac{(1 - \gamma)(1 - \mu - \eta)}{[1 + \theta + (1 + \mu)n]} \quad (3.13)$$

onde

$$\mathcal{N} = \left\{ \left| \frac{\Gamma(1 + \alpha - \eta - \mu)}{\Gamma(1 + \alpha - \eta)} \right|^n \bar{k} \right\}^{1/(n\nu + \gamma - 1)}$$

Fazendo uma escolha adequada dos parâmetros $n, \mu, \mu', \eta, \theta$ e γ na Eq. (3.13) é possível recuperar os resultados fornecido pela equação encontrada nas Refs. [1, 7, 56–58], isto é,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho(r, t) &= \frac{\partial}{\partial |r|} \left\{ D(r, t) [\rho(r, t)]^\gamma \frac{\partial^{\mu-1}}{\partial |r|^{\mu-1}} [\rho(r, t)]^\nu \right\} \\ &- \frac{\partial}{\partial t} \{ F(r) \rho(r, t) \} + \alpha(t) [\rho(r, t)]^{\mu'} \end{aligned}$$

Fazendo a substituição dos parâmetros α, β e ν , na Eq. (3.11) podemos escrever a solução na forma

$$\tilde{\rho}(z) = \mathcal{N} \left\{ z^{\frac{[1+\theta+(\eta+\mu)n]}{(\gamma-1)}} (1 + bz)^{\frac{n\mu}{\gamma-1}} \right\}^{\frac{[1+\theta+(1+\mu)n]}{[1+\theta+(\eta+2\mu)n]}} \quad (3.14)$$

onde b é uma constante e, dependendo da situação analisada, pode assumir valores como ± 1 . A escolha do valor de $b = -1$ implica uma solução limitada, enquanto que, para o valor de $b = 1$, a solução abrange todo o espaço. Assim, dependendo da escolha dos parâmetros μ, θ, ν e γ a solução pode apresentar comportamento com cauda compacta, para $b = -1$, ou com cauda longa, para $b = 1$. Este último caso pode ser relacionado com a distribuição de Lévy. De fato, se considerarmos o limite assintótico para um argumento grande na Eq. (3.14) no caso caracterizado por um comportamento com cauda longa, temos

$$\rho(z) \sim \frac{1}{z^{\frac{[1+\theta+(1+\mu)n]}{1-\gamma}}}$$

Observamos que as distribuições que surgem a partir do formalismo Tsallis [64] têm um comportamento de lei da potência e podem estar conectadas à distribuição de Lévy, [65–70]. Neste sentido, também podemos relacionar nossas soluções àquelas que surgem no formalismo de Tsallis. Ao estabelecer a relação com aquele formalismo, também damos uma base termostatística para esta equação, de maneira similar à que ocorre entre a equação de difusão usual e a termoestatística de Boltzmann-Gibbs. Fazendo a comparação entre o comportamento apresentado pela Eq. (3.14) para um grande argumento com o limite assintótico $1/z^{2/(q-1)}$, obtido a partir da distribuições de Tsallis [64], obtemos

$$q = \frac{1 + 2(1 - \gamma)}{[1 + \theta + (1 + \mu)n]}$$

Este resultado permite-nos identificar o tipo de caudas e indica uma ligação, no limite assintótico, entre a Eq. (3.14) e as distribuições que surgem no formalismo de Tsallis.

Podemos agora empregar o mesmo procedimento para obter a solução quando $\mu' \neq 1$. Para este procedimento, vamos utilizar o mesmo ansatz (3.11) e a Eq. (3.12). Obtemos

$$\tilde{\rho}(z) = \tilde{\mathcal{N}} \left\{ z^{\frac{[\theta + (\eta + \mu)n + \mu']}{(1-\gamma)}} (1 + bz)^{\frac{n\mu + \mu' - 1}{1-\gamma}} \right\}^{\frac{[\theta + 2\mu' + (1 + \mu)n - 1]}{[1 - 2(n\mu + \mu') - n\eta - \theta]}} \quad (3.15)$$

com

$$\gamma = \frac{\left\{ 1 + d - [\mu' + (1 + \mu)n + \theta] \right\}}{(d + \mu')}$$

$$\tilde{\mathcal{N}} = \left\{ \left| \frac{\Gamma(1 + \bar{\alpha} - \eta)}{\Gamma(1 + \bar{\alpha} - \eta - \mu)} \right|^n \frac{\Gamma \left[\left(\frac{n+\gamma}{\bar{\nu}} \right) \bar{\alpha} + d - \theta - (\eta + \mu)n \right]}{\bar{k} \Gamma \left[\left(\frac{n+\gamma}{\bar{\nu}} \right) \bar{\alpha} + d + 1 - \theta - (\eta + \mu)n - \mu' \right]} \right\}^{\frac{1}{1-n\nu-\gamma}} \quad (3.16)$$

onde

$$\frac{\bar{\alpha}}{\bar{\nu}} = \left\{ \left[\frac{(\theta + (\eta + \mu)n + \mu')}{(1 - \gamma)} \right] \left[\frac{(\theta + 2\mu' + (1 + \mu)n - 1)}{(1 - 2(n\mu + \mu') - n\eta - \theta)} \right] \right\}$$

e

$$\bar{\nu} = \frac{(1 - \mu - \eta)(1 - \gamma)}{(2\mu' + (1 + \mu)n + \theta - 1)}$$

e, como antes, $b = \pm 1$ como pode ser visto na Fig.(3.1).

Outras situações podem ocorrer com a Eq. (3.1) quando incorporamos o termo k_ζ/r^ζ na força externa. Com o objetivo de manter o procedimento anterior, baseado no método da similaridade, vamos escolher o valor de $\zeta = \xi - 2$ e o coeficiente de difusão independente do tempo, isto é, $D(t) = D = \text{constante}$. Deste modo, consideraremos as seguintes situações:

- (i) $\mu' = 1$ e $\mu = 1$;
- (ii) $\mu' = 1$ e $\mu = -1$;
- (iii) $\mu' = 2$ e $\mu = 0$.

Como estamos interessados na solução que pode ser expressa em termos da função (3.4), a Eq. (3.1) pode ser simplificada e ficar na forma

$$z^{d-1-\theta} \tilde{\rho}^\gamma(z) \left| \frac{d}{dz} [z^{-\eta} \tilde{\rho}^\nu(z)] \right|^n = \bar{k} z^d \left(1 + \frac{k_\zeta}{D\bar{k}} z^{-1-\zeta} \right) \tilde{\rho}(z) \quad (3.17)$$

A solução para a equação (3.17) é dada por

$$\tilde{\rho}(z) = z^{\eta/\nu} \exp_q \left[-\tilde{\mathcal{H}} \int^z d\bar{z} \bar{z}^{1/n\nu(\theta\nu + \eta(1-\gamma))} \left(\bar{z} + \frac{k_\zeta}{D\bar{k}} \bar{z}^{-\zeta} \right)^{1/n} \right] \quad (3.18)$$

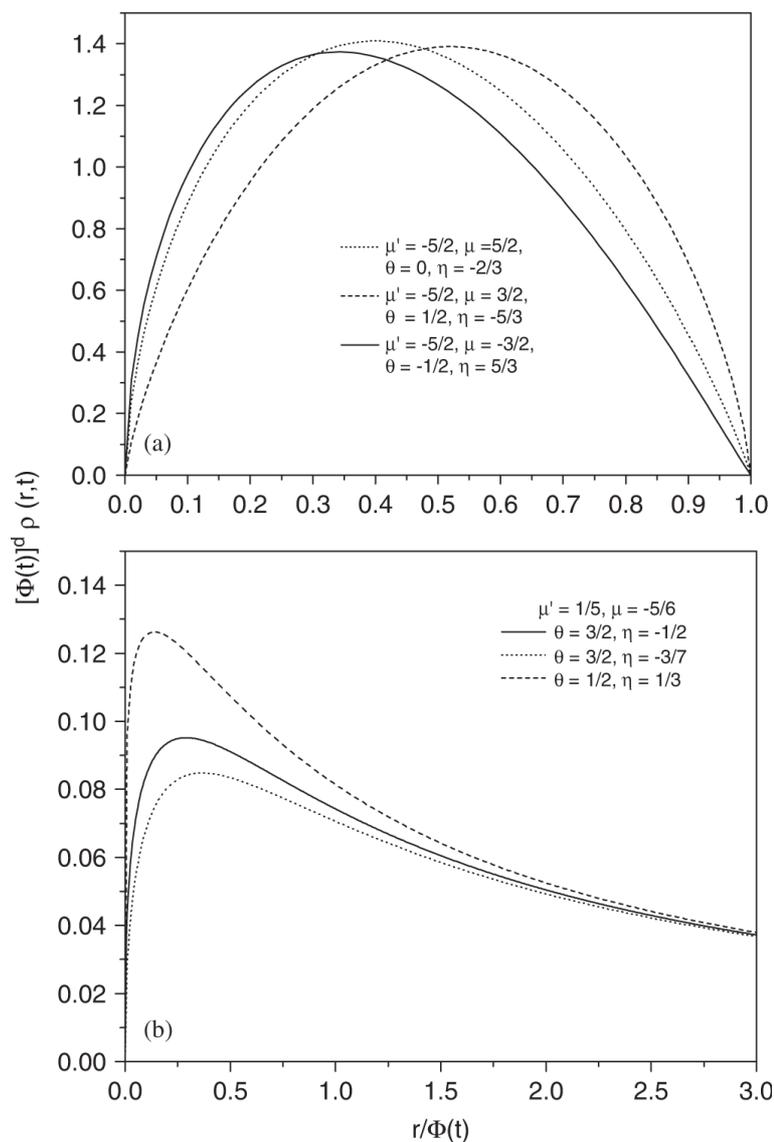


Figura 3.1: Mostra o comportamento de $[\Phi(t)]^d \rho(r,t)$ versus $r/\Phi(t)$ para valores característicos de μ, μ', θ e η na ausência de termo absorvente (fonte). Por simplicidade, estamos considerando $n = 1$ e $d = 1$. Observa-se que, dependendo da escolha específica destes parâmetros, podemos ter uma cauda compacta (a) ($b = -1$) ou uma cauda longa (b) ($b = 1$).

onde

$$q = \frac{1 - \nu + (1 - \gamma)}{n} \quad \text{e} \quad \tilde{\mathcal{H}} = \frac{\bar{k}^{1/n}}{\nu}$$

Note que

$$\exp_q[x] = [1 + (1 - q)x]^{1/(1-q)} \quad \text{para} \quad 1 + (1 - q)x \geq 0$$

de modo que

$$\exp_q[x] \equiv 0 \quad \text{para} \quad 1 + (1 - q)x < 0$$

Devemos observar que a $\exp_q[x]$ é a q -exponencial que aparece do formalismo Tsallis pela maximização da entropia de Tsallis [64]:

$$S_q = \frac{1 - \int dx \rho^q}{q - 1}$$

obedecendo os vínculos apropriados. Agora vamos analisar a segunda situação onde $\mu' = 1$ e $\mu = -1$. Obtemos

$$z^{d-1-\theta} \tilde{\rho}^\nu(z) \left| \int_0^z d\bar{z} [\bar{z}^{-\eta} \tilde{\rho}^\nu(\bar{z})] \right|^n = \bar{k} z^d \left(1 + \frac{k_\zeta}{D\bar{k}} z^{-1-\zeta} \right) \tilde{\rho}(z) \quad (3.19)$$

A solução para Eq. (3.19) é dada por

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(z) &= \left(z^{1+\theta} + \frac{k_\zeta}{D\bar{k}} z^{\theta-\zeta} \right)^{1/(\gamma-1)} \\ &\times \exp_{\bar{q}} \left[-\mathcal{H} \int^z d\bar{z} \bar{z}^{\nu\theta/(\gamma-1)-\eta} \left(\bar{z} + \frac{k_\zeta}{D\bar{k}} \bar{z}^{-\zeta} \right)^{\nu/(\gamma-1)} \right]^n \end{aligned} \quad (3.20)$$

com

$$\mathcal{H} = \frac{1}{(\gamma - 1)\bar{k}^{1/n}} \quad \text{e} \quad \bar{q} = n\nu + \gamma$$

Para analisar a última situação, vamos fazer a troca de \bar{k} por $-k$ e com \tilde{k} definido

pela condição de normalização. Assim, para o caso $\mu' = 2$ e $\mu = 0$, temos

$$\frac{d}{dz} [z^{d-1-\theta} \tilde{\rho}^\gamma(z) |z^{-\eta} \tilde{\rho}^\nu(z)|^n] = -\tilde{k} z^d \left(1 - \frac{k\zeta}{D\tilde{k}} z^{-1-\zeta}\right) \tilde{\rho}(z) \quad (3.21)$$

De maneira semelhante ao que ocorre no primeiro e no segundo caso, a solução também pode ser expressa em termos da função q -exponencial, como

$$\tilde{\rho}(z) = z^{\omega-1-d} \exp_{q'} \left[-\frac{\tilde{k}}{\omega(\gamma+n\nu)} \left(z^\omega - \frac{\omega k\zeta}{\tilde{k}D} \ln_{\tilde{q}}(z) \right) \right] \quad (3.22)$$

com

$$\omega = \frac{1+d+(1+\theta+\eta n-d)}{(\gamma+n\nu)}$$

$$q' = 2 - n\nu - \gamma \quad \tilde{q} = 2 + \zeta - \omega$$

e

$$\ln_{\tilde{q}}(z) \equiv \frac{z^{1-\tilde{q}} - 1}{1 - \tilde{q}}$$

é a função q -logarítmica, isto é, a função inversa da função q -exponencial definida anteriormente. As soluções encontradas para estes casos especiais também podem apresentar um comportamento de cauda compacta ou de cauda longa, dependendo dos parâmetros ν, γ, θ, n e η .

Desta forma, podemos concluir que a equação de difusão fracionária não linear em d -dimensões pode ser aplicada em diversas situações físicas, dependendo da escolha dos parâmetros ν, γ, θ, n e η . As soluções obtidas estão relacionadas com a distribuição de

Lévy para o caso caracterizado pelo comportamento de uma cauda longa. Aqui, também foi proposta uma conexão com o formalismo de Tsallis.

Equação de difusão fracionária com simetria radial

Vamos analisar a equação de difusão fracionária em \mathcal{N} -dimensões com simetria radial, considerando o coeficiente de difusão com dependência espacial e temporal, em uma região limitada e sujeita às condições de contorno com dependência temporal e que podem estar relacionadas às características das superfícies não homogêneas do sistema. Os resultados mostra um comportamento anômalo e um comportamento não usual da função densidade de probabilidade.

4.1 Introdução

Neste capítulo, a exemplo do que é feito em detalhes na Ref. [19], vamos considerar a equação de difusão fracionária

$$\frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(\mathbf{r}, t) = \int_0^t d\bar{t} \nabla \cdot (\tilde{D}(r, t - \bar{t}) \nabla \rho(r, \bar{t})) \quad (4.1)$$

tomando uma situação em \mathcal{N} -dimensões e considerando o caso com simetria radial no qual

$$(\tilde{D}(r, t) \nabla \dots) \equiv r^{1-\mathcal{N}} \partial_r (r^{\mathcal{N}-1} \tilde{D}(r, t) \partial_r \dots) \quad (4.2)$$

para o caso subdifusivo $0 < \gamma \leq 1$, e considerando, também, que o coeficiente de difusão é dado por:

$$\tilde{D}(r, t) = D(t) r^{-\eta}$$

onde $D(t)$ é uma função dependente do tempo, η é um número real e a derivada fracionária temporal utilizada é a derivada de Caputo [84] (Apêndice A.2).

A Eq. (4.1) pode ser empregada em várias situações, em particular para os casos em que o processo difusivo é governado por equação de difusão fracionária, com simetria esférica e cilíndrica, sujeita as condições de bordas com dependência espacial e temporal [85–87]. Desta forma, muitos casos apresentados na literatura são estendidos a um contexto mais amplo, que podem apresentar, por exemplo, diferentes regimes de propagação da solução ou ligação com a equação fracionária para uma condição de distribuição de acordo com uma escolha apropriada de $D(t)$.

Para analisar a Eq. (4.1) na presença de condições de contorno dependentes do tempo, isto é, superfícies não homogêneas, usaremos a abordagem da função de Green [88]. A função de Green será útil para encontrar várias propriedades relacionadas à Eq. (4.1), já que ela contém o comportamento dinâmico do sistema e pode esclarecer a influência da superfície sobre a propagação da solução e o comportamento da probabilidade de sobrevivência. Neste sentido, as soluções obtidas possuem características notáveis e podem encontrar aplicações. Um exemplo é o fenômeno de adsorção onde o efeito de memória desempenha um papel importante [89, 90], na presença de uma contorno reativa [91] e na primeira passagem temporal em regiões confinadas [92, 93].

Nossa primeira análise será realizada considerando a Eq. (4.1) com $\tilde{D}(t) = D\delta(t)r^{-\eta}$, na ausência do termo de reação, isto é, quando $\alpha(r, t) = 0$, sujeito às condições de

contorno

$$\rho(r, t)|_{r=a} = \tilde{\Phi}_a(t) \quad \text{e} \quad \rho(r, t)|_{r=b} = \tilde{\Phi}_b(t)$$

onde $\tilde{\Phi}_a(t)$ e $\tilde{\Phi}_b(t)$ são duas funções quaisquer e dependente do tempo. Depois disso, analisamos a solução para a Eq. (4.1) com o coeficiente de difusão na forma

$$\tilde{D}(r) = [D\delta(t) + \bar{D}(t)]r^{-n}$$

e incorporando também o termo de reação $\alpha(r, t)$, que representa uma taxa de geração ou remoção da substância difundida [95].

4.2 Equação de difusão fracionária

Iniciemos nossa análise considerando a Eq. (4.1) sujeita às condições de contorno com dependência no tempo na forma;

$$\rho(r, t)|_{r=a} = \tilde{\Phi}_a(t) \quad \text{e} \quad \rho(r, t)|_{r=b} = \tilde{\Phi}_b(t)$$

e condição inicial

$$\rho(r, 0) = \tilde{\rho}(r)$$

com o coeficiente de difusão

$$\tilde{D}(r, t) = D\delta(t)r^{-n}$$

Para este caso, a Eq. (4.1) pode ser escrita como:

$$\frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(r, t) = D \nabla \cdot (r^{-n} \nabla \rho(r, t)) \quad (4.3)$$

com $0 < \gamma \leq 1$. Esta equação é uma extensão da equação de difusão usual pela incorporação da derivada fracionária, que produz uma propagação anômala da condição inicial e pode ser obtida a partir do formalismo de caminhantes aleatórios com tempo contínuo [96]. Além disso, nota-se que, dependendo da escolha de $\Phi_a(t)$ e $\Phi_b(t)$, o sistema pode apresentar uma solução estacionária que é a mesma que a obtida para a equação de difusão usual. Esta característica indica que a presença da derivada fracionária temporal produz um relaxamento anômalo para o estado estacionário, em contraste com a derivada fracionária espacial que conduz na direção da distribuição de Lévy.

Para obter a solução para a Eq. (4.3) e examinar a influência das condições de contorno sobre a relaxação do sistema e a probabilidade de sobrevivência, vamos usar a transformada de Laplace e a abordagem da função de Green. Depois de alguns cálculos, é possível mostrar que a solução da Eq. (4.3) no espaço de Laplace é dada por

$$\begin{aligned} \hat{\rho}(r, s) = & -s^{\gamma-1} \int_a^b dr' r'^{\mathcal{N}-1} \hat{\mathcal{G}}(r, r'; s) \tilde{\rho}(r') + \left[D b^{\mathcal{N}-1-\eta} \tilde{\Phi}_b(s) \frac{\partial}{\partial r'} \hat{\mathcal{G}}(r, r'; s) \Big|_{r'=b} \right. \\ & \left. - D a^{\mathcal{N}-1-\eta} \tilde{\Phi}_a(s) \frac{\partial}{\partial r'} \hat{\mathcal{G}}(r, r'; s) \Big|_{r'=a} \right] \end{aligned} \quad (4.4)$$

onde os últimos termos correspondem aos efeitos de superfície e determinam a existência de uma solução estacionária para o processo. Eles também podem estar relacionados a vários processos, em especial com a adsorção em superfícies fractais [97]. A função de Green $\hat{\mathcal{G}}(\bar{r}, \bar{r}'; s)$ obedece à equação

$$D \nabla \cdot \left(r^{-\eta} \nabla \hat{\mathcal{G}}(r, r'; s) \right) - s^\gamma \hat{\mathcal{G}}(r, r'; s) = \frac{1}{r^{\mathcal{N}-1}} \delta(r - r') \quad (4.5)$$

e deve satisfazer as condições de contorno

$$\mathcal{G}(r, r'; s)|_{r=b} = 0 \quad \text{e} \quad \mathcal{G}(r, r'; s)|_{r=a} = 0$$

Recorrendo ao problema das autofunções de Sturm-Liouville, relacionado ao operador

especial da Eq. (4.5), temos

$$\nabla \cdot (r^{-\eta} \nabla \Psi(r, k_n)) = -k_n^2 \Psi(r, k_n)$$

com

$$\Psi(a, k_n) = \Psi(b, k_n) = 0$$

é possível mostrar que

$$\widehat{\mathcal{G}}(\bar{r}, \bar{r}'; s) = -\frac{1}{2 + \eta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\mathcal{N}_n}{s^\gamma + Dk_n^2} \Psi(r, k_n) \Psi(r', k_n) \quad (4.6)$$

onde

$$\begin{aligned} \Psi(r, k_n) &= r^{\frac{1}{2}(2+\eta-\mathcal{N})} \left(J_\alpha \left(\frac{2k_n}{2+\eta} r^{\frac{1}{2}(2+\eta)} \right) N_\alpha \left(\frac{2k_n}{2+\eta} a^{\frac{1}{2}(2+\eta)} \right) \right. \\ &\quad \left. - J_\alpha \left(\frac{2k_n}{2+\eta} a^{\frac{1}{2}(2+\eta)} \right) N_\alpha \left(\frac{2k_n}{2+\eta} r^{\frac{1}{2}(2+\eta)} \right) \right) \end{aligned}$$

com

$$\alpha = \frac{\mathcal{N}}{(2 + \eta) - 1} \quad (\alpha \geq 0)$$

e $J_\alpha(x)$, $N_\alpha(x)$ são as funções de Bessel de primeira e segunda espécie, respectivamente, k_n são as soluções da equação de autovalores:

$$J_\alpha \left(\frac{2k_n}{2+\eta} b^{\frac{1}{2}(2+\eta)} \right) N_\alpha \left(\frac{2k_n}{2+\eta} a^{\frac{1}{2}(2+\eta)} \right) - J_\alpha \left(\frac{2k_n}{2+\theta} a^{\frac{1}{2}(2+\eta)} \right) N_\alpha \left(\frac{2k_n}{2+\eta} b^{\frac{1}{2}(2+\eta)} \right) = 0 \quad (4.7)$$

e

$$\mathcal{N}_n = (\pi k_n)^2 \left\{ \left[\frac{J_\alpha \left(\frac{2k_n}{2+\eta} a^{\frac{1}{2}(2+\eta)} \right)}{J_\alpha \left(\frac{2k_n}{2+\eta} b^{\frac{1}{2}(2+\eta)} \right)} \right]^2 - 1 \right\}^{-1}$$

Fazendo a transformada inversa de Laplace na Eq. (4.4), obtemos

$$\begin{aligned} \rho(r, t) &= -\frac{1}{\Gamma(1-\gamma)} \int_0^t dt' \frac{1}{(t-t')^\gamma} \int_a^b dr' r'^{\mathcal{N}-1} \mathcal{G}(r, r'; t') \tilde{\rho}(r') \\ &+ \int_0^t dt' \left[D b^{\mathcal{N}-1-\eta} \tilde{\Phi}_b(t-t') \frac{\partial}{\partial r'} \mathcal{G}(r, r'; t') \Big|_{r'=b} \right. \\ &\left. - D a^{\mathcal{N}-1-\eta} \tilde{\Phi}_a(t-t') \frac{\partial}{\partial r'} \mathcal{G}(r, r'; t') \Big|_{r'=a} \right] \end{aligned} \quad (4.8)$$

com

$$\mathcal{G}(r, r'; t) = -\frac{t^{\gamma-1}}{2+\eta} \sum_{n=1}^{\infty} \mathcal{N}_n \Psi(r, k_n) \Psi_n(r', k_n) \mathbf{E}_{\gamma, \gamma}(-D k_n^2 t^\gamma) \quad (4.9)$$

onde

$$\mathbf{E}_{\alpha, \beta}(x) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{x^i}{\Gamma(\beta + \alpha i)}$$

que é a generalização da função Mittag-Leffler definida em (2.28) conforme podemos ver no gráfico da Fig. 4.1.

A presença desta função na solução indica uma propagação anômala da distribuição devido à presença de derivadas fracionárias temporais na Eq. (4.1), que pode ser verificado pela análise do comportamento do segundo momento. Um notável resultado pode ser obtido a partir da Eq. (4.8) tomando o limite de $b \rightarrow \infty$, compatível com a condição de

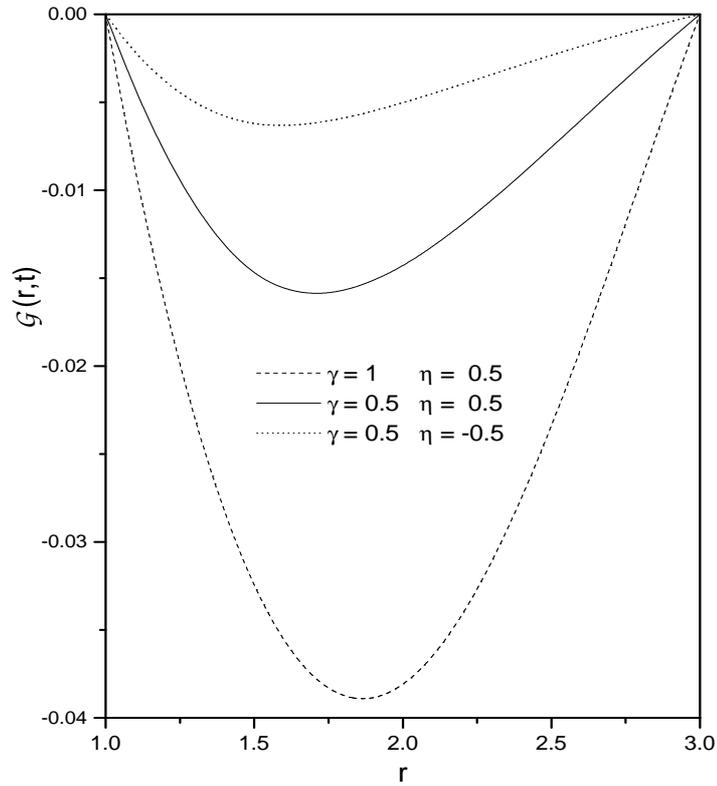


Figura 4.1: Comportamento de $\mathcal{G}(r, t)$ versus r obtido a partir da Eq. (4.9) para um valor típico de γ e η . Para simplificar, estamos considerando $D = 1$, $t = 1$, $\mathcal{N} = 3$, $a = 1$ e $b = 3$.

contorno $\rho(\infty, t) = 0$. Para este caso, a solução é dada por

$$\begin{aligned} \rho(r, t) = & -\frac{1}{\Gamma(1-\gamma)} \int_0^t dt' \frac{1}{(t-t')^\gamma} \int_a^b dr' r'^{\mathcal{N}-1} \mathcal{G}(r, r'; t') \tilde{\rho}(r') \\ & - D \int_0^t dt' \alpha^{\mathcal{N}-1-\eta} \tilde{\Phi}_a(t-t') \left. \frac{\partial}{\partial r'} \mathcal{G}(r, r'; t') \right|_{r'=a} \end{aligned} \quad (4.10)$$

com a função Green

$$\mathcal{G}(r, r'; t) = -\frac{2t^{\gamma-1}}{2+\eta} \int_0^\infty dk \frac{k\Psi(r, k)\Psi(r', k)\mathbf{E}_{\gamma, \gamma}(-k^2 t^\gamma)}{\mathbf{J}_\alpha^2\left(\frac{2k}{2+\eta}a^{\frac{1}{2}(2+\eta)}\right) + \mathbf{N}_\alpha^2\left(\frac{2k}{2+\eta}a^{\frac{1}{2}(2+\eta)}\right)} \quad (4.11)$$

Consideremos, agora, a Eq. (4.1) quando o coeficiente de difusão tem a forma

$$\tilde{D}(r, t) = D(t)r^{-\eta}$$

com

$$D(t) = D + \bar{D}(t)$$

Vamos, também, incorporar à Eq. (4.1) um termo fonte (reação ou absorção) $\alpha(r, t)$, a fim de estender a solução para um contexto mais amplo e possibilitar uma investigação, por exemplo, de fenômenos como a absorção de droga [98], desenvolvimento de tumor [99], e o fluxo de calor envolvendo produção de calor [97]. Aplicando os mesmos procedimentos do caso anterior, a solução da Eq. (4.1) para este caso é dada por

$$\begin{aligned} \rho(r, t) = & -\frac{1}{\Gamma(1-\gamma)} \int_0^t dt' \frac{1}{(t-t')^\gamma} \int_a^b dr' r'^{\mathcal{N}-1} \tilde{\mathcal{G}}(r, r'; t') \tilde{\rho}(r') \\ & - \int_0^t dt' \int_a^b dr' r'^{\mathcal{N}-1} \alpha(r', t') \tilde{\mathcal{G}}(r, r'; t-t') \\ & + \int_0^t dt' \left[Db^{\mathcal{N}-1-\eta} \tilde{\Phi}_b(t-t') \frac{\partial}{\partial r'} \tilde{\mathcal{G}}(r, r'; t') \right]_{r'=b} \\ & - \left[Da^{\mathcal{N}-1-\eta} \tilde{\Phi}_a(t-t') \frac{\partial}{\partial r'} \tilde{\mathcal{G}}(r, r'; t') \right]_{r'=a} \end{aligned} \quad (4.12)$$

com a função de Green dada por

$$\tilde{\mathcal{G}}(r, r'; t) = \mathcal{G}(r, r'; t) - \frac{1}{2 + \eta} \sum_{n=1}^{\infty} \mathcal{N}_n \Psi(r, k_n) \Psi(r', k_n) \Theta(t, k_n) \quad (4.13)$$

onde

$$\begin{aligned} \Theta(t, k_n) &= \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-k_n^2)^m}{m!} \int_0^t dt_m \bar{D}(t - t_m) \cdots \int_0^{t_3} dt_2 \bar{D}(t_3 - t_2) \\ &\times \int_0^t dt_2 \bar{D}(t_2 - t_1) t_1^{(m+1)\gamma-1} \mathbf{E}_{\gamma, \gamma}^{(m)}(-k_n^2 t_1^\gamma) \end{aligned} \quad (4.14)$$

e

$$\mathbf{E}_{\alpha, \beta}^{(m)}(y) \equiv \frac{d^m \mathbf{E}_{\alpha, \beta}(y)}{dy^m}$$

Esse resultado estende os resultados encontrados nas Refs. [85–87], considerando o caso \mathcal{N} -dimensional, com um coeficiente de difusão dependente do espaço e tempo, e levando em conta as condições de contorno não homogêneas. Neste sentido, também são entendidos os resultados encontrados nas Refs. [37, 94].

Utilizando os resultados acima, na ausência do termo de reação, podemos obter a *probabilidade de sobrevivência* $\mathcal{S}(t)$, que está relacionada à distribuição na primeira passagem temporal, isto é, $\mathcal{F}(t) = -\partial \mathcal{S}(t) / \partial t$ [95]. Assim, podemos mostrar que $\mathcal{S}(t)$ é

dado por

$$\begin{aligned}
\mathcal{S}(t) &= -\frac{a^{\frac{1}{2}(\mathcal{N}-\eta)-1}}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\mathcal{N}_n}{k_n^2} \left(1 - \frac{b^{\frac{1}{2}(\mathcal{N}-\eta)-1} \mathbf{J}_\alpha \left(\frac{2k_n}{2+\eta} a^{\frac{1}{2}(2+\eta)} \right)}{a^{\frac{1}{2}(\mathcal{N}-\eta)-1} \mathbf{J}_\alpha \left(\frac{2k_n}{2+\eta} b^{\frac{1}{2}(2+\eta)} \right)} \right) \\
&\times \left\{ \int_a^b dr' r'^{\mathcal{N}-1} \bar{\rho}(r') \Psi(r, k_n) \Upsilon(t, k_n) - \frac{2+\eta}{\pi^2} D a^{\frac{1}{2}(\mathcal{N}-\eta)-1} \right. \\
&\times \left. \int_0^t d\bar{t} \Theta(t-\bar{t}, k_n) \left[\Phi_a(\bar{t}) - \frac{b^{\frac{1}{2}(\mathcal{N}-\eta)-1} \mathbf{J}_\alpha \left(\frac{2k_n}{2+\eta} a^{\frac{1}{2}(2+\eta)} \right)}{a^{\frac{1}{2}(\mathcal{N}-\eta)-1} \mathbf{J}_\alpha \left(\frac{2k_n}{2+\eta} b^{\frac{1}{2}(2+\eta)} \right)} \Phi_b(\bar{t}) \right] \right\} \quad (4.15)
\end{aligned}$$

com

$$\begin{aligned}
\Upsilon(t, k_n) &= \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-k_n^2)^m}{m!} \int_0^t dt_m \bar{D}(t-t_m) \cdots \int_0^{t_3} dt_2 \bar{D}(t_3-t_2) \\
&\times \int_0^{t_2} dt_1 \bar{D}(t_2-t_1) t_1^{m\gamma} \mathbf{E}_\gamma^{(m)}(-D k_n^2 t_1^\gamma) \quad (4.16)
\end{aligned}$$

e o seu comportamento está ilustrado na Fig. 4.2.

Em conclusão, investigamos as soluções de uma equação de difusão fracionária em \mathcal{N} -dimensões levando em conta uma simetria radial, com um coeficiente de difusão apresentando uma dependência espaço-temporal genérica. Os resultados aqui apresentados podem ser relevantes quando o fenômeno de difusão anômala é considerado na presença de superfícies que desempenham papel importante no comportamento do sistema.

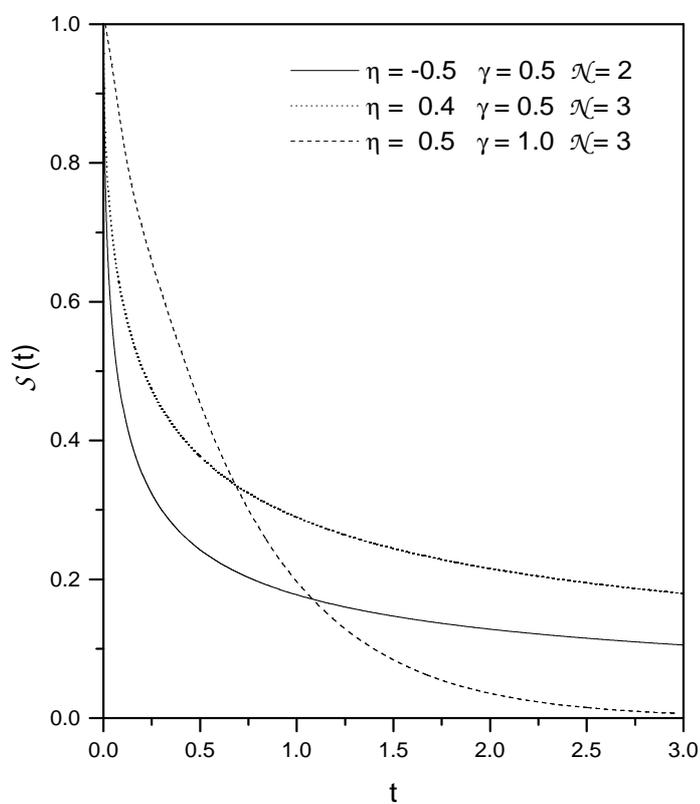


Figura 4.2: Comportamento de $\mathcal{S}(t)$ versus t a fim de ilustrar a Eq. (4.15) para valores típicos de \mathcal{N} , θ e γ . Por simplicidade, consideramos as condições de contorno $\rho(a, t) = 0$ e $\rho(b, t) = 0$, $D = 1$, $a = 1$, $b = 3$, e $\rho(r, 0) = \delta(r - 3/2)/r^{\mathcal{N}-1}$.

Conclusão e considerações finais

Desde do primeiro artigo (Fick – 1855) sobre difusão, passando pelo movimento browniano onde Einstein mostrou "que, admitindo a validade da teoria molecular do calor, corpos de ordem de magnitude de 1/1000 mm, em suspensão em líquidos, já devem executar um movimento aleatório observável, gerado pelo movimento térmico" [20], até o momento presente, tem-se observado uma surpreendente ampliação da aplicabilidade dos conhecimentos referentes à difusão e aos tópicos matemáticos relacionados a ela. Como vimos ao longo do presente trabalho, a equação de difusão têm sido aplicada no estudo de várias situações físicas. Portanto, é de fundamental importância a obtenção de soluções para o maior número possível de situações. No primeiro capítulo, como ponto de partida e para tornar mais claros os resultados de nosso trabalho, mostramos o que já está na literatura, os deslocamentos quadráticos médios das partículas em suspensão, e não suas velocidades, como as quantidades observáveis apropriadas, pois o segundo momento é a "impressão digital" dos processos difusivos, conforme as equações (1.26) e (1.38), onde a distribuição de probabilidades dos deslocamentos resultantes foi linear, durante o transcorrer do tempo arbitrário t , e o perfil da concentração é uma gaussiana.

No segundo capítulo, vimos no formalismo de caminhantes aleatórios, que a difusão usual requer que tanto o tempo médio de espera $\langle \tau \rangle$ quanto o segundo momento $\langle x^2 \rangle$ sejam finitos. Se assim não for, teremos um processo subdifusivo no caso de $\langle \tau \rangle$ divergir e superdifusivo no caso em que $\langle x^2 \rangle$ é infinito. Foram empregadas derivadas

fracionárias tanto na variável temporal como na variável espacial, que nos levaram a uma difusão anômala com o segundo momento finito, isto é, $\langle x^2 \rangle \propto t^\alpha$, quando o emprego de derivadas fracionárias é na variável temporal; e quando for na variável espacial, resultará em uma difusão anômala cujo segundo momento não é finito, dando origem às chamadas distribuições de Lévy. As soluções encontradas para os dois casos foram escritas em termos das funções H de Fox, da derivada fracionária de Caputo e das funções de Mittag-Leffler, pois estas se mostraram muito apropriadas à forma como desenvolvemos nossos cálculos.

No terceiro capítulo, procuramos escrever as soluções encontradas em termos das funções q -exponencial e q -logarítmica, que são inerentes à estatística generalizada proposta por C. Tsallis, a qual sugere um contexto termoestatístico diferente para a Eq. (3.1). Ela exibem um comportamento cuja cauda pode ser pequena ou longa dependendo da escolha dos parâmetros $\mu, \mu', \theta, \delta, \eta, \nu$ presentes na equação. Em particular, para o comportamento com cauda longa, ocorre uma conexão com as distribuições de Lévy, que correspondem a um processo de difusão anômala superdifusivo. Ali também concluímos que o resultado proposto pode ser utilizado com sucesso para descrever uma classe geral de aplicações relacionadas à difusão anômala.

Finalmente, no quarto capítulo, fizemos uso da equação de difusão fracionária em \mathcal{N} -dimensões, considerando uma simetria radial e também o coeficiente de difusão com uma dependência espacial e temporal, isto é, $D(r, t) = D(t)r^\eta$. Num primeiro momento, trabalhamos com a equação de difusão fracionária na ausência do termo de reação e considerando uma condição de contorno não homogênea e dependente do tempo, $D(t) = D\delta(t)$. Neste caso, a distribuição tem uma propagação anômala devido à presença da derivada fracionária e da condição de contorno que é dependente do tempo. Num segundo momento, incorporamos ao problema um coeficiente de difusão dependente do tempo, isto é, $D(t) = D + \bar{D}(t)$ e o termo de reação $\bar{\alpha}(r, t)$, e observamos que a dependência temporal produziu diferentes regimes difusivos na solução, que podem estar relacionados com o estado de espalhamento na equação de difusão fracionária.

Esperamos que os resultados aqui apresentados possam ser úteis para estudar os sistemas onde a difusão anômala está presente e desempenha um papel importante.

Apêndice **A**

Funções Especiais

A.1 Operador Fracionário de Riemann-Liouville

Uma maneira de fazer a introdução formal das derivadas fracionárias é começar lembrando da propriedade da derivada usual, a saber:

$$D^1 x^a = ax^{a-1} \Rightarrow D^n x^a = x^{a-n} \prod_{m=0}^{n-1} (a-m) = \frac{a!}{(a-n)!} x^{a-n} \quad (\text{A.1})$$

Generalizando-a para a ordem fracionária, temos:

$$D^\alpha x^a = \frac{\Gamma(a+1)}{\Gamma(a-\alpha+1)} x^{a-\alpha} \quad (\text{A.2})$$

A Eq. (A.2), que corresponde à derivada de Riemann-Liouville, é ideal para trabalhar com funções que podem ser desenvolvidas em série de Taylor [102] como, por exemplo,

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n x^n \Rightarrow D^\alpha f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n D^\alpha x^n = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n \frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(n-\alpha+1)} x^{n-\alpha} \quad (\text{A.3})$$

Desenvolvendo a função em série de Taylor

$$f(x+a) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{D^n f(a)}{n!} x^n \Rightarrow D^\alpha f(x+a) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{D^n f(a)}{\Gamma(n-\alpha+1)} x^{n-\alpha} \quad (\text{A.4})$$

A segunda maneira, mais elegante, de trabalhar com derivadas fracionárias, é baseada na fórmula de Cauchy [103]:

$$D^{-1}f(x) = \int_0^x f(t)dt, \quad D^{-2}f(x) = \int_0^x \int_0^{t_2} f(t_1)dt_1dt_2 \quad (\text{A.5})$$

O cálculo da segunda integral pode ser simplificado, trocando a ordem da integração, na forma

$$\begin{aligned} D^{-2}f(x) &= \int_0^x \int_0^{t_2} f(t_1)dt_1dt_2 = \int_0^x \int_{t_1}^x f(t_1)dt_2dt_1 \\ &= \int_0^x f(t_1) \int_{t_1}^x dt_2dt_1 = \int_0^x f(t)(x-t)dt \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Este método pode ser aplicado repetidas vezes, resultando em:

$$D^{-n}f(x) = \frac{1}{(n-1)!} \int_0^x f(t)(x-t)^{n-1}dt \quad (\text{A.7})$$

Generalizando para valores fracionários, que é a derivada de Riemann-Liouville, fica:

$$D^\alpha f(x) = \frac{1}{\Gamma(-\alpha)} \int_0^x \frac{f(t)}{(x-t)^{1-\alpha}}dt \quad (\text{A.8})$$

A derivada de Riemann-Liouville com o limite de integração inferior a é:

$${}_aD_x^\alpha f(x) = \frac{1}{\Gamma(-\alpha)} \int_a^x \frac{f(t)}{(x-t)^{\alpha+1}}dt \quad (\text{A.9})$$

${}_a D_x^\alpha$ é o operador fracionário de Riemann-Liouville. A α -ésima derivada fracionária é, então,

$${}_a D_x^\alpha f(x) = \frac{d^n}{dt^n} {}_a D_x^{\alpha-n} f(x). \quad (\text{A.10})$$

A partir da definição anterior, para uma potência qualquer e $a = 0$, obtemos

$${}_0 D_x^\alpha x^\mu = \frac{\Gamma(\mu + 1)}{\Gamma(\mu - \alpha + 1)} x^{\mu-\alpha} \quad (\text{A.11})$$

que coincide com a generalização heurística da diferenciação padrão (A.1). Uma consequência da definição (A.11) é que a diferenciação e a integração de uma constante é

$${}_0 D_x^\alpha 1 = \frac{1}{\Gamma(1 - \alpha)} x^{-\alpha} \quad (\text{A.12})$$

A transformada de Laplace do operador Riemann-Liouville será:

$$\mathcal{L}\{{}_0 D_t^{-\alpha} f(t)\} = u^{-\alpha} \mathcal{L}\{f(t)\}. \quad (\text{A.13})$$

A.2 Derivada Fracionária de Caputo

A derivada de ordem μ , no sentido de Caputo, é definida da seguinte maneira [31, 87]:

$$\frac{d^\alpha f(t)}{dt^\alpha} = \frac{1}{\Gamma(n - \alpha)} \int_0^t \frac{1}{(t - \tau)^{1+\alpha-n}} \frac{d^n f(\tau)}{dt^n} d\tau \quad n - 1 < \alpha < n, \quad (\text{A.14})$$

ou

$$\frac{d^\alpha f(t)}{dt^\alpha} = \frac{d^n f(t)}{dt^n} \quad \alpha = n. \quad (\text{A.15})$$

A transformada de Laplace requer o conhecimento do valor inicial da função $f(t)$:

$$\mathcal{L} \left\{ \frac{d^\alpha f(t)}{dt^\alpha} \right\} = s^\alpha \mathcal{L}\{f(t)\} - \sum_{k=0}^{n-1} f^{(k)}(0^+) s^{\alpha-1-k}, \quad n-1 < \alpha < n \quad (\text{A.16})$$

onde $k = 1, 2, \dots, n-1$.

A.3 Função H

As funções H, introduzida por Fox, em 1961, são funções que abrangem uma larga classe de funções especiais conhecidas em física matemática, tais como: funções de Bessel, funções hipergeométricas, funções de Meijer, etc. São uma ferramenta matemática que permite tratar vários fenômenos, incluindo a difusão anômala, o cálculo fracionário e processos estocásticos não gaussianos, com uma estrutura unificada e elegante [30, 44].

De acordo com a notação padrão de Fox, a função H é definida como:

$$H_{p,q}^{m,n}(z) = H_{p,q}^{m,n} \left[z \left| \begin{matrix} (a_p, \alpha_p) \\ (b_q, \beta_q) \end{matrix} \right. \right] = \frac{1}{2\pi i} \int_L \chi(s) z^s ds \quad (\text{A.17})$$

com a densidade integrante:

$$\chi(s) = \frac{A(s)B(s)}{C(s)D(s)}$$

e

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

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

onde m, n, p e q são inteiros tais que $0 \leq n \leq p$, $1 \leq m \leq q$ e $\{a_j, b_j\} \in \mathbb{C}$, $\{\alpha_j, \beta_j\} \in \mathbb{R}^+$. Quando ocorrer um produto vazio, é considerada a seguinte forma

$$n = 0 \iff B(s) = 1$$

$$m = q \iff C(s) = 1$$

$$n = p \iff D(s) = 1$$

Devido à estrutura do núcleo $\chi(s)$, definido na integral (A.17), as funções de Fox satisfazem várias propriedades úteis como, por exemplo, as listadas abaixo.

Propriedade 1. Para $k > 0$,

$$H_{p,q}^{m,n} \left[x \left| \begin{matrix} (a_p, \alpha_p) \\ (b_q, \beta_q) \end{matrix} \right. \right] = k H_{p,q}^{m,n} \left[x^k \left| \begin{matrix} (a_p, k\alpha_p) \\ (b_q, k\beta_q) \end{matrix} \right. \right]$$

Propriedade 2.

$$x^\sigma H_{p,q}^{m,n} \left[x \left| \begin{matrix} (a_p, \alpha_p) \\ (b_q, \beta_q) \end{matrix} \right. \right] = H_{p,q}^{m,n} \left[x \left| \begin{matrix} (a_p, \sigma\alpha_p, \alpha_p) \\ (b_q, \sigma\beta_q, \beta_q) \end{matrix} \right. \right]$$

Propriedade 3.

$${}_0D_z^\nu \left(z^\eta H_{p,q}^{m,n} \left[(az)^\lambda \left| \begin{matrix} (a_p, \alpha_p) \\ (b_q, \beta_q) \end{matrix} \right. \right] \right) = z^{\eta-\nu} H_{p+1,q+1}^{m,n+1} \left[(az)^\lambda \left| \begin{matrix} (-\eta, \lambda), (a_p, \alpha_p) \\ (b_q, \beta_q), (\nu-\eta, \lambda) \end{matrix} \right. \right]$$

Algumas funções especiais e sua representação em termos das funções de Fox:

$$z^b e^{-z} = H_{0,1}^{1,0} \left[z \left| \overline{(b, 1)} \right. \right];$$

$$\frac{1}{(1+z)^r} = H_{1,1}^{1,1} \left[z \left| \begin{matrix} (1-r, 1) \\ (0, 1) \end{matrix} \right. \right]$$

$$\frac{z^\mu}{1+az^\omega} = a^{-\mu/\omega} H_{1,1}^{1,1} \left[az^\omega \left| \begin{matrix} (\mu/\omega, 1) \\ (\mu/\omega, 1) \end{matrix} \right. \right]$$

Generalização da função Mittag-Leffler ($E_{\alpha,1}(z) = E_\alpha(z)$)

$$E_{\alpha,\beta}(-z) = H_{1,2}^{1,1} \left[z \left| \begin{matrix} (0, 1) \\ (0, 1), (1-\beta, \alpha) \end{matrix} \right. \right] = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{z^j}{\Gamma(\beta + \alpha j)}$$

A.4 Funções de Mittag-Leffler

As funções de Mittag-Leffler, $E_{\alpha,\beta}(z)$, são as mais usadas em cálculo fracionário, fornecem uma possível generalização da função exponencial e da função erro, e são definidas pela seguinte série [13]:

$$E_{\alpha,\beta}(z) := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\Gamma(\alpha n + \beta)}, \quad (\alpha > 0, \beta > 0) \quad (\text{A.18})$$

São casos particulares simples:

$$E_{1,2}(z) = \frac{e^z - 1}{z} \quad \text{e} \quad E_{2,2}(z) = \frac{\sinh(z^{1/2})}{z^{1/2}}$$

Para $\beta = 1$, obtemos a função de Mittag-Leffler em um parâmetro:

$$E_{\alpha,1}(z) := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\Gamma(\alpha n + 1)} \equiv E_{\alpha}(z) \quad (\text{A.19})$$

Casos particulares são:

$$E_2(+z^2) = \cosh z \quad \text{e} \quad E_2(-z^2) = \cos z, \quad z \in \mathbb{C}$$

e

$$E_{1/2}(\pm z^2) = e^z [1 + \operatorname{erf}(\pm z^{1/2})] = e^z \operatorname{erfc}(\mp z^{1/2}) \quad z \in \mathbb{C}$$

onde erf (erfc) é definida como função erro (função erro complementar):

$$\operatorname{erf}(z) := \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-u^2} du, \quad \operatorname{erfc}(z) := 1 - \operatorname{erf}(z) \quad z \in \mathbb{C}$$

A função de Mittag-Leffler está relacionada com a integral de Laplace através da equação

$$\int_0^{\infty} e^{-u} E_{\alpha}(u^{\alpha} z) du = \frac{1}{1-z}, \quad \alpha > 0 \quad (\text{A.20})$$

A.5 Função de Green

A função de Green fornece um método para tratamento de equação diferencial com um termo de fonte e é usada para resolver equações diferenciais não homogêneas sujeitas a condições de contorno. Seja L um operador diferencial linear e considere a equação diferencial

$$Lu(\vec{r}) = -4\pi\varphi(\vec{r}) \quad (\text{A.21})$$

onde φ é uma função conhecida, denominada *fonte* e u é a função incógnita. Denomina-se *função de Green* do operador linear L , a função $G(\vec{r} - \vec{r}')$ tal que

$$LG(\vec{r} - \vec{r}') = -4\pi\delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (\text{A.22})$$

com condições de contorno definidas pelo problema analisado.

A.5.1 Problema de Sturm-Liouville

Queremos resolver a equação diferencial não homogênea, no intervalo $a \leq x \leq b$, sendo $\varphi(x)$ uma função específica conhecida e condições de contorno em $x = a$ e $x = b$.

$$Lu(x) \equiv \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{du(x)}{dx} \right] - q(x)u(x) = \varphi(x) \quad (\text{A.23})$$

onde $L = \frac{d}{dx} [p(x) \frac{d}{dx}] - q(x)$ é o operador de Sturm-Liouville e $\varphi(x)$ é uma função conhecida. Para obter o *Teorema de Green*, multiplicamos o operador $Lu(x)$ ora por um fator v , ora por um fator u , e obtemos

$$vLu(x) = \frac{d}{dx} \left[vp(x) \frac{du(x)}{dx} \right] - vq(x)u(x)$$

e

$$uLv(x) = \frac{d}{dx} \left[up(x) \frac{dv(x)}{dx} \right] - uq(x)v(x)$$

Subtraindo uma da outra, integrando de ambos os lados, fica

$$\int_a^b dx [vLu - uLv] = \left[p \left(v \frac{du}{dx} - u \frac{dv}{dx} \right) \right]_{x=a}^b \quad (\text{A.24})$$

Para resolver a equação (A.23) para uma fonte comum, $\varphi(x)$, introduzimos a função de Green $G(x, x')$, que é a solução para um ponto fonte em x' :

$$LG(x, x') = \delta(x - x') \quad (\text{A.25})$$

onde $\delta(x - x')$ é a delta de Dirac. Fazendo $u = u(x)$ e $v(x) = G(x, x')$, trocando x por x' e aplicando o teorema de Green, fica:

$$\begin{aligned} u(x) &= \int_a^b dx' G(x', x) \varphi(x') \\ &- \left[p(x') \left\{ (G(x', x) \frac{du(x')}{dx'} - u(x') \frac{d}{dx'} G(x', x)) \right\} \right]_{x'=a}^b \end{aligned} \quad (\text{A.26})$$

Escolhendo as condições de contorno como

$$G(a, x') = G(b, x') = 0$$

esta condição elimina a quantidade desconhecida $du(x')/dx'$ em $x' = a, b$ na Eq. (A.26).

Então, a equação fica

$$u(x) = \int_a^b dx' G(x', x) \varphi(x') + \left[p(x') u(x') \frac{d}{dx'} G(x', x) \right]_{x'=a}^b \quad (\text{A.27})$$

que é a solução da equação (A.23) em termos das quantidades conhecidas.

A.5.2 Expansão da Função de Green em Autofunções

As funções ortogonais surgem frequentemente na resolução de equações diferenciais; melhor dizendo, pode-se gerar um conjunto ortogonal de funções que envolva um problema de contorno com equações diferenciais lineares de segunda ordem, contendo um parâmetro λ :

$$Lu_n = \frac{d}{dx} \left[p(x) \frac{du_n(x)}{dx} \right] - qu_n(x) = -\lambda_n \rho(x) u_n(x) \quad (\text{A.28})$$

O problema de autovalores de Sturm Liouville é:

$$\frac{d}{dx}\left[p(x)\frac{du_n(x)}{dx}\right] - qu_n(x) + \lambda_n\rho(x)u_n(x) = 0$$

sujeito às condições de contorno homogêneas do tipo

$$Au_n(a) + Bu'_n(a) = 0 \quad (\text{A.29})$$

e

$$Cu_n(b) + Du'_n(b) = 0 \quad (\text{A.30})$$

Agora, queremos resolver a equação diferencial não homogênea do tipo:

$$Lu + \lambda\rho(x)u = \varphi(x) \quad (\text{A.31})$$

sujeita às condições de contorno na forma

$$\begin{aligned} Au(a) + Bu'(a) &= X \\ Cu(b) + Du'(b) &= Y \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

Nas equações acima, $\varphi(x)$ é uma função definida, X e Y são constantes. Usando a função de Green $G(x, x')$, que satisfaz à equação diferencial

$$LG(x, x') + \lambda\rho(x)G(x, x') = \delta(x - x') \quad (\text{A.33})$$

e as condições de contorno

$$\begin{aligned}
 AG(a, x') + B \frac{d}{dx} G(x, x') \Big|_{x=a} &= 0 \\
 CG(b, x') + D \frac{d}{dx} G(x, x') \Big|_{x=b} &= 0
 \end{aligned}
 \tag{A.34}$$

a solução das equações (A.31) e (A.32) é dada por

$$\begin{aligned}
 u(x) &= \int_a^b dx' G(x, x') \varphi(x') \\
 &- \left[p(x') \left\{ G(x, x') \frac{du(x')}{dx} - u(x') \frac{d}{dx'} G(x, x') \right\} \right]_{x'=a}^b
 \end{aligned}
 \tag{A.35}$$

A solução da Eq. (A.33), juntamente com as condições dadas por (A.34) para $\mathcal{G}(x, x')$, é dada pela série

$$\mathcal{G}(x, x') = \sum_n \gamma_n(x') u_n(x)
 \tag{A.36}$$

Desta forma, com a Eq. (A.33) e a condição de ortogonalidade, encontramos $G(x, x')$ dada por

$$G(x, x') = \sum_n \frac{u_n(x) u_n(x')}{(\lambda - \lambda_n)}
 \tag{A.37}$$

onde $u_n(x)$ são as autofunções da Eq. (A.28). A equação geral (A.37) para $G(x, x')$ é um bom resultado. Infelizmente, ele envolve uma série infinita. Assim, para facilitar um dado problema, escolhamos condições de contorno de tal forma que a $G(x, x')$ se anule nas extremidades, podendo ser desenvolvida em uma série de funções ortogonais convenientes como, por exemplo, uma série em senos de Fourier [10].

Passeio aleatório

A origem de cada um dos termos que compõem uma equação de difusão pode ser discutida de uma forma muito interessante quando consideramos o formalismo de caminhantes aleatórios com espaço e o tempo contínuos, ao qual nos referiremos como CTRW. Em contraste com o caminho aleatório, onde o tempo de espera e o comprimento dos saltos são constantes, no CTRW estas grandezas podem variar. Esta abordagem é baseada na ideia de usarmos uma formulação microscópica levando em conta propriedades como a distribuição das distâncias dos *saltos* efetuados pela substância ao se difundir em um substrato e a distribuição temporal de espera entre *saltos* consecutivos. Assim, para formularmos uma abordagem em termos de caminhantes aleatórios com espaço e o tempo contínuos, necessitamos definir uma função densidade de probabilidade (pdf) $\psi(x, t)$. De $\psi(x, t)$, podemos obter a distribuição relacionada ao comprimento (tamanho) do salto

$$\lambda(x) = \int_0^{\infty} dt \psi(x, t) \quad (\text{B.1})$$

e a distribuição relacionada ao tempo de espera

$$w(t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x, t) . \quad (\text{B.2})$$

Assim, $\lambda(x)dx$ é a probabilidade de ocorrência de um salto com um dado comprimento no intervalo $(x, x + dx)$ e $w(t)dt$ é probabilidade de termos um dado tempo de espera entre

saltos no intervalo de tempo $(t, t+dt)$. Se o comprimento do salto e do tempo de espera são variáveis aleatórias independentes, encontra-se sob a forma dissociada $\psi(x, t) = w(t)\lambda(x)$ para o salto da função densidade de probabilidade (pdf) $\psi(x, t)$. Se ambos são acoplados, isto é, $\psi(x, t) = p(x|t)w(t)$ ou $\psi(x, t) = p(t|x)\lambda(x)$, um salto de um determinado comprimento envolve um certo tempo, ou vice-versa, ou seja, em um determinado intervalo de tempo o caminhante só pode viajar a uma máxima distância. Na Fig. B.1 vemos um modelo do CTRW.

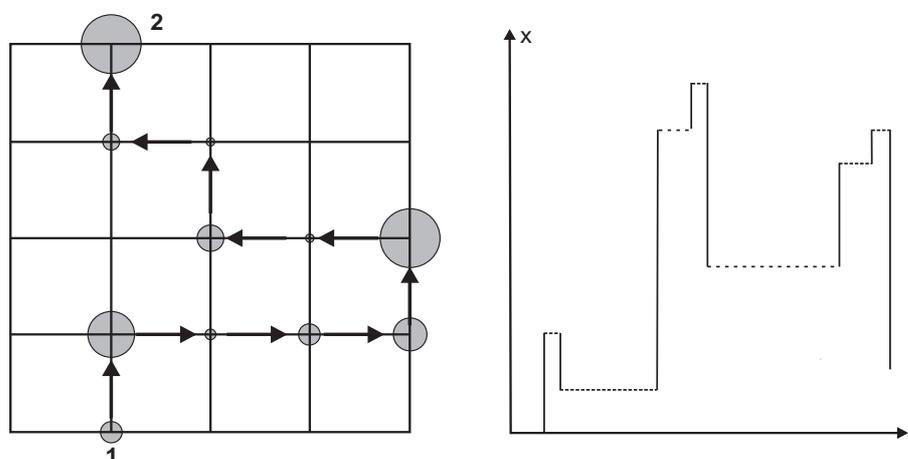


Figura B.1: Modelo de caminhantes aleatórios com espaço e o tempo contínuos (CTRW).

À esquerda, processo CTRW sobre uma rede em duas dimensões, uma generalização da situação Browniana. O tempo de espera é simbolizado por círculos, onde o diâmetro de cada círculo é proporcional ao tempo de espera que deve ser gasto em um determinado sítio, antes que o evento do próximo salto ocorra. O comprimento dos saltos tem valor fixo. À direita, temos o diagrama (x,t) de um processo CTRW unidimensional [13].

Com estas definições podemos formular o CTRW com a seguinte equação

$$\eta(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \int_0^{\infty} dt \eta(x', t') \psi(x - x', t - t') + \delta(x) \delta(t) \quad (\text{B.3})$$

que relaciona a pdf $\eta(x, t)$ de chegada na posição x no tempo t , com o evento de chegada em x' no tempo t' , $\eta(x', t')$. O segundo termo denota a condição inicial que aqui foi escolhida como sendo do tipo $\delta(x)$. Conseqüentemente, a pdf $\rho(x, t)$ de se encontrar a

partícula em x no tempo t é

$$\rho(x, t) = \int_0^t dt' \eta(x, t') \Psi(t - t') \quad (\text{B.4})$$

sendo $\Psi(t)$ a probabilidade cumulativa, definida por

$$\Psi(t) = 1 - \int_0^t dt' w(t') \quad (\text{B.5})$$

No espaço de Fourier - Laplace a Eq. (B.4) adquire o seguinte aspecto:

$$\rho(k, s) = \frac{1 - \omega(s)}{s} \frac{\rho_0(k)}{1 - \psi(k, s)} \quad (\text{B.6})$$

onde $\rho_0(k)$ denota a condição inicial.

Difusão Fracionária Radial em um Cilindro

Consideremos um caso de difusão fracionária temporal radial em duas dimensões, no interior de um cilindro de raio \mathbf{R} [47], conforme a Fig. C.1. A equação diferencial para

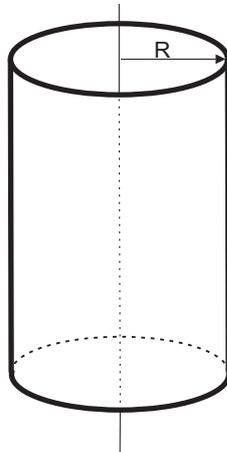


Figura C.1: *Difusão em um cilindro de raio R .*

uma difusão radial isotrópica em duas dimensões é definida como:

$$\frac{\partial \rho(r, t)}{\partial t} = \frac{D}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \frac{\partial \rho(r, t)}{\partial r} \right] = D \nabla^2 \rho(r, t) \quad (\text{C.1})$$

onde $\rho(r, t)$ é, como usual a função densidade de probabilidade (pdf) e D o coeficiente de difusão e $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ é a distância radial no espaço bidimensional.

Integrando a Eq. C.1 em relação ao tempo, fica:

$$\rho(r, t) = \rho(r, 0) + D \int_0^t \nabla^2 \rho(r, t') dt' \quad (\text{C.2})$$

As condições de contorno apropriadas para difusão radial em um cilindro de raio \mathbf{R} e comprimento unitário são:

$$\rho(r, 0) = 0, \quad \text{para } r < R$$

$$\rho(R, 0) = \rho(R, t) = \rho_0$$

A integral fracionária de ordem α ($0 < \alpha < 1$) em relação ao tempo é definida como:

$${}_0I_t^\alpha f(t) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^t (t - t')^{\alpha-1} f(t') dt' \quad (\text{C.3})$$

a nossa equação fracionária da difusão representada pela forma integral (C.2) se torna

$$\rho(r, t) = \rho(r, 0) + \frac{D}{\Gamma(\alpha)} \int_0^t (t - t')^{\alpha-1} \nabla^2 \rho(r, t') dt' \quad (\text{C.4})$$

O problema que queremos resolver terá como ponto de partida a Eq. (C.4). O problema foi resolvido por *Achar e Hanneken* usando transformadas de Hankel [47]. Aqui, nós o abordaremos usando a transformada de Laplace e obteremos os mesmos resultados. Aplicando a transformada de Laplace a todos os membros da Eq. (C.4), obtemos

$$\rho(r, s) = \frac{\rho(r, 0)}{s} + Ds^{-\alpha} \nabla^2 \rho(r, s) \quad (\text{C.5})$$

Usando a primeira das condições de contorno propostas acima, $\rho(r, 0) = 0$, obtemos

$$\rho(r, s) = Ds^{-\alpha} \nabla^2 \rho(r, s) \quad (\text{C.6})$$

A solução da Eq. (C.6) pode ser escrita utilizando as autofunções

$$\nabla^2 \Psi_n = -K_n^2 \Psi_n$$

Assim, podemos escrever a Eq. (C.1) como

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \Psi_n \right) = -K_n^2 \Psi_n \quad (\text{C.7})$$

Desse modo, a solução da Eq. (C.6) pode ser escrita na forma,

$$\Psi_n(r) = A_n J_o(K_n r) + B_n Y_o(K_n r) \quad (\text{C.8})$$

O termo $B_n Y_o(K_n r)$ diverge em $r = 0$. Assim, $B_n = 0$ então, a Eq. (C.8) torna-se:

$$\Psi_n(r) = A_n J_o(K_n r) \quad (\text{C.9})$$

Utilizando as condições de contorno, para os quais $\Psi_n(r) = 0$, temos,

$$J_o(K_n r) = 0 \quad (\text{C.10})$$

que define os autovalores positivos de K_n .

A função $\rho(r, s)$ pode ser definida na forma:

$$\rho(r, s) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n(s) J_o(K_n r) \quad (\text{C.11})$$

onde

$$A_n(s) = \frac{\int_0^R r J_o(K_n r) \rho(r, s) dr}{\int_0^R r J_o^2(K_n r) dr}$$

Usando as relações de recorrência podemos encontrar $A_n(s)$, ou seja,

$$\frac{d}{dx} \left[x^n J_n(x) \right] = x^n J_{n-1}(x)$$

e

$$\frac{d}{dx} \left[x^{-n} J_n(x) \right] = -x^{-n} J_{n+1}(x)$$

Na Eq. (C.6), multiplicando ambos os lados por $r J_o(K_n r)$ e integrando no intervalo de 0 a R, vem:

$$\int_0^R r J_o(K_n r) \rho(r, s) dr = Ds^{-\alpha} \int_0^R r J_o(K_n r) \nabla^2 \rho(r, s) dr \quad (\text{C.12})$$

e, então, podemos obter

$$A_n(s) \int_0^R J_o^2(K_n r) dr = Ds^{-\alpha} \int_0^R \left\{ \frac{\partial}{\partial r} \left[r \frac{\partial \rho(r, s)}{\partial r} \right] \right\} J_o(K_n r) dr \quad (\text{C.13})$$

Utilizando a condição de contorno, podemos escrever

$$r J_o(K_n r) \frac{\partial \rho}{\partial r} \Big|_0^R = 0$$

Desta forma, a Eq. (C.13) torna-se

$$A_n(s) \int_0^R r J_o^2(K_n r) dr = Ds^{-\alpha} \left\{ \int_0^R r \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial J_o}{\partial r} \right) \rho(r, s) dr - R \frac{\partial J_o}{\partial r} \Big|_{r=R} \rho(R, s) \right\} \quad (\text{C.14})$$

Na Eq. (C.14), o termo

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial J_o}{\partial r} \right) = -K_n^2 J_o$$

e, então, podemos reescrever a Eq. (C.14) como

$$A_n(s) \int_0^R r J_o^2(K_n r) dr + Ds^{-\alpha} K_n^2 A_n(s) \int_0^R r J_o^2(K_n r) dr = -Ds^{-\alpha} R \frac{\partial J_o}{\partial r} \Big|_{r=R} \rho(R, s) \Big\}$$

Fazendo uso das propriedades

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[x^{-\nu} J_{\nu}(\xi x) \right] = -\xi x^{-\nu} J_{\nu+1}(\xi x)$$

e

$$\int_0^R r J_0^2(K_n r) dr = \frac{R}{2} J_1^2(K_n R)$$

Podemos escrever os $A_n(s)$ como

$$A_n(s) = \frac{2Ds^{-\alpha} R J_1(K_n R) \rho(R, s)}{R^2(1 + K_n^2 D s^{-\alpha}) J_1^2(K_n R)} = \frac{2D}{R J_1(K_n R)} \rho(R, s) \frac{s^{-\alpha}}{(1 + K_n^2 D s^{-\alpha})} \quad (\text{C.15})$$

A nossa função $\rho(r, s)$ agora pode ser escrita, na forma

$$\rho(r, s) = \frac{2}{R} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{DK_n J_0(K_n r)}{J_1(K_n R)} \frac{s^{-\alpha}}{(1 + K_n^2 D s^{-\alpha})} \rho(R, s) \quad (\text{C.16})$$

O teorema da convolução nos diz que:

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ F(s)G(s) \right\} = \int_0^t f(t')g(t-t')dt'$$

e, de acordo com a condição inicial,

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \rho(R, s) \right\} = \rho(R, t) = \rho_o$$

Assim

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{s^{-\alpha}}{(1 + K_n^2 D s^{-\alpha})} \right\} = t^{\alpha-1} E_{\alpha, \alpha} \left(-K_n^2 D t^{\alpha} \right)$$

Tomando a transformada inversa de Laplace na Eq. (C.16), temos

$$\rho(r, t) = \frac{2}{R} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{DK_n J_0(K_n r)}{J_1(K_n R)} \int_0^t \rho_o (t-t')^{\alpha-1} E_{\alpha, \alpha} \left[(-K_n^2 D)(t-t')^{\alpha} \right] dt' \quad (\text{C.17})$$

Como

$$E_{\alpha,\alpha}(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\Gamma(\alpha k + \alpha)}$$

a integral da Eq. (C.17) pode ser escrita na seguinte forma:

$$\int_0^t \rho_o(t-t')^{\alpha-1} E_{\alpha,\alpha} \left[(-K_n^2 D)(t-t')^\alpha \right] dt' = t^\alpha E_{\alpha,\alpha+1} \left(-DK_n^2 t^\alpha \right)$$

Desta maneira, a Eq. (C.17) pode ser escrita como:

$$\rho(r, t) = \frac{2}{R} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{DK_n J_o(K_n r)}{J_1(K_n R)} t^\alpha E_{\alpha,\alpha+1} \left(-DK_n^2 t^\alpha \right) \quad (\text{C.18})$$

mas

$$Dt^\alpha E_{\alpha,\alpha+1} \left(-DK_n^2 t^\alpha \right) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{Dt^\alpha \left(-DK_n^2 t^\alpha \right)^k}{\Gamma(\alpha k + \alpha + 1)} \quad (\text{C.19})$$

o lado direito da Eq. (C.19) pode ser simplificado para

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{Dt^\alpha \left(-DK_n^2 t^\alpha \right)^k}{\Gamma(\alpha k + \alpha + 1)} = \frac{1}{K_n^2} \left[1 - E_{\alpha,1} \left(-DK_n^2 t^\alpha \right) \right]$$

Disso tudo, resulta uma simplificação da Eq. (C.18), que pode agora ser escrita como

$$\rho(r, t) = \frac{2\rho_o}{R} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_o(K_n r)}{K_n J_1(K_n R)} \left[1 - E_{\alpha,1} \left(-DK_n^2 t^\alpha \right) \right]. \quad (\text{C.20})$$

Este resultado pode ser expresso em termos do parâmetro adimensional,

$$\beta = \frac{Dt^\alpha}{R^2},$$

e das raízes da função de Bessel J_o , $q_n = RK_n$, como:

$$\frac{\rho(r, t)}{\rho_o} = \left\{ 1 - 2 \sum_1^\infty \frac{J_o\left(q_n \frac{r}{R}\right)}{q_n J_1(q_n)} E_{\alpha,1}\left(-\beta q_n^2\right) \right\} \quad (\text{C.21})$$

Momentos da Distribuição da Concentração

A Eq. (C.20) fornece a concentração da espécie difundida em uma dada localização r como uma função do tempo t . O n -ésimo momento normalizado da distribuição de concentração é definido por:

$$\langle r^n \rangle = \frac{\int_0^R \rho(r, t) r^n 2\pi r dr}{\int_0^R \rho(r, t) 2\pi r dr} \quad (\text{C.22})$$

e pode ser calculado para qualquer valor particular de n . A quantidade da amostra que está sendo difundida é definida como:

$$M_t = \int_0^R \rho(r, t) 2\pi r dr \quad (\text{C.23})$$

e corresponde ao momento de ordem zero da distribuição da concentração. Substituindo a Eq. (C.20) na Eq. (C.23), obtém-se

$$M_t = \frac{4\pi\rho_o}{R} \sum_{n=1}^\infty \frac{\left[1 - E_{\alpha,1}\left(-DK_n^2 t^\alpha\right) \right]}{K_n J_1(K_n R)} \int_0^R J_o(K_n r) dr \quad (\text{C.24})$$

Podemos calcular a integral da Eq. (C.24), definindo $t = K_n r$; então,

$$dr = \frac{dt}{k_n}$$

Assim, a integral resulta em

$$\int_0^R J_0(K_n r) dr = \frac{1}{K_n^2} \int_0^R \frac{d}{dt} \left[t J_1(t) \right] dt = \frac{1}{K_n^2} \left[t J_1(t) \right] \Big|_0^R = \frac{R}{K_n} J_1(K_n R)$$

Desta forma, a Eq. (C.24) torna-se

$$M_t = 4\pi\rho_o \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\left[1 - E_{\alpha,1} \left(-DK_n^2 t^\alpha \right) \right]}{K_n^2} \quad (\text{C.25})$$

A quantidade da amostra que foi difundida após um tempo muito grande, isto é, quando $t \rightarrow \infty$, será:

$$M_\infty = \lim_{t \rightarrow \infty} 4\pi\rho_o \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\left[1 - E_{\alpha,1} \left(-DK_n^2 t^\alpha \right) \right]}{K_n^2} = 4\pi\rho_o \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{K_n^2} \quad (\text{C.26})$$

Podemos escrever a Eq. (C.26) como

$$M_\infty = 4\pi\rho_o \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{K_n^2} = \pi\rho_o R^2 \quad (\text{C.27})$$

e

$$\frac{M_t}{M_\infty} = 1 - 4 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{E_{\alpha,1} \left(-\beta q_n^2 \right)}{q_n^2} \quad (\text{C.28})$$

onde

$$\beta = \frac{Dt^\alpha}{R^2} \quad \text{e} \quad q_n = RK_n$$

Cálculo do Deslocamento Quadrático

Para definir o deslocamento quadrático, vamos tomar o numerador da Eq. (C.22),

como:

$$\langle r^2 \rangle = \int_0^R \rho(r, t) r^2 2\pi r dr = \int_0^R dr \rho(r, t) r^3 2\pi = 2\pi \int_0^R \rho(r, t) r^3 dr \quad (\text{C.29})$$

Esta quantidade corresponde ao deslocamento quadrático médio na difusão da partícula.

Fazendo a substituição na Eq. (C.18), obtemos

$$\langle r^2 \rangle = \frac{4\pi\rho_o}{R} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{DK_n t^\alpha E_{\alpha, \alpha+1} \left(-DK_n^2 t^\alpha \right)}{J_1(K_n R)} \int_0^R J_o(K_n r) r^3 dr \quad (\text{C.30})$$

Usando o fato de que

$$\int_0^R J_o(K_n r) r^3 dr = \frac{R^2}{K_n^2} \left[RK_n - \frac{4}{RK_n} \right] J_1(K_n R) \quad (\text{C.31})$$

e sabendo que $J_o(K_n R) = 0$, substituindo a Eq. (C.31) na Eq. (C.30) e fazendo algumas operações, obtemos

$$2 \frac{\langle r^2 \rangle}{R^2} = \frac{\left[\frac{1}{4} - \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{2}{q_n^2} - \frac{8}{q_n^4} \right) E_{\alpha, 1}(-\beta q_n^2) \right]}{\left[\frac{1}{4} - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{E_{\alpha, 1}(-\beta q_n^2)}{q_n^2} \right]} \quad (\text{C.32})$$

mostrando que o deslocamento quadrado médio não apresenta a proporcionalidade com t^α como é conhecido no caso unidimensional.

Resultado Numérico

Os resultados do cálculo numérico são apresentados em termos do parâmetro adimensional, conforme pode ser visto nos gráficos abaixo. Na Fig. C.2 mostra-se a concentração da ρ/ρ_o em função de r/R para $\beta = 0.05$, $\beta = \sqrt{0.05}$, e $\beta = \sqrt[4]{0.05}$, respectivamente. Na Fig.C.3, mostra-se a razão de M_t/M_∞ em função de β , enquanto que na Fig. C.4 mostra-se o comportamento do segundo momento em função do parâmetro β .

Comentário

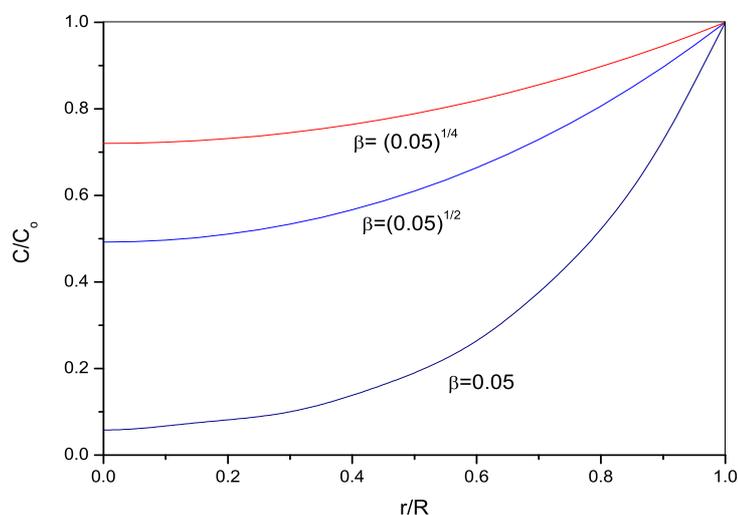


Figura C.2: Variação da concentração com a distância, conforme a Eq. C.21

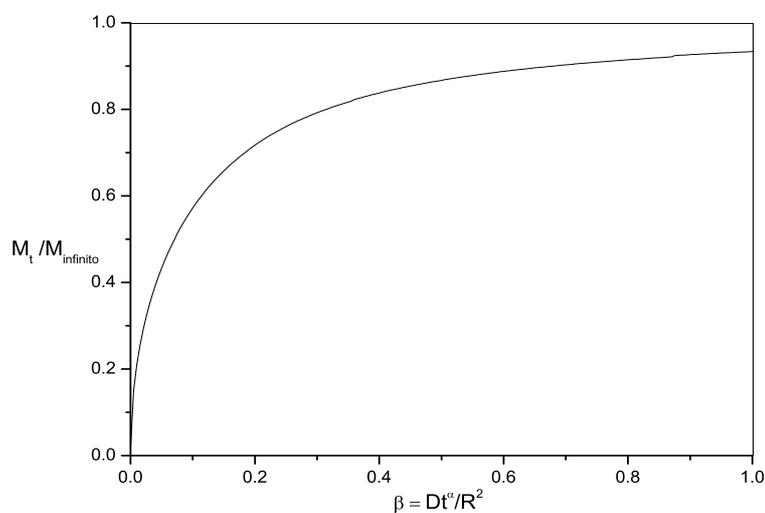


Figura C.3: A amostra total difundida em relação ao parâmetro β , conforme a Eq. C.29

Os resultados exibidos nas Figs. (C.2), (C.3) e (C.4), provenientes das equações (C.21), (C.28) e (C.32), respectivamente, são os resultados essenciais deste Apêndice. Estes resultados para a difusão radial fracionária na parte interna de um cilindro são novos e foram obtidos pela primeira vez por *Achar e Henneken* [47]. A solução da equação

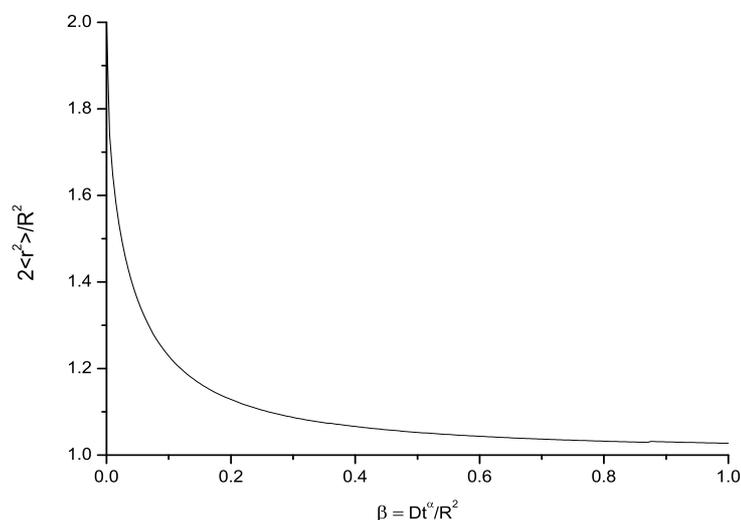


Figura C.4: O segundo momento da distribuição da concentração em função do parâmetro β , conforme a Eq. (C.32).

de difusão fracionária (C.21) satisfazem as condições de contorno apropriada e quando o parâmetro $\alpha = 1$ a solução da equação de difusão fracionária radial se reduz à solução padrão, bem como às soluções das Eqs. (C.28) e (C.32).

Um dos aspectos surpreendentes desses resultados é a universalidade latente destas equações. Por exemplo, a curva da variação da concentração com a distância Fig. (C.2) depende somente dos parâmetros adimensional $\beta = Dt^\alpha / R^2$, onde D é o coeficiente de difusão, R o raio do cilindro e α , o parâmetro que descreve a difusão fracionária.

Desse modo, obtém-se a solução para o problema da difusão fracionária radial no interior de um cilindro em termos das transformadas inversa de Laplace e da função de Mittag-Leffler. Os resultados permitem concluir que a concentração, como função da distância, a quantidade total da substância difundida e o segundo momento da concentração, todos eles exibem um comportamento universal em termos do parâmetro adimensional β .

Referências Bibliográficas

- [1] M. Bologna, C. Tsallis and P. Grigolin, *Anomalous diffusion associated with nonlinear fractional derivative Fokker-Plank-like equation: Exact time-dependent solutions*, Phys. Rev. E, 62 (2000) 2213.
- [2] L.F. Richardson, *Atmospheric diffusion shown on a distance-neighbour graph*, Proc. R. Soc. London Ser. A, 110 (1926) 709.
- [3] H. Spohn, J. Phys. I (France) 3 (1993) 69.
- [4] C. K. Peng, J. Mietus, J. M. Hausdorff, S. Havlin, H. E. Stanley, and A. L. Goldberger, *Long range anticorrelations and non-gaussian behavior of the heartbeat*, Phys. Rev. Lett., 70 (1993) 1343.
- [5] V. PLEROU, *et al.*, *Economic fluctuations and anomalous diffusion*, Phys. Rev. E, 63 (2000) 3023.
- [6] A. OTT, *et al.* *Anomalous diffusion in "living polymers": a genuine Levy flight?*, Phys. Rev. Lett., 65 (1990) 2202.
- [7] E.K. Lenzi, G.A. Mendes, R.S. Mendes, L.R. da Silva, and L.S. Lucena, *Exact solutions to nonlinear nonautonomous space-fractional diffusion equations with absorption*, Phys. Rev. E, 67 (2003) 051109.

-
- [8] A. Schot, M.K. Lenzi, L.R. Evangelista, L.C. Malacarne, R.S. Mendes and E.K. Lenzi, *Fractional diffusion equation with an absorbent term and a linear external force: Exact solution*, Phys. Lett. A (2007).
- [9] D. H. Zanette and P. A. Alemany, *Thermodynamics of anomalous diffusion*, Phys. Rev. Lett. 75 (1995) 366.
- [10] H. W. Wyld, *Mathematical Methods for Physics*. Westview Press, Boulder, 1976.
- [11] E. Butkov, *Física Matemática*. Rio de Janeiro: Editora Guanabara S. A., (1988).
- [12] M.D. Kleber, *Equações diferenciais aplicadas à física*, UEPG, (1999).
- [13] R. Metzler, J. Klafter, *The random walk's guide to anomalous diffusion: A fractional dynamics approach*, Phys. Rep. 399 (2000) 1.
- [14] R. Metzler, E. Barkai, and J. Klafter, *Anomalous transport in disordered systems under the influence of external fields*, Physica A 266 (1999) 343.
- [15] S.S. Plotkin, P.G. Wolynes, *Non-Markovian Configurational diffusion and reaction coordinates for protein folding*, Phys. Rev. Lett. 80 (1998) 5015.
- [16] I.M. Sokolov, *Thermodynamics and fractional Fokker-Planck equations*, Phys. Rev. E, 63 (2001) 056111.
- [17] D.Prato, C. Tsallis, *Nonextensive foundation of Lévy distributions*, Phys. Rev. E, 60 (1999) 2398.
- [18] A.T. Silva, E.K. Lenzi, L.R. Evangelista, M.K. Lenzi, L.R. da Silva, *Fractional non-linear diffusion equation, solutions and anomalous diffusion*, Physica A 375 (2007) 65.
- [19] E.K. Lenzi, L.R. da Silva, A.T. Silva, L.R. Evangelista, M.K. Lenzi, *Some results for a fractional diffusion equation with radial symmetry in a confined region*, Physica A 388 (2009) 806.

-
- [20] A. Einstein, *O ano miraculoso de Einstein: cinco artigos que mudaram a face da física*, Editora UFRJ, seg. edição (2005).
- [21] A. Einstein, *Investigations on the theory of the brownian movement*, Dover Publications.
- [22] D.G. Zill, M.R. Cullen, *Equações Diferenciais*, Vol. 1 e 2. São Paulo: Pearson Makron Books, (2001).
- [23] J.M. Silva, J.A.S. Lima, *Quatro abordagens para o movimento browniano*, Rev. Bras. Ens. Fís., 29 (2007) 25.
- [24] G. Gonçalves, M.K. Lenzi, L.S. Moraes, E.K. Lenzi e M.F. Andrade, *Difusão anômala e equações fracionárias de difusão*, Acta Scientiarum.Technology, Vol. 27, (2005).
- [25] M.L. Boas, *Mathematical Methods in the Physical Sciences*, Third Edition, John Wiley Sons, (2006).
- [26] K.B. Oldham and J. Spanier, *The Fractional Calculus*, Dover edition, (2006).
- [27] I.N. Sneddon, *The Use of Integral Transforms*, McGraw-Hill, (1972).
- [28] M.R. Spiegel, *Schaum's Outline or Theory and problems of Laplace Transforms*, McGraw-Hill
- [29] M.R. Spiegel, *Schaum's Outline or Theory and problems of Fourier Analysis with Applications to boundary value problems*, McGraw-Hill
- [30] C. Fox, *The G and H functions as symmetrical Fourier kernels*, Trans. Amer. Math. Soc. 98, 3 (1961) 395.
- [31] F. Huang, F. Liu, *The space-time fractional diffusion equation with Caputo derivatives*, J. Appl. Math. & Comp. 19 (2005) 179.

-
- [32] S.S. Plotkin, P.G. Wolynes, *Non-Markovian configurational diffusion and reaction coordinates for protein folding*, Phys. Rev. Lett. 80 (1998) 5015.
- [33] M. Muskat, *The Flow of Homogeneous Fluid Through Porous Media*, McGraw-Hill, New York, 1937.
- [34] P.Y. Polubarinova-Kochina, *Theory of Ground Water Movement*, Princeton University Press, NJ, 1962.
- [35] J. Buckmaster, *Viscous sheets advancing over dry beds*, J. Fluid Mech. 81 (1977) 735.
- [36] P. Grosfils, J.P. Boon, *Nonextensive statistics in viscous fingering*, Physica A 362 (2006) 168.
- [37] E.K. Lenzi, R.S. Mendes, J.S. Andrade, L.R. da Silva, L.S. Lucena, *\mathcal{N} -dimensional fractional diffusion equation and Green function approach: Spatially dependent diffusion coefficient and external force*, Phys. Rev. E 71 (2005) 052101.
- [38] F. Mainardi and G. Pagnini, *The Wright functions as solutions of the time-fractional diffusion equation*, Appl. Math. Comput. 141 (2003) 51.
- [39] R. Metzler and J. Klafter, *Boundary value problems for fractional diffusion equations*, Physica A 278 (2000) 107.
- [40] W.R. Schneider and W. Wyss, *Fractional diffusion and wave equations*, J. Math. Phys. 30 (1989) 134.
- [41] O.M.P. Agrawal, *Solution for a Fractional Diffusion-Wave Equation Defined in a Bounded Domain*, Nonlinear Dyn. 29 (2002) 145.
- [42] M.O. Vlad, *Fractional diffusion equation on fractals: Self-similar stationary solutions in a force field derived from a logarithmic potential*, Chaos Solitons Fractals 4 (1994) 191.

-
- [43] Y.E. Ryabov, *Behavior of fractional diffusion at the origin*, Phys. Rev. E 68 (2003) 030102(R).
- [44] F. Mainardi, G. Pagnini and R.K. Saxena, *Fox H functions in fractional diffusion*, J. Comput. Appl. Math. 178 (2005) 321.
- [45] M.M. Meeschaert, D.A. Benson and B. Baumer, *Multidimensional advection and fractional dispersion*, Phys. Rev. E 59 (1999) 5026.
- [46] V.V. Uchaikin, *Multidimensional symmetric anomalous diffusion*, Chem. Phys. 284 (2002) 507.
- [47] B.N.N. Achar, J.W. Hanneken, *Fractional radial diffusion in a cylinder*, J. Mol. Liq. 114 (2004) 147.
- [48] A. Compte, D. Jou and Y. Katayama, *Anomalous diffusion in linear shear flows*, J. Phys. A 30 (1997) 1023.
- [49] C. Giordano, A.R. Plastino, M. Casas and A. Plastino, *Nonlinear diffusion under a time dependent external force: q-maximum entropy solutions* Eur. Phys. J. B 22 (2001) 361.
- [50] C. Tsallis and D.J. Bukman, *Anomalous diffusion in the presence of external forces: Exact time-dependent solutions and their thermostistical basis*, Phys. Rev. E 54 (1996) R2197.
- [51] G. Drazer, H.S. Wio and C. Tsallis, *Anomalous diffusion with absorption: Exact time-dependent solutions*, Phys. Rev. E 61 (2000) 1417.
- [52] A.R. Plastino, M. Casas and A. Plastino, *A nonextensive maximum entropy approach to a family of nonlinear reaction-diffusion equations*, Physica A 280 (2000) 289.
- [53] P.C. Silva, L.R. da Silva, E.K. Lenzi, R.S. Mendes and L.C. Malacarne, *Anomalous diffusion and anisotropic nonlinear Fokker-Planck equation*, Physica A 342 (2004) 16.

-
- [54] T.D. Frank, *On a general link between anomalous diffusion and nonextensivity*, J. Math. Phys. 43 (2002) 344.
- [55] A.R. Plastino and A. Plastino, *Non-extensive statistical mechanics and generalized Fokker-Planck equation*, Physica A 222 (1995) 347.
- [56] C. Tsallis and E.K. Lenzi, *Anomalous diffusion: nonlinear fractional Fokker-Planck equation*, Chem. Phys. 284 (2002) 341 Erratum 287 (2002) 295.
- [57] E.K. Lenzi, R.S. Mendes, L.C. Malacarne and I.T. Pedron, *Anomalous diffusion, nonlinear fractional Fokker-Planck equation and solutions*, Physica A 319 (2003) 245.
- [58] E.K. Lenzi, R.S. Mendes, K.S. Fa, L.S. Moraes, L.R. da Silva and L.S. Lucena, *Non-linear fractional diffusion equation: Exact results*, J. Math. Phys. 46 (2005) 83506.
- [59] T.A. Hewett, *Fractal Distributions of Reservoir Heterogeneity and their Influence on Fluid Transport 61st Annual Technical Conference and Exhibition of the Society of Petroleum Engineers*, New Orleans, 1988.
- [60] R. Hilfer, *Applications of Fractional Calculus in Physics*, World Scientific, Singapore (2000).
- [61] H. Pascal, *A nonlinear model of heat conduction*, J. Phys. A: Math. Gen. 25 (1992) 939.
- [62] E. Daly and A. Porporato, *Similarity solutions of nonlinear diffusion problems related to mathematical hydraulics and the Fokker-Planck equation*, Phys. Rev. E 70 (2004) 056303.
- [63] J. Gratton, F. Minotti and S.M. Mahajan, *Theory of creeping gravity currents of a non-Newtonian liquid*, Phys. Rev. E 60 (1999) 6960.
- [64] C. Tsallis, A.R. Plastino and R.S. Mendes, *The role of constraints within generalized nonextensive statistics*, Physica A 261 (1998) 534.

-
- [65] C. Tsallis, S.V.F. Levy, A.M.C. Souza and R. Maynard, *Statistical-Mechanical Foundation of the Ubiquity of Lévy Distributions in Nature*, Phys. Rev. Lett. 75 (1995) 3589 [Erratum: 77 (1996) 5442].
- [66] D.H. Zanette and P.A. Alemany, *Thermodynamics of Anomalous Diffusion*, Phys. Rev. Lett. 75 (1995) 366.
- [67] M.O. Caceres and C.E. Budde, *Comment on §Thermodynamics of Anomalous Diffusion*, Phys. Rev. Lett. 77 (1996) 2589.
- [68] D.H. Zanette and P.A. Alemany, *Zanette and Alemany Reply*, Phys. Rev. Lett. 77 (1996) 2590.
- [69] M. Buiatti, P. Grigolini and A. Montagnini, *Dynamic Approach to the Thermodynamics of Superdiffusion*, Phys. Rev. Lett. 82 (1999) 3383.
- [70] D. Prato and C. Tsallis, *Nonextensive foundation of Lévy distributions*, Phys. Rev. E 60 (2000) 2398.
- [71] C.W. Gardiner, *Handbook of Stochastic Methods: For Physics, Chemistry and the Natural Sciences*, New York; Springer Series in Synergetics; 1996.
- [72] J. M. Burgers, *The Nonlinear Diffusion Equation*, Holland: D. Reidel Publishing Company; 1974.
- [73] C. Tsallis, E.K. Lenzi, *Anomalous Diffusion: Nonlinear Fractional Fokker-Planck Equation*, Chem. Phys. 284 (2002) 341. Erratum. 287 (2002) 295.
- [74] E.K. Lenzi, R.S. Mendes, K.S. Fa, L.S. Moraes, L.R. da Silva, L.S. Lucena, *Nonlinear fractional diffusion equation: Exact results*, J. Math. Phys. 46 (2005) 083506.
- [75] M.O. Vlad, *Fractional diffusion equation on fractals - self-similar stationary solutions in a force-field derived from a logarithmic potential*, Chaos, Solitons & Fractals 4 (1994) 191.

-
- [76] S. Havlin, D. Ben-Avraham, *Diffusion in Disordered Media*, Advance in Physics 36 (1987) 695.
- [77] P.A. Alemany, D.H. Zanette, H.S. Wio, *Time-dependent reactivity for diffusion-controlled annihilation and coagulation in two dimensions*, Phys. Rev. E 50 (1994) 3646.
- [78] B.P. Lee, *Renormalization-group calculation for the reaction $kA \rightarrow$* , J. Phys. A: Math. and Gen. 27 (1994) 2633.
- [79] J. Crank, *The Mathematics of Diffusion*, London; Oxford University Press: 1956.
- [80] H.S Carslaw and J.C. Jaeger, *Conduction of Heat in Solids*, London; Oxford University Press: 1959.
- [81] W.T. Coffey, D.S.F. Crothers, D. Holland, S.V. Titov, *Green function for the diffusion limit of one-dimensional continuous time random walks*, J. Mol. Liq. 114 (2004) 165.
- [82] S. Eule, R. Friedrich, F. Jenko, D. Kleinhans, *Langevin Approach to Fractional Diffusion Equations Including Inertial Effects*, J. Phys. Chem. B 111 (2007) 11474.
- [83] R. Metzler, E. Barkai, J. Klafter, *Deriving fractional Fokker-Planck equations from a generalised master equation*, Europhys. Lett. 46 (1999) 431.
- [84] I. Podlubny, *Fractional Differential Equations*, Academic Press. San Diego, 1999.
- [85] R. Rossato, M.K. Lenzi, L.R. Evangelista, E.K. Lenzi, *Fractional diffusion equation in a confined region*, Phys. Rev. E 76 (2007) 032102.
- [86] L.S. Lucena, L.R. da Silva, L.R. Evangelista, M.K. Lenzi, R. Rossato, E.K. Lenzi, *Solutions for a fractional diffusion equation with spherical symmetry using Green function approach*, Chem. Phys. 344 (2008) 90.
- [87] Y.Z. Povstenko, *Fractional radial diffusion in a cylinder*, J. Mol. Liq. 137 (2008) 46.

-
- [88] M.P. Morse, H. Feshbach, *Methods of Theoretical Physics*, McGraw-Hill, New York, 1953.
- [89] G. Barbero, L.R. Evangelista, *Adsorption Phenomena and Anchoring Energy in Nematic Liquid Crystals*, Taylor & Francis, London, 2006.
- [90] R.S. Zola, E.K. Lenzi, L.R. Evangelista, G. Barbero, *Memory effect in the adsorption phenomena of neutral particles*, Phys. Rev. E 75 (2007) 042601.
- [91] M.A. Lomholt, I.M. Zaid, R. Metzler, *Subdiffusion and Weak Ergodicity Breaking in the Presence of a Reactive Boundary*, Phys. Rev. Lett. 98 (2007) 200603.
- [92] S. Condamin, O. Bénichou, J. Klafter, *First-Passage Time Distributions for Subdiffusion in Confined Geometry*, Phys. Rev. Lett. 98 (2007) 250602.
- [93] S. Condamin, O. Bénichou, V. Tejedor, R. Voituriez, J. Klafter, *First-passage times in complex scale-invariant media*, Nature 450 (2007) 77.
- [94] T. Bickel, *A note on confined diffusion*, Physica A 377 (2007) 24.
- [95] J. Crank, *The Mathematics of Diffusion*, Oxford University Press, London, 1956.
- [96] B.I. Henry, T.A.M. Langlands, S.L. Wearne, *Anomalous diffusion with linear reaction dynamics: From continuous time random walks to fractional reaction-diffusion equations*, Phys. Rev. E 74 (2006) 031116.
- [97] M. Giona, M. Giustiniani, *Adsorption Kinetics on Fractal Surfaces*, J. Phys. Chem. 100 (1996) 16690.
- [98] P. Macheras, A. Iliadis, *Modeling in Biopharmaceutics, Pharmacokinetics, and Pharmacodynamics*, Springer, New York, 2006.
- [99] A. Iomin, *Superdiffusion of cancer on a comb structure*, J. Phys.: Conf. Ser. 7 (2005) 57.

-
- [100] H.S. Carslaw, J.C. Jaeger, *Conduction of Heat in Solids*, Oxford University Press, London, 1959.
- [101] S. Redner, *A Guide to First-Passage Processes*, Cambridge University Press, Cambridge, England, 2001.
- [102] J.D. Munkhammar, *Fractional calculus and the Taylor-Riemann series*, (2005).
- [103] I. Sokolov, J. Klafter and A. Blumen, *Fractional Kinetics*, Physics Today 55 (2002) 48.
- [104] J.P. Pascal, H. Pascal, *On some diffusive waves in nonlinear heat-conduction*, Int. J. Non-Linear Mech. 28 (1993) 641.
- [105] P. Grigolini, C. Tsallis, B.J. West, *Classical and Quantum Complexity and Nonextensive Thermodynamics. Chaos, Solitons and Fractals 13*. Number 3 Amsterdam; Pergamon-Elsevier: 2002.
- [106] B.J West, M. Bologna, P. Grigolini, *Physics of Fractal Operators*, New York; Springer: (2002).
- [107] J. Klafter, M.F. Shlesinger, G. Zumofen, *Beyond Brownian motion*, Physics Today, 49 (1996) 33.
- [108] A. Pekalski, K. Sznajd-Wero, *Anomalous Diffusion: From Basics to Applications*, In: Lecture Notes in Physics. Telos; Springer-Verlag: (1999).
- [109] J.P. Bouchaud, A. Georges, *Anomalous diffusion in disordered media - statistical mechanisms, models and physical applications*, Phys. Rep., 195 (1990) 127.
- [110] D. Campos, V. Mendez, *Description of diffusive and propagative behavior on fractals*, Phys. Rev. E 69 (2004) 031115.
- [111] B. O'Shaughnessy, I. Procaccia, *Analytical Solutions for Diffusion on Fractal Objects*, Phys. Rev. Lett. 54 (1985) 455.

-
- [112] D.S.F. Crothers, D. Holland, Y.P. Kalmykov, W.T. Coffey, *The role of Mittag-Leffler functions in anomalous relaxation*, J. Mol. Liq. 114 (2002) 27.
- [113] A. Iomin, *Toy model of fractional transport of cancer cells due to self-entrapping*, Phys. Rev. E 73 (2006) 061918.
- [114] C.K. Peng, J. Mietus, J.M. Hausdorff, S. Havlin, K.E. Stanley, A.L. Goldberger, *Long-range anticorrelations and non-Gaussian behavior of the heartbeat*, Phys. Rev. Lett. 65 (1990) 2201.
- [115] H. Sher, E.W. Montroll, *Anomalous transit-time dispersion in amorphous solids*, Phys. Rev. B 12 (1975) 2455.
- [116] L.C. Malacarne, R.S. Mendes, I.T. Pedron, E.K. Lenzi, *N-dimensional nonlinear Fokker-Planck equation with time-dependent coefficients*, Phys. Rev. E 65 (2002) 52101.
- [117] M.F. Shlesinger, G.M. Zaslavsky, U. Frisch, *Lévy flights and related topics in physics*, Berlin; Springer-Verlag: 1994.
- [118] L. F. Richardson, *Atmospheric diffusion shown on a distance-neighbour graph*, Proc. R. Soc. A 110 (1926) 709.
- [119] U. Frisch, *Turbulence: the Legacy of A.N. Kolmogorov*. New York: Cambridge University Press; 1995.
- [120] N. Su, *Generalisation of various hydrological and environmental transport models using Fokker-Planck equation*, Env Mod Sof 19 (2004) 345.
- [121] Z.S. Khan, S.W. Morris, *Subdiffusive Axial Transport of Granular Materials in a Long Drum Mixer*, Phys. Rev. Lett. 94 (2005) 048002.
- [122] R.C. Lua, A.Y. Grosberg, *First passage times and asymmetry of DNA translocation*, Phys. Rev. E 72 (2005) 061918.

- [123] I. Podlubny, *The laplace transform method for linear differential equations of the fractional order*, Slovak Academy of Sciences; 1994.
- [124] F. Mainardi, R. Gorenflo *On Mittag-Leffler-type functions in fractional evolution processes*, J. Comp. Appl. Math. 118:283 (2000).
- [125] T.D. Frank, *A Langevin approach for the microscopic dynamics of nonlinear Fokker-Planck equations*, Physica A 301 (2001) 52
- [126] R. Hilfer, R. Metzler, A. Blumen and J. Klafter, Editors, *Strange Kinetics*, Chemical Physics vol. 284, Pergamon-Elsevier, Amsterdam (2004), pp. 12.
- [127] G.M.Zaslavsky, *Chaos, fractional kinetics, and anomalous transport*, Phys. Rep. 371 (2002) 461.