

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

DIFUSÃO ANÔMOLA: SOLUÇÕES DE
EQUAÇÕES DE DIFUSÃO FRACIONÁRIAS E
NÃO LINEARES

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ
MARINGÁ, 2008

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

ALEXANDRE SCHOT

DIFUSÃO ANÔMOLA: SOLUÇÕES DE
EQUAÇÕES DE DIFUSÃO FRACIONÁRIAS E
NÃO LINEARES

ORIENTADOR: Luís Carlos Malacarne

CO-ORIENTADOR: Ervin Kaminski Lenzi

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ
MARINGÁ, 2008

Ciência é como arte: só aquele que tem dom consegue verdadeiramente produzir uma obra prima.

Agradecimentos

Agradeço em primeiro lugar a Deus, a todos os meus professores do mestrado ao professor Luís Carlos Malacarne por me orientar e tornar tudo possível, ao professor Renio dos Santos Mendes pela paciência e principalmente ao professor Ervin Kaminsk Lenzi, pelo profissionalismo por tudo que fez por mim e pela excelente pessoa que é. Ao meu pai que mais uma vez me ajudou muito, a minha esposa Luana e a todos os colegas pelo apoio moral, por fim a capes pelo apoio financeiro fundamental para mim.

Resumo

Nesta dissertação, investigamos as soluções analíticas a partir de métodos de transformadas integrais de equações de difusão, que generalizam a equação de difusão usual contendo derivadas fracionárias tanto na variável espacial como na variável temporal e com termos não lineares. Neste cenário, também consideramos a presença de termos de forças externas e sumidouros ou (fontes) que podem estar associados a processos que envolvem reação. Por fim, apresentaremos nossas discussões e conclusões.

Abstract

In this work, we investigate the analytical solutions of diffusion equations obtained by integral transforms methods that generalize the usual diffusion equation via spatial fractional derivatives as well as temporal ones and non-linear terms. In this scenario, we consider also the presence of terms with external forces and sources that can be associated with processes related to reaction. Finally, we present our discussions and conclusions.

Listas de equações

Equação de Langevin

$$m \frac{dv_x}{dt} = -\alpha v_x + F_{est.}(t) \quad (1)$$

Equação de Langevin discretizada

$$x_{n+1} = x_n + \tau F(x_n) + \zeta_n \quad (2)$$

Distribuição de probabilidade da variável x

$$g_n(k) = \langle e^{ikx_n} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx_n} \rho_n dx_n \quad (3)$$

Equação de Fockker Planck

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) = -\frac{\partial}{\partial x} [F(x, t) \rho(x, t)] + \frac{\Gamma}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, t) \quad (4)$$

Equação de difusão usual com termo de força externa

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \left[\mathcal{D} \frac{\partial}{\partial x} \rho(x, t) - F(x, t) \rho(x, t) \right] \quad (5)$$

Densidade de probabilidade

$$J(x, t) = -\mathcal{D} \frac{\partial}{\partial x} \rho(x, t) + F(x, t) \rho(x, t) \quad (6)$$

Equação da continuidade

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} J(x, t) = 0 \quad (7)$$

Polinômio de Hermite

$$\psi_n(x) = e^{-\frac{k}{2\mathcal{D}} x^2} H_n \left(\sqrt{\frac{k}{2\mathcal{D}}} x \right) \quad (8)$$

Operador de Caputo

$$\frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(x, t) = \frac{1}{\Gamma(n - \gamma)} \int_0^t dt' \frac{\rho^{(n)}(x, t')}{(t - t')^{\gamma+1-n}} \quad (9)$$

Transformada de Fourier

$$(F\{\rho(x, t)\}) = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x, t) e^{-ikx} dx = \hat{\rho}(k, t) \quad (10)$$

A inversa de Fourier

$$F^{-1}\{\hat{\rho}(k, t)\} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\rho}(k, t) e^{ikx} dk = \rho(x, t) \quad (11)$$

Transformada de Laplace

$$\mathcal{L}\{\rho(x, t)\} = \int_0^{\infty} \rho(x, t) e^{-st} dt = \tilde{\rho}(x, s) \quad (12)$$

A inversa de Laplace

$$\mathcal{L}^{-1}\{\tilde{\rho}(x, s)\} = \frac{1}{2\pi} \int_{\delta-i\infty}^{\delta+i\infty} \tilde{\rho}(x, s) e^{st} ds = \rho(x, t) \quad (13)$$

Transformada de Laplace na derivada fracionária temporal

$$\mathcal{L}\left\{\frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(x, t)\right\} = s^\gamma \tilde{\rho}(x, s) + \sum_{i=0}^{i-1} s^{\gamma-i-1} \left[\frac{\partial^{\gamma-1-i}}{\partial t^{\gamma-1-i}} \rho(x, t) \right]_{t=0} \quad (14)$$

Definição da função de Fox

$$\begin{aligned} H_{p,q}^{m,n} \left[x \left| \begin{matrix} (a_1, A_1), (a_2, A_2), \dots, (a_p, A_p) \\ (b_1, B_1), (b_2, B_2), \dots, (b_q, B_q) \end{matrix} \right. \right] &= \frac{1}{2\pi i} \int_L ds \chi(s) x^s \\ \chi(s) &= \frac{\prod_{i=1}^m \Gamma(b_i - B_i s) \prod_{i=1}^n \Gamma(1 - a_i + A_i s)}{\prod_{i=m+1}^q \Gamma(1 - b_i + B_i s) \prod_{i=1+n}^p \Gamma(a_i - A_i s)} \end{aligned} \quad (15)$$

Transformada de Mellin

$$\rho(x, s') = \int_0^{\infty} dt t^{s'-1} \rho(x, t) \quad (16)$$

Inversa de Mellin

$$\rho(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_L \rho(x, s') t^{-s'} ds' \quad (17)$$

Distribuição de Lévy

$$L_\mu(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{-ikx - |k|^\mu \mathcal{D}t} \quad (18)$$

Função de Mittag-Leffler

$$E_\alpha(t) = \sum_{n=0}^{\infty} t^n / \Gamma(n\alpha + 1) \quad (19)$$

Função de Mittag-Leffler generalizada

$$E_{\alpha,\beta}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{\Gamma(n\alpha + \beta)} \quad (20)$$

Equação de difusão fracionária espacial

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \mathcal{D} \frac{\partial^\mu \rho}{\partial |x|^\mu} - \frac{\partial}{\partial x} [F(x, t) \rho(x, t)] \quad (21)$$

Equação de difusão fracionária linear com termo absorvente

$$\begin{aligned} \frac{\partial^\gamma \rho(x, t)}{\partial t^\gamma} &= \mathcal{D} \frac{\partial^\mu \rho(x, t)}{\partial |x|^\mu} - \frac{\partial}{\partial x} [F(x) \rho(x, t)] \\ &- \int_0^t dt' \alpha(t-t') \rho(x, t') \end{aligned} \quad (22)$$

Equação de difusão fracionária não linear

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \mathcal{D}(t) \frac{\partial^{\mu'}}{\partial |x|^{\mu'}} \left\{ |x|^{-\theta} \rho^\gamma \frac{\partial^\mu}{\partial |x|^\mu} [|x|^{-\eta} \rho^\nu] \right\} - \frac{\partial}{\partial x} [F(x, t) \rho] - \alpha(t) \rho^{\bar{\mu}} \quad (23)$$

Derivada fracionária de Riemann-Liouville

$$\frac{d^\delta}{dz^\delta} [z^\alpha (1 + bz)^\beta] = \frac{\Gamma(\alpha + 1)}{\Gamma(\alpha + 1 - \delta)} \frac{z^{\alpha - \delta}}{(1 + bz)^{\delta - \beta}} \quad (24)$$

Sumário

I - Introdução	1
1 Movimento Browniano	4
1.1 Equação de Langevin	4
1.2 Caminhadas aleatórias	6
1.3 Equação de difusão usual	8
2 Equação de difusão fracionária linear	16
2.1 Derivadas fracionárias aplicadas à variável temporal	17
2.2 Equação de Difusão: derivadas fracionárias no espaço	26
3 Equação de difusão fracionária linear: termo absorvente e força externa	31
3.1 Equação de difusão fracionária linear e termo absorvente	32
4 Equações de difusão não lineares fracionárias	41
4.1 Equações não lineares fracionárias com termos absorventes lineares	42
4.2 Equações não lineares fracionárias com termos absorventes não lineares	48
Bibliografia	52

I - Introdução

A compreensão da difusão e, em especial, da difusão anômala ou de sistemas que possuem uma relaxação anômala, têm atraído a atenção de vários pesquisadores devido ao grande número de situações físicas que apresentam este tipo de comportamento. De fato, a difusão anômala está presente em várias situações tais como difusão em meios fractais [1], na relaxação ao equilíbrio de sistemas com memória temporal longa [2, 3], no transporte através de um meio poroso [4], nas flutuações de sistemas financeiros [5], nas batidas do coração [6], em semicondutores amorfos [7], em micelas dissolvidas em água salgada [8], entre outras. Nas situações em que temos uma difusão anômala (por exemplo, nas mencionadas acima), podemos ter o segundo momento finito [9] ou não [9, 10] (segundo momento que caracteriza a largura da distribuição da função de probabilidade). A difusão anômala com o segundo momento finito, geralmente tem como característica $\langle x^2 \rangle \propto t^\alpha$ ($\alpha < 1$ e $\alpha > 1$ correspondendo a subdifusão e superdifusão, respectivamente). Neste contexto, algumas equações representativas na descrição desse fenômeno são as equações de difusão que empregam derivadas fracionárias temporais [2, 11], a equação de meios porosos (que é não linear) [9] e a equação usual de difusão com coeficientes dependentes de variáveis de posição ou de tempo [12]. Essas equações têm sido aplicadas em várias situações de interesse físico, tais como, na relaxação ao equilíbrio em sistemas com memória temporal longa (por exemplo, cadeias de polímeros e membranas) [2], na descrição de transporte anômalo em sistemas desordenados [13], para modelar processos dinâmicos não Markovianos em proteínas [14], lei de Richardson [15] e a lei de Kolmogorov [16] (estas duas leis aplicam-se ao estudo de turbulência), para modelar sistemas hidrológicos [17], transporte axial de materiais granu-

lares [18], transporte de substância em um solvente de um vaso para outro através de uma membrana [19] e na translocação assimétrica do DNA [20]. Por sua vez, a difusão anômala quando não possui o segundo momento finito é caracterizada pelas distribuições do tipo Lévy [10]. Dentro deste contexto, temos em geral, a equação de difusão com derivadas fracionárias na variável espacial cuja solução é dada em termos das distribuições de Lévy [10, 11], que satisfazem o teorema de Lévy-Gnedenko, i.e., uma generalização do teorema central do limite.

De um ponto de vista formal, a partir da discussão acima, vemos que a difusão anômala pode ser investigada por meio de diferentes tipos de equações. Assim, o estudo desses tipos de equações diferenciais, suas extensões e as situações relacionadas a elas são importantes, pois possibilitam a investigação de novos cenários. Além de termos associados a elas um contexto termo-estatístico seja através da mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs ou de alguma termoestatística generalizada. Neste sentido, pretendemos dedicar nossos esforços ao estudo dessas equações na presença de uma força externa (“drift”) e um termo de sumidouro ou fonte. Vamos focalizar nossa atenção em equações de difusão que estão contidas na equação geral abaixo:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(x, t) &= \mathcal{D}(t) \frac{\partial^{\mu'}}{\partial |x|^{\mu'}} \left\{ |x|^{-\theta} [\rho(x, t)]^{\bar{\gamma}} \frac{\partial^\mu}{\partial |x|^\mu} [|x|^{-\eta} (\rho(x, t))^\nu] \right\} \\ &- \frac{\partial}{\partial x} [F(x, t) \rho(x, t)] - \int_0^t d\bar{t} \alpha(\bar{t}) [\rho(x, t - \bar{t})]^{\bar{\mu}}, \end{aligned}$$

em que $\mathcal{D}(t)$ é o coeficiente de difusão, $F(\rho, r, t)$ é a força externa que neste caso pode ser não linear, $\partial^\mu / \partial |x|^\mu$ é o operador diferencial fracionário aplicado à variável espacial na representação de Riemann-Liouville ou Riesz/Weyl [11,21], $\partial^\gamma / \partial t^\gamma$ é o operador de Caputo [11,21] aplicado a variável temporal e $\alpha(t)$ representa um termo de fonte ou sumidouro relacionado a um processo de reação e difusão. Em particular, a presença de termos relacionados a processos de reação e difusão como o presente na equação acima tem sido estudados em várias situações. Por exemplo, processos catalíticos em sistemas regulares, heterogêneos, ou desordenados [22], em reações de primeira ordem irreversíveis e no transporte de uma substância [23]. Termos dessa natureza também podem ser relevantes ao investigarmos o transporte

de uma substância radioativa ao longo de um meio poroso, no fluxo de calor envolvendo produção de calor [24] e no transporte de soluto por amostras absorventes. Cabe mencionar que a equação acima tem o mérito de ter como caso particular muitas situações presentes na literatura e, em particular, recuperar a equação de difusão usual na ausência de força externa se $\mu = 0$, $\alpha(r, t) = 0$, $\nu = 1$ e $\gamma = 1$, $\bar{\gamma} = 0$, $\mu' = 2$, $\theta = 0$ e $F(x, t) = 0$.

Apresentamos esta dissertação dividida em quatro capítulos. No primeiro capítulo, analisaremos a equação de difusão usual na ausência e na presença de uma força externa linear $F(x) = -kx$, além de discutirmos formulações alternativas de estudo do movimento Browniano. O segundo capítulo apresenta um estudo das equações de difusão que possuem derivadas fracionárias na variável temporal e na variável espacial. O terceiro capítulo, que é o principal desta dissertação, é dedicado ao estudo dessas equações fracionárias na presença de um termo absorvente [25] obtendo as soluções analíticas a partir de métodos de transformadas integrais. O quarto capítulo apresenta um estudo acerca das equações de difusão não lineares e/ou fracionárias. Por fim, a última parte da dissertação que dedicada as conclusões e discussões.

Capítulo 1

Movimento Browniano

Neste capítulo inicial, apresentaremos uma breve discussão acerca do movimento Browniano[26], isto é, um movimento estocástico sob o enfoque de equações de Langevin, caminhantes aleatórios com espaço e tempo contínuos e a equação de difusão. Tais conceitos são fundamentais na compreensão do desenvolvimento do presente trabalho.

1.1 Equação de Langevin

Um dos primeiros cientistas a observar e, conseqüentemente, reportar sobre o movimento aleatório de uma partícula foi o botânico R. Brown, [26] ao observar o movimento de grãos de pólen quando colocados em contato com uma superfície líquida. Desde então muitas explicações para este fenômeno foram propostas, entretanto, uma das primeiras explicações satisfatórias vieram de Einstein[26, 27] que contou com ampla comprovação experimental. Algum tempo após a explicação de Einstein, Langevin apresentou um novo método para descrever tal movimento aleatório baseado em uma equação de Newton com um termo de força aleatória [44] que seria responsável pelo movimento altamente irregular das partículas. Essa equação ficou conhecida como equação de Langevin e foi o primeiro exemplo de uma equação estocástica.

Começaremos nossa discussão pela equação de Langevin e investigaremos a sua conexão com a equação de difusão.

A equação de Langevin em sua forma mais simples, para o caso unidimensional, pode ser escrita como

$$m \frac{dv_x}{dt} = -\alpha v_x + F_{est.}(t) , \quad (1.1)$$

ou seja, uma equação de Newton onde m é a massa, e $F_{est.}(t)$ é termo de força extra representando uma força de caráter aleatório (também chamada de força de Langevin ou força estocástica), conforme mencionamos anteriormente, e $-\alpha v_x$ representando o arraste devido a viscosidade. Cabe ressaltar que a riqueza dos resultados que obtemos e, conseqüentemente a descrição de forma adequada de um dado fenômeno físico fica vinculada a escolha da força de natureza estocástica. Assim, precisamos fazer mais uma consideração sobre o termo F_{est} que está intimamente relacionado com as propriedades microscópicas do sistema. Por simplicidade, vamos admitir que

$$\begin{aligned} \langle F_{est}(t) \rangle &= 0 \\ \langle F_{est}(t) F_{est}(t') \rangle &= B \delta(t - t'), \end{aligned} \quad (1.2)$$

com $B = 2\alpha K_B T$. O conjunto de equações acima caracteriza um movimento tipicamente Browniano e, em particular, a escolha feita acima para a equação (1.2) recebe o nome de ruído branco. Sistemas nos quais se fazem presentes processos difusivos anômalos requerem outra força estocástica em suas descrições. De fato, ao escolhermos outra forma funcional para a equação (1.2) podemos ser conduzidos a situações que abrangem outros tipos de movimentos estocásticos que não o Browniano. Por exemplo, a escolha de um ruído (função aleatória) dependente da concentração [28] pode nos levar a uma situação que é caracterizada pela equação de meios porosos e conseqüentemente a estabelecermos uma relação com a mecânica estatística não extensiva. Em uma situação genérica podemos também considerar $\langle F_{est}(t) F_{est}(t') \rangle \propto \Phi(t - t')$ em que Φ não é delta de Dirac. Este tipo de consideração pode ser útil na investigação de um processo aleatório do tipo “dichotomous”, fracionário e outros.

A partir de (1.1) e (1.2) podemos obter a dispersão (ou variância) do sistema, cuja importância reside no fato de que esta caracteriza a forma como o sistema se difunde. Nesse caso, encontramos que

$$\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \frac{\Gamma}{\gamma^2} \left\{ t - \frac{2}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}) + \frac{1}{2\gamma} (1 - e^{-2\gamma t}) \right\}, \quad (1.3)$$

em que $\gamma = \alpha/m$, e para o limite de tempos longos, ou seja, ($\gamma t \gg 1$), se reduz a

$$\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle \approx Dt, \quad (1.4)$$

com $D = \Gamma/\gamma^2 = B/\alpha^2 = 2k_B T/\alpha$ onde $\Gamma = B/m^2$. Esse comportamento é característico de um processo difusivo usual, enquanto que processos difusivos anômalos apresentam uma variância diferente desta. Cabe mencionar aqui que a partir da equação de Langevin (1.1) podemos obter uma equação de difusão associada a ela. Na seção que segue abordaremos o formalismo de caminhantes aleatórios com espaço e tempo contínuos.

1.2 Caminhadas aleatórias

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. Essa abordagem é baseada na idéia de usarmos uma formulação microscópica levando em conta propriedades como a distribuição das distâncias dos *pulos* efetuados por um sistema que se difunde em um substrato e a distribuição temporal de espera entre *pulos* consecutivos. Assim, para formularmos uma abordagem em termos de caminhantes aleatórios necessitamos definir uma função densidade de probabilidade (pdf) $\psi(x, t)$. De $\psi(x, t)$ podemos obter a distribuição relacionada ao comprimento (tamanho) do pulo

$$\lambda(x) = \int_0^\infty dt \psi(x, t) \quad (1.5)$$

e a distribuição relacionada ao tempo de espera

$$w(t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x, t) . \quad (1.6)$$

Na equação (1.5) $\lambda(x)dx$ representa a probabilidade de ocorrência de um salto com um dado comprimento no intervalo entre $(x, x + dx)$ e $w(t)dt$ dado pela equação (1.6) é a probabilidade de termos um dado tempo de espera entre pulos no intervalo de tempo $(t, t + dt)$. Com estas definições podemos formular o CTRW mediante a seguinte equação [11]

$$\eta(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \int_0^{\infty} dt' \eta(x', t') \psi(x - x', t - t') + \delta(x)\delta(t) \quad (1.7)$$

que relaciona a pdf $\eta(x, t)$ de chegada na posição x no tempo t , com o evento de partida 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

$$\rho(x, t) = \int_0^t dt' \eta(x, t') \Psi(t - t') \quad (1.8)$$

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

$$\Psi(t) = 1 - \int_0^t dt' w(t') . \quad (1.9)$$

No espaço de Fourier-Laplace, a equação (1.8) adquire o seguinte aspecto:

$$\rho(k, s) = \frac{1 - W(s)}{s} \frac{1}{(1 - \psi(k, s))} , \quad (1.10)$$

que é o propagador geral que emerge da abordagem CTRW, completando assim nossa descrição breve e introdutória desta abordagem.

Agora vamos relacionar a equação de difusão usual com o CTRW de forma a associarmos cada termo presente naquela equação com o desenvolvimento feito acima para o CTRW. Mais especificamente, pretendemos identificar o comportamento de $w(t)$ e $\lambda(x)$ que correspondam a um processo difusivo usual. Essa compreensão será muito útil ao investigarmos situações que generalizam a equação de difusão usual, pois quando modificamos a mesma

estamos, implicitamente, modificando o comportamento destas grandezas. A equação de difusão usual

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = \mathcal{D} \frac{\partial^2 \rho(x, t)}{\partial x^2} \quad (1.11)$$

pode ser reescrita na seguinte forma integral:

$$\rho(x, t) = \rho(x, 0) + \mathcal{D} \int_0^t dt' \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, t'). \quad (1.12)$$

Tomando a transformada de Laplace-Fourier da equação acima, considerando $\rho(x, 0) = \delta(x)$, obtemos que

$$\rho(k, s) = \frac{1}{s + \mathcal{D}k^2}. \quad (1.13)$$

Com uma simples comparação entre a equação acima e a equação (1.10), vemos que a descrição do movimento Browniano requer que o tempo característico (τ) e a variância do comprimento dos pulos (σ) sejam finitas, o que implicando em $w(s) \sim 1 - s\tau + \mathcal{O}(\tau^2)$ e em $\lambda(k) = 1 - \sigma^2 k^2$. Dessa forma, quando modificamos a equação de difusão, na tentativa de incorporar efeitos que não são convenientemente descritos pela equação de difusão usual, estamos modificando a forma com que o sistema se difunde, alterando a forma com que o mesmo faz seus passeios e o tempo com que estes passeios são feitos. Particularmente, ao incorporarmos derivadas de ordem fracionária na equação de difusão este fato fica visível. De fato, ao incorporarmos derivadas fracionárias temporais na equação de difusão, alteramos a distribuição do tempo de espera é modificado. De forma análoga, se incorporarmos derivadas fracionárias espaciais na equação de difusão altera a distribuição do comprimento dos saltos, e o segundo momento deixa de ser finito. No último caso a distribuição passa a ser do tipo lei de potência com um comportamento de cauda longa, que é característica de distribuições do tipo Lévy.

1.3 Equação de difusão usual

A equação de difusão pode ser obtida de várias formas, uma delas, por exemplo, consiste em combinar a lei de Fick com a equação de continuidade, outra

forma seria usar a equação de Langevin. Particularmente, usaremos a equação de Langevin para obtermos a equação de difusão. Assim, desejamos obter a densidade de probabilidade de encontrar uma partícula x , no instante de tempo t , quando em $t = t_0$ se encontra em $x = x_0$. Para tal, vamos discretizar a equação (1.1) e desprezar o termo de aceleração. O tempo t é discretizado em intervalos τ e a posição da partícula no instante $t = n\tau$ é denotada por x_n . Então, a equação de Langevin discretizada desprezando o termo de aceleração pode ser aproximada por

$$x_{n+1} = x_n + \tau F(x_n) + \zeta_n \quad (1.14)$$

em que $F(x_n) = f(x_n)/\alpha$, com $f(x_n)$ representando uma força externa que foi incorporada na equação (1.1) que pode ser associada a um potencial $V(x)$, $\langle \zeta_n \rangle = 0$ e $\langle \zeta_n \zeta_{n'} \rangle = \tau \Gamma \delta_{nn'}$ em que $\Gamma = B/m^2$ e $\zeta_n = \tau F_{est.,n}/\alpha$. Seja $\rho_n = \rho(x_n)$ a distribuição de probabilidade da variável x_n e $g_n(k)$ a correspondente função característica, i.e.,

$$g_n(k) = \langle e^{ikx_n} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx_n} \rho_n dx_n . \quad (1.15)$$

Ressalta-se que $g_n(k)$, conforme definida acima, é a transformada de Fourier da densidade de probabilidade associada a uma variável aleatória x . De forma análoga, temos $g_{n+1}(k) = \langle e^{ikx_{n+1}} \rangle = \langle e^{ik[x_n + \tau F(x_n) + \zeta_n]} \rangle$. Como x_n e ζ_n são independentes, podemos escrever

$$g_{n+1}(k) = \langle e^{ik[x_n + \tau F(x_n)]} \rangle \langle e^{ik\zeta_n} \rangle. \quad (1.16)$$

Agora, expandindo a função $g_{n+1}(k)$ em τ e desconsiderando os termos de segunda ordem, obtemos

$$\langle e^{ikx_n} e^{ik\tau F(x_n)} \rangle \approx \langle e^{ikx_n} \rangle + ik\tau \langle e^{ikx_n} F(x_n) \rangle \quad (1.17)$$

e

$$\langle e^{ik\zeta_n} \rangle \approx \langle 1 + ik\zeta_n + \frac{(ik\zeta_n)^2}{2!} \rangle \approx 1 - \frac{1}{2} k^2 \tau \Gamma . \quad (1.18)$$

Substituindo esses resultados na equação (1.16), obtemos

$$g_{n+1}(k) \approx g_n(k) + \tau \left(ik \langle f(x_n) e^{ikx_n} \rangle - \frac{1}{2} k^2 \Gamma g_n(k) \right) . \quad (1.19)$$

Usando

$$ik\langle F(x)e^{ikx} \rangle = \langle F(x) \frac{d}{dx} e^{ikx} \rangle = - \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \frac{d}{dx} [F(x)\rho_n(x)] dx \quad (1.20)$$

$$-k^2 \langle e^{ikx} \rangle = \langle \frac{d^2}{dx^2} e^{ikx} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \frac{d^2}{dx^2} \rho_n(x) dx \quad (1.21)$$

podemos expressar a equação (1.19) na forma

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx_{n+1}} \rho_{n+1} dx_{n+1} &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx_n} \rho_n dx_n - \tau \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \frac{d}{dx_n} [F(x_n)\rho_n] dx_n \\ &+ \frac{\tau\Gamma}{2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \frac{d^2}{dx^2} \rho_n dx_n, \end{aligned} \quad (1.22)$$

que nos conduz a equação

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx_n} \left\{ \frac{\rho_{n+1} - \rho_n}{\tau} + \frac{d}{dx_n} [F(x_n)\rho_n] - \frac{\tau\Gamma}{2} \frac{d^2}{dx^2} \rho_n \right\} dx_n = 0. \quad (1.23)$$

Da equação (1.23), temos

$$\frac{\rho_{n+1} - \rho_n}{\tau} = - \frac{d}{dx_n} [F(x_n)\rho_n] + \frac{\tau\Gamma}{2} \frac{d^2}{dx^2} \rho_n. \quad (1.24)$$

Essa equação no limite de $\tau \rightarrow 0$ e usando $\rho(x, t)$ ao invés de ρ_n , chegamos a

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) = - \frac{\partial}{\partial x} [F(x, t)\rho(x, t)] + \frac{\Gamma}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, t) \quad (1.25)$$

que dá a evolução temporal da densidade de probabilidade $\rho(x, t)$, em que $F(x, t)$ é a força externa aplicada ao sistema e $\rho(x, t)$ está relacionada com a concentração ou com a densidade de probabilidade. Esta é uma equação de difusão também conhecida como equação de Fokker-Planck.

A equação (1.25) pode formalmente ser escrita como

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \left[\mathcal{D} \frac{\partial}{\partial x} \rho(x, t) - F(x, t)\rho(x, t) \right], \quad (1.26)$$

em que \mathcal{D} é o coeficiente de difusão, aqui considerado constante, $F(x, t)$ representa uma força externa atuando no sistema e $\rho(x, t)$ representa uma densidade de probabilidade. Na equação (1.26), identificamos o termo

$$J(x, t) = -\mathcal{D} \frac{\partial}{\partial x} \rho(x, t) + F(x, t)\rho(x, t), \quad (1.27)$$

de tal modo que podemos reescrevê-la como

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x, t) + \frac{\partial}{\partial x}J(x, t) = 0. \quad (1.28)$$

a equação (1.28) é a equação de continuidade para a nossa densidade de probabilidade $\rho(x, t)$, em que $J(x, t)$ representa a densidade de corrente. Assim, levando em conta as condições em que $\int dx\rho(x, t) = cte$, analisamos considerando duas situações: (i) na ausência de força externa e (ii) presença de uma força externa linear. No primeiro caso nos leva a uma distribuição gaussiana no segundo caso, temos a presença de uma solução estacionária devido ao potencial associado à força externa escolhida.

Na ausência de força externa, temos

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x, t) = \mathcal{D}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\rho(x, t). \quad (1.29)$$

Utilizando as transformadas de Fourier e Laplace, considerando a condição inicial $\rho(x, 0) = \delta(x)$, a equação acima fica dada por

$$\rho(k, s) = \frac{1}{s + \mathcal{D}k^2}. \quad (1.30)$$

Invertendo as transformadas, chegamos na solução desejada:

$$\rho(x, t) = \frac{e^{-\frac{x^2}{4\mathcal{D}t}}}{\sqrt{4\pi\mathcal{D}t}} \quad (1.31)$$

(veja figura 1.1). Da distribuição acima, obtida da equação (1.29), podemos calcular o segundo momento, que para nós desempenha um papel importante. De fato, ao conhecermos o segundo momento podemos obter a variância e conseqüentemente saber como a distribuição alarga-se. Neste caso, temos $\langle x^2 \rangle = 2\mathcal{D}t$. Essa linearidade do comportamento do segundo momento com relação ao tempo será o que caracterizará um processo difusivo usual.

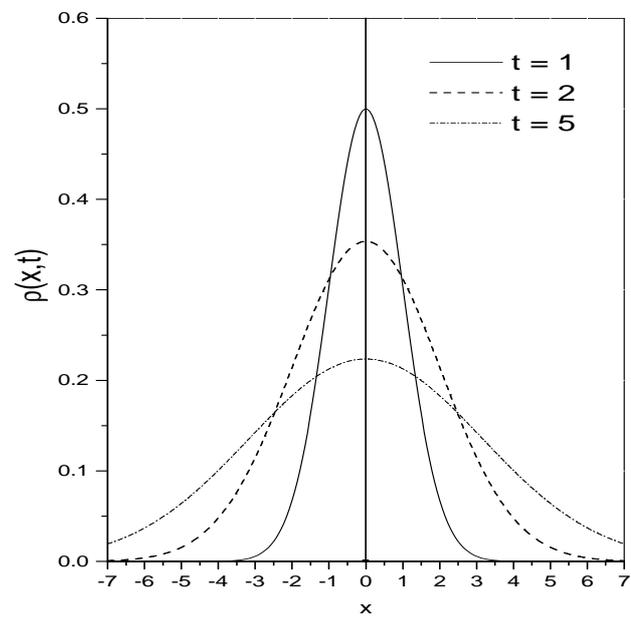


Figura 1.1: Densidade de probabilidade $\rho(x,t)$ versus x para valores típicos de t com $\mathcal{D} = 1$ (1.31).

Nesse ponto, consideraremos a presença da força $F = -kx$ e as conseqüências que surgem desta escolha. A equação de difusão nesta situação fica dada por

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x, t) = \mathcal{D}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\rho(x, t) - \frac{\partial}{\partial x}[kx\rho(x, t)] . \quad (1.32)$$

Para resolvermos essa equação, vamos empregar o método de separação de variáveis. Assim sendo, vamos considerar que a nossa solução possa ser escrita como

$$\rho(x, t) = \sum_n \psi_n(x)\phi_n(t) , \quad (1.33)$$

em que $\psi_n(x)$ é obtida da equação espacial e $\phi_n(t)$ da equação que envolve a variável temporal. Dessa forma, substituindo a equação (1.33) em (1.32) e usando as propriedades de ortogonalidade inerentes a estas funções, obtemos

$$\mathcal{D}\frac{d^2}{dx^2}\psi_n(x) - \frac{d}{dx}[k\psi_n(x)] = -\lambda_n\psi_n(x) \quad (1.34)$$

e

$$\frac{d}{dt}\phi_n(t) = -\lambda_n\phi_n(t) . \quad (1.35)$$

Após alguns cálculos, é possível mostrar que

$$\psi_n(x) = e^{-\frac{k}{2\mathcal{D}}x^2} H_n\left(\sqrt{\frac{k}{2\mathcal{D}}} x\right) , \quad (1.36)$$

$\lambda_n = 2nk$ e $\phi_n(t) = \phi_n(0)e^{-\lambda_n t}$ onde H_n é o polinômio de Hermite. Utilizando os resultados encontrados na equação (1.36) e usando novamente as propriedades de ortogonalidade obtemos que

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\rho}(\xi)\mathcal{G}(x, \xi, t)d\xi \\ \mathcal{G}(x, \xi, t) &= \sqrt{\frac{k}{2\mathcal{D}\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{e^{-\frac{kx^2}{2\mathcal{D}}-2nkt}}{2^n\Gamma(n+1)} H_n\left(\sqrt{\frac{k}{2\mathcal{D}}} \xi\right) H_n\left(\sqrt{\frac{k}{2\mathcal{D}}} x\right) , \end{aligned} \quad (1.37)$$

para uma condição inicial genérica do tipo $\rho(x, 0) = \tilde{\rho}(x)$ onde a solução encontrada nos da uma polinômio de Hermite. Da equação acima, podemos

verificar dois fatos importantes. O primeiro deles consiste na presença de uma situação estacionária. Fato esse que sugere a possibilidade de usarmos o princípio de entropia máxima para obtermos soluções exatas ou aproximadas, já que podemos conectar esta distribuição a um contexto termoestatístico. O segundo fato relaciona-se com o segundo momento, que agora comporta-se da seguinte forma:

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\mathcal{D}}{k} (1 - e^{-2kt}) . \quad (1.38)$$

Note que esta forma difere do caso anterior devido a presença da força externa. Em particular, da equação (1.38) vemos que quanto maior for k mais rápido o segundo momento fica constante (veja figura (1.2)) indicando que nesta situação a distribuição estacionária é atingida com maior rapidez também.

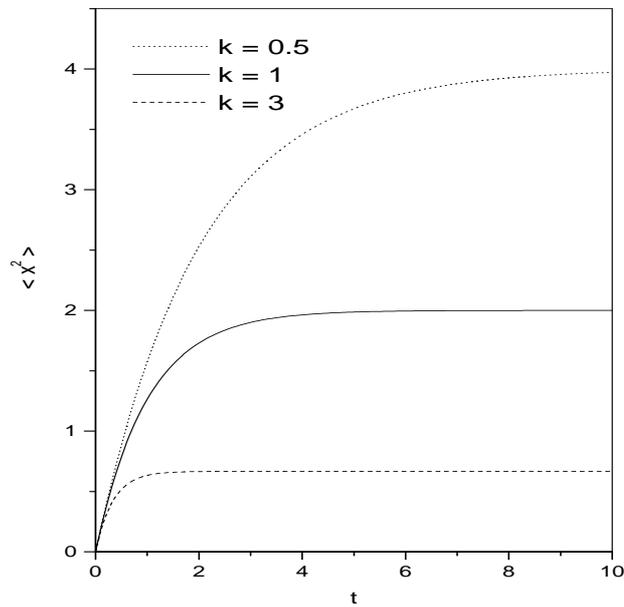


Figura 1.2: *Comportamento do segundo momento $\langle x^2 \rangle$ versus t para valores típicos de k (1.38)*

Nos capítulos que seguem, investigaremos possíveis extensões da equação de difusão. Basicamente, analisaremos as situações que envolvem presença de derivadas fracionárias tanto na variável espacial como na variável temporal e/ou situações que empregam termos não lineares.

Capítulo 2

Equação de difusão fracionária linear

Neste capítulo, vamos abordar algumas equações de difusão que empregam derivadas fracionárias na variável temporal ou na variável espacial, usualmente empregadas na descrição de processos difusivos anômalos. Como veremos, o uso de derivadas fracionárias na variável temporal nos leva a uma difusão anômala com o segundo momento finito, i.e., $\langle x^2 \rangle \propto t^\alpha$; em contraste com a derivada fracionária aplicada na variável espacial, que resulta em uma difusão anômala cujo segundo momento não é finito. Em ambos os casos, usaremos o formalismo de caminhantes aleatórios descrito no capítulo anterior para explorar as implicações obtidas pelo uso de derivadas fracionárias na equação de difusão. Deixaremos para o capítulo seguinte as extensões que contemplam situações em que ambas as derivadas aparecem juntas na mesma equação com a presença de termos de fonte.

2.1 Derivadas fracionárias aplicadas à variável temporal

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

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

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

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

com $n - 1 < \gamma < n$ e $\rho^{(n)}(x, t)$ é a n -ésima derivada de $\rho(x, t)$ em relação ao tempo. Temos ainda a presença do termo de força externa $F(x, t)$ e do coeficiente de difusão \mathcal{D} , que inicialmente consideraremos constante. Mais a frente, veremos situações nas quais \mathcal{D} poderá apresentar uma dependência, por exemplo, com o espaço e com o tempo. Ainda com relação à equação (2.1), vale comentar que esta equação generaliza a equação usual de difusão, conforme vimos acima, 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 equação (2.1) é normalizável, vamos reescrevê-la na forma

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

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

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

A normalização é verificada quando integramos a equação (2.3) sobre todo o espaço e consideramos que $\mathcal{J}(x = \pm\infty, t) = 0$, pois estamos assumindo que $\rho(x = \pm\infty, t) = 0$. Assim, esta importante propriedade das densidades

de probabilidades continua válida mesmo com a presença do operador de derivada fracionária do tipo Caputo.

Voltando à análise das soluções da equação (2.1), faremos desenvolvimentos para esta equação considerando diferentes situações para o coeficiente de difusão \mathcal{D} , para a força externa $F(x, t)$ e para as condições de contorno. Inicialmente consideraremos uma situação caracterizada pela ausência de força externa, com \mathcal{D} constante e a condição inicial $\rho(x, 0) = \tilde{\rho}(x)$. Como condição de contorno vamos considerar inicialmente $\rho(x = \pm\infty, t) = 0$. Devido a estas considerações, a equação a ser resolvida é

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

sujeita às já referidas condições de contorno e inicial. Tal situação é melhor trabalhada se fizermos uso de transformadas integrais. Realmente, empregando as transformadas de Fourier e Laplace na equação (2.5), obtemos

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

com $0 < \gamma < 1$, em que empregamos o resultado

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

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

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

em que

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

Observando a equação (2.8), vemos que $\mathcal{G}(x, s)$ é a função de Green associada à condição inicial considerada. Por sua vez, para invertermos a transformada de Laplace faremos uso do seguinte procedimento: relacionaremos

a transformada de Laplace com a transformada de Mellin, inverteremos esta transformada (Mellin) mediante a identificação do integrando da operação inversa desta transformada com o integrando das funções H de Fox, obtendo então $\rho(x, t)$. Nesses cálculos, usamos o fato de que as funções de Fox são definidas como [29]

$$\begin{aligned} \mathbb{H}_{p\ q}^{m\ n} \left[x \left| \begin{matrix} (a_1, A_1), (a_2, A_2), \dots, (a_p, A_p) \\ (b_1, B_1), (b_2, B_2), \dots, (b_q, B_q) \end{matrix} \right. \right] &= \frac{1}{2\pi i} \int_L ds \chi(s) x^s \\ \chi(s) &= \frac{\prod_{i=1}^m \Gamma(b_i - B_i s) \prod_{i=1}^n \Gamma(1 - a_i + A_i s)}{\prod_{i=m+1}^q \Gamma(1 - b_i + B_i s) \prod_{i=1+n}^p \Gamma(a_i - A_i s)} . \end{aligned} \quad (2.10)$$

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

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

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

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

Desta forma, utilizando a relação (2.11) na equação (2.9) obtemos

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

A partir de onde, após a inversão da transformada de Mellin, obtemos que

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

(nas figuras (2.1) e (2.2) ilustramos o comportamento de $G(x, t)$ para valores típicos de γ). Este resultado da equação (2.14) é obtido mediante a comparação direta entre a integral de inversão de Mellin

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

e a forma integral das funções H de Fox anteriormente representadas pela relação (2.10). Com base nesses resultados concluímos que nossa solução é

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

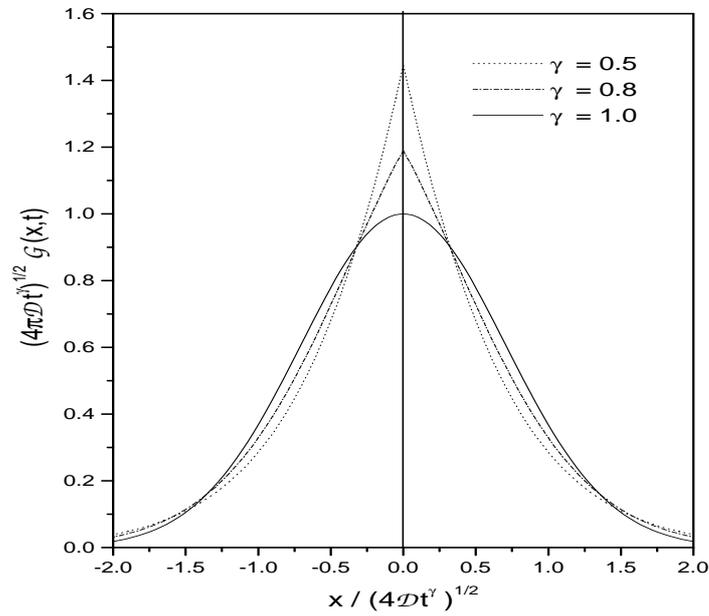


Figura 2.1: *Comportamento de $(4\pi\mathcal{D}t)^{1/2}\mathcal{G}(x,t)$ versus $x/(4\mathcal{D}t^\gamma)^{1/2}$, ilustra a equação (2.14) para valores típicos de γ .*

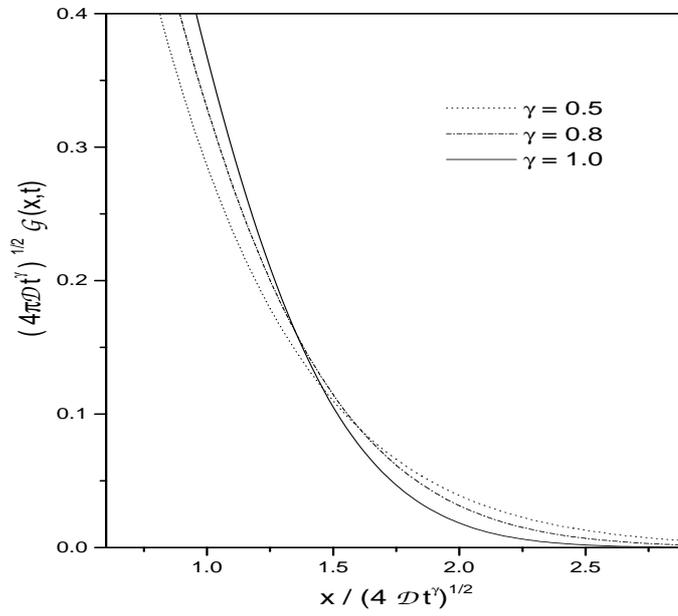


Figura 2.2: *Comportamento da equação (2.14) para grandes argumentos.*

Antes de considerarmos o caso em que o sistema está confinado a uma região que possui barreiras absorventes, refletoras ou uma combinação de ambos os casos, vamos analisar a situação em que as condições de contorno são dadas por $\rho(0, t) = \rho(\infty, t) = 0$. Este caso é uma situação intermediária entre o cenário analisado anteriormente e uma região confinante. Nesta situação, o melhor procedimento que podemos utilizar para resolver a eq. (2.5) consiste em usar transformadas de Fourier do seno para que as condições de contorno naturalmente sejam incorporadas durante o cálculo da solução. Assim, aplicando a transformada de Fourier do seno na eq. (2.5), obtemos

$$\frac{d^\gamma}{dt^\gamma} \rho(k, t) = -k^2 \mathcal{D} \rho(k, t) , \quad (2.17)$$

cujas soluções são dadas por

$$\rho(k, t) = \rho(k, 0) E_\gamma(-k^2 \mathcal{D} t^\gamma) , \quad (2.18)$$

em que $E_\alpha(t) = \sum_{n=0}^{\infty} t^n / \Gamma(n\alpha + 1)$ é a função de Mittag-Leffler. Invertendo a transformada de Fourier do seno, temos

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \tilde{\rho}(x') \mathcal{G}(x, x', t) \\ \mathcal{G}(x, x', t) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi \mathcal{D} t^\gamma}} \left[\text{H}_{1,2}^{2,0} \left[\frac{(x-x')^2}{4\mathcal{D} t^\gamma} \middle| \begin{matrix} (1-\frac{\gamma}{2}, \gamma) \\ (\frac{1}{2}, 1) \end{matrix} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \text{H}_{1,2}^{2,0} \left[\frac{(x+x')^2}{4\mathcal{D} t^\gamma} \middle| \begin{matrix} (1-\frac{\gamma}{2}, \gamma) \\ (\frac{1}{2}, 1) \end{matrix} \right. \right. \right] . \end{aligned} \quad (2.19)$$

Vamos agora considerar situações nas quais há a presença de barreiras absorventes e refletoras no sistema. Para estes casos a aplicação de transformadas integrais não é, ao contrário do caso anterior, apropriada. De fato, a imposição de condições de contorno finitas faz necessário o emprego de outros métodos para encontrarmos a solução desejada. Considerando inicialmente o caso de barreiras absorventes, ou seja, situação na qual $\rho(0, t) = \rho(L, t) = 0$, faremos uso de uma transformada finita no intervalo $0 < x < L$. Com a condição de contorno em mente vamos considerar que a solução procurada possa ser escrita em termos de uma série em senos de Fourier. Assim, a série

$$\rho(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \mathcal{B}_n(t) \text{sen} \left(\frac{n\pi}{L} x \right) , \quad (2.20)$$

com

$$\mathcal{B}_n(t) = \frac{2}{L} \int_0^L dx \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{L} x \right) \rho(x, t), \quad (2.21)$$

é apropriada para o tratamento deste caso, pois satisfaz a condição de contorno. Substituindo a equação (2.20) na equação (2.5), multiplicando ambos os lados por $\operatorname{sen}(nx\pi/L)$, integrando desde 0 a L e identificando $\mathcal{B}_n(t)$, verificamos que

$$\frac{d^\gamma}{dt^\gamma} \mathcal{B}_n(t) = -\frac{n^2\pi^2}{L^2} \mathcal{D} \mathcal{B}_n(t). \quad (2.22)$$

Para resolver a equação acima aplicaremos uma transformada de Laplace, permitindo-nos uma clara identificação do resultado a ser invertido com as funções de Mittag-Leffler $E_\alpha(x)$. Então, após alguns cálculos, podemos mostrar que

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

Agora, considerando uma condição inicial do tipo $\rho(x, 0) = \tilde{\rho}(x)$ e utilizando o resultado acima em (2.20) chegamos a

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

com

$$\mathcal{G}(x, x', t) = \frac{2}{L} \sum_{n=1}^{\infty} \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{L} x' \right) \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi}{L} x \right) E_\gamma \left(-\frac{n^2\pi^2}{L^2} \mathcal{D} t^\gamma \right). \quad (2.24)$$

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

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

com

$$\mathcal{G}(x, x') = \frac{2}{L} \sum_{n=1}^{\infty} \cos \left(\frac{n\pi}{L} x' \right) \cos \left(\frac{n\pi}{L} x \right) E_\gamma \left(-\frac{n^2\pi^2}{L^2} \mathcal{D} t^\gamma \right). \quad (2.25)$$

Neste ponto, é interessante observar que para esta situação podemos obter uma solução estacionária. De fato, considerando $t \rightarrow \infty$ na solução acima chegamos em

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

pois $E_\gamma(-n^2\pi^2\mathcal{D}t^\gamma/L^2) \rightarrow 0$ quando $t \rightarrow \infty$. Isto se verifica devido ao fato de que a função $E_\alpha(x)$ no intervalo de γ considerado é uma função que decai de forma monotônica sem apresentar oscilações.

Voltemos nossa atenção para a forma do segundo momento obtido para a equação (2.5), a partir da qual discutimos os três casos precedentes. Como foi mencionado no capítulo anterior, o segundo momento rotula um processo difusivo como anômalo ou usual. Para a situação que aqui está em consideração, ou seja, aquela na qual há a presença de derivadas não inteiras na variável temporal de uma equação de difusão, o segundo momento se mostra na forma de uma potência de t , ou seja, $\langle x^2 \rangle \propto t^\gamma$. Além disso, é marcante a forma com que a presença do operador de Caputo altera a distribuição de tempo de espera $w(t)$. Nesse sentido, utilizando os conceitos de caminhantes aleatórios anteriormente discutidos, chegamos a uma distribuição de probabilidades para a parte temporal da forma

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

em que τ é um tempo característico e $E_{\alpha,\beta}(t)$ é a função de Mittag-Leffler generalizada

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

Vemos que agora a distribuição apresenta uma dependência com o parâmetro γ , que pode dar forma tanto a processos subdifusivos quanto a superdifusivos. Assim, a presença de operadores diferenciais fracionários na equação de difusão representa uma situação na qual as distribuições de probabilidades para o tempo e para o espaço, que emergem da abordagem de caminhantes aleatórios, são alteradas, ou seja, a difusão ocorre de forma anômala. Nesse caso em particular, a alteração ocorreu apenas na distribuição de tempos, já

que a derivada fracionária foi aplicada na variável temporal. Mais a frente, veremos a alteração causada na distribuição de saltos quando da aplicação de derivadas fracionárias na variável espacial.

Vejam agora o caso em que o coeficiente de difusão é dado por $\mathcal{D}(x, t) = \mathcal{D}|x|^{-\theta}$. Cabe mencionar aqui que essa dependência espacial no coeficiente de difusão tem sido empregada na investigação de, por exemplo, sistemas turbulentos e difusão em fractais. Ainda considerando $F(x, t) = 0$ na equação (2.1) e utilizando transformadas integrais definidas anteriormente, podemos mostrar que

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

observando que para $\gamma = 1$ e $\theta = 0$ recuperamos a solução gaussiana obtida para o caso usual. Se, além desta dependência do coeficiente de difusão com o espaço, tivermos a presença de uma força externa do tipo linear, ou seja, $F(x) = -kx$, obteremos mediante separação de variáveis o resultado

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

em que $L_n^\alpha(x)$ são os polinômios associados de Laguerre e $\lambda_n = (2 + \theta)nk$.

Da discussão feita acima, percebemos que são poucos os potenciais cuja presença na equação de difusão nos conduz a uma solução exata expressa em termos de funções especiais conhecidas. Dessa forma, na maioria das situações somos obrigados a fazer aproximações da situação original devido a dificuldade de encontrarmos uma solução em forma fechada. Nesse sentido, é interessante obter a equação integral relativa à equação (2.1) que torna possível uma solução recursiva na forma de uma abordagem perturbativa que pode ser relevante na análise do problema. Assim, vamos reescrever a equação (2.1) como

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

com

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

Empregando transformadas de Fourier e Laplace na equação (2.30) obtemos

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

A inversão dessas transformadas fornece

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

com

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

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

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

em que

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

A equação (2.35) é a forma integral correspondente a equação (2.1) e pode ser empregada no cálculo da influência de uma força externa aplicada ao sistema.

2.2 Equação de Difusão: derivadas fracionárias no espaço

Até o presente momento tratamos apenas de situações em que foram empregadas derivadas fracionárias na variável temporal, de modo que à luz da

abordagem de caminhantes aleatórios, obtivemos alterações somente na função distribuição de tempos de espera $w(t)$. Além disso, vimos que as soluções obtidas forneciam segundos momentos finitos, embora não fossem, como no caso usual, lineares com o tempo. O emprego de derivadas fracionárias na variável espacial é representativo de uma situação em que o segundo momento diverge. Esse comportamento é característico de distribuições do tipo Lévy que têm sido aplicadas, por exemplo, no estudo de sistemas caóticos, na descrição de transporte em plasma turbulento, no movimento bacteriano e também em estudos de econofísica. Não entraremos em mais detalhes acerca do emprego de distribuições do tipo Lévy em sistemas que apresentam comportamento caótico pois isto transcende os objetivos desta dissertação.

Iniciaremos com a observação de que a distribuição de Lévy

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

é solução da equação de difusão

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

quando consideramos a ausência de força externa onde o modulo de x é para preservarmos o sinal positivo na derivada. Para demonstrarmos esse resultado, basta utilizarmos o fato de que $\mathcal{F}\{\partial_x^\mu \rho(x, t)\} \equiv -|k|^\mu \rho(k, t)$, em que

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

é a transformada de Fourier. Essa consideração conduz a $\rho(x, t) = L_\mu(x, t)$ $\rho(x, 0) = \delta(x)$ (veja a figura (2.3)). Nesse contexto, aplicando o procedimento do capítulo anterior relativo a caminhantes aleatorios equação (2.38) obtemos que a distribuição relacionada ao comprimento dos saltos é agora dada por $\lambda(k) = 1 - \sigma^\mu |k|^\mu$ com $\sigma^\mu = \mathcal{D}/\tau^\mu$, para a qual recuperamos o caso usual com $\mu = 2$. Esta distribuição apresenta comportamento assintótico de cauda longa, ou seja, saltos longos possuem uma maior probabilidade de ocorrerem quando comparados com o caso usual.

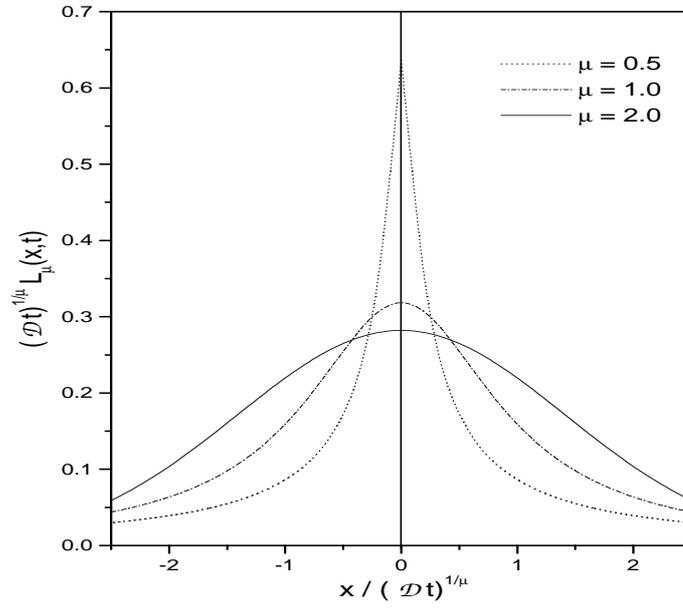


Figura 2.3: Comportamento de $(\mathcal{D}t)^{\frac{1}{\mu}} L_{\mu}(x, t)$ versus $x/(\mathcal{D}t)^{\frac{1}{\mu}}$, ilustra a equa-
 ção (2.42) para valores típicos de μ .

Ainda na ausência de força externa, vamos considerar agora que o coeficiente de difusão apresenta dependência temporal do tipo $\mathcal{D}(t) = \mathcal{D}t^{\alpha-1}/\Gamma(\alpha)$ e que o mesmo esteja convoluído com a distribuição $\rho(x, t)$ como segue

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x, t) = \int_0^t d\bar{t}\mathcal{D}(t - \bar{t})\frac{\partial^2}{\partial x^2}\rho(x, \bar{t}) . \quad (2.40)$$

Para resolver essa equação, assim como nos casos anteriores, podemos utilizar transformadas integrais e propriedades das funções de Mittag-Leffler e de Fox para dada condição de contorno e condição inicial $\rho(x, 0) = \delta(x)$, que nos conduzem a seguinte solução

$$\rho(x, t) = \frac{\pi}{\mu|x|}\mathbb{H}_{33}^{21}\left[\frac{|x|}{(\mathcal{D}t^{\alpha+1})^{\frac{1}{\mu}}}\Bigg|_{(1,1) (1, \frac{1}{\mu}) (1, \frac{1}{2})}^{(1, \frac{1}{\mu}) (1, \frac{\alpha+1}{\mu}) (1, \frac{1}{2})}\right] \quad (2.41)$$

(veja Fig.2.3). Por outro lado, se considerarmos $\mathcal{D}(t) = \mathcal{D}\delta(t)$ na equação (2.40) e $F(x) = -kx$, obtemos empregando método semelhante ao do caso anterior, a solução

$$\rho(x, t) = \frac{1}{\mu|x|}\mathbb{H}_{11}^{22}\left[\left(\frac{\alpha\mu}{\overline{\mathcal{D}}(t)}\right)^{\frac{1}{\mu}}|x|\Bigg|_{(1,1) (1, \frac{1}{2})}^{(1, \frac{1}{\mu}) (1, \frac{1}{2})}\right] , \quad (2.42)$$

em que $\overline{\mathcal{D}}(t) = \mathcal{D}[1 - \exp(-\alpha\mu t)]$. Vamos analisar agora a equação (2.38) para uma condição inicial do tipo $\rho(x, 0) = \tilde{\rho}(x)$. Repetindo o procedimento empregado acima, obtemos tomando a transformada de Laplace e Fourier da equação (2.38),

$$\rho(k, s) = \frac{\rho(k, 0)}{s + \mathcal{D}|k|^\mu} . \quad (2.43)$$

Invertendo a equação acima chegamos a

$$\rho(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx'\mathcal{G}_\mu(x - x', t - t')\tilde{\rho}(x') \quad (2.44)$$

em que $\mathcal{G}_\mu(x, t) = L_\mu(x, t)$. E a equação integral associada a equação (2.38) é

$$\rho(x, t) = \rho^{(0)}(x, t) - \int_0^t dt' \int_{-\infty}^{\infty} dx'\mathcal{G}_\mu^{(2)}(x - x', t - t')F(x', t')\rho(x', t') , \quad (2.45)$$

em que

$$\begin{aligned}\mathcal{G}_\mu^{(2)}(x, t) &= -\frac{d}{dx}L_\mu(x, t) \\ &= \int_0^\infty \frac{dk}{\pi} k \operatorname{sen}(kx) e^{-t\mathcal{D}|k|^\mu} .\end{aligned}\tag{2.46}$$

A equação (2.45) é justamente a equação integral correspondente à equação (2.38) que pode ser usada para calcular perturbativamente a influência de uma força externa qualquer aplicada ao sistema.

Neste capítulo, investigamos as equações que empregam derivadas fracionárias tanto na variável temporal como na espacial. Para cada uma dessas equações, usando o formalismo de caminhantes aleatórios, mostramos como tais derivadas afetam o nosso caminhante, seja no tempo entre saltos ou no tamanho com que os saltos são dados. De fato, ao usarmos a derivada fracionária temporal alteramos o tempo entre saltos e no caso da derivada fracionária espacial alteramos a distribuição do comprimento desses saltos. No capítulo que segue, analisaremos as alterações que são obtidas ao incorporarmos um termo absorvente e um termo de força externa.

Capítulo 3

Equação de difusão fracionária linear: termo absorvente e força externa

Continuando os desenvolvimentos feitos capítulo anterior, vamos dedicar este capítulo a análise da seguinte equação de difusão fracionária [25]

$$\begin{aligned} \frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(x, t) &= \mathcal{D} \frac{\partial^\mu}{\partial |x|^\mu} \rho(x, t) - \frac{\partial}{\partial x} [F(x) \rho(x, t)] \\ &\quad - \int_0^t dt' \alpha(t-t') \rho(x, t'), \end{aligned} \quad (3.1)$$

em que \mathcal{D} é o coeficiente de difusão, $F(x)$ é a força externa, $\alpha(t)$ é um termo absorvente (ou fonte) relacionado a um processo de reação que pode estar ocorrendo no sistema. De forma análoga aos casos analisados anteriormente, a derivada fracionária temporal é do tipo Caputo e a derivada fracionária aplicada a variável espacial é do tipo Riesz-Weyl [21]. Assim, começaremos nossa discussão pelo caso caracterizado por um termo absorvente do tipo $\alpha(t) = \alpha t^{\beta-1} / \Gamma(\beta)$ sem a presença de forças externas. Depois, incorporaremos uma força externa do tipo $F(x) = -\mathcal{K}x$ em nossa análise. De forma analoga as situações estudadas anteriormente, as soluções serão expressas em termos das funções H de Fox e em alguns casos relacionadas com as distribuições do tipo Lévy.

3.1 Equação de difusão fracionária linear e termo absorvente

Vamos inicialmente abordar a equação (3.1) na presença do termo absorvente (fonte) $\alpha(t) = \alpha t^{\beta-1}/\Gamma(\beta)$, sem a presença de forças externas. Nesse caso, a equação (3.1) assume a forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(x, t) &= \mathcal{D} \frac{\partial^\mu}{\partial |x|^\mu} \rho(x, t) \\ &- \frac{\alpha}{\Gamma(\beta)} \int_0^t dt' (t-t')^{\beta-1} \rho(x, t') \end{aligned} \quad (3.2)$$

com $0 < \gamma \leq 1$, $0 < \beta \leq 1$, e $0 < \mu \leq 2$. Esta equação estende a equação de difusão usual pela presença das derivadas fracionárias e pelo termo absorvente que encontra-se convoluido com a distribuição. A equação (3.2) similar as equações fracionárias estudadas anteriormente, também pode ser obtida do formalismo de caminhadas aleatórias usando o procedimento apresentado em [30] com uma escolha adequada para o termo que vai originar o termo de reação presente na equação (3.2).

As soluções que vamos obter para a equação (3.2) serão aquelas que satisfazem a condição de contorno $\rho(\pm\infty, t) = 0$ e a condição inicial do tipo $\rho(x, 0) = \tilde{\rho}(x)$ com $\tilde{\rho}(x)$ sendo uma função integrável. Dessa forma, empregando a transformada de Fourier ($F\{\rho(x, t)\} = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x, t) e^{-ikx} dx = \hat{\rho}(k, t)$ e $F^{-1}\{\hat{\rho}(k, t)\} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\rho}(k, t) e^{ikx} dk = \rho(x, t)$ e a transformada de Laplace ($\mathcal{L}\{\rho(x, t)\} = \int_0^{\infty} \rho(x, t) e^{-st} dt = \tilde{\rho}(x, s)$ e sua inversa $\mathcal{L}^{-1}\{\tilde{\rho}(x, s)\} = \frac{1}{2\pi i} \int_{\delta-i\infty}^{\delta+i\infty} \tilde{\rho}(x, s) e^{st} ds = \rho(x, t)$), podemos simplificar a equação (3.2), que é uma equação integro-diferencial, na equação algébrica

$$s^\gamma \tilde{\hat{\rho}}(k, s) - s^{\gamma-1} \hat{\rho}(k, 0) = -\mathcal{D} |k|^\mu \tilde{\hat{\rho}}(k, s) - \alpha s^{-\beta} \tilde{\hat{\rho}}(k, s). \quad (3.3)$$

A solução da equação acima é dada por

$$\begin{aligned} \tilde{\hat{\rho}}(k, s) &= \tilde{\hat{\mathcal{G}}}(k, s) \hat{\rho}(k, 0) \\ \tilde{\hat{\mathcal{G}}}(k, s) &= \frac{s^{\gamma-1}}{s^\gamma + \mathcal{D} |k|^\mu + \alpha s^{-\beta}} \end{aligned} \quad (3.4)$$

em que $\hat{\rho}(k, 0)$ é a transformada de Fourier da condição inicial e $\tilde{\hat{\mathcal{G}}}(k, s)$ é a função de Green da equação (3.2) no espaço de Fourier-Laplace levando em

conta a condição de contorno acima. Observe que para $\gamma = 1$, $\mu = 2$ e $\alpha = 0$ recuperamos a função de Green da equação de difusão usual neste espaço. Para calcular a transformada inversa de Laplace e Fourier da equação (3.4), empregaremos o procedimento apresentado em [31] que apresenta de forma detalhada uma explicação de como podemos obter expansões em séries que contém funções H de Fox. Aplicando esse procedimento, obtemos

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

$$\mathcal{G}(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\alpha t^{\gamma+\beta})^n}{2\mu\sqrt{\pi}n!(\mathcal{D}t^\gamma)^{\frac{1}{\mu}}} \mathbb{H}_{2,3}^{2,1} \left[\frac{|x|}{2(\mathcal{D}t^\gamma)^{\frac{1}{\mu}}} \left| \begin{matrix} (1-\frac{1}{\mu}, \frac{1}{\mu}) & (1+(\gamma+\beta)n-\frac{\gamma}{\mu}, \frac{\gamma}{\mu}) \\ (0, \frac{1}{2}) & (1+n-\frac{1}{\mu}, \frac{1}{\mu}) & (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \end{matrix} \right. \right], \quad (3.5)$$

em que $\mathbb{H}_{p,q}^{m,n} \left[x \left| \begin{matrix} (a_1, A_1), \dots, (a_p, A_p) \\ (b_1, B_1), \dots, (b_q, B_q) \end{matrix} \right. \right]$ é a função de H Fox definida no Cap.2 (equação (2.10)). A equação (3.5) pode ser relacionada com vários resultados presentes na literatura [32, 33, 34] obtidos para equações de difusão fracionárias na ausência de termos absorventes (fonte). Em particular, um deles é o resultado apresentado em [32] para equações de difusão bifracionárias que corresponde a equação (3.5) com $\alpha = 0$. Note que a função de Green obtida acima nos conduz a um espalhamento (progação) anômalo da condição inicial devido a presença das derivadas fracionárias e o termo absorvente que também induz um efeito de memória. Esse fato pode ser verificado, por exemplo, analisando o segundo momento da equação (3.5) para o caso particular $\mu = 2$. De fato, Nessa situação ele fica dado por

$$\langle x^2 \rangle = 2\mathcal{D}t^\gamma \mathbb{E}_{\beta+\gamma, 1-\beta}^{(1)}(-\alpha t^{\gamma+\beta}) \quad (3.6)$$

para uma condição inicial do tipo $\rho(x, 0) = \delta(x)$, em que $\mathbb{E}_{\alpha,\beta}^{(1)}(x)$ é primeira derivada da função de Mittag-Leffler generalizada [21] (veja as figuras 3.1 e 3.2). A presença da função H de Fox na equação (3.5) e o comportamento diferente do usual apresentado pelo segundo momento podem ser associados às mudanças produzidas na densidade de probabilidade dos tempos de saltos pela derivada fracionária temporal, que para este caso tem um comportamento de cauda longa em comparação com o caso usual. Incorporando $\mu \neq 2$ ao caso anterior, produzimos mudanças na densidade de probabilidade do

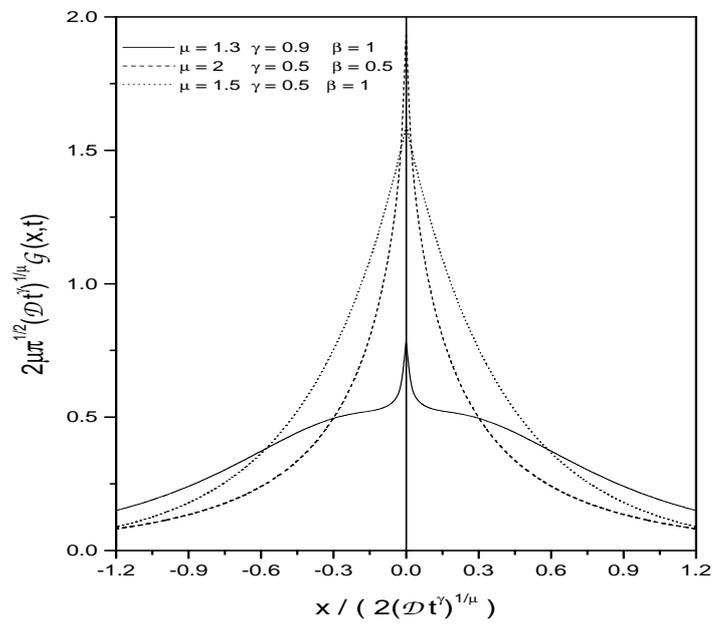


Figura 3.1: *Comportamento de $2\mu\pi^{\frac{1}{2}}(\mathcal{D}t^\gamma)^{\frac{1}{\mu}}\mathcal{G}(x,t)$ versus $x/(2(\mathcal{D}t^\gamma)^{\frac{1}{\mu}})$ ilustra a equação (3.5) considerando, por simplicidade, $t = 1$, para valores típicos de μ , γ e β .*

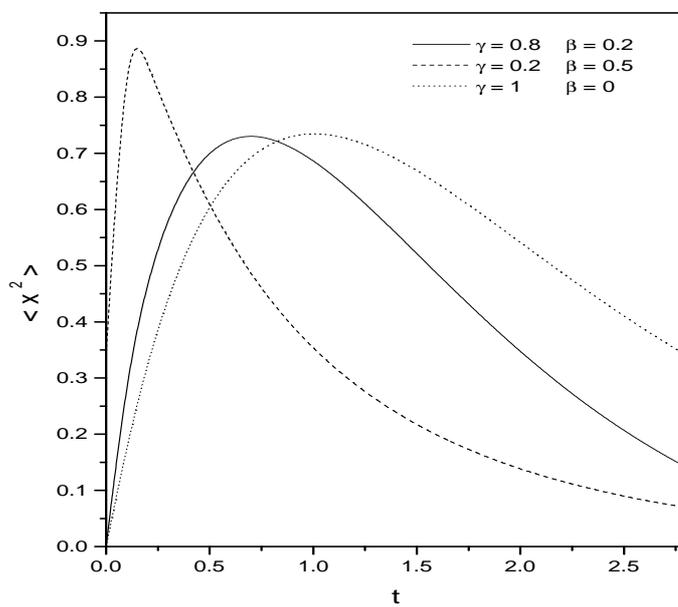


Figura 3.2: *Comportamento de $\langle x^2 \rangle$ versus t que ilustra como a equação (3.6) evolui no tempo considerando, por simplicidade, $\mathcal{D} = 1$ e $\alpha = 1$ para valores típicos de γ e β .*

tamanho com que os saltos são feitos. Nesse caso, o segundo momento da equação (3.5) diverge.

Usando o resultado anterior e o método das imagens [35], podemos achar a solução quando a condição de contorno é definida em um intervalo semi-infinito, i.e., $\rho(0, t) = \rho(\infty, t) = 0$. Em particular, a solução que leva em conta essa condição de contorno, na presença de um termo absorvente e a condição inicial $\rho(x, 0) = \delta(x - \xi)$, é dada por

$$\begin{aligned} \rho(x, t) = & \frac{1}{2\mu\sqrt{\pi}(\mathcal{D}t^\gamma)^{\frac{1}{\mu}}} \\ & \times \left(\text{H}_{2,3}^{2,1} \left[\frac{|x - \xi|}{2(\mathcal{D}t^\gamma)^{\frac{1}{\mu}}} \middle| \begin{matrix} (1-\frac{1}{\mu}, \frac{1}{\mu}) & (1-\frac{\gamma}{\mu}, \frac{\gamma}{\mu}) \\ (0, \frac{1}{2}) & (1-\frac{1}{\mu}, \frac{1}{\mu}) & (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \end{matrix} \right] \right. \\ & \left. - \text{H}_{2,3}^{2,1} \left[\frac{|x + \xi|}{2(\mathcal{D}t^\gamma)^{\frac{1}{\mu}}} \middle| \begin{matrix} (1-\frac{1}{\mu}, \frac{1}{\mu}) & (1-\frac{\gamma}{\mu}, \frac{\gamma}{\mu}) \\ (0, \frac{1}{2}) & (1-\frac{1}{\mu}, \frac{1}{\mu}) & (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \end{matrix} \right] \right). \end{aligned} \quad (3.7)$$

Esse resultado estende resultados encontrados em [36] e a distribuição de tempo da primeira passagem de tempo para esse caso, usando a definição $\mathcal{F}(t) = -\int_0^\infty \partial\rho(x, t)/\partial t$ empregada em [36], é dada por

$$\mathcal{F}(t) = \frac{\gamma\xi}{\mu^2\sqrt{\pi}t(\mathcal{D}t)^{\frac{\gamma}{\mu}}} \text{H}_{2,3}^{2,1} \left[\frac{\xi}{2(\mathcal{D}t^\gamma)^{\frac{1}{\mu}}} \middle| \begin{matrix} (1-\frac{1}{\mu}, \frac{1}{\mu}) & (1-\frac{\gamma}{\mu}, \frac{\gamma}{\mu}) \\ (0, \frac{1}{2}) & (1-\frac{1}{\mu}, \frac{1}{\mu}) & (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \end{matrix} \right] \quad (3.8)$$

que, para tempos longos, tem o comportamento assintótico $\mathcal{F}(t) \sim 1/t^{1+\gamma/\mu}$ para $1 \leq \mu \leq 2$ (veja a figura 3.3). Ressaltando que a equação (3.8) recupera a distribuição de tempos de primeira passagem encontrada em [36] para uma escolha adequada dos parâmetros μ e γ .

Agora, vamos incorporar ao caso anterior a força externa $F(x) = -\mathcal{K}x$. Para esse caso a equação (3.1) fica dada por

$$\begin{aligned} \frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(x, t) = & \mathcal{D} \frac{\partial^\mu}{\partial |x|^\mu} \rho(x, t) + \mathcal{K} \frac{\partial}{\partial x} [x\rho(x, t)] \\ & - \frac{\alpha}{\Gamma(\beta)} \int_0^t dt' (t - t')^{\beta-1} \rho(x, t'). \end{aligned} \quad (3.9)$$

Note que na ausência do termo absorvente a equação (3.9) tem a solução estacionária dada em termos das distribuições de Lévy. Esse fato é uma

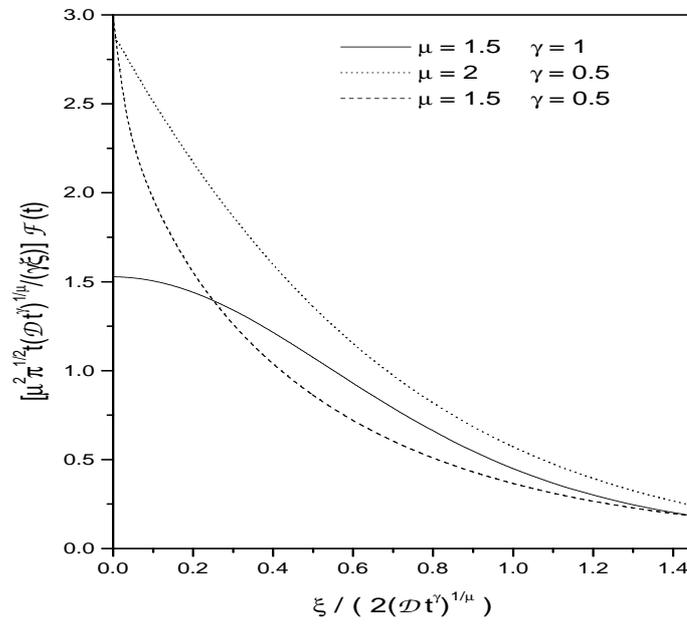


Figura 3.3: Comportamento de $[\mu^2 \pi^{1/2} t^{1/\mu} (\mathcal{D}t^\gamma)^{1/\mu} / (\gamma \xi)] \mathcal{F}(t)$ versus $\xi / (2(\mathcal{D}t^\gamma)^{1/\mu})$ que ilustra a equação (3.8) para valores típicos de μ e γ .

característica da presença das derivadas fracionárias espaciais presentes na equação de difusão que mudam a densidade de probabilidade associada as distribuições dos comprimentos dos pulos, como discutido anteriormente. Seguindo o procedimento empregado previamente, vamos usar as transformadas de Laplace e Fourier para simplificar nosso estudo. Usando essas transformadas integrais a, equação (3.9) pode ser simplificada para a seguinte equação

$$s^\gamma \widehat{\rho}(k, s) - s^{\gamma-1} \widehat{\rho}(k, 0) = -|k|^\mu \mathcal{D} \widehat{\rho}(k, s) - \mathcal{K} k \frac{d}{dk} \widehat{\rho}(k, s) - \alpha s^{-\beta} \widehat{\rho}(k, s), \quad (3.10)$$

em que $\widehat{\rho}(k, 0)$ é a transformada de Fourier da condição inicial. A solução dessa equação (considerando por, simplicidade $\widehat{\rho}(k, 0) = 1$), é dada por

$$\widehat{\rho}(k, s) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{\mathcal{D}|k|^\mu}{\mu\mathcal{K}} \right)^n \frac{s^{\gamma-1} e^{-\frac{\mathcal{D}|k|^\mu}{\mathcal{K}\mu}}}{s^\gamma + \alpha s^{-\beta} + n\mu\mathcal{K}}. \quad (3.11)$$

Invertendo a transformada de Laplace na equação (3.11) obtemos

$$\widehat{\rho}(k, t) = \sum_{j,n=0}^{\infty} \frac{(-\alpha t^{\gamma+\beta})^j}{n!j!} \left(\frac{\mathcal{D}|k|^\mu}{\mu\mathcal{K}} \right)^n e^{-\frac{\mathcal{D}|k|^\mu}{\mathcal{K}\mu}} \mathbb{E}_{\gamma, 1+j\beta}^{(j)}(-n\mu\mathcal{K}t^\gamma). \quad (3.12)$$

Na ausência de termos absorventes a equação (3.12) recupera o resultado encontrado em [37], que é dado por

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

Deve ser observando na equação acima que a função de Mittag-Leffler tem um comportamento monótonico para os valores do parâmetro γ considerados aqui. Assim, para tempos longos a equação (3.13) têm como limite assintótico $\rho(k, t) \sim e^{-\mathcal{D}|k|^\mu/(\mathcal{K}\mu)}$ que é estacionária, i.e., independente do tempo. Aplicando a transformada inversa de Fourier nesse limite assintótico, obtemos

$$\rho(x, t) \sim \frac{1}{|x|} \mathbb{H}_{2,2}^{1,1} \left[\left(\frac{\mu\mathcal{K}}{\mathcal{D}} \right)^{\frac{1}{\mu}} |x| \left| \begin{matrix} (1, \frac{1}{\mu}) & (1, \frac{1}{2}) \\ (1,1) & (1, \frac{1}{2}) \end{matrix} \right. \right], \quad (3.14)$$

que é uma distribuição de Lévy. Este último fato sugere um contexto termoestatístico diferente do usual para esse cenário (por exemplo, veja [39]).

Nessa direção, a presente análise pode ser considerada uma adição as análises feitas em [38] para as equações de difusão fracionárias. Invertendo a transformada de Fourier na equação (3.12) chegamos a

$$\rho(x, t) = \sum_{j,n=0}^{\infty} \frac{(-\alpha t^{\gamma+\beta})^j}{n!j!\mu|x|} \mathbb{E}_{\gamma,1+j\beta}^{(j)}(-n\mu\mathcal{K}t^\gamma) \mathbb{H}_{2,2}^{1,1} \left[\left(\frac{\mu\mathcal{K}}{\mathcal{D}} \right)^{\frac{1}{\mu}} |x| \left| \begin{matrix} (1-n, \frac{1}{\mu}) & (1, \frac{1}{2}) \\ (1,1) & (1, \frac{1}{2}) \end{matrix} \right. \right]. \quad (3.15)$$

A equação acima na ausência de termos de fonte recupera os resultados encontrados em [11] para o caso de um potencial harmônico e seu comportamento assintótico para grandes argumentos ($x \rightarrow \infty$) é dado por

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &\sim \sum_{j,n=0}^{\infty} \left(\frac{\mathcal{D}}{\mu\mathcal{K}} \right)^{\frac{1}{n\mu}} \frac{(-\alpha t^{\gamma+\beta})^j}{n!j!\mu|x|^{1+n\mu}} \mathbb{E}_{\gamma,1+j\beta}^{(j)}(-n\mu\mathcal{K}t^\gamma) \\ &\times \sum_{\eta=0}^{\infty} \left(\frac{\mathcal{D}}{\mu\mathcal{K}} \right)^{\frac{1}{\eta\mu}} \frac{(-1)^{\eta+1} \Gamma(1 + (\eta+n)\mu)}{|x|^{\eta\mu} \Gamma(1+\eta)} \sin\left(\frac{\pi}{2}(\eta+n)\mu\right). \quad (3.16) \end{aligned}$$

Neste capítulo, trabalhamos equações de difusão fracionárias na presença de termos de fonte e força externa. Particularmente, o termo de fonte encontra-se convoluído com a distribuição induzindo um efeito de memória. Primeiramente, analisamos o caso caracterizado pela ausência de força externa na presença do termo absorvente $\alpha(t) = \alpha t^{\beta-1}/\Gamma(\beta)$. Para esse caso, obtivemos soluções exatas e as expressamos em termos da função de Green. A função de Green mostrou possuir um comportamento diferente do usual (Gaussiano) que manifesta-se na forma como ocorre a propagação da condição inicial. Fato esse que está intimamente conectado com a presença das derivadas fracionárias presentes na equação de difusão. Nessa direção analisamos o comportamento do segundo momento. A seguir, incorporamos a força externa $F(x) = -\mathcal{K}x$ à situação anterior em que temos a presença do termo absorvente. Para este caso, também, obtivemos soluções exatas e discutimos o caso $\alpha = 0$. Em particular, a solução estacionária é do tipo Lévy, sugerindo que o contexto termoestatístico associado a esse cenário é diferente do usual. Nesse sentido, os resultados apresentados podem ser considerados como uma extensão das análises feitas em [38] para equações de difusão fracionárias.

No capítulo que segue, estudaremos as equações de difusão fracionárias não lineares.

Capítulo 4

Equações de difusão não lineares fracionárias

Neste capítulo, discutiremos algumas soluções particulares de uma equação de difusão não linear unidimensional considerando a presença de derivadas fracionárias na variável espacial. Particularmente, será foco de nossa discussão a equação:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \mathcal{D}(t) \frac{\partial^{\mu'}}{\partial |x|^{\mu'}} \left\{ |x|^{-\theta} \rho^\gamma \frac{\partial^\mu}{\partial |x|^\mu} [|x|^{-\eta} \rho^\nu] \right\} - \frac{\partial}{\partial x} [F(x, t)\rho] - \alpha(t)\rho^{\bar{\mu}}, \quad (4.1)$$

em que o coeficiente de difusão, dado por $\mathcal{D}(t)$, é dependente do tempo, $F(x, t)$ é uma força externa aplicada ao sistema, dada por $F(x, t) = -k(t)x$ e $\alpha(t)$ é um termo absorvente ou de fonte o qual tem sua origem, por exemplo, em um processo que contenha algum tipo de reação além da difusão. Começaremos investigando as soluções da equação acima na presença de termos absorventes lineares, isto é, com $\bar{\mu} = 1$. Na seqüência, estudaremos situações caracterizadas por $\bar{\mu} \neq 1$ na ausência de forças externas com um coeficiente de difusão constante. Nesse caso, obteremos soluções para alguns valores particulares dos parâmetros presentes na equação (4.1).

4.1 Equações não lineares fracionárias com termos absorventes lineares

Investigaremos as soluções dependentes do tempo para a equação (4.1) utilizando o método de similaridade para reduzi-la a uma equação diferencial ordinária, observando que a forma explícita da equação que será obtida depende das condições de contorno ou de restrições impostas pelas leis de conservação, como por exemplo, a condição de normalização. Assim, vamos considerar em nossas investigações soluções do tipo

$$\bar{\rho}(x, t) = \frac{1}{\Phi(t)} \tilde{\rho} \left[\frac{x}{\Phi(t)} \right], \quad (4.2)$$

em que $\bar{\rho}(\pm\infty, 0) = 0$.

Estas soluções devem satisfazer as condições de contorno, inicial e de normalização, quando $\bar{\alpha}(t) = 0$. Antes de analisarmos as soluções da equação (4.1), vamos considerar $\rho(x, t) = \exp \left[-\int_0^t d\tilde{t} \bar{\alpha}(\tilde{t}) \right] \bar{\rho}(x, t)$, em que $\bar{\rho}(x, t)$ é a função a ser determinada, sendo dada pela equação (4.2) e $\bar{\mu} = 1$. Desta forma, deixamos para uma etapa posterior o estudo do caso $\bar{\mu} \neq 1$ e suas soluções. Aplicando estas considerações na equação (4.1) obtemos

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} = \bar{\mathcal{D}}(t) \frac{\partial^{\mu'}}{\partial |x|^{\mu'}} \left\{ |x|^{-\theta} \bar{\rho}^{\gamma} \frac{\partial^{\mu}}{\partial |x|^{\mu}} \left[|x|^{-\eta} \bar{\rho}^{\nu} \right] \right\} - \frac{\partial}{\partial x} [k(t)x\bar{\rho}], \quad (4.3)$$

com $\bar{\mathcal{D}}(t) = \mathcal{D}(t) \exp \left[(\nu + \gamma - 1) \int_0^t d\tilde{t} \bar{\alpha}(\tilde{t}) \right]$. Agora, empregando a equação (4.2) na equação (4.3) e utilizando $z = |x|/\Phi(t)$, obtemos um conjunto de duas equações como segue:

$$\frac{d^{\mu'}}{dz^{\mu'}} \left\{ z^{-\theta} \tilde{\rho}^{\gamma}(z) \frac{d^{\mu}}{dz^{\mu}} \left[z^{-\eta} \tilde{\rho}^{\nu}(z) \right] \right\} = \bar{k} \frac{d}{dz} [z\tilde{\rho}(z)] \quad (4.4)$$

e

$$\dot{\Phi}(t) = -\bar{k}\bar{\mathcal{D}}(t) [\Phi(t)]^{2-\xi} - k(t)\Phi(t), \quad (4.5)$$

em que $\xi = \theta + \gamma + \nu + \eta + \mu + \mu'$ e \bar{k} é uma constante arbitrária que pode ser determinada pela condição de normalização. Resolvendo a equação para

$\Phi(t)$, temos

$$\frac{\Phi(t)}{\Phi(0)} = \left[1 + k' \int_0^t d\tilde{t} \tilde{\mathcal{D}}(\tilde{t}) e^{(\xi-1) \int_0^t dt' k(t')} \right]^{\frac{1}{\xi-1}} e^{-\int_0^t dt' k(t')}, \quad (4.6)$$

em que $k' = (1 - \xi)\bar{k}/[\Phi(0)]^{\xi-1}$. Podemos perceber que esta equação contempla a possibilidade de considerarmos como condição inicial a distribuição com uma determinada largura. Voltando nossa atenção para a equação (4.4), a primeira simplificação que podemos fazer nela é efetuar uma integração, o que resulta em

$$\frac{d^{\mu'-1}}{dz^{\mu'-1}} \left\{ z^{-\theta} \tilde{\rho}^\gamma(z) \frac{d^\mu}{dz^\mu} [z^{-\eta} \tilde{\rho}^\nu(z)] \right\} = \bar{k}z\tilde{\rho}(z) + \mathcal{C}, \quad (4.7)$$

a partir da qual analisaremos várias situações para os parâmetros $\mu', \mu, \theta, \gamma, \eta, \nu$. Em particular, primeiramente estudaremos o caso $\mu' = 1$ com $\mu, \theta, \gamma, \eta$ e ν arbitrários. Após este estudo, consideraremos situações que envolvem valores arbitrários de μ' e casos particulares para estes parâmetros. Para que a condição de contorno $\rho(\pm\infty, t) = 0$ seja satisfeita, vamos considerar $\mathcal{C} = 0$ para todos os casos.

Dessa forma, considerando $\mu' = 1$ juntamente com $\mathcal{C} = 0$ a equação (4.7) fica reduzida a

$$z^{-\theta} \tilde{\rho}^\gamma(z) \frac{d^\mu}{dz^\mu} [z^{-\eta} \tilde{\rho}^\nu(z)] = \bar{k}z\tilde{\rho}(z). \quad (4.8)$$

A equação (4.8) é uma equação de difusão não linear e fracionária, o que torna difícil, ou impossível, empregarmos procedimentos baseados no princípio da superposição que são comumente usados na obtenção das soluções das equações diferenciais parciais lineares. Assim, iremos propor o *ansatz*¹ $\tilde{\rho}(z) = \mathcal{N} z^{\frac{\alpha}{\nu}} (1 + bz)^{\frac{\beta}{\nu}}$ como uma possível solução, observando que esta proposta de solução satisfaz às condições de contorno e inicial pertinentes ao problema. A seguir aplicamos o *ansatz* na equação (4.8) e utilizamos

¹Esse método consiste em utilizarmos as condições inicial e de contorno para propor uma estrutura para a solução, a menos de parâmetros adequados.

a propriedade que é obtida usando a definição de derivada fracionária de Riemann-Liouville,

$$\frac{d^\delta}{dz^\delta} [z^\alpha (1+bz)^\beta] = \frac{\Gamma(\alpha+1)}{\Gamma(\alpha+1-\delta)} \frac{z^{\alpha-\delta}}{(1+bz)^{\delta-\beta}} \quad (4.9)$$

com $\delta = \alpha + \beta + 1$. Encontramos portanto, os parâmetros α, β e ν presentes no *ansatz* e na equação de difusão em termos dos demais parâmetros como segue:

$$\begin{aligned} \frac{\alpha}{\nu} &= \frac{(1+\theta+\mu+\eta)(2+\theta+\mu)}{(\gamma-1)(1+\theta+2\mu+\eta)}, \\ \frac{\beta}{\nu} &= \frac{\mu(2+\theta+\mu)}{(\gamma-1)(1+\theta+2\mu+\eta)} \text{ e} \\ \nu &= \frac{(1-\gamma)(1-\mu-\eta)}{2+\theta+\mu}, \end{aligned} \quad (4.10)$$

com $\mathcal{N} = \left[\frac{\Gamma(1+\alpha-\eta)}{k\Gamma(1+\alpha-\eta-\mu)} \right]^{\frac{1}{1-\nu-\gamma}}$. Substituindo esses resultados na solução proposta, encontramos

$$\tilde{\rho}(z) = \mathcal{N} \left[z^{\frac{1+\theta+\mu+\eta}{\gamma-1}} (1+bz)^{\frac{\mu}{\gamma-1}} \right]^{\frac{2+\theta+\mu+\eta}{1+\theta+2\mu+\eta}}, \quad (4.11)$$

Devemos observar que $b = -1$ consiste em uma solução compacta, ao passo que $b = 1$ nos conduz a uma solução que “cobre” todo o espaço. Conseqüentemente, dependendo da escolha dos parâmetros μ, θ, η e γ , a solução adquire uma cauda curta ($b = -1$) ou longa ($b = 1$). Em particular, o último caso está relacionado com as distribuições do tipo Lévy. De fato, se considerarmos o limite assintótico para argumentos grandes na equação (4.11), para o caso caracterizado por uma cauda longa, teremos $\tilde{\rho}(z) \sim 1/z^{\frac{2+\mu+\theta}{1-\gamma}}$.

Empregando o procedimento acima, podemos estender a solução encontrada para o caso caracterizado por $\mu' \neq 1$. Analogamente, utilizando o *ansatz* descrito acima na equação (4.7) com $\mathcal{C} = 0$, obtemos como solução

$$\tilde{\rho}(z) = \tilde{\mathcal{N}} \left[z^{\frac{\theta+\mu+\mu'+\eta}{1-\gamma}} (1+bz)^{\frac{\mu+\mu'-1}{1-\gamma}} \right]^{\frac{\theta+2\mu'+\mu}{1-2(\mu+\mu')-\theta-\eta}}, \quad (4.12)$$

em que $\gamma = (1 - \mu - \mu' - \theta)/(1 + \mu')$,

$$\tilde{\mathcal{N}} = \left[\frac{\Gamma(1+\bar{\alpha}-\eta)}{k\Gamma(1+\bar{\alpha}-\eta-\mu)} \frac{\Gamma(1+(1+\frac{\gamma}{\nu})\bar{\alpha}-\theta-\eta-\mu)}{\Gamma(2+(1+\frac{\gamma}{\nu})\bar{\alpha}-\theta-\eta-\mu-\mu')} \right]^{\frac{1}{1-\nu-\gamma}},$$

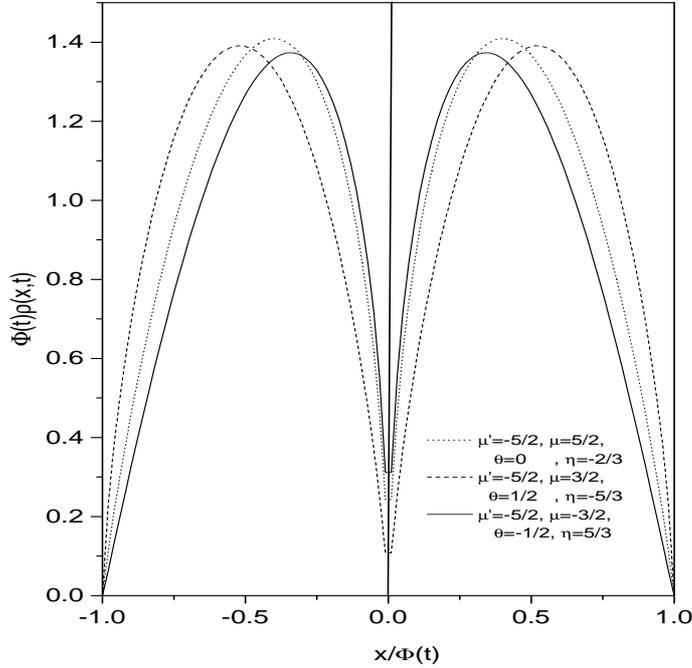


Figura 4.1: *Comportamento da $\Phi(t)\rho(x,t)$ versus $x/\Phi(t)$ a partir da equação (4.12) para valores típicos dos parâmetros η, μ', θ e μ e na ausência de termos absorventes, que nos conduzem a uma distribuição com a forma compacta.*

e $\bar{\alpha}/\bar{\nu} = [(\theta + 2\mu' + \mu) / (1 - 2(\mu + \mu') - \theta - \eta)] [(\theta + \mu' + \mu + \eta) / (1 - \gamma)]$. De forma análoga ao caso anterior, $b = \pm 1$ e $\bar{\nu} = (1 - \gamma)(1 - \mu - \eta) / (1 + \theta + 2\mu)$ (veja as figuras 4.1 e 4.2).

Utilizando os resultados acima, podemos obter o segundo momento, e, em particular, para o caso em que o mesmo é finito, encontramos $\langle x^2 \rangle \propto [\Phi(t)]^2$, com $\Phi(t)$ definido pela equação (4.6). Quando consideramos tempos longos, este resultado se reduz a $\langle x^2 \rangle = t^{2/(\xi-1)}$ na ausência de forças externas e termos absorventes. Essa relação nos diz que o processo difusivo pode ser superdifusivo, normal ou subdifusivo se $2/(\xi - 1)$ for maior, igual ou menor que um respectivamente.

Agora, vamos considerar casos particulares da equação (4.1). Mais precisamente, consideraremos os seguintes casos: (i) $\mu' = \mu = 1$, (ii) $\mu' = 1$

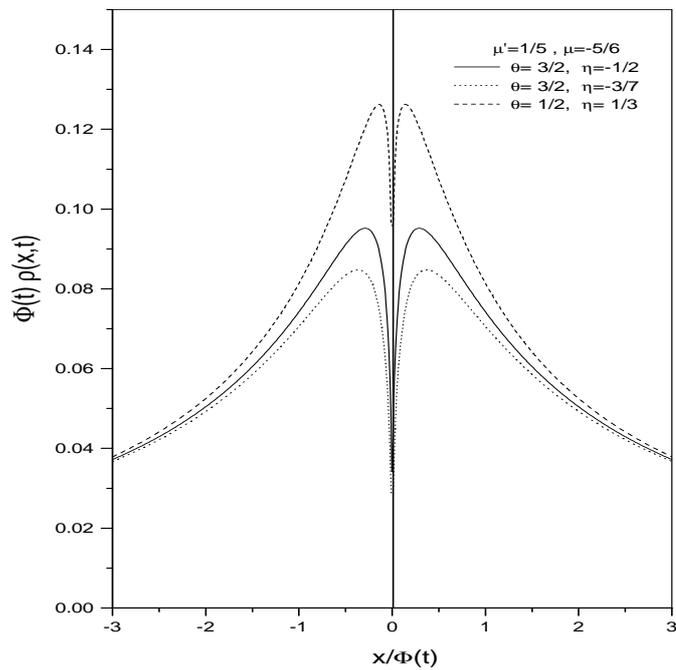


Figura 4.2: *Comportamento da $\Phi(t)\rho(x,t)$ versus $x/\Phi(t)$ obtido a partir da equação (4.12) para valores típicos dos parâmetros η, μ', θ e μ e na ausência de termos absorventes, que nos conduzem a uma distribuição com uma cauda alongada, cobrindo todo espaço.*

e $\mu = -1$ e (iii) $\mu' = 2$ e $\mu = 0$. Entretanto, antes de começarmos nossas investigações acerca desses casos, vamos fazer a mudança de \bar{k} por $-\tilde{k}$ com \tilde{k} definido pela condição de normalização. Aplicando este requisito na equação (4.7), obtemos para o caso $\mu' = \mu = 1$ a expressão

$$z^{-\theta} \tilde{\rho}^\gamma(z) \frac{d}{dz} \left[z^{-\eta} \tilde{\rho}^\nu(z) \right] = -\tilde{k} z \tilde{\rho}(z).$$

A solução para a equação acima é dada por

$$\tilde{\rho}(z) = z^{\frac{\eta}{\nu}} \exp_q \left[-\frac{\tilde{k} z^{2+\theta+(1-\gamma)\frac{\eta}{\nu}}}{(2+\theta)\nu + (1-\gamma)\eta} \right], \quad (4.13)$$

em que $q = 2 - \nu - \gamma$, com $\exp_q[x] = [1 - (1-q)x]^{-\frac{1}{1-q}}$ para $1 - (1-q)x \geq 0$ e $\exp_q[x] = 0$ para $1 - (1-q)x < 0$. Note que $\exp_q[x]$ é a função q -exponencial que emerge do formalismo de Tsallis ao maximarmos a entropia de Tsallis $S_q = (1 - \int dx \rho^q) / (q-1)$ com vínculos adequados [45]. Para o segundo caso, isto é $\mu' = 1$ e $\mu = -1$, temos que

$$z^{-\theta} \tilde{\rho}^\gamma(z) \int_0^z d\bar{z} \bar{z}^{-\eta} \tilde{\rho}^\nu(\bar{z}) = -\tilde{k} z \tilde{\rho}(z).$$

Resolvendo a equação anterior, obtemos como solução

$$\tilde{\rho}(z) = z^{\frac{1+\theta}{\gamma-1}} \exp_q \left[-\frac{1}{\tilde{\mathcal{K}}} z^{1-\eta+\nu\frac{1+\theta}{\gamma-1}} \right], \quad (4.14)$$

em que $\tilde{\mathcal{K}} = k[(1-\gamma)(1-\eta) - \nu(1+\theta)]$. No terceiro caso, $\mu' = 2$ e $\mu = 0$, a equação (4.8) assume a forma

$$\frac{d}{dz} \left[z^{-\theta-\eta} \tilde{\rho}^{\gamma+\nu}(z) \right] = -\tilde{k} z \tilde{\rho}(z).$$

De forma análoga aos casos anteriores, podemos expressar a solução para esse caso em termos das funções q -exponenciais, obtendo como resultado

$$\tilde{\rho}(z) = z^{\frac{\eta+\theta}{\nu+\gamma}} \exp_q \left[-\frac{\tilde{k} z^{2+\frac{\eta+\theta}{\nu+\gamma}}}{2(\nu+\gamma) + \theta + \eta} \right], \quad (4.15)$$

em que $q = 2 - \nu - \gamma$. As soluções para esses casos podem exibir uma forma compacta ou alongada de cauda, dependendo dos valores dos parâmetros ν, γ, θ e η .

4.2 Equações não lineares fracionárias com termos absorventes não lineares

Para complementar nossa análise feita anteriormente, consideraremos a situação em que $\bar{\mu} \neq 1$. No intuito de simplificarmos o problema, trataremos esse caso na ausência de forças externas, com o coeficiente de difusão e o termo absorvente constantes. Empregando todas essas condições na equação (4.1), podemos reduzi-la à forma

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \mathcal{D} \frac{\partial^{\mu'}}{\partial |x|^{\mu'}} \left\{ |x|^{-\theta} \rho^\gamma \frac{\partial^\mu}{\partial |x|^\mu} [|x|^{-\eta} \rho^\nu] \right\} - \alpha \rho^{\bar{\mu}}. \quad (4.16)$$

Assim, como nos casos trabalhados anteriormente, a equação (4.16) é uma equação não linear, sendo que a não linearidade está presente tanto no termo difusivo quanto no termo absorvente. Seguindo o procedimento empregado na seção anterior, vamos considerar que a solução para a equação (4.16) seja do tipo $\rho(x, t) = \phi(t) \mathcal{P}(\varphi(t)x)$, sendo $\phi(t)$ e $\varphi(t)$ funções dependentes do tempo a serem determinadas. Observe que contrariamente a equação (4.2), $\phi(t)$ e $\varphi(t)$ não precisam ser necessariamente iguais. Continuando nossa investigação acerca das soluções da equação (4.16), vamos analisar a equação cinética que emerge ao tomarmos $\mathcal{D} = 0$, ou seja, quando temos a equação

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\alpha \rho^{\bar{\mu}}. \quad (4.17)$$

A solução para esta equação é dada por $\rho = [1 - (1 - \mu')\alpha t]^{\frac{1}{1-\mu'}}$, o que sugere considerarmos que ϕ seja dada por $\rho = [1 - (1 - \mu')\mathcal{K}t]^{\frac{1}{1-\mu'}}$ (sendo \mathcal{K} uma constante arbitrária a ser determinada), uma vez que para $\mathcal{D} = 0$ a solução deve ser formalmente equivalente à solução da equação cinética. Para obter φ , vamos substituir a solução proposta na equação (4.16), com $\phi(t)$ definido acima. Após alguns cálculos é possível mostrar que $\varphi(t) = [\phi(t)]^{\frac{\gamma+\nu-\bar{\mu}}{\mu+\mu'+\theta+\eta}}$ e, com isto, podemos reduzir a equação (4.16) à equação ordinária

$$-\mathcal{K}\mathcal{P} - \frac{(\gamma + \nu - \bar{\mu})\mathcal{K}}{\mu + \mu' + \theta + \eta} \frac{d\mathcal{P}}{d\zeta} = \mathcal{D} \frac{d^{\mu'}}{d\zeta^{\mu'}} \left\{ \zeta^{-\theta} \mathcal{P}^\gamma \frac{d^\mu}{d\zeta^\mu} [\zeta^{-\eta} \mathcal{P}^\nu] \right\} - \alpha \mathcal{P}^{\bar{\mu}}, \quad (4.18)$$

em que $\zeta = \varphi(t)x$. Nesse ponto, é interessante ressaltarmos que, supondo que $\int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \zeta^2 \mathcal{P}(\zeta)$ seja finita e conhecendo $\phi(t)$ e $\varphi(t)$, podemos determinar

o comportamento temporal do segundo momento. Nesse caso, aplicando a definição, $\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 \rho(x, t)$, obtemos $\langle x^2 \rangle \propto \phi(t)/[\varphi(t)]^3$. Tomando o limite de tempos suficientemente longo, obtemos $\langle x^2 \rangle \sim t^{\frac{3(1+\bar{\mu}-\gamma-\nu)}{(1-\bar{\nu})(\mu+\mu'+\theta+\eta)}}$. Desse último resultado, podemos observar que para $3(1+\bar{\mu}-\gamma-\nu)/[(1-\bar{\nu})(\mu+\mu'+\theta+\eta)]$ maior, igual ou menor que a unidade, temos um processo superdifusivo, normal ou subdifusivo, respectivamente.

Agora, nosso problema reside em encontrar soluções analíticas para a equação (4.18), o que é uma tarefa difícil se considerarmos $\mu, \mu', \theta, \eta, \gamma$ e ν arbitrários. Assim, vamos considerar duas situações particulares envolvendo estes parâmetros. Elas são (i) $\gamma + \nu = \bar{\mu}$ com $\mu = 1$ e $\mu' = 0$ e (ii) $\gamma + \nu - \bar{\mu} = \mu + \mu' + \theta + \eta$ com $\mu = \mu' = 1$. Começaremos considerando $\gamma + \nu = \bar{\mu}$, $\mu = 1$ e $\mu' = 0$ com os demais parâmetros podendo assumir valores arbitrários. Para este caso, a equação (4.18) pode ser reduzida à equação

$$-\mathcal{K}\mathcal{P} = \mathcal{D}\zeta^{-\theta}\mathcal{P}^\gamma \frac{d}{d\zeta} [\zeta^{-\eta}\mathcal{P}^\nu] - \alpha\mathcal{P}^{\bar{\mu}},$$

cuja solução é dada por

$$\mathcal{P}(\zeta) = \zeta^{\frac{\eta}{\nu}} \exp_q \left[-\frac{\mathcal{K}}{\mathcal{D}\nu} \int^\zeta du u^{\theta+\frac{\eta}{\nu}(1-\gamma)} e^{-\frac{(1-q)\alpha}{(1+\theta+\eta)\mathcal{D}\nu} u^{1+\theta+\eta}} \right] e^{\frac{\alpha\zeta^{1+\theta+\eta}}{(1+\theta+\eta)\mathcal{D}\nu}}, \quad (4.19)$$

para $q = 2 - \gamma - \nu$.

Para o caso $\gamma + \nu - \bar{\mu} = \mu + \mu' + \theta + \eta$ e $\mu = \mu' = 1$, a equação (4.18) adquire a forma

$$-\mathcal{K} \frac{d}{d\zeta} [\zeta\mathcal{P}] = \mathcal{D} \frac{d}{d\zeta} \left\{ \zeta^{-\theta}\mathcal{P}^\gamma \frac{d^\mu}{d\zeta^\mu} [\zeta^{-\eta}\mathcal{P}^\nu] \right\} - \alpha\mathcal{P}^{\bar{\mu}}.$$

A solução para esse caso pode ser obtida de forma implícita e tem como resultado

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(\zeta) &= \zeta^{\frac{\eta}{\nu}} \exp_q \left[-\frac{\mathcal{K}\zeta^{2+\theta+\frac{\eta}{\nu}(1-\gamma)}}{\mathcal{D}[(2+\theta)\nu + \eta(1-\gamma)]} \right. \\ &\quad \left. - \frac{\alpha}{\mathcal{D}\nu} \int^\zeta du \frac{u^{\theta+\frac{\eta}{\nu}(1-\gamma)}}{\mathcal{P}(u)} \int^u d\bar{u} [\mathcal{P}(\bar{u})]^{\bar{\mu}} \right], \end{aligned} \quad (4.20)$$

com $q = 2 - \gamma - \nu$. De forma análoga, outras situações envolvendo os parâmetros presentes na equação (4.18) podem ser analisadas.

Neste capítulo, abordamos as equações que são não lineares e possuem derivadas fracionárias espaciais. Também consideramos a presença de termos de força externa e termos de fonte ou sumidouro. As soluções foram obtidas levando em conta o método de similaridade que ressaltaram em distribuições do tipo lei de potência as quais poderiam ter uma forma compacta ou alongada, dependendo da escolha dos parâmetros presente na equação de difusão. Outro fato interessante é a presença das funções q -exponenciais e q -logarítmicas presentes nas soluções da equação de difusão, sugerindo uma conexão dessas equações com o formalismo de Tsallis.

Discussões e perspectivas

Nesta dissertação, abordamos vários tipos de equações de difusão que generalizam a equação de difusão usual pela presença de derivadas fracionárias temporais, espaciais ou incorporando termos não lineares. Nesse último caso, o termo não linear pode estar no termo difusivo e/ou no termo de reação. Particularmente, começamos a discussão pela equação de difusão usual no intuito de compreender as situações físicas que a rodeiam e conseqüentemente as situações baseadas em suas generalizações. Assim, depois de uma rápida introdução sobre a equação de difusão usual e alguns formalismos relacionados a ela abordamos as equações de difusão que empregam derivadas fracionárias na variável temporal e espacial. Essas equações são resultados de mudanças, pensando no formalismo de caminhantes aleatórios, na distribuição do tempo de espera entre saltos ou na distribuição do tamanho dos saltos. Fatos estes que podem ser verificados utilizando o formalismo de caminhantes aleatórios. O resultado de tais soluções que passaram a ser expressas em termos das funções H de Fox ou das distribuições de Levy. Nesse sentido, o segundo momento associado a estas distribuições, quando finito, nos levou a obter um alargamento da distribuição de uma forma anômala, diferente do caso usual que é linear com o tempo. Seguindo com nossas investigações incorporamos um termo absorvente na equação de difusão fracionária e obtivemos as soluções em termos das funções H de Fox. Após o estudo dessas equações lineares, consideramos as equações de difusão que são não lineares e empregam ou não derivadas fracionárias na variável espacial. Nesse caso, as soluções obtidas são expressas em termos da função q -exponencial que aparece no formalismo de Tsallis, sugerindo assim uma base termoestatística

para tais equações. Ressaltando que também consideramos a presença de um termo de reação não linear.

Uma etapa futura seria investigar situações físicas em que o formalismo abordado aqui pode ser aplicado e buscar extensões dos resultados encontrados aqui. Nesse sentido, temos por exemplo o modelo do pente [40, 41, 42] que tem sido empregado no estudo da propagação de células cancerígenas [43]. Outra possível extensão seria considerar a presença de termos convectivos não lineares. Por fim, esperamos que os resultados obtidos aqui venham a ser úteis na discussão de situações que envolvam ou estejam relacionadas com processos difusivos anômalos.

Referências Bibliográficas

- [1] D. Campos, V. Méndez e J. Fort, Phys. Rev. E **69**, 031115 (2004); B. O'Shaughnessy e I. Procaccia, Phys. Rev. Lett. **54**, 455 (1985); R. Metzler, W. G. Glöckle e T. F. Nonnenmacher, Physica A **211**, 13 (1994); L. Acedo e S. B. Yuste, Phys. Rev. E **57**, 5160 (1998).
- [2] D. S. F. Crothers, D. Holland Y. P. Kalmykov e W. T. Coffey, J. Mol. Liq. **114**, 27 (2004); H. Schriessel e A. Blumen, Fractals **3**, 483 (1995).
- [3] R. Hilfer, Applications of Fractional Calculus in Physics (World Scientific, Singapore, 2000).
- [4] M. Muskat, The Flow of Homogeneous Fluid Through Porous Media (McGraw-Hill, New York, 1937); P. Y. Polubarinova-Kochina, Theory of Ground Water Movement (Princeton University Press, Princeton, 1962).
- [5] V. Plerou, et al., Phys. Rev. E **62**, R3023 (2000).
- [6] C.-K. Peng, J. Mietus, J. M. Hausdorff, S. Havlin, H. E. Stanley e A. L. Goldberger, Phys. Rev. Lett. **70**, 1343 (1993).
- [7] H. Sher e E. W. Montroll, Phys. Rev. B **12**, 2455 (1975).
- [8] A. Ott et al., Phys. Rev. Lett. **65**, 2201 (1990).
- [9] C. Tsallis e E. K. Lenzi, Chem. Phys. **284**, 341 (2002). [Erratum **287**, 295 (2003).]; L. C. Malacarne, I. T. Pedron, R. S. Mendes e E. K. Lenzi, Phys. Rev. E **63**, 30101R (2001). L. Borland, Phys. Rev. E **57**, 6634

- (1998); N. Goldenfeld, Lectures on phase transitions and the renormalization group (Addison-Wesley Publishing Company, Inc., Reading, 1992).
- [10] M. F. Shlesinger, G. M. Zaslavsky e U. Frisch, Lévy flights and related topics in physics (Springer-Verlag, Berlin, 1994).
- [11] R. Metzler e J. Klafter, Phys. Rep. **339**, 1 (2000).
- [12] H. Risken, The Fokker-Planck Equation (Springer, New York, 1984); C. W. Gardiner, Handbook of Stochastic Methods: For Physics, Chemistry and the Natural Sciences (Springer Series in Synergetics, New York, 1996).
- [13] R. Metzler, E. Barkai e J. Klafter, Physica A **266**, 343 (1999).
- [14] S. S. Plotkin e P. G. Wolynes, Phys. Rev. Lett. **80**, 5015 (1998).
- [15] L. F. Richardson, Proc. Roy. Soc. London, Ser. A **110**, 709 (1926).
- [16] A. N. Komolgorov, C. R. Dokl. Acad. Sci. URSS **30**, 301 (1941).
- [17] N. Su, Environ. Modell. & Softw. **19**, 345 (2004).
- [18] Z. S. Khan e S. W. Morris, Phys. Rev. Lett. **94**, 048002 (2005).
- [19] T. Kosztoowicz, K. Dworecki e St. Mrówczyński, Phys. Rev. Lett. **94**, 170602 (2005).
- [20] R. C. Lua e A. Y. Grosberg, Phys. Rev. E **72**, 061918 (2005).
- [21] I. Podlubny, Fractional Differential Equations (Academic Press, San Diego, 1999).
- [22] S. Havlin e D. Ben-Avraham, Adv. Phys. **36**, 695 (1987); B. P. Lee, J. Phys. A **27**, 2633 (1994); P. A. Alemany, D. H. Zanette e H. S. Wio, Phys. Rev. E **50**, 3646 (1994).
- [23] J. Crank, The Mathematics of Diffusion (Oxford University Press, London, 1956).

- [24] H. S. Carslaw e J. C. Jaeger, *Conduction of Heat in Solids* (Oxford University Press, London, 1959).
- [25] A. Schot, M. K. Lenzi, L. R. Evangelista, L.C Malacarne, R. S. Mendes e E. K. Lenzi, *Phys. Lett. A* **366**, 346 (2007).
- [26] C.W.Gardiner *Handbook of Stochastic Methods* **1**, (2004)
- [27] A. Einstein, *Ann Phys. (Leipzig)* **17**, 549 (1905).
- [28] L. Borland, *Phys. Rev. E* **57**, 6634 (1998)
- [29] A. M. Mathai e R. K. Saxena, *The H-function with Application in Statistics e other Disciplines* (Wiley Eastern, New Delhi, 1978).
- [30] B. I. Henry, T. A. M. Langlands e S. L. Wearne, *Phys. Rev. E* **74**, 031116 (2006).
- [31] T. A. M. Langlands, *Physica A* **367**, 136 (2006).
- [32] R. Metzler e T. F. Nonnenmacher, *Chem. Phys.* **284**, 67 (2000).
- [33] F. Mainardi, Y. Luchko e G. Pagnini, *Fractional Calculus e Applied Analysis* **4**, 153 (2001).
- [34] F. Mainardi, G. Pagnini e R. K. Saxena, *J. Comp. e Appl. Math.* **178**, 321 (2005).
- [35] M. P. Morse e H. Feshbach, *Methods of Theoretical Physics* (McGraw-Hill, New York, 1953).
- [36] G. Rangarajan e M. Ding, *Phys. Lett. A* **273**, 322 (2000).
- [37] E. K. Lenzi, R. S. Mendes, K. S. Fa, L. C. Malacarne e L. R. da Silva, *J. Math. Phys.* **44**, 2179 (2003).
- [38] I.M. Sokolov, *Phys. Rev. E* **63**, 056111 (2001); I.M. Sokolov, J. Klafter e A. Blumen, *Phys. Rev. E* **64**, 021107 (2001).

- [39] S. Abe e Y. Okamoto, *Nonextensive Statistical Mechanics e Its Applications*, Lecture Notes in Physics (Springer-Verlag, Heidelberg, 2001); M. F. Shlesinger, G. M. Zaslavsky e U. Frisch. *Lévy Flights e Related Topics in Physics* (Springer-Verlag, Berlin, 1994).
- [40] E.Baskin e A.Iomin, *Phys.Rev.Lett.* **93**, 120603 (2004).
- [41] V. E. Arkhincheev, *Physica A* **307**, 131 (2002).
- [42] S. A. Elwakil, M. A. Zahran e E. M. Abulwafa, *Chaos, Solitons e Fractals* **20**, 1113 (2004).
- [43] A. Iomin, *Phys. Rev. E* **73**, 061918 (2006); S. Fedotov e A. Iomin, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 118101 (2007).
- [44] P.Langevin, *Comptes Rendues* **146**, 530 (1906).
- [45] C. Tsallis, R. S. Mendes e A. R . Plastino, *Physica* **261**, 543 (1998).