

Agradecimentos

Ao professor e orientador Renio dos Santos Mendes, pela maneira competente e dedicada com que orientou meu trabalho.

A professora Celia Anteneodo, pelas observações e colaboração.

À minha família, pelo amor e pela confiança depositada em mim.

Ao meu namorado Emerson Hara, por todo amor, carinho e compreensão durante a realização deste trabalho.

Aos meus amigos e amigas: Cesar, Francielle, Manoel, Maria Luiza e Otavio, pela sincera amizade que desenvolvemos ao longo de todo o curso.

A Akiko, da secretaria do Mestrado em Física, que sempre esteve presente quando precisei.

A todos os colegas e funcionários que não foram mencionados, mas que também não foram esquecidos.

A CAPES pelo apoio financeiro.

Resumo

Neste trabalho, a partir das formas da condição inicial e da função de Green, identificamos o comportamento assintótico temporal de soluções das equações de difusão e de Schrödinger usuais e fracionárias. As condições iniciais empregadas variam desde as situações localizadas (cauda curta) até aquelas pouco localizadas (cauda longa). Em contraste com o caso de cauda curta, a presença de cauda longa para a condição inicial atrapalha o processo difusivo, no sentido de tornar o alargamento do pacote inicial mais lento. Esses fatos são consequência de funções de Green que sofrem um alargamento progressivo com o tempo. Isso, para tempos longos, faz com que a condição inicial fique bastante concentrada em relação a função de Green, e a partir daí fizemos nossas aproximações. Essas estimativas, independentemente da forma concreta da função de Green, podem ser expressas, essencialmente, em termos dos momentos da condição inicial e de derivadas de mesma ordem da função de Green.

Abstract

In this work, from the initial conditions and the Green functions, we identified the time asymptotic behavior of solutions of the usual diffusion and Schrödinger equations, as well as of the spatial fractional ones. The initial conditions employed here vary from localized (short tail) ones; to not much localized (long tail) ones. In contrast with the short tail case, the presence of the long tail for the initial condition disturbs the diffusive process, in a such way the spreading of the initial packet becomes slower. These facts are a consequence of the Green functions that progressively spreads with time. For long times, this behavior leads to a very wide Green function in comparison with the initial condition. From this we performed our approximations. These approximations, independently of the specific form of the Green function, can essentially be written in terms of the moments of the initial condition and the derivatives of the Green function.

Sumário

Resumo	3
Abstract	5
1 Introdução	9
2 As Equações de Difusão e de Schrödinger	13
2.1 Equação de Difusão	13
2.2 Solução da Equação de Difusão	16
2.2.1 Exemplos	18
2.3 Movimento Browniano	19
2.4 A Equação de Schrödinger	22
2.4.1 Exemplos	24
2.5 Solução no Caso N -dimensional	24
2.5.1 Exemplo	26
3 Difusão Anômala e Equação Schrödinger Fracionária	27
3.1 Equação de Difusão Anômala	28
3.1.1 Exemplo	29
3.1.2 Derivadas Fracionárias	30
3.2 Distribuições de Lévy	31
3.3 Movimento Browniano Generalizado	35
3.4 Equação de Schrödinger Fracionária	36
3.4.1 Exemplo	37
3.5 Caso N -dimensional	38
3.5.1 Exemplo	40
4 Comportamento Assintótico I	41
4.1 Análise Assintótica - Caso Unidimensional	41
4.2 Exemplos - Caso Unidimensional	44
4.3 Caso N -dimensional	49

4.4	Exemplos - Caso N -dimensional	51
5	Comportamento Assintótico II	57
5.1	Caso Unidimensional com Cauda Curta	57
5.2	Caso Unidimensional com Cauda Longa	61
5.3	Exemplos - Caso Unidimensional	63
5.4	Caso N -dimensional com Cauda Curta	69
5.5	Caso N -Dimensional com Cauda Longa	72
5.6	Exemplos - Caso N -dimensional	73
6	Conclusões	81
	Bibliografia	85

Capítulo 1

Introdução

Das equações que comumente deparamos quando estudamos aspectos relacionados à física, algumas ocupam atualmente um lugar de destaque incontestável. Duas dessas equações são a de difusão[1, 2, 3, 4, 5] e a de Schrödinger[6, 7]. Em tal contexto, os casos mais simples e largamente empregados são aqueles vinculados a ausência de força. Nesse sentido, a investigação de suas possíveis soluções faz com que possamos entender melhor a implicação das mesmas. Conseqüentemente, tal estudo nos conduz a um maior e melhor discernimento das vertentes ligadas às situações físicas que envolvem essas equações. O presente trabalho é direcionado justamente a esse tipo de estudo. Mais precisamente, investigamos aqui o comportamento assintótico temporal dessas soluções.

Como vamos ver, os desenvolvimentos apresentados neste texto permitem tratar de maneira unificada várias situações. Em particular, as equações de difusão na ausência de força externa e a de Schrödinger para uma partícula livre. Na realidade, certas generalizações (vertentes anômalas) dessas equações podem ser igualmente investigadas. Nessa direção, nossos resultados gerais são aplicados para analisar uma equação de difusão anômala que contém uma derivada fracionária espacial. Esse tipo de equação tem sido usado para descrever difusão relacionada às distribuições de Lévy[8, 9]. Numa vertente análoga, também como ilustração, empregamos nosso ferramental para estudar uma equação de Schrödinger que contém uma derivada fracionária espacial. Nesse caso, a presença desse tipo de derivada tem sido relacionada a um contexto fractal[10, 11, 12].

Como deve estar claro, alargamento de pacotes é um fenômeno onipresente aparecendo em propagação de partículas em sistemas quânti-

cos ou em processos difusivos. Em particular, o espalhamento de pacotes de onda quântico associado com partícula livre tem sido recentemente investigado[13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21]. O principal foco é na dependência do comportamento assintótico da função de onda sobre sua condição inicial. Num caso unidimensional, quando a função de onda inicial é Gaussiana, é bem conhecido que sua amplitude na origem decai assintoticamente com $t^{-1/2}$. No entanto, este cenário muda quando uma função de onda inicial arbitrária é considerada, isto é, quando a integral da função de onda inicial sobre todo espaço não é finita. Neste caso, um decaimento com $t^{-\alpha}$ com $\alpha < 1/2$ é comum[13, 15, 17, 20, 21]. No mais, leis logarítmicas também surgem nos casos limites[13, 15, 16, 17, 18, 19].

Visto que a estrutura da equação de Schrödinger usual de partícula livre está intimamente conectada com a equação de difusão usual sem força externa, um cenário similar pode ser desenhado para o caso difusivo. Neste trabalho, consideramos um amplo quadro de equações de evolução, aquele que apresenta um aspecto difusivo. Por exemplo, equações que envolvem derivada espacial fracionária e que contém como casos particulares às equações usuais de Schrödinger de uma partícula livre e de difusão. No geral, o comportamento do tipo difusivo manifesta o fato de que soluções inicialmente localizadas espalham-se indefinidamente com o tempo. Além disso, uma grande família de condições iniciais, de cauda curta e longa, são também consideradas. Notamos ainda que não encontramos estudos desses aspectos para a vertente N -dimensional. Com isto em mente, voltamos nossa análise na direção de suprir também essa escassez de estudos de casos N -dimensionais.

Quanto à exposição de nosso trabalho, tentamos fazê-la de uma maneira bem detalhada. Por esse motivo, discutimos primeiramente os aspectos unidimensionais, assim como, alguns conceitos básicos. Como continuação, desenvolvemos a vertente em dimensão arbitrária. Nesse sentido, as últimas partes de cada capítulo estão dedicadas ao caso N -dimensional. Também numa direção crescente de complexidade dos temas enfocados, consideramos como ponto de partida as equações de difusão (usual) e de Schrödinger. A seguir, passamos para a apresentação das equações de difusão e Schrödinger fracionárias. Além disso, com o objetivo de facilitar ainda mais o entendimento dos resultados gerais alcançados neste trabalho, ilustramos via exemplos as várias etapas de nossa discussão.

No capítulo dois, fazemos uma revisão sobre os aspectos fundamentais da equação de difusão usual unidimensional e suas respectivas soluções, obtidas através do uso de transformada de Fourier. Com o intuito de visualizar as soluções encontradas para a difusão usual (normal), fazemos também aplicações aos casos de funções iniciais do tipo delta e inicial do tipo

Gaussiana. Nesse caso, obtemos o comportamento assintótico de $\rho(x, t)$ para t longo. Com o objetivo de ganhar um entendimento maior sobre a equação de difusão, mostramos como $\rho(x, t)$ para a equação de difusão pode surgir devido a um movimento aleatório (movimento Browniano) de uma partícula. A seguir, de maneira análoga a de difusão usual examinamos a equação de Schrödinger para uma partícula livre. Aplicamos os resultados obtidos em duas condições iniciais: delta de Dirac e Gaussiana. Ao final dessa seção obtemos o comportamento assintótico de $\Psi(x, t)$. Para finalizar este capítulo, consideramos soluções do caso N -dimensional tanto da equação de difusão usual quanto da equação de Schrödinger para uma partícula livre. Ilustramos essas soluções com o exemplo de uma condição inicial do tipo delta.

No tocante ao fenômeno da difusão, observamos que na natureza há também comportamentos difusivos mais complexos que aqueles estudados no capítulo dois, ou seja, a equação de difusão usual não é mais suficiente para descrever certos fenômenos difusivos. Tendo isso em mente, no capítulo três, fazemos uma breve apresentação de uma situação difusiva mais complexa. Nesse contexto, apresentamos uma equação mais geral, que incorpora o caso usual e alguns de seus possíveis desvios. De uma maneira geral, quando ocorrem desvios do comportamento normal da difusão temos a chamada difusão anômala. Mais objetivamente, estudamos brevemente um possível tipo de equação de difusão anômala e suas respectivas soluções. Essa equação de difusão anômala envolve o uso de derivada de ordem não inteira, isto é, derivada fracionária. Paralelamente ao estudo da equação de difusão apresentamos uma generalização da equação de Schrödinger que contém derivada fracionária. Em ambos os casos, difusão anômala e equação de Schrödinger com derivada fracionária, temos naturalmente como função de Green as distribuições de Lévy. Encerrando este capítulo, consideramos a vertente N -dimensional para estas equações fracionárias. Com esse capítulo, encerramos os aspectos de revisão desta dissertação.

No capítulo quatro, apresentamos de forma sistemática como o comportamento temporal de uma função está relacionado com a condição inicial e a função de Green. Em particular, aplicamos nossos desenvolvimentos a funções que são soluções da equação de difusão usual e de Schrödinger. Investigamos também o comportamento assintótico temporal de soluções das equações generalizadas (via derivada fracionária espacial) de difusão e de Schrödinger. Para iniciarmos nossa análise assintótica, começamos com situações em que a condição inicial apresenta cauda curta (no sentido de seu primeiro momento ser não nulo e finito). Finalizamos esse capítulo com a vertente N -dimensional. Em geral, quando temos cauda curta, vemos que para t suficientemente longo o comportamento espacial e temporal de $\rho(\mathbf{x}, t)$ seguirá aquele da função de Green ou de uma de suas derivadas.

No capítulo cinco, apresentamos inicialmente um procedimento alternativo para obtermos a expressão assintótica de $\rho(x, t)$, encontrada no capítulo quatro. A seguir, mostramos como esse novo procedimento nos permite tratar uma classe mais ampla de condições iniciais, isto é, aquelas cujas caudas são longas o suficiente para que integrais de potências das coordenadas diverjam. Para esse tipo de condição inicial, temos que o primeiro momento não nulo é divergente, ou seja, esta classe inclui condições iniciais não normalizáveis. Para analisarmos esse tipo de condição inicial, baseamos nas transformadas de Fourier de $\rho(x, 0)$ e $G(x - x', t)$. Discutimos situações em que $\tilde{\rho}(k, 0)$ pode ser par ou ímpar. Nesse contexto, surgem também casos marginais (limiares) que conduzem a correções logarítmicas. Tratamos os casos marginais dessas duas vertentes em forma de exemplos. Para finalizar este capítulo, revisitamos novamente essas questões quando o espaço for N -dimensional.

No último capítulo, o sexto, apresentamos uma breve discussão da nossa investigação, isto é, dos capítulos 4 e 5. Nesse resumo, enfatizamos os principais resultados obtidos, juntamente com uma interpretação dos mesmos. Encerramos o trabalho com sugestões que visam dar continuidade às pesquisas reportadas nessa dissertação.

Capítulo 2

As Equações de Difusão e de Schrödinger

Iniciamos a apresentação deste capítulo de revisão com a equação de difusão. Obtemos a solução dessa equação de difusão via transformada de Fourier. Apresentamos dois exemplos variando a condição inicial, condição inicial tipo delta e uma Gaussiana. Com o objetivo de ilustrar como a equação de difusão pode surgir, a discutimos sob um ponto de vista microscópico, isto é, fazemos um tratamento do movimento Browniano usando probabilidades. Apresentamos também a equação de Schrödinger e expomos sua solução para partícula livre.

2.1 Equação de Difusão

Num estudo introdutório da teoria cinética, ao derivar a expressão para a pressão exercida por um gás ideal, as moléculas são tratadas como pontos geométricos, que podem se deslocar livremente de uma parede do recipiente a outra, sem colidir com outras moléculas. Uma das objeções levantadas no início do desenvolvimento da teoria cinética foi que, se as moléculas se movem desta maneira, uma pequena quantidade de gás libertada em uma grande sala se espalharia pela mesma de uma forma praticamente instantânea. Por outro lado, se sabe que, quando se retira a tampa de um frasco de perfume, passa-se um tempo considerável até que o odor possa ser detectado, mesmo em um ponto a poucos metros de distância, na ausência

de correntes de ar. Cedo se percebeu que esta difusão, relativamente lenta de um gás em outro, resultava de choques moleculares, como está ilustrado na fig. (2.1), que faz com que uma molécula se mova em uma trajetória irregular em ziguezague[22].

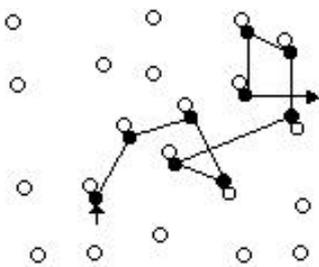


Figura 2.1: Caminhos moleculares.

A descrição da difusão, que será apresentada brevemente agora, envolve um modelo matemático baseado em uma hipótese fundamental ou “lei”, usualmente conhecida como lei de Fick da difusão. A opção pela lei de Fick conduz a grande abrangência, por exemplo, leva a descrições comuns na física, físico-química e biologia.

Definamos ρ como a densidade do elemento que se difunde (frequentemente chamado de concentração) e \mathbf{J} a densidade de corrente (quantidade da substância por unidade de tempo que atravessa uma unidade de área normal à direção de fluxo). Em termos destas grandezas, uma grande parte dos fenômenos de difusão obedece à seguinte lei linear (lei de Fick):

$$\mathbf{J} = -D\nabla\rho \quad (2.1)$$

com $\rho = \rho(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{J} = \mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{r} = (x_1, x_2, x_3)$ e D o coeficiente de difusão ou difusividade, o qual dependerá das propriedades do meio. Esse coeficiente será uma matriz no caso geral anisotrópico, pois meios anisotrópicos têm propriedades de difusão diferentes em diferentes direções. Entretanto, iremos tratar aqui apenas de casos isotrópicos (D é um número real positivo). O coeficiente de difusão indica o quão rápida a quantidade medida por ρ difunde-se de regiões com altas concentrações para regiões com baixas concentrações. Por outro lado, o sinal negativo combinado com o gradiente na lei de Fick diz que a difusão tende a ocorrer da região de maior densidade para a região de menor densidade.

Vamos considerar inicialmente que a substância difundida não é absorvida nem emitida pelo meio. Então, a lei de conservação para esta

substância implica uma equação de continuidade:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0. \quad (2.2)$$

Ao combinarmos essa equação e a eq. (2.1), chegamos à equação de difusão

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \nabla^2 \rho. \quad (2.3)$$

Se o sistema estiver sob a ação de uma força externa \mathbf{F} , ou arraste, a densidade de corrente é

$$\mathbf{J} = -D \nabla \rho + \mu \mathbf{F} \rho \quad (2.4)$$

em que μ representa a mobilidade. Uma maneira de vermos que esse último termo deve ser proporcional a $\mathbf{F}\rho$ é empregarmos $\mathbf{J} = \rho \mathbf{v}$ e \mathbf{v} de uma equação de movimento com atrito linear na velocidade, isto é, usarmos $m\mathbf{a} = \mathbf{F} - \alpha \mathbf{v}$ com $\mathbf{a} = \mathbf{0}$. A equação de difusão com arraste é então escrita como

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \nabla^2 \rho - \mu \nabla \cdot (\mathbf{F} \rho). \quad (2.5)$$

A equação de difusão também é modificada se for possível a substância ser criada (emitida) ou destruída (absorvida) como no caso de um composto químico (reações químicas) ou de nêutrons (emissões ou absorções pelo núcleo). Para essa situação, a equação de continuidade é

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = \delta, \quad (2.6)$$

na qual δ é a densidade da fonte, onde $\delta > 0$ e $\delta < 0$ estão associados à criação e absorção de substância, respectivamente. Portanto, a correspondente equação de difusão, não-homogênea, é dada por

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \nabla^2 \rho + \delta. \quad (2.7)$$

Evidentemente, podemos ter os diversos fenômenos ocorrendo simultaneamente. Tal situação é regida por

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \nabla^2 \rho - \mu \nabla \cdot (\mathbf{F} \rho) + \delta. \quad (2.8)$$

Consideramos para o estudo de difusão de partículas, a trajetória devido às forças externas e às advindas de outras partículas (trazendo, esta última, numa aproximação, um efeito aleatório). Sendo assim, temos

equações que envolvem grandezas aleatórias. Essas equações são, no geral, denominadas equações de Langevin[2, 3, 4, 5]. Alternativamente, podemos focar o comportamento médio das grandezas relevantes através do estudo de suas probabilidades. Em tal caso, a equação que descreve a evolução das próprias probabilidades é a equação de Fokker-Planck [23]. Além disso, se denominarmos a densidade de probabilidade de encontrar uma partícula no ponto \mathbf{r} no instante t por $p(\mathbf{r}, t)$, $\rho(\mathbf{r}, t) = Np(\mathbf{r}, t)$, onde N é o número total de partículas em difusão. Nesse contexto, a equação de Fokker-Planck multiplicada por N fornece a equação de difusão.

2.2 Solução da Equação de Difusão

Uma maneira bastante empregada para resolver equações diferenciais parciais lineares é o método de separação de variáveis[24]. Por exemplo, para eq. (2.3) em uma dimensão, podemos procurar uma solução particular da forma $\rho(x, t) = T(t)X(x)$. Assim, quando substituimos esse *ansatz* na eq. (2.3), recaímos em duas equações diferenciais ordinárias. Em particular, a equação para $X(x)$ admite como solução $X(x) \propto \exp(ikx)$ com k constante. Portanto, uma solução bastante geral da equação de difusão pode ser obtida via a superposição dessas exponenciais. Para a equação em questão esse procedimento é equivalente a empregar transformada de Fourier. Em uma dimensão, empregaremos a seguinte definição para a transformada de Fourier:

$$\tilde{\rho}(k, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x, t) e^{-ikx} dx, \quad (2.9)$$

e sua inversa é dada por

$$\rho(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\rho}(k, t) e^{ikx} \frac{dk}{2\pi}. \quad (2.10)$$

No caso unidimensional, ao colocarmos formalmente $\rho(x, t)$ em evidência na eq. (2.3), chegamos a

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - D \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \rho(x, t) = 0. \quad (2.11)$$

Ao substituirmos a transformada de Fourier inversa nesta última equação,

temos

$$\begin{aligned} 0 &= \left(\frac{\partial}{\partial t} - D \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\rho}(k, t) e^{ikx} \frac{dk}{2\pi} \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\partial \tilde{\rho}(k, t)}{\partial t} + Dk^2 \tilde{\rho}(k, t) \right) e^{ikx} \frac{dk}{2\pi}. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Esse resultado implica a equação

$$\frac{\partial \tilde{\rho}(k, t)}{\partial t} + Dk^2 \tilde{\rho}(k, t) = 0, \quad (2.13)$$

cujas soluções são

$$\tilde{\rho}(k, t) = \tilde{\rho}(k, 0) e^{-Dtk^2}. \quad (2.14)$$

Ao empregarmos a eq. (2.14) na eq. (2.10), verificamos que

$$\rho(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\rho}(k, 0) e^{-Dtk^2 + ikx} \frac{dk}{2\pi}. \quad (2.15)$$

Por sua vez, a transformada de Fourier (2.9) em $t = 0$ é

$$\tilde{\rho}(k, 0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x', 0) e^{-ikx'} dx' \quad (2.16)$$

quando usamos a variável de integração x' em substituição a x . Portanto, esse último resultado inserido na eq. (2.15) fornece

$$\rho(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-Dtk^2 + ik(x-x')} \frac{dk}{2\pi} \right) \rho(x', 0) dx'. \quad (2.17)$$

Se empregarmos

$$G_2^D(x - x', t) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-Dtk^2 + ik(x-x')} \frac{dk}{2\pi}, \quad (2.18)$$

em que $G_2^D(x - x', t)$ é a função de Green da equação da difusão, constatamos que

$$\rho(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} G_2^D(x - x', t) \rho(x', 0) dx'. \quad (2.19)$$

A função de Green (2.18) pode ser calculada completando quadrados, ou seja,

$$G_2^D(x - x', t) = \frac{e^{-\frac{1}{4Dt}(x-x')^2}}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-Dt \left[k - \frac{i(x-x')}{2Dt} \right]^2} dk. \quad (2.20)$$

Além disso, ao usarmos que

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha(y-y_0)^2} dy &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha y'^2} dy' \\ &= \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}, \end{aligned} \quad (2.21)$$

chegamos a função de Green da equação da difusão:

$$G_2^D(x-x', t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{1}{4Dt}(x-x')^2}. \quad (2.22)$$

2.2.1 Exemplos

Vamos considerar a condição inicial $\rho(x', 0) = \rho_0 \delta(x' - x_0)$, que representa toda substância concentrada em x_0 no instante inicial. Então, $\rho(x, t)$ assume a forma da função de Green:

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &= \frac{\rho_0}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{4Dt}(x-x')^2} \delta(x' - x_0) dx' \\ &= \frac{\rho_0}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{1}{4Dt}(x-x_0)^2}, \end{aligned} \quad (2.23)$$

isto é, $\rho(x, t) = \rho_0 G_2^D(x - x_0, t)$.

Como segundo caso, empregaremos uma condição inicial do tipo Gaussiana, tal como $\rho(x', 0) = \rho_0 \sqrt{\alpha/\pi} e^{-\alpha(x'-x_0)^2}$. A partir dessa função, $\rho(x, t)$ é dada por

$$\rho(x, t) = \rho_0 \sqrt{\frac{\alpha}{4\pi^2 Dt}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{4Dt}(x-x')^2} e^{-\alpha(x'-x_0)^2} dx' \quad (2.24)$$

e que ao completar o quadrado conduz a

$$\rho(x, t) = \rho_0 \sqrt{\frac{\alpha}{4\pi^2 Dt}} e^{-\frac{\alpha\beta}{(\beta+\alpha)}(x-x_0)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(\beta+\alpha)[x'+(\frac{\beta x + \alpha x_0}{\beta+\alpha})]^2} dx', \quad (2.25)$$

com $\beta = 1/4Dt$. Portanto, a partir da integral (2.21), resulta em

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &= \frac{\rho_0}{\sqrt{4\pi Dt + \pi/\alpha}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4Dt + 1/\alpha}} \\ &= \frac{\rho_0}{\sqrt{4\pi D(t+t_0)}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4D(t+t_0)}} \end{aligned} \quad (2.26)$$

em que $t_0 = 1/(4D\alpha)$. Essa expressão pode ser também escrita em termos da função de Green, pois $\rho(x, t) = \rho_0 G_2^D(x - x_0, t + t_0)$. Se $t \gg t_0$, pode-se, com boa aproximação, escrever que $\rho(x, t) = \rho_0 G_2^D(x - x_0, t)$, que é o

caso da função delta. Esse fato é equivalente a empregar $t_0 \rightarrow 0$. Isso ocorre porque nesse limite a condição inicial torna-se efetivamente aquela do parágrafo anterior. É conveniente ressaltar também que nos exemplos que acabamos de apresentar ocorre o seguinte comportamento assintótico (tempos longos):

$$\rho(x, t) \propto G_2^D(x, t) \quad \text{e} \quad \rho(0, t) \propto t^{-1/2} \quad (2.27)$$

se $x_0 = 0$. Antecipando aos estudos apresentados no capítulo quatro, informamos que esse último resultado é bastante geral e para que ele ocorra basta que

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x, 0) dx \quad (2.28)$$

seja finito e não nulo. Observe que para a nossa condição inicial, temos $\int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x') dx' = \rho_0$, dessa forma devemos ter ρ_0 diferente de zero e finito.

2.3 Movimento Browniano

Com o objetivo de ganhar um entendimento maior sobre a equação de difusão, nesta seção mostraremos como a eq. (2.19) pode surgir devido a um movimento aleatório (movimento Browniano) de uma partícula. Suponhamos conhecida a probabilidade inicial da localização de uma partícula, $\rho(y, 0)$ (Por simplicidade de nomenclatura, empregaremos a denominação “probabilidade” para denominar “densidade de probabilidade”). A seguir, não faremos uma descrição tão detalhada quanto aquela via a equação de Fokker-Planck, mas se mostrará conveniente ao discutirmos difusão anômala no próximo capítulo[25]. Portanto, consideremos $p_\tau(x - y)$ como a probabilidade da partícula sair da posição y e chegar a posição x num certo intervalo de tempo τ . Assim, quando tomamos $\rho(y, 0)$ e $p_\tau(x - y)$ independentes, a probabilidade da partícula ser encontrada na posição x_1 após o tempo τ é

$$\rho(x_1, \tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} p_\tau(x_1 - y) \rho(y, 0) dy. \quad (2.29)$$

De fato, se $\rho(y, 0)$ e $p_\tau(x_1 - y)$ são independentes, a probabilidade da partícula sair do ponto y e chegar ao x_1 é $p_\tau(x_1 - y) \rho(y, 0)$. Além disso, para levar em conta todas as diferentes posições de partida y , devemos fazer a integração (soma) nessa variável.

Por sua vez, se substituirmos $\rho(x, 0)$ por $\rho(x_1, \tau)$ e $\rho(x_1, \tau)$ por

$\rho(x_2, 2\tau)$ na eq. (2.29), obtemos

$$\begin{aligned}\rho(x_2, 2\tau) &= \int_{-\infty}^{+\infty} p_\tau(x_2 - x_1) \rho(x_1, \tau) dx_1 \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} p_\tau(x_2 - x_1) p_\tau(x_1 - y) \rho(y, 0) dx_1 dy, \quad (2.30)\end{aligned}$$

que é a probabilidade de encontrar a partícula em x_2 após o intervalo de tempo 2τ . Procedendo dessa forma, vemos que a probabilidade de encontrar a partícula em $x = x_n$ no tempo $t = n\tau$ é

$$\begin{aligned}\rho(x, t) &= \rho(x_n, n\tau) \quad (2.31) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} p_\tau(x_n - x_{n-1}) \cdots p_\tau(x_1 - y) \rho(y, 0) dx_1 \cdots dx_{n-1} dy.\end{aligned}$$

Se empregarmos que

$$p_\tau(x_j - x_{j-1}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{p}_\tau(k_j) e^{ik_j(x_j - x_{j-1})} \frac{dk_j}{2\pi}, \quad (2.32)$$

$\rho(x, t)$ em (2.31) pode ser escrito como

$$\begin{aligned}\rho(x, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{p}_\tau(k_n) e^{ik_n(x_n - x_{n-1})} \cdots \tilde{p}_\tau(k_1) e^{ik_1(x_1 - y)} \times \\ &\times \rho(y, 0) \frac{dk_1}{2\pi} \cdots \frac{dk_n}{2\pi} dx_1 \cdots dx_{n-1} dy. \quad (2.33)\end{aligned}$$

Ao reordenarmos essa expressão, obtemos

$$\begin{aligned}\rho(x, t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{p}_\tau(k_n) \cdots \tilde{p}_\tau(k_1) e^{ik_n x_n} e^{-ik_1 y} \times \\ &\times \left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ix_{n-1}(k_{n-1} - k_n)} \frac{dx_{n-1}}{2\pi} \right) \cdots \left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ix_1(k_1 - k_2)} \frac{dx_1}{2\pi} \right) \times \\ &\times \rho(y, 0) dk_1 \cdots dk_n \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{p}_\tau(k_n) \cdots \tilde{p}_\tau(k_1) e^{ik_n x_n} e^{-ik_1 y} \times \\ &\times \delta(k_{n-1} - k_n) \cdots \delta(k_1 - k_2) \rho(y, 0) dk_1 \cdots dk_n, \quad (2.34)\end{aligned}$$

na qual empregamos que

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ix_{j-1}(k_{j-1} - k_j)} \frac{dx_{j-1}}{2\pi} = \delta(k_{j-1} - k_j). \quad (2.35)$$

Devido à presença da função delta de Dirac $\delta(k_1 - k_2)$ na eq. (2.34), a dependência em k_1 resulta em ser substituída por k_2 . Com esse procedimento,

k_2 é eliminado após sua integração e, portanto, efetivamente trocado por k_3 . Dessa forma, as dependências em $k_1 \cdots k_{n-1}$ são eliminadas em favor de k_n na eq. (2.34). Tal procedimento resulta em

$$\rho(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} [\tilde{p}_\tau(k_n)]^n e^{ik_n(x_n-y)} \rho(y, 0) \frac{dk_n}{2\pi} dy. \quad (2.36)$$

Além disso, em termos da função de Green

$$\begin{aligned} G(x-y, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{G}(k, t) e^{ik_n(x_n-y)} \frac{dk_n}{2\pi} \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} [\tilde{p}_\tau(k_n)]^n e^{ik_n(x-y)} \frac{dk_n}{2\pi} \end{aligned} \quad (2.37)$$

e da probabilidade inicial $\rho(y, 0)$, vemos que a probabilidade da partícula ser encontrada na posição x no tempo $t = n\tau$ é

$$\rho(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} G(x-y, t) \rho(y, 0) dy. \quad (2.38)$$

Desse resultado geral, percebemos que a eq. (2.19) é um caso particular. No sentido de entendermos melhor essa situação, verificaremos que condições a probabilidade $p_\tau(x-y)$ deve satisfazer para que a função de Green (2.37) possa ser reduzida a (2.19).

Para tal, escrevamos o $\tilde{p}_\tau(k)$ da eq. (2.37) como

$$\tilde{p}_\tau(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} p_\tau(x) e^{-ikx} dx, \quad (2.39)$$

que ao expandirmos a exponencial em série, nos conduz a

$$\begin{aligned} \tilde{p}_\tau(k) &= \int_{-\infty}^{+\infty} p_\tau(x) \left\{ 1 - ikx - \frac{k^2}{2}x^2 + \mathcal{O}(k^3) \right\} dx \\ &= 1 - ik \langle x \rangle - \frac{k^2}{2} \langle x^2 \rangle + \mathcal{O}(k^3). \end{aligned} \quad (2.40)$$

Aqui usamos o fato da probabilidade estar normalizada, $\int_{-\infty}^{+\infty} p_\tau(x) dx = 1$, e a notação

$$\langle x^n \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x^n p_\tau(x) dx \quad (2.41)$$

para representar o valor médio de x^n . Vamos supor agora que a probabilidade $p_\tau(x)$ não favorece preferencialmente x positivo nem negativo no sentido de que $\langle x \rangle = 0$. Isso corresponde a descontarmos em nossa análise o deslocamento médio da partícula. Além disso, consideremos apenas os primeiros

termos dessa série desprezando os de ordem superior a dois. Assim, ficamos com

$$\tilde{p}_\tau(k) \simeq 1 - \frac{k^2}{2} \langle x^2 \rangle_0. \quad (2.42)$$

Como queremos $[\tilde{p}_\tau(k)]^n$, elevamos a eq. (2.42) a n e chegamos a

$$\begin{aligned} [\tilde{p}_\tau(k)]^n &\simeq \left(1 - \frac{k^2}{2} \langle x^2 \rangle_0 \right)^n \\ &\simeq e^{-n\tau \frac{\langle x^2 \rangle}{2\tau} k^2}. \end{aligned} \quad (2.43)$$

Para obtermos essa última igualdade, usamos o fato de que

$$\left(1 + \frac{a}{n} \right)^n \simeq e^a \quad (2.44)$$

quando n for suficientemente grande. Além disso, ao empregarmos $t = n\tau$ e $D = \langle x^2 \rangle / (2\tau)$, chegamos ao resultado almejado

$$[\tilde{p}_\tau(k)]^n \simeq e^{-Dtk^2}, \quad (2.45)$$

pois nesse caso a eq. (2.37) conduz à eq. (2.18). O que fizemos quando usamos essa aproximação foi essencialmente empregar a aproximação básica presente no teorema central do limite [4, 5, 26].

2.4 A Equação de Schrödinger

Por simplicidade, consideraremos nesta seção a equação de Schrödinger unidimensional dependente do tempo [6, 7]

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x, t) \Psi. \quad (2.46)$$

Aqui, \hbar , m , $V(x, t)$ e $\Psi = \Psi(x, t)$ são respectivamente a constante de Planck dividida por 2π , a massa da partícula, a energia potencial da partícula e a função de onda. Como é bem conhecido, a partir dessa função pode-se calcular o valor médio das grandezas físicas de interesse. Em particular, quando se faz uma medida da posição, a probabilidade de encontrar a partícula entre x e $x + dx$ é $|\Psi(x, t)|^2 dx$.

No caso de uma partícula livre, podemos usar uma energia potencial nula, $V(x, t) = 0$. Nesse exemplo particular, temos

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}. \quad (2.47)$$

Essa equação é formalmente idêntica a de difusão se empregarmos um tempo imaginário, pois ela pode ser escrita como

$$\frac{\partial}{\partial t'} \Psi = D' \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi ; \quad t' = t ; \quad D' = \frac{i\hbar}{2m} . \quad (2.48)$$

Assim, o procedimento de solução segue a mesma linha de raciocínio anterior, (2.9 - 2.22). Conseqentemente, resolveremos a eq. (2.47) usando

$$\begin{aligned} \tilde{\Psi}(k, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x, t) e^{-ikx} dx , \\ \Psi(x, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\Psi}(k, t) e^{ikx} \frac{dk}{2\pi} . \end{aligned} \quad (2.49)$$

Com isso, a eq. (2.47) pode ser escrita como

$$\begin{aligned} 0 &= \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \Psi(x, t) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Psi} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tilde{\Psi} \right) e^{ikx} \frac{dk}{2\pi} , \end{aligned} \quad (2.50)$$

que implica

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Psi}(k, t) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tilde{\Psi}(k, t) = 0 . \quad (2.51)$$

A solução dessa equação é

$$\tilde{\Psi}(k, t) = \tilde{\Psi}(k, 0) e^{-\frac{i\hbar t}{2m} k^2} , \quad (2.52)$$

com

$$\tilde{\Psi}(k, 0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x', 0) e^{-ikx'} dx' . \quad (2.53)$$

Assim, o correspondente das eqs. (2.17) e (2.18) é

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i\hbar t}{2m} k^2 + ik(x-x')} \frac{dk}{2\pi} \right) \Psi(x', 0) dx' , \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} G_2^S(x - x', t) \Psi(x', 0) dx' , \end{aligned} \quad (2.54)$$

onde

$$\begin{aligned} G_2^S(x - x', t) &= \frac{e^{-\frac{m}{i2\hbar t} (x-x')^2}}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i\hbar t}{2m} \left[k - \frac{im}{\hbar t} (x-x') \right]^2} dk \\ &= \sqrt{\frac{m}{i2\pi\hbar t}} e^{-\frac{m}{i2\hbar t} (x-x')^2} . \end{aligned} \quad (2.55)$$

Note que, em comparação com a situação anterior, empregamos a identidade (2.21) com α imaginário (situação que é completamente válida), isto é, $\alpha = i\hbar t/(2m)$. A partir desses resultados, vemos que a semelhança formal entre as equações de difusão (2.11) e a de Schrödinger (2.48) é mantida em todas as etapas quando fazemos as substituições $t' \rightarrow it$ e $D' \rightarrow \hbar/(2m)$.

2.4.1 Exemplos

Vamos aplicar as condições iniciais $\Psi(x', 0) = c_0 \delta(x' - x_0)$ e $\Psi(x', 0) = c_0 \sqrt{\alpha/\pi} e^{-\alpha(x'-x_0)^2}$. Então, $\Psi(x, t)$ assume as respectivas formas:

$$\begin{aligned}\Psi(x, t) &= c_0 \sqrt{\frac{m}{i2\pi\hbar t}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{m}{i2\hbar t}(x-x')^2} \delta(x' - x_0) dx' \\ &= c_0 \sqrt{\frac{m}{i2\pi\hbar t}} e^{-\frac{m}{i2\hbar t}(x-x_0)^2} \\ \Psi(x, t) &= c_0 \sqrt{\frac{m\alpha}{i2\pi^2\hbar t}} e^{-\frac{\alpha\gamma}{(\alpha+\gamma)}(x-x_0)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(\alpha+\gamma)[x' - (\frac{\gamma x + \alpha x_0}{\alpha+\gamma})]^2} dx' \\ &= c_0 \sqrt{\frac{m}{i2\pi\hbar(t+t_0)}} e^{-\frac{m}{i2\hbar(t+t_0)}(x-x_0)^2},\end{aligned}\tag{2.56}$$

com $t_0 = m/(i2\hbar\alpha)$ e $\gamma = m/(i2\hbar t)$. Portanto, para a função delta, temos $\Psi(x, t) = c_0 G_2^S(x - x_0, t)$ e para a condição inicial gaussiana, chegamos a $\Psi(x, t) = c_0 G_2^S(x - x_0, t + t_0)$. Além disso, se $t \gg |t_0|$ e $x_0 = 0$, vemos que

$$\Psi(x, t) \propto G_2^S(x, t) \quad \text{e} \quad \Psi(0, t) \propto t^{-1/2}.\tag{2.57}$$

2.5 Solução no Caso N -dimensional

Em duas seções precedentes, obtivemos a solução para a equação de difusão na ausência de força externa e de fonte, assim como da equação de Schrödinger com energia potencial nula. Porém, por simplicidade, consideramos apenas o caso unidimensional. Agora, seguindo o procedimento do caso unidimensional, apresentaremos brevemente as correspondentes soluções para a vertente N -dimensional.

No caso N -dimensional, a equação de difusão sem força externa e termo de fonte é $\partial\rho/\partial t = D\nabla^2\rho$ com $\nabla^2\rho = \sum_{j=1}^N \partial^2\rho/\partial x_j^2$. Por sua vez, a equação de Schrödinger na ausência de força externa é formalmente idêntica

a anterior, basta para tal fazermos as substituições $t \rightarrow it$, $D \rightarrow \hbar/(2m)$ e $\rho \rightarrow \Psi$. Para obtermos a solução procurada dessas equações, é suficiente empregarmos

$$\begin{aligned}\tilde{\rho}(\mathbf{k}, t) &= \int \rho(\mathbf{x}, t) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} d^N \mathbf{x}, \\ \rho(\mathbf{x}, t) &= \int \rho(\mathbf{k}, t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \frac{d^N \mathbf{k}}{(2\pi)^N},\end{aligned}\quad (2.58)$$

em que está subentendida a integração em cada uma das variáveis de $-\infty$ a $+\infty$. Ao substituirmos esse $\rho(\mathbf{x}, t)$ na equação de difusão acima, chegamos a

$$\int \left(\frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial t} + D|\mathbf{k}|^2 \tilde{\rho} \right) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \frac{d^N \mathbf{k}}{(2\pi)^N} = 0, \quad (2.59)$$

que implica

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{\rho}(\mathbf{k}, t) + D|\mathbf{k}|^2 \tilde{\rho}(\mathbf{k}, t) = 0, \quad (2.60)$$

em que empregamos a notação $|\mathbf{k}|^2 = \mathbf{k} \cdot \mathbf{k} = \sum_{j=1}^N k_j^2$.

A solução da eq. (2.60) é

$$\tilde{\rho}(\mathbf{k}, t) = \tilde{\rho}(\mathbf{k}, 0) e^{-Dt|\mathbf{k}|^2} \quad (2.61)$$

com

$$\tilde{\rho}(\mathbf{k}, 0) = \int \rho(\mathbf{x}', 0) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}'} d^N \mathbf{x}', \quad (2.62)$$

que nos leva a

$$\begin{aligned}\rho(\mathbf{x}, t) &= \int \left(\int e^{-Dt|\mathbf{k}|^2 + i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} \frac{d^N \mathbf{k}}{(2\pi)^N} \right) \rho(\mathbf{x}', 0) d^N \mathbf{x}', \\ &= \int G_2(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t) \rho(\mathbf{x}', 0) d^N \mathbf{x}'.\end{aligned}\quad (2.63)$$

Aqui, $\rho(\mathbf{x}, 0)$ e

$$\begin{aligned}G_2(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t) &= \int e^{-Dt|\mathbf{k}|^2 + i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} \frac{d^N \mathbf{k}}{(2\pi)^N} \\ &= \frac{1}{(4\pi Dt)^{N/2}} e^{-\frac{1}{4Dt}|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|^2}\end{aligned}\quad (2.64)$$

são respectivamente a condição inicial e a função de Green para a equação de difusão.

Não apresentaremos o análogo do desenvolvimento da seção 2.3 para o caso N -dimensional, pois ele não traz nenhum conteúdo qualitativo

novo e a generalização não apresenta maiores complicações, a exemplo das discussões já apresentadas nesta seção. Porém, por completeza, ressaltamos que na vertente N -dimensional isotrópica, temos

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \int G(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t) \rho(\mathbf{x}', 0) d^N \mathbf{x}', \quad (2.65)$$

em que

$$G(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t) = \int [p_\tau(\mathbf{k})]^n e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \frac{d^N \mathbf{k}}{(2\pi)^N} \quad (2.66)$$

e

$$\begin{aligned} [\tilde{p}_\tau(\mathbf{k})]^n &\simeq \left(1 - \frac{k^2}{2} \langle |\mathbf{x}|^2 \rangle \right)^n \\ &\simeq e^{-Dt|\mathbf{k}|^2}, \end{aligned} \quad (2.67)$$

com $t = n\tau$, $D = \langle |\mathbf{x}|^2 \rangle / (2\tau)$ e $|\mathbf{x}|^2 = \mathbf{x} \cdot \mathbf{x}$.

2.5.1 Exemplo

Uma aplicação direta da eq. (2.63), ocorre quando fazemos uso da condição inicial $\rho(\mathbf{x}', 0) = \rho_0 \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}_0)$, que fornece

$$\rho(\mathbf{x}, t) \propto G_2(\mathbf{x}, t) \quad \text{e} \quad \rho(\mathbf{0}, t) \propto t^{-N/2}. \quad (2.68)$$

Como último comentário deste capítulo, pode-se perguntar se o cenário fornecido pelas Eqs. (2.27), (2.57) e (2.68) é mantido quando consideramos uma classe mais ampla de condições iniciais. Responder esse tipo de questão é justamente o objetivo do presente trabalho. Em outras palavras, desejamos aqui discutir como a condição inicial $\rho(\mathbf{x}, 0)$ (ou $\Psi(\mathbf{x}, 0)$) e a forma da função de Green influenciam o comportamento assintótico de

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \int G(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t) \rho(\mathbf{x}', 0) d^N \mathbf{x}'. \quad (2.69)$$

Capítulo 3

Difusão Anômala e Equação Schrödinger Fracionária

Estudamos no capítulo anterior a equação de difusão normal e equação de Schrödinger com enfoque a suas soluções. No tocante a difusão, observa-se, no entanto, que na natureza há também comportamentos difusivos mais complexos que aquele tipo discutido anteriormente, ou seja, a equação de difusão normal (usual) não é mais suficiente para descrever certos fenômenos difusivos. Necessitamos com isso obter equações que sejam mais gerais que a usual para a difusão, equações que incorporem o caso normal e desvios. De uma maneira geral, quando ocorre desvio do comportamento normal (usual) da difusão, tem-se a chamada difusão anômala. Neste capítulo, estudaremos brevemente um possível tipo de equação de difusão anômala e sua respectiva solução. Essa equação de difusão anômala envolve o uso de derivada de ordem não inteira, isto é, derivada fracionária.

Apresentaremos, paralelamente a equação de difusão, uma generalização da equação de Schrödinger que contém derivada fracionária. Em ambos os casos, difusão anômala e equação de Schrödinger com derivada fracionária, surgem como função de Green as distribuições de Lévy. Fazemos uma breve exposição das distribuições de Lévy. Isso inclui, além de sua representação integral, casos particulares, comportamento assintótico e expansão em série. Uma noção sobre derivada fracionária também é enfocada. Esses aspectos são primeiramente discutidos no caso unidimensional e depois vistos em sua vertente N -dimensional. Concluimos, este capítulo, com uma discussão de um modelo de movimento Browniano anômalo, que apresenta como função de Green uma distribuição de Lévy.

3.1 Equação de Difusão Anômala

A seguir, vamos considerar uma possível equação de difusão anômala[27], cuja solução geral possa ser obtida via um procedimento análogo ao apresentado no capítulo anterior. Para tal, definamos inicialmente, para o caso unidimensional, a equação de difusão anômala

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial^\mu \rho}{\partial |x|^\mu}; \quad \rho = \rho(x, t). \quad (3.1)$$

Nessa situação, o efeito anômalo advém do uso da derivada fracionária espacial, $\partial^\mu/\partial|x|^\mu$, em substituição a derivada segunda em x , $\partial^2/\partial x^2$. Assim, quando $\mu \rightarrow 2$, o caso usual (difusão normal) é recuperado. Uma breve discussão sobre a derivada fracionária aqui empregada será deixada para o final desta seção. Em geral, as equações usadas na investigação de difusão anômala são algum tipo de generalização da equação de difusão usual. Por exemplo, pode-se introduzir derivada fracionária no tempo, derivada fracionária no espaço, coeficiente de difusão com dependência espaço-temporal e não linearidade. Apesar de não fazermos uso neste trabalho de toda essa generalidade, citemos uma equação que incorpora todas essas possibilidades. Ela é [28]

$$\frac{\partial^\gamma \rho}{\partial t^\gamma} = \frac{\partial}{\partial |x|} \left(D \frac{\partial^{\mu-1} \rho^\nu}{\partial |x|^{\mu-1}} \right). \quad (3.2)$$

A estrutura de cálculo do caso baseado na eq. (3.1) será preservada em relação à situação usual se as eqs. (2.11) e (2.12) forem substituídas por

$$\begin{aligned} 0 &= \left(\frac{\partial}{\partial t} - D \frac{\partial^\mu}{\partial |x|^\mu} \right) \rho(x, t) \\ &= \left(\frac{\partial}{\partial t} - D \frac{\partial^\mu}{\partial |x|^\mu} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\rho}(k, t) e^{ikx} \frac{dk}{2\pi} \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\partial}{\partial t} \tilde{\rho}(k, t) + D |k|^\mu \tilde{\rho}(k, t) \right) e^{ikx} \frac{dk}{2\pi}. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Desse último resultado, chegamos a equação

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{\rho}(k, t) + D |k|^\mu \tilde{\rho}(k, t) = 0, \quad (3.4)$$

cuja solução é dada por

$$\tilde{\rho}(k, t) = \tilde{\rho}(k, 0) e^{-D t |k|^\mu}. \quad (3.5)$$

Vemos que a partir do resultado (3.5) a transformada de Fourier inversa de $\tilde{\rho}(k, t)$ é

$$\rho(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\rho}(k, 0) e^{-Dt|k|^\mu + ikx} \frac{dk}{2\pi}. \quad (3.6)$$

Assim, se for usado o $\tilde{\rho}(k, 0)$ apresentado na eq. (2.16), verificamos que

$$\rho(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-Dt|k|^\mu + ik(x-x')} \frac{dk}{2\pi} \right) \rho(x', 0) dx'. \quad (3.7)$$

A exemplo dos casos anteriores, podemos escrever $\rho(x, t)$ em termos de uma função de Green e da condição inicial, ou seja, vamos colocar a eq. (3.7) na forma

$$\rho(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} G_\mu^D(x - x', t) \rho(x', 0) dx' \quad (3.8)$$

com

$$G_\mu^D(x - x', t) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-Dt|k|^\mu + ik(x-x')} \frac{dk}{2\pi}. \quad (3.9)$$

Deve ser notado que na última igualdade da eq. (3.3), em comparação com o caso usual, foi empregado $|k|^\mu$ no lugar de k^2 . Essa escolha foi feita de maneira que a derivada μ -ésima corresponda à μ -ésima potência de $|k|$, em particular, o caso usual é resgatado quando $\mu \rightarrow 2$. Também deve ser enfatizada a presença de $|k|^\mu$ ao invés de k^μ na última igualdade da eq. (3.3). Isso faz com que a solução (3.5) decaia para tempos longos, fato que não ocorreria para um μ genérico quando usássemos k^μ com k negativo. No decorrer deste trabalho, usaremos $0 < \mu \leq 2$.

3.1.1 Exemplo

Se na eq. (3.8) usarmos uma condição inicial do tipo delta de Dirac, $\rho(x', 0) = \rho_0 \delta(x' - x_0)$, $\rho(x, t)$ será proporcional a função de Green, pois

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} G_\mu^D(x - x', t) \rho_0 \delta(x' - x_0) dx' \\ &= \rho_0 G_\mu^D(x - x_0, t). \end{aligned} \quad (3.10)$$

Nesse exemplo, se fizermos primeiramente $x_0 = 0$ e a seguir $x = 0$, temos respectivamente

$$\rho(x, t) \propto G_\mu^D(x, t) \quad \text{e} \quad \rho(0, t) \propto t^{-1/\mu}. \quad (3.11)$$

O resultado para $\rho(0, t)$ segue diretamente das eqs. (3.9) e (3.10), ou seja,

$$\begin{aligned}\rho(0, t) &= 2\rho_0 \int_0^\infty e^{-Dt k^\mu} \frac{dk}{2\pi} \\ &= \frac{\rho_0 \Gamma(1/\mu)}{\pi \mu D^{1/\mu}} t^{-1/\mu}.\end{aligned}\quad (3.12)$$

A última igualdade pode ser obtida ao efetuarmos a mudança de variável $k \rightarrow [x/(Dt)]^{1/\mu}$ e empregarmos a representação integral de Euler para a função gama

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty x^{z-1} e^{-x} dx \quad (3.13)$$

com $z = 1/\mu$.

3.1.2 Derivadas Fracionárias

Notemos inicialmente que a idéia de derivada fracionária é praticamente tão velha quanto o próprio cálculo[29]. Para ilustrar como podem ser introduzidas derivadas fracionárias, empregaremos transformadas de Fourier. Nesse contexto, as derivadas usuais de n -ésima ordem podem ser escritas como

$$\begin{aligned}\frac{d^n f(x)}{dx^n} &= \frac{d^n}{dx^n} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{f}(k) e^{ikx} \frac{dk}{2\pi} \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} (ik)^n \tilde{f}(k) e^{ikx} \frac{dk}{2\pi}.\end{aligned}\quad (3.14)$$

Dessa forma, para considerarmos derivadas fracionárias basta supormos que n seja um número não inteiro. Por outro lado, a derivada fracionária empregada neste trabalho, definida também através da transformada de Fourier, é

$$\mathcal{F} \left\{ \frac{d^\mu}{d|x|^\mu} f(x) \right\} = -|k|^\mu \mathcal{F}\{f(x)\}, \quad (3.15)$$

em que foi empregada a notação $\mathcal{F}\{f(x)\} = \tilde{f}(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ikx} dx$ para a transformada de Fourier. Essa última derivada generalizada que acabamos de usar é comumente denominada de derivada fracionária de Riesz[30].

Apesar de não necessitarmos em nossos estudos de uma representação espacial para a derivada fracionária (3.15), enfatizaremos apenas que elas, em geral, apresentam uma não localidade, isto é, leva em conta o comportamento da função numa ampla vizinhança. Por exemplo, quando tomamos a transformada de Fourier inversa da eq. (3.15), surge a integral

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |k|^\mu e^{ik(x-y)} \frac{dk}{2\pi}, \quad (3.16)$$

pois

$$\frac{d^\mu f(x)}{d|x|^\mu} = - \int_{-\infty}^{+\infty} |k|^\mu \left(\int_{-\infty}^{+\infty} f(y) e^{-ixy} dy \right) e^{ikx} \frac{dk}{2\pi}. \quad (3.17)$$

Sem nos preocuparmos com uma análise mais refinada, vemos a partir de uma simplória análise dimensional que $k \sim 1/x$ e, portanto, a integral (3.16) seria da ordem de $|x|^{-(1+\mu)}$. Discussões detalhadas sobre derivadas fracionárias podem ser encontradas nas referências[29, 31, 32].

3.2 Distribuições de Lévy

Passemos agora para uma breve discussão sobre a forma que a função de Green $G_\mu(x-x', t)$ assume a depender do valor específico do parâmetro μ . Em geral, não existe uma forma fechada simples para essa função. Porém, antes de considerarmos casos particulares do parâmetro μ , faremos formalmente $Dt = 1$. Nesse caso, $G_\mu(x, t)$ será escrita como

$$\begin{aligned} L_\mu(x) &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-|k|^\mu + ikx} \frac{dk}{2\pi} \\ &= \int_0^\infty e^{-k^\mu} \cos(kx) \frac{dk}{\pi}. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Essa última igualdade é verificada ao usarmos a identidade $\exp(ikx) = \cos(kx) + i \sin(kx)$ e notarmos que a integral que envolve a função *seno* é nula. Por sua vez, a função $L_\mu(x)$, que é par, é denominada distribuição de Lévy[8, 9, 33]. Esta distribuição foi primeiramente considerada por Cauchy em 1853 para μ arbitrário, porém ele não sabia que para $\mu > 2$ a distribuição seria negativa para algum x .

Dois casos particulares da eq. (3.18) têm um destaque especial são os correspondentes a $\mu = 2$ e $\mu = 1$. Quando $\mu = 2$, recaímos diretamente na distribuição Gaussiana, conforme os cálculos relativos as eqs. (2.20), (2.21) e (2.22). Por outro lado, se $\mu = 1$, temos

$$\begin{aligned} L_1(x) &= \int_0^\infty e^{-k} \cos(kx) \frac{dk}{\pi} \\ &= \frac{1}{\pi} \frac{1}{1+x^2}, \end{aligned} \quad (3.19)$$

que é justamente a distribuição de Lorentz (Lorentziana). Para obter esse resultado integramos duas vezes por partes. Como já dissemos no início desta seção, não há expressões simples para outros valores de μ e, portanto, não

discutiremos aqui como obter uma forma fechada para outros casos de $L_\mu(x)$. Entretanto, representamos graficamente as distribuições de Lévy na fig. (3.1) para alguns valores de μ .

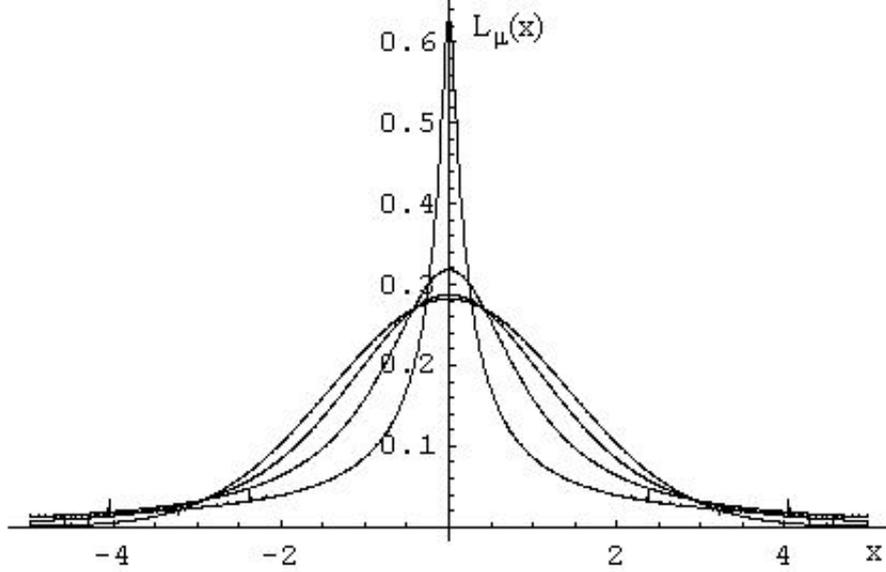


Figura 3.1: Distribuição de Lévy de cima para baixo com os respectivos valores de $\mu = 0.5, 1, 1.5$ e 2 .

Do ponto de vista analítico, vamos agora ressaltar duas propriedades das distribuições de Lévy. Primeiramente, notemos que as distribuições de Lévy são normalizadas, visto que

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^{+\infty} L_\mu(x) dx &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-|k|^\mu + ikx} \frac{dk}{2\pi} \right) dx \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-|k|^\mu} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} \frac{dx}{2\pi} \right) dk \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-|k|^\mu} \delta(k) dk \\
 &= 1.
 \end{aligned} \tag{3.20}$$

Em segundo lugar, a eq. (3.19) implica $L_1(x) \propto |x|^{-2}$ e de maneira mais geral temos[9]

$$L_\mu(x) \propto |x|^{-(1+\mu)} \tag{3.21}$$

para grandes valores de $|x|$. Esse resultado permite concluir que o segundo momento de x relativo a $L_\mu(x)$ não existe (diverge), pois

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 L_\mu(x) dx = 2 \int_0^{x_m} x^2 L_\mu(x) dx + cte \int_{x_m}^{\infty} \frac{x^2}{|x|^{1+\mu}} dx \tag{3.22}$$

diverge para qualquer x_m e $0 < \mu < 2$.

Uma propriedade notável das distribuições de Lévy é a sua estabilidade perante a convolução, isto é,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} L_\mu(a(x-y)) L_\mu(by) dy = A L_\mu(Bx), \quad (3.23)$$

com $A = (1 + |a/b|^\mu)^{-1/\mu}$ e $B = (|a|^{-\mu} + |b|^{-\mu})^{-1/\mu}$. Dito de outra forma, a convolução de duas distribuições de Lévy com os mesmos índices é proporcional à outra de índice idêntico. Em termos de transformadas de Fourier, a propriedade de estabilidade (3.23) vem basicamente da igualdade $\exp(-a_1|k|^\mu) \exp(-a_2|k|^\mu) = \exp(-(a_1+a_2)|k|^\mu)$. Assim, a demonstração da estabilidade é obtida via a definição de L_μ e essa última igualdade. Ressalte-mos ainda que a propriedade (3.23) está diretamente ligada à generalização do teorema central do limite (teorema de Lévy-Guedenko), pois quando $\mu = 2$ recaímos no caso Gaussiano (veja, por exemplo, as eqs. (2.24) e (2.26)).

Vamos agora expressar a função de Green (3.9) em termos da distribuição de Lévy. Nesse sentido, escrevamos a função de Green analogamente a eq. (3.18),

$$G_\mu(x, t) = \int_0^\infty e^{-Dtk^\mu} \cos(kx) \frac{dk}{\pi}, \quad (3.24)$$

e façamos uma mudança de variável tal que $\eta^\mu = Dtk^\mu$, para verificarmos que

$$\begin{aligned} G_\mu(x, t) &= (Dt)^{-\frac{1}{\mu}} \int_0^\infty e^{-\eta^\mu} \cos(\eta(Dt)^{-\frac{1}{\mu}} x) \frac{d\eta}{\pi} \\ &= \frac{1}{(Dt)^{1/\mu}} L_\mu\left(\frac{x}{(Dt)^{1/\mu}}\right) \end{aligned} \quad (3.25)$$

e, conseqentemente,

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} G_\mu(x, t) dx &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{(Dt)^{1/\mu}} L_\mu\left(\frac{x}{(Dt)^{1/\mu}}\right) dx \\ &= 1. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Antes de encerrarmos essa seção, representaremos uma distribuição de Lévy (ou $G_\mu(x, t)$) via série de Taylor. Com vistas a futuras aplicações, consideraremos uma situação um pouco mais geral:

$$\begin{aligned} Q_{\mu\sigma}(x, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} |k|^\sigma e^{-Dt|k|^\mu + ikx} \frac{dk}{2\pi} \\ &= \sum_{n=0}^{N-1} a_{\mu\sigma}^{(n)}(t) x^n + R_N(x, t), \end{aligned} \quad (3.27)$$

que se reduz a distribuição de Lévy (3.18) quando $\sigma = 0$ e $Dt = 1$. Nessa série,

$$\begin{aligned} a_{\mu\sigma}^{(n)}(t) &= \frac{1}{n!} \left. \frac{\partial^n}{\partial x^n} Q_{\mu\sigma}(x, t) \right|_{x=0} \\ &= \frac{i^n}{n!} \int_{-\infty}^{+\infty} |k|^\sigma k^n e^{-Dt|k|^\mu} \frac{dk}{2\pi} \end{aligned} \quad (3.28)$$

e

$$\begin{aligned} R_N(x, t) &= \frac{x^N}{N!} \left. \frac{\partial^N}{\partial x^N} Q_{\mu\sigma}(x, t) \right|_{x=\xi} \\ &= \frac{i^N x^N}{N!} \int_{-\infty}^{+\infty} |k|^\sigma k^N e^{-Dt|k|^\mu + ik\xi} \frac{dk}{2\pi} \end{aligned} \quad (3.29)$$

é o resto na forma diferencial[34], em que ξ é algum valor conveniente de x interior ao intervalo que une x e 0.

Se n for ímpar, $a_{\mu\sigma}^{(n)}(t) = 0$, pois o integrando é uma função ímpar em k . Para n par, se usarmos $u = Dt|k|^\mu$ e substituirmos n por $2n$ para enfatizarmos que somente restaram os coeficientes pares em nossa análise, verificamos que

$$\begin{aligned} a_{\mu\sigma}^{(2n)}(t) &= \frac{(-1)^n}{\pi\mu(2n)!} (Dt)^{-(2n+\sigma+1)/\mu} \int_0^\infty u^{[(2n+\sigma+1)/\mu]-1} e^{-u} du \\ &= \frac{(-1)^n}{\pi\mu(2n)!} \Gamma\left(\frac{2n+\sigma+1}{\mu}\right) (Dt)^{-(2n+\sigma+1)/\mu}. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Naturalmente, $R_N(x, t) \rightarrow 0$ para um N dado e x suficientemente pequeno. Em particular para o caso com N par, constatamos, ao usarmos as desigualdades[35] $\left| \int_{x_1}^{x_2} f(x) dx \right| \leq \int_{x_1}^{x_2} |f(x)| dx$ e $|\exp(ikx)| \leq 1$, que

$$\begin{aligned} |R_N(x, t) \rightarrow 0| &\leq \frac{|x|^N}{N!} \int_{-\infty}^{+\infty} |k|^\sigma k^N e^{-Dt|k|^\mu} \frac{dk}{2\pi} \\ &= |a_{\mu\sigma}^N(t)| |x|^N, \end{aligned} \quad (3.31)$$

e, portanto $|R_N(x, t)| \rightarrow 0$ quando $x \rightarrow 0$. A convergência da série (3.27) ($N \rightarrow \infty$) pode ser analisada usando o teste da razão[35]:

$$\left| \frac{a_{\mu\sigma}^{(2n+2)}(t) x^{2n+2}}{a_{\mu\sigma}^{(2n)}(t) x^{2n}} \right| = \frac{1}{(2n+1)(2n+2)} \frac{\Gamma\left(\frac{2n+\sigma+3}{\mu}\right)}{\Gamma\left(\frac{2n+\sigma+1}{\mu}\right)} \left(\frac{|x|}{(Dt)^{1/\mu}} \right)^2. \quad (3.32)$$

Se $\mu \geq 1$,

$$\begin{aligned} \Gamma\left(\frac{2n+\sigma+3}{\mu}\right) &\leq \Gamma\left(\frac{2n+\sigma+1}{\mu} + 2\right) \\ &= \left(\frac{2n+\sigma+1}{\mu} + 1\right) \left(\frac{2n+\sigma+1}{\mu}\right) \Gamma\left(\frac{2n+\sigma+1}{\mu}\right). \end{aligned} \quad (3.33)$$

Assim, para $\mu > 1$ e n suficientemente grande a razão (3.32) é menor do que um e, portanto, a série (3.27) converge para qualquer x . Quando $\mu = 1$, a série também converge se $x/(Dt)^{1/\mu} < 1$. Pelo contrário, se $\mu < 1$, a série (3.27) não converge, salvo para $x = 0$. Em termos dos resultados acima, podemos escrever que

$$\begin{aligned} Q_{\mu\sigma}(x, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} |k|^\sigma e^{-Dt|k|^\mu + ikx} \frac{dk}{2\pi} \\ &= \sum_{n=0}^{N-1} \frac{b_n}{(Dt)^{(\sigma+1)/\mu}} \left(\frac{x}{(Dt)^{1/\mu}} \right)^{2n} + R_N(x, t), \end{aligned} \quad (3.34)$$

em que

$$b_n = \frac{(-1)^n}{\pi\mu(2n)!} \Gamma\left(\frac{2n + \sigma + 1}{\mu}\right). \quad (3.35)$$

3.3 Movimento Browniano Generalizado

No capítulo anterior, usamos a aproximação (2.42), que está intimamente vinculada à existência do segundo momento de x , $\langle x^2 \rangle$, para investigar um movimento Browniano. Entretanto, em alguns casos, $\langle x^2 \rangle$ pode não existir (divergir) porque a probabilidade $p_\tau(x)$ tem a cauda muito longa. Nesse sentido, teremos um movimento Browniano generalizado. Em tal caso, a eq. (2.42) não pode mais ser empregada e é substituída por

$$\tilde{p}_\tau(k) \simeq 1 - b|k|^\mu, \quad (3.36)$$

em que b é um análogo de $\langle x^2 \rangle/2$ e $0 < \mu < 2$. Cabe ressaltar que $b > 0$, pois

$$\begin{aligned} |\tilde{p}(k)| &= \left| \int_{-\infty}^{+\infty} p_\tau(x) e^{-ikx} dx \right| \\ &\leq \int_{-\infty}^{+\infty} |p_\tau(x)| |e^{-ikx}| dx \\ &\leq \int_{-\infty}^{+\infty} p_\tau(x) dx \\ &= |\tilde{p}(0)| \\ &= 1 \end{aligned} \quad (3.37)$$

De acordo com a discussão que apresentamos no último parágrafo da seção 3.1 (veja também o parágrafo que contém a eq. (5.16)), para $|k|$ pequeno, $|k|^\mu$ na transformada de Fourier de $|k|^\mu$ está vinculada, para $|x|$ grande, a

potência $|x|^{-(1+\mu)}$ na função. Isso mostra que $\mu < 2$, de fato, está diretamente conectado com uma distribuição de cauda longa.

A partir da eq. (3.36), chegamos a

$$\begin{aligned} [\tilde{p}_\tau(k)]^n &\simeq (1 - b|k|^\mu)^n \\ &\simeq e^{-n\tau \frac{b}{\tau} |k|^\mu} \end{aligned} \quad (3.38)$$

ao empregarmos a aproximação (2.44), válida quando n for suficientemente grande. Além disso, se usarmos $t = n\tau$ e $D = b/\tau$, obtemos (via (2.37))

$$\begin{aligned} \tilde{G}(k, t) &= [\tilde{p}_\tau(k)]^n \\ &\simeq e^{-Dt|k|^\mu}, \end{aligned} \quad (3.39)$$

que conduz à função de Green (3.9). Com essa aproximação, temos basicamente uma generalização do teorema central do limite, o teorema de Lévy-Guedenko[36]. Como deve estar claro, esse último teorema é usado quando a distribuição tiver uma cauda suficientemente longa.

3.4 Equação de Schrödinger Fracionária

Analogamente a equação de difusão anômala, vamos obter a solução geral para a equação de Schrödinger fracionária para uma partícula livre[11, 12]. Usaremos para isso o mesmo procedimento apresentado na seção 3.1. Isso é possível, pois a equação de Schrödinger fracionária em uma dimensão com potencial nulo é

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^\mu \Psi}{\partial |x|^\mu}; \quad \Psi = \Psi(x, t). \quad (3.40)$$

Como vimos anteriormente para o caso da difusão anômala, temos aqui o uso da derivada fracionária, $\partial^\mu/\partial|x|^\mu$, que foi introduzida em substituição a derivada segunda em x , $\partial^2/\partial x^2$. Assim, quando $\mu \rightarrow 2$, recuperamos a equação de Schrödinger usual.

Por questão de preservação do esquema dos cálculos utilizados até aqui, com uso da transformada de Fourier, teremos, conforme as eqs. (2.50) e (3.3),

$$\begin{aligned} 0 &= \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^\mu}{\partial |x|^\mu} \right) \Psi(x, t) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Psi}(k, t) - \frac{\hbar^2}{2m} |k|^\mu \tilde{\Psi}(k, t) \right) e^{ikx} \frac{dk}{2\pi}, \end{aligned} \quad (3.41)$$

o que conduz a

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Psi}(k, t) - \frac{\hbar^2}{2m} |k|^\mu \tilde{\Psi}(k, t) = 0, \quad (3.42)$$

cuja solução é

$$\tilde{\Psi}(k, t) = \tilde{\Psi}(k, 0) e^{-\frac{i\hbar t}{2m} |k|^\mu}. \quad (3.43)$$

Portanto, empregamos somente $|k|^\mu$ no lugar de k^2 em comparação com a equação de Schrödinger usual.

De (3.43), vemos que a transformada de Fourier inversa de $\tilde{\Psi}(k, t)$ é

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\Psi}(k, 0) e^{-\frac{i\hbar t}{2m} |k|^\mu} e^{ikx} \frac{dk}{2\pi}. \quad (3.44)$$

Se usarmos a eq. (2.53), a qual nos oferece o $\tilde{\Psi}(k, 0)$, chegamos a

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i\hbar t}{2m} |k|^\mu + ik(x-x')} \frac{dk}{2\pi} \right) \Psi(x', 0) dx'. \quad (3.45)$$

Ao escrevermos esse $\Psi(x, t)$ em termos de uma função de Green e da condição inicial, verificamos que

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} G_\mu^S(x - x', t) \Psi(x', 0) dx', \quad (3.46)$$

com

$$G_\mu^S(x - x', t) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i\hbar t}{2m} |k|^\mu + ik(x-x')} \frac{dk}{2\pi}. \quad (3.47)$$

3.4.1 Exemplo

Para ilustrar uma aplicação da eq. (3.46), usaremos a condição inicial $\Psi(x', 0) = c_0 \delta(x' - x_0)$. Isto faz com que $\Psi(x, t)$ seja proporcional a função de Green, pois

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} G_\mu^S(x - x', t) c_0 \delta(x' - x_0) dx' \\ &= c_0 G_\mu^S(x - x_0, t). \end{aligned} \quad (3.48)$$

Assim como no caso de difusão anômala (eq. (3.11)), verificamos a partir da eq. (3.48) que

$$\Psi(x, t) \propto G_\mu^S(x, t) \quad \text{e} \quad \Psi(0, t) \propto t^{-1/\mu}. \quad (3.49)$$

3.5 Caso N -dimensional

Nesta última seção deste capítulo, obteremos primeiramente a solução das equações de difusão anômala e de Schrödinger fracionária para uma partícula livre no caso N -dimensional. Usaremos para isso o mesmo procedimento de cálculo utilizado nas seções anteriores. Nesse sentido, a equação de difusão anômala em N -dimensões é

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \nabla^\mu \rho; \quad \rho = \rho(\mathbf{x}, t), \quad (3.50)$$

em que $\nabla^\mu \rho$ é a generalização do Laplaciano de ρ . A equação de Schrödinger fracionária para partícula livre é formalmente idêntica a anterior, pois basta fazermos as substituições $t \rightarrow it$ e $D \rightarrow \hbar/2m$.

Empreguemos agora a transformada de Fourier inversa dada pela eq. (2.58) na eq. (3.50). Nesse caso, notamos que

$$\int \left(\frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial t} + D |\mathbf{k}|^\mu \tilde{\rho} \right) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \frac{d^N \mathbf{k}}{(2\pi)^N} = 0 \quad \left(|\mathbf{k}| = (k_1^2 + k_2^2 + \dots + k_N^2)^{1/2} \right) \quad (3.51)$$

se impusermos que a forma da eq. (3.51) seja a mesma da eq. (3.3). Isto posto, a eq. (3.51) conduz a

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{\rho}(\mathbf{k}, t) + D |\mathbf{k}|^\mu \tilde{\rho}(\mathbf{k}, t) = 0, \quad (3.52)$$

que por sua vez tem

$$\tilde{\rho}(\mathbf{k}, t) = \tilde{\rho}(\mathbf{k}, 0) e^{-Dt|\mathbf{k}|^\mu} \quad (3.53)$$

como solução. Em comparação com o caso N -dimensional usual, empregamos somente $|\mathbf{k}|^\mu$ no lugar de $|\mathbf{k}|^2$. Assim, em termos da transformada de Fourier em N -dimensões, a generalização do Laplaciano é

$$\mathcal{F}\{\nabla^\mu f(\mathbf{x})\} = -|\mathbf{k}|^\mu \mathcal{F}\{f(\mathbf{x})\}. \quad (3.54)$$

Portanto, a generalização em questão preserva uma estrutura isotrópica e por isso não pode ser, por exemplo, da forma $\nabla^\mu \rho = \sum_{j=1}^N \partial^\mu \rho / \partial |x_j|^\mu$.

A partir das eqs. (3.53) e (2.62), a transformada de Fourier inversa de $\tilde{\rho}(\mathbf{k}, t)$ é dada por

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{x}, t) &= \int \left(\int e^{-Dt|\mathbf{k}|^\mu + i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \frac{d^N \mathbf{k}}{(2\pi)^N} \right) \rho(\mathbf{x}', 0) d^N \mathbf{x}', \\ &= \int G_\mu(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t) \rho(\mathbf{x}', 0) d^N \mathbf{x}', \end{aligned} \quad (3.55)$$

em que

$$G_\mu(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t) = \int e^{-Dt|\mathbf{k}|^\mu + i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \frac{d^N \mathbf{k}}{(2\pi)^N}. \quad (3.56)$$

Aqui, consideramos também que $0 < \mu \leq 2$. Se fizermos nesta última equação a mudança de variável em que $\mathbf{q} = (Dt)^{1/\mu} \mathbf{k}$, verificamos que

$$G_\mu(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t) = \frac{1}{(Dt)^{N/\mu}} \int e^{-|\mathbf{q}|^\mu + i\frac{\mathbf{q} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')}{(Dt)^{1/\mu}}} \frac{d^N \mathbf{q}}{(2\pi)^N}. \quad (3.57)$$

Antes de passarmos para um exemplo, discutiremos como representar uma distribuição de Lévy em N dimensões via série de Taylor. Com vistas a aplicações que teremos no decorrer deste trabalho, enfocaremos uma situação um pouco mais geral:

$$\begin{aligned} Q_{\mu\sigma}^{(N)}(\mathbf{x}, t) &= \int |\mathbf{k}|^\sigma e^{-Dt|\mathbf{k}|^\mu + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \frac{d^N \mathbf{k}}{(2\pi)^N} \\ &= \sum_{i_1, i_2, \dots, i_N=1}^{\bar{N}-1} [\bar{a}_{\mu\sigma}^{(n)}(t)]_{i_1 \dots i_N} x_{i_1} \cdots x_{i_N} + R_{\bar{N}}(\mathbf{x}, t), \end{aligned} \quad (3.58)$$

que leva à distribuição de Lévy usual num espaço N -dimensional (eq. (3.57) com $Dt = 1$) quando $\sigma = 0$, $\mathbf{x}' = \mathbf{0}$ e $Dt = 1$. Nessa série,

$$\begin{aligned} [\bar{a}_{\mu\sigma}^{(n)}(t)]_{i_1 \dots i_n} &= \frac{1}{n!} \left. \frac{\partial^n Q_{\mu\sigma}^{(N)}(\mathbf{x}, t)}{\partial x_{i_1} \cdots \partial x_{i_n}} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{0}} \\ &= \frac{i^n}{n!} \int |\mathbf{k}|^\sigma k_{i_1} \cdots k_{i_n} e^{-Dt|\mathbf{k}|^\mu} \frac{d^N \mathbf{k}}{(2\pi)^N} \end{aligned} \quad (3.59)$$

e

$$\begin{aligned} R_{\bar{N}}(\mathbf{x}, t) &= \sum_{i_1, i_2, \dots, i_N=1}^N \frac{x_{i_1} \cdots x_{i_N}}{\bar{N}!} \left. \frac{\partial^{\bar{N}} Q_{\mu\sigma}^{(\bar{N})}(\mathbf{x}, t)}{\partial x_{i_1} \cdots \partial x_{i_N}} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{u}} \\ &= \sum_{i_1, i_2, \dots, i_N=1}^N \frac{i^{\bar{N}} x_{i_1} \cdots x_{i_N}}{\bar{N}!} \int |\mathbf{k}|^\sigma k_{i_1} \cdots k_{i_N} e^{-Dt|\mathbf{k}|^\mu + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}} \frac{d^N \mathbf{k}}{(2\pi)^N} \end{aligned} \quad (3.60)$$

é o resto na forma diferencial[34], tal que \mathbf{u} representa um ponto que está situado no segmento retilíneo que une \mathbf{x} e $\mathbf{0}$.

Notemos que $[\bar{a}_{\mu\sigma}^{(n)}(t)]_{i_1 \dots i_n} = 0$ se índices iguais não ocorrerem em um número par de vezes, pois o integrando em (3.59) seria ímpar na variável k_i correspondente ao índice em questão. De uma maneira mais geral, os coeficientes do tipo $[\bar{a}_{\mu\sigma}^{(n)}(t)]_{i_1 \dots i_n}$ não nulos serão positivos.

Por outro lado, quando usarmos coordenadas (hiper) esféricas, fizermos uma mudança de variáveis tal que $\mathbf{q} = (Dt)^{1/\mu} \mathbf{k}$ e tomarmos um sistema de coordenadas em que a N -ésima coordenada de \mathbf{q} seja paralela a \mathbf{x} , verificamos que

$$Q_{\mu\sigma}^N(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{(2\pi)^N (Dt)^{(\sigma+N)/\mu}} \int |\mathbf{q}|^{\sigma+N-1} e^{-|\mathbf{q}|^\mu + i \frac{|\mathbf{q}||\mathbf{x}| \cos \theta_1}{(Dt)^{1/\mu}}} d|\mathbf{q}| d\Omega_N \quad (3.61)$$

em que $\mathbf{q} \cdot \mathbf{x} = |\mathbf{q}||\mathbf{x}| \cos \theta_1$ e o elemento de volume[37] é dado por $d^N \mathbf{q} = |\mathbf{q}|^{N-1} d\Omega_N$ com $d\Omega_N = \left[\prod_{j=1}^{N-2} (\sin \theta_j)^{N-(j+1)} d\theta_j \right] d\theta_{N-1}$. Portanto, após fazermos as integrações nas variáveis angulares e na radial, vemos que

$$Q_{\mu\sigma}^N(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{(Dt)^{(\sigma+N)/\mu}} Q \left(\frac{|\mathbf{x}|}{(Dt)^{1/\mu}} \right) \quad (3.62)$$

com

$$Q \left(\frac{|\mathbf{x}|}{(Dt)^{1/\mu}} \right) = \frac{1}{(2\pi)^N} \int |\mathbf{q}|^{\sigma+N-1} e^{-|\mathbf{q}|^\mu + i \frac{|\mathbf{q}||\mathbf{x}| \cos \theta_1}{(Dt)^{1/\mu}}} d|\mathbf{q}| d\Omega_N. \quad (3.63)$$

Devido a eq. (3.62), a série (3.58) poderá conter apenas termos proporcionais a $(Dt)^{-(\sigma+N)/\mu} [(\mathbf{x} \cdot \mathbf{x})(Dt)^{-2/\mu}]^n$ com n inteiro. Ou seja, teremos

$$\begin{aligned} Q_{\mu\sigma}^N \left(\frac{|\mathbf{x}|}{(Dt)^{1/\mu}} \right) &= \int |\mathbf{k}|^\sigma e^{-Dt|\mathbf{k}|^\mu + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \frac{d^N \mathbf{k}}{(2\pi)^N} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^N (Dt)^{(\sigma+N)/\mu}} \int |\mathbf{q}|^{\sigma+N-1} e^{-|\mathbf{q}|^\mu + i \frac{|\mathbf{q}||\mathbf{x}| \cos \theta_1}{(Dt)^{1/\mu}}} d|\mathbf{q}| d\Omega_N \\ &= \sum_{n=0}^{\bar{N}-1} \frac{b_n^N}{(Dt)^{(\sigma+N)/\mu}} \left(\frac{|\mathbf{x}|}{(Dt)^{1/\mu}} \right)^{2n} + R_{\bar{N}}(\mathbf{x}, t). \end{aligned} \quad (3.64)$$

Poderíamos aqui continuar e obter as expressões para os coeficientes b_n^N , porém seus valores particulares não serão de interesse nas nossas aplicações.

3.5.1 Exemplo

Como exemplo, vamos aplicar a eq. (3.56) a uma condição inicial do tipo $\rho(\mathbf{x}', 0) = \rho_0 \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}_0)$. Nesse caso,

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \rho_0 G_\mu(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0, t) \quad (3.65)$$

e dessa expressão, com $\mathbf{x}_0 = 0$ temos que

$$\rho(\mathbf{x}, t) \propto G_\mu(\mathbf{x}, t) \quad \text{e} \quad \rho(\mathbf{0}, t) \propto t^{-N/\mu} \quad (3.66)$$

quando empregamos as eqs. (3.62) e (3.64) com $\sigma = 0$.

Capítulo 4

Comportamento Assintótico I

Neste capítulo, vamos começar a apresentar, de maneira sistemática, como o comportamento assintótico temporal de uma função está relacionado com a sua condição inicial e a correspondente função de Green. Em particular, aplicaremos nossos desenvolvimentos a funções que são soluções da equação de difusão e de Schrödinger usuais. Além disso, investigaremos o comportamento assintótico temporal de soluções das equações generalizadas (via derivada fracionária) de difusão e de Schrödinger discutidas no capítulo anterior.

4.1 Análise Assintótica - Caso Unidimensional

Começamos nesta seção a desenvolver a parte principal desta dissertação, isto é, iniciamos o estudo do comportamento assintótico temporal de $\rho(x, t)$. Para tal, consideraremos situações do tipo difusivas, com isso a função de Green em

$$\rho(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} G(x - x', t) \rho(x', 0) dx' \quad (4.1)$$

tem como característica geral um alargamento que aumenta com o tempo. Nessa investigação, outro aspecto importante está relacionado com a condição inicial $\rho(x, 0)$. De maneira que nosso estudo sobre comportamento assintótico de $\rho(x, t)$ estará baseado sobre a forma particular da condição inicial e da lei de alargamento da função de Green. Em particular, para caracterizamos

esta condição inicial serão úteis seus momentos de n -ésima ordem

$$\langle x^n \rangle_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} x^n \rho(x, 0) dx. \quad (4.2)$$

Antes de entrarmos na análise assintótica, mostremos dois resultados gerais, que são consequência das simetrias da função de Green e da condição inicial.

i) Se $G(x - x', t) = G(-x + x', t)$ e $\rho(x', 0) = \rho(-x', 0)$, então $\rho(x, t) = \rho(-x, t)$. A demonstração dessa afirmação segue ao usarmos essas hipóteses na eq. (4.1). Realmente,

$$\begin{aligned} \rho(-x, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} G(-x - x', t) \rho(-x', 0) dx' \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} G(-x + y, t) \rho(y, 0) dy \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} G(x - y, t) \rho(y, 0) dy \\ &= \rho(x, t) \end{aligned} \quad (4.3)$$

quando fazemos a mudança de variável em que $y = -x'$.

ii) Se $G(x - x', t) = G(-x + x', t)$ e $\rho(x', 0) = -\rho(-x', 0)$, então $\rho(x, t) = -\rho(-x, t)$. A verificação desse enunciado é direta se usarmos (4.3) com $\rho(-x', 0)$ substituído por $-\rho(-x', 0)$.

Para iniciarmos nossa análise assintótica, começaremos com situações em que $\rho(x, 0)$ apresenta cauda curta, no sentido de que o primeiro momento não nulo (digamos de ordem n^*) é finito. Em adição a esse fato, depois de um tempo suficientemente longo, a função de Green $G(x - x', t)$ dispersou bem mais que $\rho(x, 0)$. Em outras palavras, para t suficientemente longo, $\rho(x, 0)$ estará muito concentrado quando comparado com $G(x - x', t)$. Por exemplo, se $\rho(x, 0)$ está concentrada em torno de x_0 e satisfaz a condição de normalização $\int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x, 0) dx = c$ (c finito e não nulo), temos que $G(x - x', t)$ permanece praticamente constante em relação as variações de $\rho(x', 0)$ para t suficientemente longo e, portanto,

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} G(x - x', t) \rho(x', 0) dx' &\simeq G(x - x_0, t) \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x', 0) dx' \\ &\simeq c G(x - x_0, t). \end{aligned} \quad (4.4)$$

Outra forma de apresentar esse exemplo é

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} G(x - x', t) \rho(x', 0) dx' &\simeq \int_{-\infty}^{+\infty} G(x - x', t) c \delta(x' - x_0) dx' \\ &= c G(x - x_0, t) \end{aligned} \quad (4.5)$$

para t suficientemente longo. A fig. (4.1) ilustra esse comportamento da função de Green em relação a condição inicial.

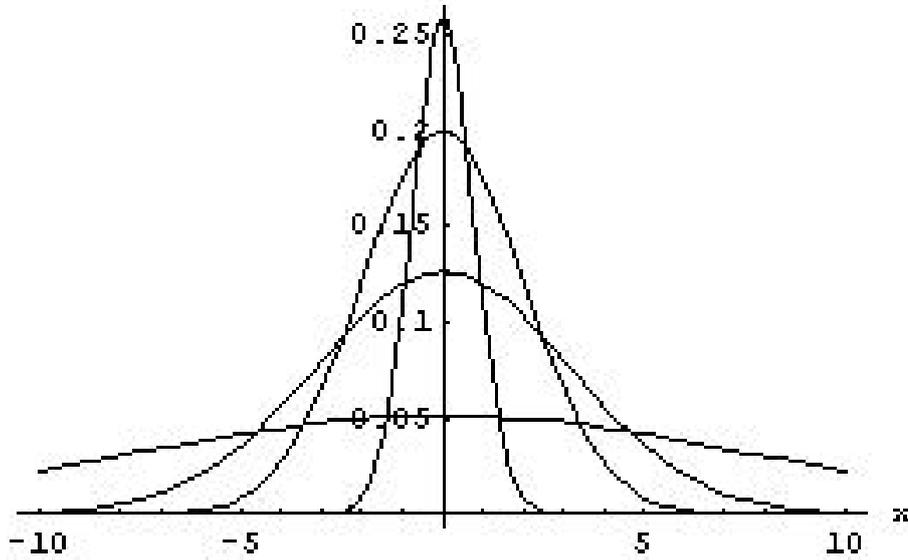


Figura 4.1: A figura mostra de cima para baixo, em $x = 0$, uma condição inicial Gaussiana e a função de Green $G_2(x, t) = (4\pi Dt)^{-1/2} \exp(-x^2/(4Dt))$ para $Dt = 1, 5$ e 30 .

Cabe ressaltar que a terminologia “normalização” empregada no decorrer deste trabalho, em geral, não se refere, como é usual, a uma norma positiva definida (distância). Mais precisamente, a nossa normalização diz somente que a integral de uma função é finita e não o módulo ao quadrado dela como ocorre em mecânica quântica.

Por uma escolha conveniente do sistema de coordenadas, podemos supor que a região efetivamente estreita, ditada pelo contraste entre as larguras de $\rho(x, 0)$ e $G(x - x', t)$, engloba a origem. Seguindo estas considerações, expandimos $G(x - x', t)$ em série de Taylor em torno de $x' = 0$, isto é,

$$\begin{aligned} G(x - x', t) &= \sum_{n=0}^{n_G-1} \frac{(x')^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial x'^n} G(x - x', t) \Big|_{x'=0} + R_{n_G}(x, t) \\ &= \sum_{n=0}^{n_G-1} \frac{(-x')^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial x^n} G(x, t) + R_{n_G}(x, t), \end{aligned} \quad (4.6)$$

em que usamos $\partial^n G(x - x', t) / \partial x'^n = (-1)^n \partial^n G(x - x', t) / \partial x'^n$. Aqui, $R_{n_G}(x, t)$ é um resto que pode, por exemplo, ser na forma diferencial como fizemos na

seção 3.2. Por meio dessa expansão, a eq. (4.1) pode ser escrita como

$$\rho(x, t) \simeq \sum_{n=n^*}^{n_G-1} \frac{(-1)^n}{n!} \langle (x')^n \rangle_0 \frac{\partial^n}{\partial x^n} G(x, t), \quad (4.7)$$

em que $\langle (x')^n \rangle_0$ é o primeiro momento não nulo. Se o primeiro momento divergente for $\langle x^{n_\infty} \rangle_0$ e $n_\infty < n_G$, a eq. (4.7) deve ser substituída por

$$\rho(x, t) \simeq \sum_{n=n^*}^{n_\infty-1} \frac{(-1)^n}{n!} \langle (x')^n \rangle_0 \frac{\partial^n}{\partial x^n} G(x, t). \quad (4.8)$$

Por outro lado, se $n_\infty \geq n_G$, devemos empregar (4.7).

Em geral, para t suficientemente longo, o primeiro termo das expansões acima será o dominante. Esta propriedade é suportada, por exemplo, pelo fato de que muitas funções de Green, como as que foram ilustradas nos capítulos anteriores, são da forma $G(x, t) = F(x/\phi(t))/\phi(t)$, em que $\phi(t)$ é uma função que aumenta com t e é arbitrariamente grande para uma conveniente escolha de t . Assim, para um t suficientemente longo, o comportamento espacial e temporal de $\rho(x, t)$ seguirá aquele da função de Green ou de uma de suas derivadas, ditado pelo primeiro termo da série (4.7) (ou (4.8)). Assim, a eq. (4.7) (ou (4.8)) possibilita-nos obter o comportamento assintótico para $\rho(x, t)$ para uma grande classe de funções de Green e condições iniciais, em que a equação de difusão usual e a equação de Schrödinger para partícula livre são casos particulares. Observamos também que a eq. (4.7) (ou (4.8)) pode ser empregada para investigar outras situações além do caso não confinante. De fato, quando a condição inicial é suficientemente estreita, esta expansão pode ser também usada para investigar a evolução temporal de sistemas confinantes tais como osciladores harmônicos.

4.2 Exemplos - Caso Unidimensional

Para ilustrar a aplicabilidade dos desenvolvimentos obtidos agora, vamos fazer alguns exemplos que envolvem várias possibilidades para as funções de Green e as condições iniciais.

Exemplo 4.2.1

Primeiramente, analisaremos um caso difusivo em que o primeiro

momento não-nulo e finito é o de ordem $n^* = 0$,

$$\langle x^0 \rangle_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x, 0) dx = c \quad (c \neq 0), \quad (4.9)$$

e $\mu = 2$ (eq. (2.22)),

$$G_2^D(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}. \quad (4.10)$$

Assim, a solução assintótica dominante de acordo com a eq. (4.7) (ou (4.8)) é

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &= \langle x^0 \rangle_0 G_2^D(x, t) \\ &= \frac{c}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}, \end{aligned} \quad (4.11)$$

que é justamente uma situação particularizada nas eqs. (4.4) e (4.5). Como temos que a condição inicial $\rho(x, 0)$ está presente no comportamento assintótico de $\rho(x, t)$ unicamente através de $\langle x^0 \rangle_0$, chegamos a

$$\rho(x, t) = c (4\pi Dt)^{-1/2} \quad (4.12)$$

quando $x^2 \ll 4Dt$. Enfatizamos também que $\rho(x, t) \propto t^{-1/2}$ no caso da equação de Schrödinger, pois basta usar nos cálculos acima $G_2^S(x, t)$ (eq. (2.55)) em substituição a $G_2^D(x, t)$. Ressaltamos ainda que essa conclusão já foi reportada por alguns autores[11, 13, 15, 17, 19, 20, 21, 38, 39]. Note ainda que esse resultado contém a condição inicial Gaussiana (2.27) como caso particular.

Exemplo 4.2.2

Agora, façamos o análogo do caso anterior para uma situação mais geral envolvendo difusão anômala, mais precisamente, enfocaremos a vertente com $n^* = 0$ e $0 < \mu < 2$ (eq. (3.25)),

$$G_\mu^D(x) = \frac{1}{(Dt)^{1/\mu}} L_\mu \left(\frac{x}{(Dt)^{1/\mu}} \right). \quad (4.13)$$

Como no exemplo anterior, a solução assintótica dominante, de acordo com a eq. (4.7), é

$$\rho(x, t) = \langle x^0 \rangle_0 G_\mu^D(x, t) \quad (4.14)$$

Se usarmos para $\langle x^0 \rangle$ e G_μ^D dado em termos da distribuição de Lévy (eq. (3.25)), obtemos

$$\rho(x, t) = \frac{c}{(Dt)^{1/\mu}} L_\mu \left(\frac{x}{(Dt)^{1/\mu}} \right), \quad (4.15)$$

Se fizermos $x = 0$ na eq. (4.15), teremos que $L_\mu(0) = (1/\pi\mu)\Gamma(1/\mu)$ (veja a eq. (3.12)) e, portanto, $\rho(0, t) = (c/\pi\mu)\Gamma(1/\mu)(Dt)^{-1/\mu}$. De uma maneira mais geral,

$$\rho(x, t) \sim t^{-1/\mu} \quad (4.16)$$

quando $|x| \ll |Dt|^{1/\mu}$. Resultado que segue da série (3.34) ($\sigma = 0$) ao retermos somente o termo dominante em $x/(Dt)^{1/\mu}$. Tal constatação mostra que o fato da função de Green apresentar um comportamento de cauda longa leva a um abaixamento da altura da distribuição inicial mais rápido que o usual, pois $1/\mu > 1/2$. Frizamos que esses resultados são preservados quando empregamos a equação de Schrödinger fracionária.

Exemplo 4.2.3

A seguir, analisaremos o caso em que o momento de ordem zero é nulo, $\langle x^0 \rangle_0 = 0$, e com $\langle x^1 \rangle_0$ finito ($n^* = 1$). Isso ocorre, em particular, para uma condição inicial do tipo $\rho(x, 0) = x/(b^2 + x^2)^\nu$, com $\nu > 3/2$. Assim, da eq. (4.7) (ou (4.8)), vemos que

$$\rho(x, t) = -\langle x^1 \rangle_0 \frac{\partial}{\partial x} G_\mu^D(x, t) \quad (4.17)$$

no regime assintótico. Portanto,

$$\rho(x, t) = -\langle x^1 \rangle_0 \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{(Dt)^{1/\mu}} L_\mu \left(\frac{x}{(Dt)^{1/\mu}} \right) \right]. \quad (4.18)$$

Observemos que $\rho(0, t) = 0$, pois $G_\mu^D(0, t)$ e $\partial_x G_\mu^D(0, t)$ são respectivamente funções par e ímpar, e conseqüentemente a $\partial_x G_\mu^D(0, t) = 0$. Além disso, da série (3.34) com ($\sigma = 0$) quando $|x| \ll |Dt|^{1/\mu}$, verificamos que

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &\simeq -\langle x^1 \rangle_0 \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{b_0}{(Dt)^{1/\mu}} + \frac{b_1}{(Dt)^{1/\mu}} \left(\frac{x}{(Dt)^{1/\mu}} \right)^2 \right] \\ &= -\frac{2b_1 \langle x^1 \rangle_0 x}{(Dt)^{3/\mu}}. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Ou seja, $\rho(x, t) \sim t^{-3/\mu}$ se $|x| \ll (Dt)^{1/\mu}$ mas com $x \neq 0$. Não é demais dizer que esse resultado vale igualmente no caso da mecânica quântica [13, 15, 17, 20]. Além disso, essa conclusão está em acordo com o resultado geral (ii) da seção 4.1.

Exemplo 4.2.4

Façamos agora o caso em que a condição inicial é da forma

$$\rho(x, 0) = \frac{x^2 + a}{(b^2 + x^2)^\nu} \quad (4.20)$$

com $\nu > 5/2$. Se desejarmos que a primeira correção para o termo principal seja a relacionada a $\langle x^2 \rangle_0$, teremos

$$\rho(x, t) = -\frac{\langle x^2 \rangle_0}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} G_\mu^D(x, t), \quad (4.21)$$

$\langle x^1 \rangle_0 = 0$ e $\langle x^0 \rangle_0 = 0$. De fato, a penúltima dessas condições é diretamente satisfeita, pois o integrando é uma função ímpar. Porém, $\langle x^0 \rangle_0 = 0$ conduz a

$$\langle x^0 \rangle_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{(x^2 + a)}{(b^2 + x^2)^\nu} dx = 0, \quad (4.22)$$

isto é,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{x^2}{(b^2 + x^2)^\nu} dx = -a \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{(b^2 + x^2)^\nu} dx. \quad (4.23)$$

Por sua vez, se usarmos que[40]

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{x^{2\beta}}{(b^2 + x^2)^\nu} dx = \frac{\Gamma(\beta + 1/2)\Gamma(\nu - \beta - 1/2)}{\Gamma(\nu)} b^{-2(\nu-\beta)+1}, \quad (4.24)$$

chegamos a

$$a = -\frac{b^2}{2\nu - 3}. \quad (4.25)$$

Assim, a contribuição dominante para o comportamento assintótico de $\rho(x, t)$ é proporcional a $t^{-3/\mu}$ se $|x| \ll (Dt)^{1/\mu}$, pois

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial x^2} G_\mu^D(x, t) &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[\frac{1}{(Dt)^{1/\mu}} L_\mu \left(\frac{x}{(Dt)^{1/\mu}} \right) \right] \\ &\propto t^{-3/\mu} \end{aligned} \quad (4.26)$$

quando empregamos a série (3.34) ($\sigma = 0$) até a segunda ordem em $x/(Dt)^{1/\mu}$. Podemos perceber deste caso e do anterior, que eles têm o mesmo comportamento temporal no regime de t suficientemente longo, que a princípio, poderíamos pensar justamente o contrário. Isso tanto numa situação quântica quanto difusiva.

Exemplo 4.2.5

Aqui, trataremos de uma situação mais geral em que a primeira derivada não-nula é de ordem n^* . Isso faz com que, quando nos restringimos ao comportamento assintótico temporal dominante, possamos escrever

$$\begin{aligned}\rho(x, t) &= \frac{(-1)^{n^*}}{n!} \langle x^{n^*} \rangle_0 \frac{\partial^{n^*}}{\partial x^{n^*}} G_\mu^D(x, t), \\ &= \frac{(-1)^{n^*}}{n!} \langle x^{n^*} \rangle_0 \frac{\partial^{n^*}}{\partial x^{n^*}} \left[\frac{1}{(Dt)^{1/\mu}} L_\mu \left(\frac{x}{(Dt)^{1/\mu}} \right) \right].\end{aligned}\quad (4.27)$$

Quando levamos em conta a série (3.34) ($\sigma = 0$) e retemos somente o termo dominante em $x/(Dt)^{1/\mu}$ após calcularmos as n^* derivadas, vemos que

$$\rho(x, t) \sim \begin{cases} t^{-(1+n^*)/\mu} & \text{para } n^* \text{ par} \\ t^{-(2+n^*)/\mu} & \text{para } n^* \text{ ímpar} \end{cases}\quad (4.28)$$

se $|x| \ll |Dt|^{1/\mu}$. Notemos que esse resultado incorpora naturalmente os exemplos anteriores desta seção.

Um tipo de condição inicial que fornece $\langle x^n \rangle_0 = 0$ para $n < n^*$ e $\langle x^{n^*} \rangle_0 \neq 0$ é

$$\rho(x, 0) = e^{-a^2 x^2} H_{n^*}(ax), \quad (4.29)$$

em que H_{n^*} é o polinômio de Hermite de ordem n^* e a uma constante com dimensão de distância. Para verificarmos essa afirmação basta usarmos que[41]

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-z^2} H_{n^*}(z) H_j(z) dz &= 0 & \text{se } n^* \neq j \\ \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-z^2} [H_{n^*}(z)]^2 dz &= 2^{n^*} n^*! \sqrt{\pi} & \text{se } n^* = j\end{aligned}\quad (4.30)$$

e o fato de $H_n(z)$ ser um polinômio de ordem n em z conduzir a

$$z^n = \sum_{j=0}^n c_j H_j(z). \quad (4.31)$$

Realmente, das eqs. (4.30) e (4.31) segue que

$$\begin{aligned}\langle x^n \rangle_0 &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a^2 x^2} H_{n^*}(ax) x^n dx \\ &= \sum_{j=0}^n c_j a^{-n-1} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-z^2} H_{n^*}(z) H_j(z) dz\end{aligned}\quad (4.32)$$

é nulo quando $n < n^*$ e diferente de zero se $n = n^*$.

4.3 Caso N -dimensional

Nesta seção, analisaremos o comportamento assintótico temporal de

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \int G(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t) \rho(\mathbf{x}', 0) d^N \mathbf{x}' . \quad (4.33)$$

Aqui, $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_N)$, a integral é sobre todo o espaço, $G(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t)$ é a função de Green e $\rho(\mathbf{x}', 0)$ é a condição inicial.

Primeiramente, enfocaremos dois resultados gerais que não dependem de comportamento assintótico e que são uma extensão do caso unidimensional.

i) Se $G(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t) = G(-\mathbf{x} + \mathbf{x}', t)$ e $\rho(\mathbf{x}', 0) = \rho(-\mathbf{x}', 0)$, então $\rho(\mathbf{x}, t) = \rho(-\mathbf{x}, t)$. A constatação desse enunciado pode ser verificada quando empregamos essas hipóteses na eq. (4.33). De fato,

$$\begin{aligned} \rho(-\mathbf{x}, t) &= \int G(-\mathbf{x} - \mathbf{x}', t) \rho(-\mathbf{x}', 0) d^N \mathbf{x}' \\ &= \int G(-\mathbf{x} + \mathbf{y}, t) \rho(\mathbf{y}, 0) d^N \mathbf{y} \\ &= \int G(\mathbf{x} - \mathbf{y}, t) \rho(\mathbf{y}, 0) d^N \mathbf{y} \\ &= \rho(\mathbf{x}, t) \end{aligned} \quad (4.34)$$

ao usarmos a mudança de variável em que $\mathbf{y} = -\mathbf{x}'$.

ii) Se $G(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t) = G(-\mathbf{x} + \mathbf{x}', t)$ e $\rho(\mathbf{x}', 0) = -\rho(-\mathbf{x}', 0)$, então $\rho(\mathbf{x}, t) = -\rho(-\mathbf{x}, t)$. A verificação desse enunciado é direta se usarmos (4.34) com $\rho(-\mathbf{x}', 0)$ substituído por $-\rho(-\mathbf{x}', 0)$.

Assim como na seção anterior, nosso estudo sobre o comportamento assintótico de $\rho(\mathbf{x}, t)$ será baseado na forma da lei de espalhamento (a função de Green) e da condição inicial. Para caracterizarmos esta condição inicial, serão úteis os momentos

$$\langle x_{i_1} x_{i_2} \cdots x_{i_n} \rangle_0 = \int x_{i_1} x_{i_2} \cdots x_{i_n} \rho(\mathbf{x}, 0) d^N \mathbf{x} . \quad (4.35)$$

Inicialmente, veremos situações em que $\rho(\mathbf{x}, 0)$ apresenta cauda curta, dito de outra forma, temos que o primeiro momento não nulo é finito. Depois que tivermos um tempo suficientemente longo, a função de Green $G(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t)$ terá dispersado bem mais que $\rho(\mathbf{x}, 0)$. Por exemplo, se $\rho(\mathbf{x}, 0)$ está concentrada em torno de \mathbf{x}_0 e satisfaz a condição de normalização $\int \rho(\mathbf{x}, 0) d^N \mathbf{x} = c$,

obtemos

$$\begin{aligned} \int G(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t) \rho(\mathbf{x}', 0) d^N \mathbf{x}' &\simeq \int G(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t) c \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}_0) d^N \mathbf{x}' \\ &= c G(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0, t). \end{aligned} \quad (4.36)$$

Com o objetivo de considerar outras contribuições que não foram levadas em conta nesse último exemplo, expandimos $G(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t)$ em série de Taylor em torno de $\mathbf{x}' = 0$, isto é,

$$\begin{aligned} G(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t) &= G(\mathbf{x}, t) - \sum_{i_1=1}^N x'_{i_1} \frac{\partial G(\mathbf{x}, t)}{\partial x_{i_1}} + \frac{1}{2} \sum_{i_1, i_2=1}^N x'_{i_1} x'_{i_2} \frac{\partial^2 G(\mathbf{x}, t)}{\partial x_{i_1} \partial x_{i_2}} \\ &+ \dots + \frac{(-1)^n}{n!} \sum_{i_1 \dots i_n=1}^N x'_{i_1} \dots x'_{i_n} \frac{\partial^n G(\mathbf{x}, t)}{\partial x_{i_1} \dots \partial x_{i_n}} + \dots, \end{aligned} \quad (4.37)$$

em que supomos sem perda de generalidade que $\mathbf{x}_0 = 0$. Em geral, devemos truncar essa expansão antes que ocorra divergência. Ao denotarmos por n_G a ordem a partir da qual há divergência, a eq. (4.37) toma a forma

$$G(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t) = \sum_{n=0}^{n_G-1} \frac{(-1)^n}{n!} \sum_{i_1 \dots i_n=1}^N x'_{i_1} \dots x'_{i_n} \frac{\partial^n G(\mathbf{x}, t)}{\partial x_{i_1} \dots \partial x_{i_n}} + R_{n_G}(\mathbf{x}', t), \quad (4.38)$$

em que o resto $R_{n_G}(\mathbf{x}', t)$ tende a zero quando $\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{0}$, por exemplo, na forma diferencial como foi empregado na seção 3.2. Em (4.38) deve ser notado que n é a quantidade de somatórias de 1 a N . Assim, se $n = 0$, deve ser subentendido que não há somatória de 1 a N , e $x'_{i_1} \dots x'_{i_n}$ representa exatamente o número 1. Por meio da expansão (4.38), podemos escrever $\rho(\mathbf{x}, t)$ como

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{x}, t) &= \int G(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t) \rho(\mathbf{x}', 0) d^N \mathbf{x}' \\ &\simeq \int \left[\sum_{n=n^*}^{n_G-1} \frac{(-1)^n}{n!} \sum_{i_1 \dots i_n=1}^N x'_{i_1} \dots x'_{i_n} \frac{\partial^n G(\mathbf{x}, t)}{\partial x_{i_1} \dots \partial x_{i_n}} \right] \rho(\mathbf{x}', 0) d^N \mathbf{x}' \\ &\simeq \sum_{n=n^*}^{n_G-1} \frac{1}{n!} \sum_{i_1, i_2, \dots, i_n=1}^N \left(\int x'_{i_1} \dots x'_{i_n} \rho(\mathbf{x}', 0) d^N \mathbf{x}' \right) \frac{\partial^n G(\mathbf{x}, t)}{\partial x_{i_1} \dots \partial x_{i_n}} \\ &\simeq \sum_{n=n^*}^{n_G-1} \frac{(-1)^n}{n!} \sum_{i_1 \dots i_n=1}^N \langle x'_{i_1} \dots x'_{i_n} \rangle_0 \frac{\partial^n G(\mathbf{x}, t)}{\partial x_{i_1} \dots \partial x_{i_n}}. \end{aligned} \quad (4.39)$$

Deve ser notado que nesse resultado, empregamos n^* para denotar quando o primeiro $\langle x'_{i_1} \dots x'_{i_n} \rangle_0$ é não nulo. Se o primeiro momento divergente for de ordem n_∞ e $n_G > n_\infty$, devemos substituir n_∞ por n_G na série (4.39).

De modo geral, o primeiro termo da expansão anterior será o dominante. Portanto, para um t suficientemente longo, o comportamento espacial e temporal de $\rho(\mathbf{x}, t)$ seguirá aquele da função de Green ou de uma de suas derivadas, ou seja, ditado pelo primeiro termo da série (4.39). Assim, a eq. (4.39) possibilita-nos obter o comportamento assintótico de $\rho(\mathbf{x}, t)$ para uma grande classe de funções de Green e condições iniciais.

4.4 Exemplos - Caso N -dimensional

De modo a tornar claro a aplicabilidade dos desenvolvimentos apresentados na seção anterior, vamos considerar algumas possibilidades para as funções de Green e para as condições iniciais. Nesses exemplos, apesar de falarmos da equação de difusão, as conclusões também valem para a equação de Schrödinger fracionária, já que formalmente basta substituir D por $i\hbar/(2m)$ para passar do primeiro caso para o segundo.

Exemplo 4.3.1

Começaremos com a análise da situação em que o primeiro momento não-nulo e finito é o de ordem $n^* = 0$,

$$\begin{aligned} \langle x_1^0 x_2^0 \cdots \rangle_0 &= \langle 1 \rangle_0 \\ &= \int \rho(\mathbf{x}, 0) d^N \mathbf{x} = c \quad (c \neq 0). \end{aligned} \quad (4.40)$$

Para a função de Green, usaremos (eq. (3.57))

$$G_\mu(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t) = \frac{1}{(Dt)^{N/\mu}} \int e^{-|\mathbf{q}|^\mu + i \frac{\mathbf{q} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')}{(Dt)^{1/\mu}}} \frac{d^N \mathbf{q}}{(2\pi)^N} \quad (4.41)$$

com $0 < \mu \leq 2$. Portanto, essa escolha incorpora inclusive a difusão usual, $\mu = 2$. Assim, a solução assintótica dominante, de acordo com a eqs. (4.39) e (4.40), é

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{x}, t) &= \langle 1 \rangle_0 G(\mathbf{x}, t) \\ &= c G_\mu(\mathbf{x}, t). \end{aligned} \quad (4.42)$$

Quando $|\mathbf{x}| \ll (Dt)^{1/\mu}$, temos, numa primeira aproximação,

$$\begin{aligned} G_\mu(\mathbf{x}, t) &= \frac{1}{(Dt)^{N/\mu}} \int e^{-|\mathbf{q}|^\mu + i \frac{\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}}{(Dt)^{1/\mu}}} \frac{d^N \mathbf{q}}{(2\pi)^N} \\ &\simeq \frac{1}{(Dt)^{N/\mu}} \int e^{-|\mathbf{q}|^\mu} \frac{d^N \mathbf{q}}{(2\pi)^N} \end{aligned} \quad (4.43)$$

em conformidade com a expansão (3.34) com $\sigma = 0$. Visto que a integral acima fica independente de t quando $|\mathbf{x}| \ll (Dt)^{1/\mu}$, obtemos

$$\rho(\mathbf{0}, t) \propto t^{-N/\mu}. \quad (4.44)$$

Em particular, se $\mu = 2$, temos $\rho(\mathbf{x}, t) \propto G_2(\mathbf{x}, t)$ e $\rho(\mathbf{0}, t) \propto t^{-N/2}$. Assim, recaímos na eq. (2.68), na qual foi utilizada uma condição inicial do tipo delta.

Exemplo 4.3.2

A seguir, analisaremos a possibilidade em que o momento de ordem zero é nulo, $\langle 1 \rangle_0 = 0$, porém com $\langle x_i \rangle_0$ finito para todo i , e com pelo menos um deles não nulo. Essa é a situação com $n^* = 1$. Isso ocorre, em particular, para uma condição inicial do tipo

$$\rho(\mathbf{x}, 0) = \frac{x_j}{(b^2 + |\mathbf{x}|^2)^\nu}, \quad (4.45)$$

com $\nu > (2 + N)/2$. Nesse caso,

$$\langle 1 \rangle_0 = \int \frac{x_j}{(b^2 + |\mathbf{x}|^2)^\nu} d^N \mathbf{x} = 0, \quad (4.46)$$

pois o integrando é uma função ímpar na variável x_j . Além disso, por essa mesma razão, temos

$$\langle x_i \rangle_0 = \begin{cases} 0 & \text{se } i \neq j \\ \int \frac{x_j^2}{(b^2 + |\mathbf{x}|^2)^\nu} d^N \mathbf{x} & \text{se } i = j \end{cases}. \quad (4.47)$$

Quando $i = j$, essa integral não depende do valor particular de j e, portanto,

$$\int \frac{x_j^2}{(b^2 + |\mathbf{x}|^2)^\nu} d^N \mathbf{x} = \frac{1}{N} \int \frac{|\mathbf{x}|^2}{(b^2 + |\mathbf{x}|^2)^\nu} d^N \mathbf{x}, \quad (4.48)$$

visto que $|\mathbf{x}|^2 = x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_N^2$. Dado que esse último integrando é simétrico por rotações, vamos usar coordenadas (hiper) esféricas em (4.48), ou seja,

$$\int \frac{x_j^2}{(b^2 + |\mathbf{x}|^2)^\nu} d^N \mathbf{x} = \frac{1}{N} \int_{\Omega_N} \int_0^\infty \frac{|\mathbf{x}|^{2+N-1}}{(b^2 + |\mathbf{x}|^2)^\nu} d|\mathbf{x}| d\Omega_N, \quad (4.49)$$

com $d\Omega_N = [\prod_{j=1}^{N-2} (\sin\theta_j)^{N-(j+1)} d\theta_j] d\theta_{N-1}$. Já que no integrando não há dependência da parte angular, a integração sobre $d\Omega_N$ nos fornece o ângulo sólido em N -dimensões[37] $\Omega_N = (2\pi^{N/2})[\Gamma(N/2)]^{-1}$. Isso posto,

$$\begin{aligned}\langle x_j \rangle_0 &= \int \frac{x_j^2}{(b^2 + |\mathbf{x}|^2)^\nu} d^N \mathbf{x} \\ &= \frac{2\pi^{N/2}}{N\Gamma(N/2)} \int_0^\infty \frac{|\mathbf{x}|^{2+N-1}}{(b^2 + |\mathbf{x}|^2)^\nu} d|\mathbf{x}| \\ &= \pi^{N/2} \frac{\Gamma(\nu - N/2 - 1)}{2\Gamma(\nu)} b^{-2\nu+N+2}\end{aligned}\quad (4.50)$$

quando empregamos a identidade (4.24). De posse desse resultado e das eqs. (4.39) e (3.57), podemos obter a contribuição dominante no regime assintótico:

$$\begin{aligned}\rho(\mathbf{x}, t) &= -\sum_{i=1}^N \langle x_i \rangle_0 \frac{\partial}{\partial x_i} G_\mu(\mathbf{x}, t) \\ &= -\langle x_j \rangle_0 \frac{\partial}{\partial x_j} G_\mu(\mathbf{x}, t) \\ &= -\langle x_j \rangle_0 \frac{1}{(Dt)^{N/\mu}} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \int e^{-|\mathbf{q}|^\mu + i\frac{\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}{(Dt)^{1/\mu}}} \frac{d^N \mathbf{q}}{(2\pi)^N} \right) \\ &= -\frac{i \langle x_j \rangle_0}{(Dt)^{(N+1)/\mu}} \int q_j e^{-|\mathbf{q}|^\mu + i\frac{\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}{(Dt)^{1/\mu}}} \frac{d^N \mathbf{q}}{(2\pi)^N}.\end{aligned}\quad (4.51)$$

Se $\mathbf{x} = \mathbf{0}$, a última integral é nula e, conseqüentemente, $\rho(\mathbf{0}, t) = 0$, pois o integrando é uma função ímpar em q_j . Tal fato pode ser visto também como uma conseqüência de $\partial_{x_i} G_\mu(\mathbf{x}, t) = -\partial_{y_i} G_\mu(\mathbf{y}, t)|_{\mathbf{y}=-\mathbf{x}}$ que, por sua vez, segue de $G_\mu(\mathbf{x}, t) = G_\mu(-\mathbf{x}, t)$ e, portanto, inteiramente compatível com o resultado geral *ii* da seção 4.3. Ademais, se $|\mathbf{x}| \ll |Dt|^{1/\mu}$ com $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$, temos

$$\rho(\mathbf{x}, t) \sim t^{-(N+2)/\mu}, \quad (4.52)$$

pois a contribuição dominante da série (3.64) com $\sigma = 0$ é o segundo termo. Do exposto acima, vemos que o uso da condição inicial

$$\rho(\mathbf{x}, 0) = \sum_{j=1}^N a_j \frac{x_j}{(b^2 + |\mathbf{x}|^2)^\nu} \quad (4.53)$$

em substituição a (4.45), com os a_j 's constantes, conduz a resultados que são combinações lineares dos anteriores. Em particular, o correspondente a (4.51) é

$$\rho(\mathbf{x}, t) = -\sum_{j=1}^N a_j \frac{i \langle x_j \rangle_0}{(Dt)^{(N+1)/\mu}} \int q_j e^{-|\mathbf{q}|^\mu + i\frac{\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}{(Dt)^{1/\mu}}} \frac{d^N \mathbf{q}}{(2\pi)^N}. \quad (4.54)$$

Exemplo 4.3.3

Poderíamos fazer como próximo exemplo, o caso em que a condição inicial fosse da forma

$$\rho(\mathbf{x}, 0) = \frac{x_j^2 + a}{(b^2 + |\mathbf{x}|^2)^\nu}, \quad (4.55)$$

não o faremos aqui, analisaremos um caso mais abrangente, em que essa condição inicial para $\nu > 2 + N/2$ será apenas um caso particular. Assim, em uma situação mais geral a primeira derivada não-nula é a de ordem n^* . Com isso, quando nos restringimos ao comportamento assintótico temporal dominante, podemos escrever, tendo em mente as eqs. (4.39) e (3.64),

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{x}, t) &= \frac{(-1)^{n^*}}{n^*!} \sum_{i_1 \dots i_{n^*}=1}^N \langle x_{i_1} \dots x_{i_{n^*}} \rangle_0 \frac{\partial^{n^*} G(\mathbf{x}, t)}{\partial x_{i_1} \dots \partial x_{i_{n^*}}} \\ &\simeq \frac{(-1)^{n^*}}{(Dt)^{N/\mu} n^*!} \sum_{i_1 \dots i_{n^*}=1}^N \langle x'_{i_1} \dots x'_{i_{n^*}} \rangle_0 \times \\ &\quad \times \frac{\partial^{n^*}}{\partial x_{i_1} \dots \partial x_{i_{n^*}}} \left[b_0^N + \dots + b_n^N \left(\frac{|\mathbf{x}|}{(Dt)^{1/\mu}} \right)^{2n} + \dots \right] \end{aligned} \quad (4.56)$$

Deste resultado somente um termo que está entre colchetes contribui de maneira dominante quando $|\mathbf{x}| \ll (Dt)^{1/\mu}$. De fato se n^* for par e tivermos $n = n^*/2$, os termos anteriores ao proporcional a n serão nulos após todas as derivações. Por sua vez, o n -ésimo termo é proporcional a $t^{-(N+n^*)/\mu}$ também após efetuadas todas as derivações. Analogamente as demais contribuições são subdominantes. Da mesma forma, se n^* for ímpar e tivermos $n = (n^* + 1)/2$, somente o n -ésimo termo contribuirá quando $|\mathbf{x}| \ll (Dt)^{1/\mu}$ e depois de calculada as derivadas ele será proporcional a $t^{-(N+n^*+1)/\mu}$. Entretanto, esse resultado será nulo quando $\mathbf{x} = \mathbf{0}$, pois ele é linear nas componentes \mathbf{x} . Cabe ressaltar que esse fato está em completa concordância com o enunciado (ii) da seção 4.3. Assim, podemos resumir essas observações em

$$\rho(\mathbf{x}, t) \sim \begin{cases} t^{-(N+n^*)/\mu} & \text{para } n^* \text{ par} \\ t^{-(N+n^*+1)/\mu} & \text{para } n^* \text{ ímpar} \end{cases} \quad (4.57)$$

quando $|\mathbf{x}| \ll (Dt)^{1/\mu}$, porém devemos ter $|\mathbf{x}| \neq \mathbf{0}$ se n^* for ímpar.

Consideremos agora uma condição inicial que fornece $\langle x_{i_1} \dots x_{i_n} \rangle_0 = 0$ para $0 \leq n < n^*$ e com algum $\langle x_{i_1} \dots x_{i_{n^*}} \rangle_0$ não nulo. Para esse momento não nulo, temos

$$\langle x_{i_1} x_{i_2} \dots x_{i_{n^*}} \rangle_0 = \langle x_1^{n_1} x_2^{n_2} \dots x_N^{n_N} \rangle_0 \quad (4.58)$$

com $n_1 + n_2 + \dots + n_N = n^*$. Nesse caso, mostraremos que

$$\begin{aligned}\rho(\mathbf{x}, 0) &= e^{-a^2|\mathbf{x}|^2} H_{n_1}(ax_1)H_{n_2}(ax_2)\cdots H_{n_N}(ax_N) \\ &= e^{-a^2x_1^2} H_{n_1}(ax_1)\cdots e^{-a^2x_N^2} H_{n_N}(ax_N),\end{aligned}\quad (4.59)$$

conduz a $\langle x_1^{n_1}x_2^{n_2}\cdots x_N^{n_N}\rangle_0$ não nulo e os demais momentos de ordem menor que n^* a valores nulos. Aqui H_{n_i} é o polinômio de Hermite de ordem n_i e a é uma constante com dimensão de inverso de distância. Visto que esse $\rho(\mathbf{x}, 0)$ é da forma de um produto, segue para um momento genérico que

$$\begin{aligned}\langle x_{i_1}x_{i_2}\cdots x_{i_n}\rangle_0 &= \int x_{i_1}x_{i_2}\cdots x_{i_n}\rho(\mathbf{x}, 0)d^N\mathbf{x} \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a^2x_1^2} H_{n_1}(x_1)x_1^{\tilde{n}_1}dx_1\cdots \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a^2x_N^2} H_{n_N}(x_N)x_N^{\tilde{n}_N}dx_N.\end{aligned}\quad (4.60)$$

Por sua vez, cada uma dessas integrais unidimensionais, corresponde ao caso tratado no exemplo 4.2.5 (veja especialmente a eq. (4.32)). Fica claro a partir desse exemplo que se pelo menos uma das potências de $\tilde{n}_1, \dots, \tilde{n}_N$ for, respectivamente, menor que n_1, \dots, n_N , obteremos $\langle x_{i_1}x_{i_2}\cdots x_{i_n}\rangle_0 = 0$. Por outro lado, se forem respectivamente iguais, (4.60) não é nulo e $n = n^*$.

Capítulo 5

Comportamento Assintótico II

Numa primeira etapa, via transformada de Fourier, apresentamos neste capítulo um procedimento alternativo para obter a expressão assintótica de $\rho(x, t)$ encontrada no capítulo anterior. A seguir, com esse novo procedimento, tratamos situações mais gerais que o anterior, isto é, aquelas cujos comportamentos de cauda das condições iniciais são longos o suficiente para que várias integrais de potências das coordenadas diverjam. Essas discussões são inicialmente feitas no caso unidimensional e depois na vertente N -dimensional. Como tem sido uma característica deste trabalho, apresentamos exemplos para ilustrar os resultados gerais obtidos.

5.1 Caso Unidimensional com Cauda Curta

Para obtermos um procedimento alternativo ao que leva à expansão assintótica (4.8),

$$\rho(x, t) \simeq \sum_{n=n^*}^{n_\infty-1} \frac{(-1)^n}{n!} \langle (x')^n \rangle_0 \frac{\partial^n}{\partial x^n} G(x, t), \quad (5.1)$$

vamos empregar transformada de Fourier para investigar o comportamento de $\rho(x, t)$. Para tal, usemos

$$\rho(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} G(x - x', t) \rho(x', 0) dx', \quad (5.2)$$

com

$$\begin{aligned} G(x - x', t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{G}(k, t) e^{ik(x-x')} \frac{dk}{2\pi} \\ \rho(x', 0) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\rho}(k', 0) e^{ik'x'} \frac{dk'}{2\pi}. \end{aligned} \quad (5.3)$$

Ao substituirmos estas duas últimas equações na eq. (5.2), obtemos

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{G}(k, t) e^{ik(x-x')} \frac{dk}{2\pi} \right) \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\rho}(k', 0) e^{ik'x'} \frac{dk'}{2\pi} \right) dx' \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk'}{2\pi} \tilde{G}(k, t) \tilde{\rho}(k', 0) e^{ikx} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(k'-k)x'} dx' \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk' \delta(k' - k) \tilde{G}(k, t) \tilde{\rho}(k', 0) e^{ikx} \end{aligned} \quad (5.4)$$

quando invertemos a ordem de algumas integrações e empregamos que

$$\delta(k' - k) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(k'-k)x'} \frac{dx'}{2\pi}. \quad (5.5)$$

Portanto, a eq. (5.4) conduz à forma a partir da qual desenvolveremos nossas discussões futuras (teorema da convolução [34]):

$$\rho(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{G}(k, t) \tilde{\rho}(k, 0) e^{ikx} \frac{dk}{2\pi}. \quad (5.6)$$

Como deve estar claro, a nossa investigação sobre comportamento assintótico visa com especial atenção as situações difusivas. Como já vimos no cap. 3, uma ilustração dessa situação é dada pela equação

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) = D \frac{\partial^\mu \rho}{\partial |x|^\mu} \quad (5.7)$$

com $0 < \mu \leq 2$. Assim, se $\mu = 2$, temos a difusão usual e a equação de Schrödinger para partícula livre, desde que nesta última vertente $D = i\hbar/2m$. Nesses exemplos, sabemos que o espalhamento (alargamento) de $\rho(x, t)$ aumenta com o decorrer do tempo. Espalhamento esse diretamente associado com o alargamento do propagador $G(x - x', t)$ com t .

De uma maneira geral, uma função e sua transformada de Fourier tem comportamentos opostos quanto ao padrão de localização. Fato que fica claro quando consideramos um exemplo específico tal como $f(x) = \exp(-x^2/(2a^2))$ e $\tilde{f}(k) = \sqrt{2\pi}a \exp(-k^2/(2a^{-2}))$, pois para $f(x)$ temos $\Delta x \sim$

a como uma largura típica e para $\tilde{f}(k)$ vê-se que $\Delta k \sim 1/a$ é uma correspondente medida de largura. Desse exemplo, vemos imediatamente que

$$\Delta x \Delta k \sim 1, \quad (5.8)$$

cuja validade ocorre para uma ampla classe de funções. Esse padrão oposto de localização é uma relação de incerteza entre as larguras de uma função e sua transformada de Fourier[6].

Essa propriedade de incerteza, quando aplicada para o par $G(x - x', t)$ e $\tilde{G}(k, t)$, mostra que a transformada de Fourier $\tilde{G}(k, t)$ torna-se progressivamente mais localizada com o aumento de t , em contraste com o alargamento de $G(x - x', t)$ para t grande. Devido a este fato, nossa análise sobre o comportamento assintótico de $\rho(x, t)$, baseada na eq. (5.6), focará sobre a vizinhança de $k = 0$. Portanto, reteremos unicamente a contribuição principal de $\tilde{\rho}(k, 0)e^{ikx}$ para $|k|$ pequeno. Porém, quando $|x|$ for grande, e^{ikx} pode ser altamente oscilatório. Por isso, precisamos conservar a forma completa de e^{ikx} de maneira a preservar o comportamento assintótico espacial de $\rho(x, t)$. Por outro lado, é comum que a condição inicial $\tilde{\rho}(k, 0)$ seja suave (não altamente oscilante) para $|k|$ pequeno. Nesse sentido, podemos invocar uma aproximação para $\tilde{\rho}(k, 0)$ útil para $|k|$ pequeno.

Para entender melhor essas duas últimas afirmações, notemos primeiramente que

$$\begin{aligned} \langle x^n \rangle_0 &= \int_{-\infty}^{+\infty} x^n \rho(x, 0) dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(i^n \frac{d^n}{dk^n} e^{-ikx} \Big|_{k=0} \right) \rho(x, 0) dx \\ &= i^n \frac{d^n}{dk^n} \tilde{\rho}(k, 0) \Big|_{k=0}. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Com essa notação, se $\rho(x, 0)$ for normalizável, $\tilde{\rho}(0, 0) = \langle x^0 \rangle_0 \neq 0$, podemos empregar inicialmente a aproximação $\tilde{\rho}(k, 0) \simeq \tilde{\rho}(0, 0)$ e, portanto, a eq. (5.6) resume-se a

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &\simeq \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{G}(k, t) \tilde{\rho}(0, 0) e^{ikx} dk \\ &= \langle x^0 \rangle_0 \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{G}(k, t) e^{ikx} \frac{dk}{2\pi} \\ &= \langle x^0 \rangle_0 G(x, t). \end{aligned} \quad (5.10)$$

Ao compararmos essa aproximação com a eq. (5.1), vemos que ela corresponde ao seu primeiro termo quando $n^* = 0$.

Incorporar correções à eq. (5.10) não é trabalhoso, mesmo quando o primeiro momento não-nulo e finito é mais alto que o de ordem zero. De fato, em substituição a aproximação $\tilde{\rho}(k, 0) \simeq \tilde{\rho}(0, 0)$, podemos empregar a expansão $\tilde{\rho}(k, 0)$ em série de Taylor em torno de $k = 0$, isto é,

$$\tilde{\rho}(k, 0) \simeq \sum_{n=0}^{n_\infty-1} \frac{k^n}{n!} \left. \frac{d^n}{dk^n} \tilde{\rho}(k, 0) \right|_{k=0}. \quad (5.11)$$

Essa expansão é consistente com a possibilidade do momento de n_∞ -ordem de $\rho(x, t)$ ser divergente, pois nesse caso a derivada de n_∞ -ésima ordem da transformada de Fourier $\tilde{\rho}(k, 0)$ não existe. Além disso, se os momentos até a ordem n^* forem nulos, a expansão (5.11) assume a forma

$$\tilde{\rho}(k, 0) \simeq \sum_{n=n^*}^{n_\infty-1} \frac{k^n}{n!} \left. \frac{d^n}{dk^n} \tilde{\rho}(k, 0) \right|_{k=0}. \quad (5.12)$$

A substituição da eq. (5.12) na eq. (5.6), e com o uso da eq. (5.9), permitenos reobter o resultado (5.1), pois

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &\simeq \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{G}(k, t) \left(\sum_{n=n^*}^{n_\infty-1} \frac{k^n}{n!} \left. \frac{d^n}{dk^n} \tilde{\rho}(k, 0) \right|_{k=0} \right) e^{ikx} \frac{dk}{2\pi} \\ &= \sum_{n=n^*}^{n_\infty-1} \frac{1}{n!} \left. \frac{d^n}{dk^n} \tilde{\rho}(k, 0) \right|_{k=0} \int_{-\infty}^{+\infty} k^n \tilde{G}(k, t) e^{ikx} \frac{dk}{2\pi} \\ &= \sum_{n=n^*}^{n_\infty-1} \frac{(-1)^n}{n!} \langle (x')^n \rangle_0 \frac{\partial^n}{\partial x^n} G(x, t), \end{aligned} \quad (5.13)$$

visto que

$$\frac{\partial^n}{\partial x^n} G(x, t) = i^n \int_{-\infty}^{+\infty} k^n \tilde{G}(k, t) e^{ikx} \frac{dk}{2\pi}. \quad (5.14)$$

Acabamos de verificar como a eq. (5.1) é obtida via transformada de Fourier. Esse resultado corresponde a situações nas quais a condição inicial $\rho(x, 0)$ é de cauda suficientemente curta para garantir a finitude dos momentos. Por exemplo, se $\rho(x, 0)$ pode ser normalizável ($\langle x^0 \rangle_0$ não nulo e finito) e tem um comportamento de cauda do tipo $|x|^{-\sigma}$, vemos que $\sigma > 1$. Por outro lado, cabe a seguinte pergunta: O que ocorre em casos com $\sigma \leq 1$? Essas situações correspondem ao que chamaremos de caudas longas e que será o próximo tema de investigação.

5.2 Caso Unidimensional com Cauda Longa

Vamos analisar a seguir situações com cauda longa, isto é, aquelas cujo primeiro momento não-nulo é divergente, ou seja, esta classe inclui condições iniciais não normalizáveis. Em particular, tais casos podem ocorrer no contexto da mecânica quântica mesmo quando as funções são de quadrado integrável,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi|^2 dx < \infty . \quad (5.15)$$

Por exemplo, se $\Psi(x) \sim |x|^{-\sigma}$, então $\sigma > 1/2$. Assim, essa condição e a divergência de $\langle x^0 \rangle_0$ conduzem a $1/2 < \sigma \leq 1$. Por outro lado, para a difusão, devemos ter $\langle x^0 \rangle_0$ finito, para garantir a quantidade finita do que está difundindo, contudo vamos formalmente considerar a possibilidade de $\langle x \rangle_0$ divergir.

Se o primeiro momento não-nulo for divergente, logo uma expansão como a usada na eq. (5.13) não existe. Em tais casos, precisamos considerar as eqs. (5.2) ou (5.6) diretamente. Nesse sentido, ao analisarmos casos de cauda longa, basearemos nossa análise nas transformadas de Fourier de $\rho(x', 0)$ e $G(x - x', t)$, ou seja, partiremos da eq. (5.6).

Como vimos no caso de cauda curta, por exemplo na eq. (5.12), o termo dominante para $\tilde{\rho}(k, 0)$ é proporcional a k^{n^*} , em que n^* é um inteiro não nulo. Motivado por esta proporcionalidade e de maneira a tratar de condições iniciais com cauda longa, dirigiremos primeiramente nossa discussão a situações assintóticas pares tal que $\tilde{\rho}(k, 0) \simeq A|k|^\sigma$ com A constante e $\sigma < 0$. Esse caso corresponde à condição inicial par $\rho(x, 0) \sim |x|^{-(1+\sigma)}$ para $|x|$ grande, pois na integral[26]

$$\rho(x, t) \sim \int |k|^\sigma e^{ikx} dk \quad (5.16)$$

temos $k \sim 1/x$ do ponto de vista dimensional.

Pela substituição da aproximação em questão para $\tilde{\rho}(k, 0)$ na eq. (5.6), obtemos

$$\rho(x, t) \simeq \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{G}(k, t) A |k|^\sigma e^{ikx} \frac{dk}{2\pi} . \quad (5.17)$$

Por sua vez, a partir do uso da eq. (3.15) para $G(x, t)$,

$$\mathcal{F} \left\{ \frac{\partial^\sigma}{\partial |x|^\sigma} G(x, t) \right\} = -|k|^\sigma \tilde{G}(k, t) , \quad (5.18)$$

verificamos que

$$\begin{aligned}\rho(x, t) &\simeq -A \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{F} \left\{ \frac{\partial^\sigma}{\partial |x|^\sigma} G(x, t) \right\} e^{ikx} \frac{dk}{2\pi} \\ &= -A \frac{\partial^\sigma}{\partial |x|^\sigma} G(x, t) .\end{aligned}\tag{5.19}$$

Uma outra situação assintótica diretamente ligada a $\tilde{\rho}(k, t) \simeq Ak^{n^*}$ é $\tilde{\rho}(k, 0) \simeq A'|k|^{\sigma-1}k$. Essa nova possibilidade corresponde a condições iniciais ímpares, em contraste com a par que acabamos de investigar, $\tilde{\rho}(k, 0) \simeq A|k|^\sigma$. Nessa situação, em analogia com o caso anterior, temos $\rho(x, 0) \sim x|x|^{-(2+\sigma)}$ para $|x|$ grande. Além disso, com o uso da eq. (5.6), chegamos a

$$\begin{aligned}\rho(x, t) &\simeq \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{G}(k, t) A' |k|^{\sigma-1} k e^{ikx} \frac{dk}{2\pi} \\ &= -iA' \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{G}(k, t) |k|^{\sigma-1} \left(\frac{\partial}{\partial x} e^{ikx} \right) \frac{dk}{2\pi} \\ &= -iA' \frac{\partial}{\partial x} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{G}(k, t) |k|^{\sigma-1} e^{ikx} \frac{dk}{2\pi} \\ &= iA' \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial^{\sigma-1}}{\partial |x|^{\sigma-1}} G(x, t) .\end{aligned}\tag{5.20}$$

Quando discutíamos na seção anterior o caso de condição inicial de cauda curta e tínhamos a expansão dada pela eq. (5.1), tínhamos o seguinte cenário: o termo dominante era aquele que correspondia à derivada de menor ordem da função de Green, ou seja, o associado ao primeiro termo não nulo da expansão. Observemos, também que este cenário permanece imutável quando derivadas fracionárias são envolvidas, a exemplo das eqs. (5.19) e (5.20). Então, no geral, para ambos os casos, cauda curta ou longa, o comportamento assintótico é regido por uma derivada de $G(x, t)$, em que ela pode ser inteira ou de ordem fracionária. Em particular, como uma consequência dos comportamentos assintóticos discutidos nesta seção, mesmo que a equação original não contenha derivada fracionária, elas podem surgir naturalmente quando exploramos as possibilidades de condições iniciais de cauda longa.

Antes de concluirmos esta seção, observemos ainda que correções logarítmicas da forma $\tilde{\rho}(k, 0) = A|k|^\sigma \ln|k|$ ou $\tilde{\rho}(k, 0) = A'|k|^{\sigma-1}k \ln|k|$ podem ocorrer como situações marginais dos dois casos anteriores. Investigaremos essas duas possibilidades nos dois últimos exemplos da próxima seção.

5.3 Exemplos - Caso Unidimensional

Com o intuito de esclarecer de um modo mais específico o que foi apresentado na seção anterior, vamos fazer algumas aplicações para casos com o primeiro momento não nulo divergente. Nos exemplos desta seção, referimos apenas a difusão anômala, mas a extensão para a equação de Schrödinger fracionária é direta, pois basta empregar $D = i\hbar/(2m)$.

Exemplo 5.3.1

Consideremos a condição inicial

$$\rho(x, 0) \propto \frac{1}{(b^2 + x^2)^\nu} \quad (5.21)$$

com $0 < \nu < 1/2$. Para $|x| \gg b$, vemos que, $\rho(x, t) \simeq |x|^{-(1+\sigma)}$ com $\sigma = 2\nu - 1$ e, portanto, $\tilde{\rho}(k, 0) \propto |k|^\sigma$. Aqui, empregamos $\nu > 0$ para que a condição inicial represente uma função com localização mais acentuada em torno de $x = 0$. Quanto a escolha $\nu < 1/2$ foi feita de modo que $\rho(x, 0)$ não seja normalizável, isto é, seu momento de ordem zero é divergente. De fato, se $\nu < 1/2$,

$$\begin{aligned} \langle x^0 \rangle_0 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x, 0) dx \\ &\sim \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \int_a^\Lambda x^{-2\nu} dx \\ &= \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \frac{x^{1-2\nu}}{1-2\nu} \Big|_a^\Lambda = \infty, \end{aligned} \quad (5.22)$$

em que a é um número positivo finito. Neste exemplo, com o uso da eq. (5.19), de $G_\mu^D(x, t)$ apresentado na eq. (3.9) e da eq. (3.34), verificamos que

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &\propto \frac{\partial^\sigma}{\partial |x|^\sigma} G_\mu(x, t) \\ &\propto Q_{\mu\sigma}(x, t). \end{aligned} \quad (5.23)$$

Portanto, a eq. (5.23) e o termo dominante da série (3.34) conduzem a

$$\rho(x, t) \simeq t^{-(\sigma+1)/\mu}, \quad (5.24)$$

ou seja, $\rho(x, t) \simeq t^{-2\nu/\mu}$ quando $|x| \ll |Dt|^{1/\mu}$. Deve ser notado que o caso $\nu = 1/2$ também conduz a divergência de $\langle x^0 \rangle_0$, porém esta situação será discutida num próximo exemplo.

Exemplo 5.3.2

Examinemos a condição inicial

$$\rho(x, 0) \propto \frac{x}{(b^2 + x^2)^\nu} \quad (5.25)$$

com $1/2 < \nu < 3/2$. A condição $\nu > 1/2$ garante que $\rho(x, 0)$ tenda a zero quando $|x| \rightarrow \infty$, pois nesse limite $|\rho(x, 0)| \simeq |x|^{1-2\nu}$. Além disso, $\tilde{\rho}(k, 0) \sim k|k|^{\sigma-1}$ com $\sigma = 2\nu - 2$ para $|k|$ pequeno. Por outro lado, a condição inicial em questão proporciona o momento de ordem zero,

$$\begin{aligned} \langle x^0 \rangle_0 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{x}{(b^2 + x^2)^\nu} dx \\ &\simeq x^{2-2\nu} \Big|_{-\infty}^{+\infty}, \end{aligned} \quad (5.26)$$

nulo quando $\nu > 1$ e divergente se $\nu < 1$. Também o momento de ordem um,

$$\begin{aligned} \langle x^1 \rangle_0 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{x^2}{(b^2 + x^2)^\nu} dx \\ &\simeq x^{3-2\nu} \Big|_{-\infty}^{+\infty}, \end{aligned} \quad (5.27)$$

pode ser divergente ou não. De fato, essa integral será divergente para $\nu < 3/2$ e convergirá para $\nu > 3/2$.

O uso da eq. (5.20), a função de Green dada pela eq. (3.25) e da eq. (3.9), nos conduz a

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &\propto \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial^{\sigma-1}}{\partial |x|^{\sigma-1}} G_\mu(x, t) \\ &\propto \frac{\partial}{\partial x} Q_{\mu(\sigma-1)}(x, t). \end{aligned} \quad (5.28)$$

Por sua vez, ao empregarmos a série (3.34), o resultado anterior torna-se

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &\propto \frac{\partial}{\partial x} \left[b_{0(\sigma-1)} + \frac{b_{1(\sigma-1)}}{(Dt)^{\sigma/\mu}} \left(\frac{x}{(Dt)^{1/\mu}} \right)^2 + \dots \right] \\ &\propto x t^{-(\sigma+2)/\mu} \end{aligned} \quad (5.29)$$

quando $|x| \ll (Dt)^{1/\mu}$. Nesse limite,

$$\rho(x, t) \propto t^{-2\nu/\mu}, \quad (5.30)$$

porém com $x \neq 0$. Notemos que esses fatos são inteiramente compatíveis com o resultado geral i da seção 4.3.

Exemplo 5.3.3

Neste exemplo, investigamos, o comportamento de $\rho(x, t)$ quando a condição inicial é da forma

$$\rho(x, 0) = \frac{1}{(b^2 + x^2)^{1/2}} \quad (5.31)$$

com $b > 0$. O momento de ordem zero dessa condição inicial é dado por

$$\begin{aligned} \langle x^0 \rangle_0 &= \lim_{\Lambda_1 \rightarrow \infty} \lim_{\Lambda_2 \rightarrow \infty} \int_{-\Lambda_1}^{+\Lambda_2} x^0 \rho(x, 0) dx \\ &= \lim_{\Lambda_1 \rightarrow \infty} \lim_{\Lambda_2 \rightarrow \infty} \int_{-\Lambda_1}^{+\Lambda_2} \frac{dx}{(b^2 + x^2)^{1/2}} \\ &\simeq \lim_{\Lambda_1 \rightarrow \infty} \lim_{\Lambda_2 \rightarrow \infty} \ln |x| \Big|_{-\Lambda_1}^{+\Lambda_2}. \end{aligned} \quad (5.32)$$

Portanto, temos que a integral do momento de ordem zero não tem um limite definido, devido ao logaritmo em (5.32).

Para a transformada de Fourier de $\rho(x, t)$ em $t = 0$, chegamos a (ref. [42], pág. 419, fórmula 3.754-2)

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(k, 0) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-ikx}}{(b^2 + x^2)^{1/2}} dx \\ &= 2 \int_0^{+\infty} \frac{\cos(kx)}{(b^2 + x^2)^{1/2}} dx \\ &= 2 K_0(bk) \end{aligned} \quad (5.33)$$

em que K_0 é a função de Bessel modificada de segunda espécie de ordem zero. Se realizarmos uma expansão em série desse $\tilde{\rho}(k, 0)$ e preservarmos apenas os termos até primeira ordem, obteremos como resultado

$$\tilde{\rho}(k, 0) \simeq -2 \left(\gamma + \ln \left| \frac{kb}{2} \right| \right), \quad (5.34)$$

em que $\gamma = 0.5772156\dots$ é a constante de Euler e (ref.[41], pág. 375, fórmula 9.6.13)

$$K_0(z) = - \left[\ln \left(\frac{z}{2} \right) + \gamma \right] I_0(z) + \frac{z^2/4}{(1!)^2} + \left(1 + \frac{1}{2} \right) \frac{(z^2/4)^2}{(2!)^2} + \dots \quad (5.35)$$

com

$$I_0(z) = 1 + \frac{z^2/4}{(1!)^2} + \frac{(z^2/4)^2}{(2!)^2} + \dots \quad (5.36)$$

Ao usarmos a eq. (5.34) na eq. (5.6), somos conduzidos a

$$\rho(x, t) \simeq -2 \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{G}(k, t) \left(\gamma + \ln \left| \frac{kb}{2} \right| \right) e^{ikx} \frac{dk}{2\pi}. \quad (5.37)$$

Empreguemos a transformada de Fourier da função de Green (eq. (3.39)) na eq. (5.37). Dessa forma,

$$\rho(x, t) \simeq -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-Dt|k|^\mu} \left(\gamma + \ln \left| \frac{kb}{2} \right| \right) e^{ikx} dk. \quad (5.38)$$

Quando introduzimos em (5.38) a variável $q = (Dt)^{1/\mu}k$, somos remetidos a

$$\rho(x, t) \simeq -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-|q|^\mu + i \frac{xq}{(Dt)^{1/\mu}}} \left(\gamma + \ln \left| \frac{q b}{2(Dt)^{1/\mu}} \right| \right) \frac{dq}{(Dt)^{1/\mu}}. \quad (5.39)$$

Vamos separar essa integral em duas partes, isto é,

$$\begin{aligned} \rho(x, t) \simeq & \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-|q|^\mu + i \frac{xq}{(Dt)^{1/\mu}}} \ln(Dt)^{1/\mu} \frac{dq}{(Dt)^{1/\mu}} + \\ & - \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-|q|^\mu + i \frac{xq}{(Dt)^{1/\mu}}} \left(\gamma + \ln \left| \frac{q b}{2} \right| \right) \frac{dq}{(Dt)^{1/\mu}}. \end{aligned} \quad (5.40)$$

No lado direito de (5.40), a primeira integral será muito maior do que a segunda para tempos longos. Nesse caso, o comportamento assintótico para $\rho(x, t)$ é dado por $\rho(x, t) \sim t^{-1/\mu} \ln(t)$ quando $|x| \ll (Dt)^{-1/\mu}$, pois na ausência do termo logarítmico em (5.34), teríamos simplesmente $\rho(x, t) \sim t^{-1/\mu}$. Visto que em muitos casos uma contribuição puramente logarítmica pode ser comparável com termos constantes, a melhor maneira de expressar (5.40), quando $|x| \ll (Dt)^{-1/\mu}$, é

$$\rho(x, t) \simeq A t^{-1/\mu} (\ln(t) + B), \quad (5.41)$$

com

$$\begin{aligned} A &= \frac{1}{\pi D^{1/\mu}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-|q|^\mu} dq \\ B &= \frac{1}{\pi D^{1/\mu} A} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-|q|^\mu} \left(\ln(D) - \gamma - \ln \left| \frac{q b}{2} \right| \right) dq. \end{aligned} \quad (5.42)$$

Antes de concluirmos este exemplo, notemos que outra maneira de obtermos a eq. (5.34) seria partirmos da eq. (5.33) via a aproximação

$$\tilde{\rho}(k, 0) \simeq \int_0^a \frac{\cos(kx)}{(b^2 + x^2)^{1/2}} dx + \int_a^{+\infty} \frac{\cos(kx)}{x} dx \quad (5.43)$$

em que $a \gg b$. Para $|k| \ll 1$, a primeira integral é finita. Por sua vez, a segunda não diverge para $|k| \rightarrow 0$ e pode ser escrita em termos da função cosseno integral (ref.[41], pág. 232, fórmula 5.2.27)

$$\text{Ci}(z) = - \int_z^{+\infty} \frac{\cos(u)}{u} du \quad (5.44)$$

ao usarmos $u = kx$, isto é,

$$\int_a^{+\infty} \frac{\cos(kx)}{x} dx = - \text{Ci}(ka). \quad (5.45)$$

Assim, quando empregarmos a expansão (ref.[41], pág. 232, fórmula 5.2.16)

$$\text{Ci}(z) = (\gamma + \ln(z)) - \frac{z^2}{4} + \dots \quad (5.46)$$

que é válida para $|z| \ll 1$, a eq. (5.43) assume a forma

$$\tilde{\rho}(k, 0) \simeq A' + B' \ln(k) \quad (5.47)$$

em que A' e B' são constantes. Portanto, reobtivemos a estrutura da eq. (5.33).

Exemplo 5.3.4

Façamos a seguir o caso cuja condição inicial é

$$\rho(x, 0) = \frac{x}{(b^2 + x^2)^{3/2}} \quad (5.48)$$

com $b > 0$. Para essa função, temos que o momento de ordem zero é dado por

$$\begin{aligned} \langle x^0 \rangle_0 &= \lim_{\Lambda_1 \rightarrow \infty} \lim_{\Lambda_2 \rightarrow \infty} \int_{-\Lambda_1}^{+\Lambda_2} \frac{x}{(b^2 + x^2)^{3/2}} dx \\ &= 0, \end{aligned} \quad (5.49)$$

pois o integrando é ímpar e tende suficientemente rápido a zero quando $|x| \rightarrow \infty$. Seguiremos com o cálculo do momento de ordem um para a condição inicial em questão:

$$\begin{aligned} \langle x^1 \rangle_0 &= \lim_{\Lambda_1 \rightarrow \infty} \lim_{\Lambda_2 \rightarrow \infty} \int_{-\Lambda_1}^{+\Lambda_2} \frac{x^2}{(b^2 + x^2)^{3/2}} dx \\ &\simeq \lim_{\Lambda_1 \rightarrow \infty} \lim_{\Lambda_2 \rightarrow \infty} \ln|x| \Big|_{-\Lambda_1}^{+\Lambda_2}. \end{aligned} \quad (5.50)$$

Aqui o momento de ordem um, como no exemplo anterior para o momento de ordem zero, recai numa situação em que não há um limite definido quando $\Lambda_1 \rightarrow \infty$ e $\Lambda_2 \rightarrow \infty$.

Quanto a transformada de Fourier para a condição inicial, verificamos que

$$\begin{aligned}
\tilde{\rho}(k, 0) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{x}{(b^2 + x^2)^{3/2}} e^{-ikx} dx \\
&= - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{(b^2 + x^2)^{1/2}} \right) e^{-ikx} dx \\
&= ik \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-ikx}}{(b^2 + x^2)^{1/2}} dx \\
&= 2ik K_0(|bk|).
\end{aligned} \tag{5.51}$$

A terceira igualdade obtivemos via uma integração por partes e a quarta igualdade empregamos a eq. (5.33). O que fizemos aqui foi basicamente usar a relação geral entre a transformada de Fourier de uma função e sua derivada[35]: $\mathcal{F}\{df(x)/dx\} = ik \mathcal{F}\{f(x)\}$. Além disso, notamos que

$$\begin{aligned}
\rho(x, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{G}(k, t) (ik) \tilde{\rho}_0(k, 0) e^{ikx} \frac{dk}{2\pi} \\
&= \frac{\partial}{\partial x} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{G}(k, t) \tilde{\rho}_0(k, 0) e^{ikx} \frac{dk}{2\pi} \\
&= \frac{\partial}{\partial x} \rho_0(x, t),
\end{aligned} \tag{5.52}$$

com

$$\rho_0(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{G}(k, t) \tilde{\rho}_0(k, 0) e^{ikx} \frac{dk}{2\pi}. \tag{5.53}$$

Esse resultado mostra que se uma condição inicial for a derivada de outra, esta relação será preservada em qualquer instante.

Assim, quando levamos em conta este fato aplicado ao exemplo anterior e, em particular, a observação imediatamente após a eq. (5.42), verificamos que

$$\rho(x, t) \simeq C x t^{-3/\mu} (\ln(t) + E), \tag{5.54}$$

em que C e E são constantes. Portanto,

$$\rho(x, t) \sim t^{-3/\mu} (\ln(t) + cte) \tag{5.55}$$

quando consideramos o regime de t longo e $0 < |x| \ll (Dt)^{1/\mu}$.

5.4 Caso N -dimensional com Cauda Curta

Vamos mostrar, no decorrer desta seção, como a expansão assintótica (4.39),

$$\rho(\mathbf{x}, t) \simeq \sum_{n=n^*}^{n_G-1} \frac{(-1)^n}{n!} \sum_{i_1 \dots i_n=1}^N \langle x'_{i_1} \dots x'_{i_n} \rangle_0 \frac{\partial^n G(\mathbf{x}, t)}{\partial x_{i_1} \dots \partial x_{i_n}}, \quad (5.56)$$

pode ser obtida ao empregarmos transformada de Fourier. Nesse sentido, usaremos

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \int G(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t) \rho(\mathbf{x}', 0) d^N \mathbf{x}', \quad (5.57)$$

com

$$G(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t) = \int \tilde{G}(\mathbf{k}, t) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \frac{d^N \mathbf{k}}{(2\pi)^N} \quad (5.58)$$

$$\rho(\mathbf{x}', 0) = \int \tilde{\rho}(\mathbf{k}', 0) e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{x}'} \frac{d^N \mathbf{k}'}{(2\pi)^N}. \quad (5.59)$$

Portanto, ao substituírmos as eqs. (5.58) e (5.59) na eq. (5.57), chegamos a

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{x}, t) &= \int \left(\int \tilde{G}(\mathbf{k}, t) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')} \frac{d^N \mathbf{k}}{(2\pi)^N} \right) \left(\int \tilde{\rho}(\mathbf{k}', 0) e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{x}'} \frac{d^N \mathbf{k}'}{(2\pi)^N} \right) d^N \mathbf{x}' \\ &= \int \frac{d^N \mathbf{k}}{(2\pi)^N} \int \frac{d^N \mathbf{k}'}{(2\pi)^N} \tilde{G}(\mathbf{k}, t) \tilde{\rho}(\mathbf{k}', 0) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \int e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{x}'} d^N \mathbf{x}' \\ &= \int \frac{d^N \mathbf{k}}{(2\pi)^N} \int d^N \mathbf{k}' \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \tilde{G}(\mathbf{k}, t) \tilde{\rho}(\mathbf{k}', 0) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \end{aligned} \quad (5.60)$$

quando invertemos convenientemente a ordem de integrações e empregamos que

$$\delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) = \int e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{x}'} \frac{d^N \mathbf{x}'}{(2\pi)^N}. \quad (5.61)$$

Dessa maneira, a eq. (5.60) conduz a (teorema da convolução [34])

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \int \tilde{G}(\mathbf{k}, t) \tilde{\rho}(\mathbf{k}, 0) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \frac{d^N \mathbf{k}}{(2\pi)^N}, \quad (5.62)$$

expressão a partir da qual desenvolveremos as discussões a seguir.

A exemplo da vertente unidimensional no caso do tipo difusivo, a transformada de Fourier $\tilde{G}(\mathbf{k}, t)$ torna-se progressivamente mais localizada com o aumento de t , em contraste com o alargamento de $G(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t)$ para t grande. Ao considerando esse fato, nossa análise sobre o comportamento

assintótico de $\rho(\mathbf{x}, t)$, baseada na eq. (5.62), focará a vizinhança de $\mathbf{k} = 0$. Com isso, reteremos unicamente a contribuição principal de $\tilde{\rho}(\mathbf{k}, 0)e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$ para $|\mathbf{k}|$ pequeno. No entanto, quando $|\mathbf{x}|$ for grande, $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$ poderá ser altamente oscilatório. Por isso, conservaremos a forma completa de $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$ de maneira a preservar o comportamento assintótico espacial de $\rho(\mathbf{x}, t)$. Podemos ter ainda que a condição inicial $\tilde{\rho}(\mathbf{k}, 0)$ seja suave (não altamente oscilante) para $|\mathbf{k}|$ pequeno. Nesse sentido, é conveniente invocarmos uma aproximação para $\tilde{\rho}(\mathbf{k}, 0)$ útil para $|\mathbf{k}|$ pequeno.

Para implementarmos essas últimas afirmações num esquema de cálculo, observemos primeiramente que

$$x_{i_1} x_{i_2} \cdots x_{i_n} = i^n \left. \frac{\partial^n e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}}{\partial k_{i_1} \partial k_{i_2} \cdots \partial k_{i_n}} \right|_{\mathbf{k}=\mathbf{0}} \quad (5.63)$$

e, portanto,

$$\begin{aligned} \langle x_{i_1} x_{i_2} \cdots x_{i_n} \rangle_0 &= \int x_{i_1} x_{i_2} \cdots x_{i_n} \rho(\mathbf{x}, 0) d^N \mathbf{x} \\ &= \int \left(i^n \left. \frac{\partial^n e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}}{\partial k_{i_1} \partial k_{i_2} \cdots \partial k_{i_n}} \right|_{\mathbf{k}=\mathbf{0}} \right) \rho(\mathbf{x}, 0) d^N \mathbf{x} \\ &= i^n \left. \frac{\partial^n}{\partial k_{i_1} \partial k_{i_2} \cdots \partial k_{i_n}} \int \rho(\mathbf{x}, 0) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} d^N \mathbf{x} \right|_{\mathbf{k}=\mathbf{0}} \\ &= i^n \left. \frac{\partial^n \tilde{\rho}(\mathbf{k}, 0)}{\partial k_{i_1} \partial k_{i_2} \cdots \partial k_{i_n}} \right|_{\mathbf{k}=\mathbf{0}}. \end{aligned} \quad (5.64)$$

Dessa forma, se $\rho(\mathbf{x}, 0)$ for normalizável, isto é, $\tilde{\rho}(\mathbf{0}, 0) = \langle 1 \rangle_0 = \int \rho(\mathbf{x}, 0) d^N \mathbf{x} = A$ com $0 < |A| < \infty$, podemos empregar inicialmente a aproximação $\tilde{\rho}(\mathbf{k}, 0) \simeq \tilde{\rho}(\mathbf{0}, 0)$ para $|\mathbf{k}|$ pequeno. Conseqüentemente, a eq. (5.62) torna-se

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{x}, t) &\simeq \int \tilde{G}(\mathbf{k}, t) \tilde{\rho}(\mathbf{0}, 0) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \frac{d^N \mathbf{k}}{(2\pi)^N} \\ &= \langle 1 \rangle_0 \int \tilde{G}(\mathbf{k}, t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \frac{d^N \mathbf{k}}{(2\pi)^N} \\ &= \langle 1 \rangle_0 G(\mathbf{x}, t), \end{aligned} \quad (5.65)$$

ou seja, $\rho(\mathbf{x}, t) = A G(\mathbf{x}, t)$ para tempos suficientemente longos. Ao comparar a eq. (5.65) com a eq. (5.56), vemos que ela corresponde ao primeiro termo da eq. (5.56) quando $n^* = 0$.

Não é difícil incorporarmos correções à eq. (5.65) quando o grau do primeiro momento não-nulo e finito é mais alto ou igual aquele de ordem

zero. De fato, em substituição a $\tilde{\rho}(\mathbf{k}, 0) \simeq \tilde{\rho}(\mathbf{0}, 0)$, podemos expandir $\tilde{\rho}(\mathbf{k}, 0)$ em série de Taylor em torno de $\mathbf{k} = 0$:

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(\mathbf{k}, 0) &= \tilde{\rho}(\mathbf{0}, 0) + \sum_{i_1=1}^N k_{i_1} \left. \frac{\partial \tilde{\rho}(\mathbf{k}, 0)}{\partial k_{i_1}} \right|_{\mathbf{k}=\mathbf{0}} + \frac{1}{2} \sum_{i_1, i_2=1}^N k_{i_1} k_{i_2} \left. \frac{\partial^2 \tilde{\rho}(\mathbf{k}, 0)}{\partial k_{i_1} \partial k_{i_2}} \right|_{\mathbf{k}=\mathbf{0}} \\ &+ \cdots + \frac{1}{n!} \sum_{i_1, \dots, i_n=1}^N k_{i_1} \cdots k_{i_n} \left. \frac{\partial^n \tilde{\rho}(\mathbf{k}, 0)}{\partial k_{i_1} \cdots \partial k_{i_n}} \right|_{\mathbf{k}=\mathbf{0}} + \cdots \end{aligned} \quad (5.66)$$

Melhor dizendo, empregaremos

$$\tilde{\rho}(\mathbf{k}, 0) = \sum_{n=n^*}^{n_\infty-1} \frac{1}{n!} \sum_{i_1, i_2, \dots, i_n=1}^N k_{i_1} \cdots k_{i_n} \left. \frac{\partial^n \tilde{\rho}(\mathbf{k}, 0)}{\partial k_{i_1} \cdots \partial k_{i_n}} \right|_{\mathbf{k}=\mathbf{0}} + R'(\mathbf{k}), \quad (5.67)$$

em que o resto $R'(\mathbf{k})$ tende a zero quando $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}$. Essa expansão é exatamente a (5.66) quando eliminamos os seus primeiros termos nulos e a truncamos de maneira a eliminar os possíveis termos divergentes. Assim, começamos a série (5.67) a partir do n^* -ésimo termo (o primeiro momento não nulo) e a terminamos na $(n_\infty - 1)$ -ésima parcela (aquela imediatamente antes ao primeiro momento divergente).

Se desprezarmos $R'(\mathbf{k})$, a substituição da eq. (5.67) em (5.62), com o uso de (5.64), constatamos que

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &= \int \tilde{G}(\mathbf{k}, t) \tilde{\rho}(\mathbf{k}, 0) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \frac{d^N \mathbf{k}}{(2\pi)^N} \\ &\simeq \int \tilde{G}(\mathbf{k}, t) \left[\sum_{n=n^*}^{n_\infty-1} \frac{1}{n!} \sum_{i_1, i_2, \dots, i_n=1}^N k_{i_1} \cdots k_{i_n} \left. \frac{\partial^n \tilde{\rho}(\mathbf{k}, 0)}{\partial k_{i_1} \cdots \partial k_{i_n}} \right|_{\mathbf{k}=\mathbf{0}} \right] e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \frac{d^N \mathbf{k}}{(2\pi)^N} \\ &= \sum_{n=n^*}^{n_\infty-1} \frac{1}{n!} \sum_{i_1, i_2, \dots, i_n=1}^N \left. \frac{\partial^n \tilde{\rho}(\mathbf{k}, 0)}{\partial k_{i_1} \cdots \partial k_{i_n}} \right|_{\mathbf{k}=\mathbf{0}} \int k_{i_1} \cdots k_{i_n} \tilde{G}(\mathbf{k}, t) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \frac{d^N \mathbf{k}}{(2\pi)^N} \\ &= \sum_{n=n^*}^{n_\infty-1} \frac{1}{n!} \sum_{i_1, i_2, \dots, i_n=1}^N \left. \frac{\partial^n \tilde{\rho}(\mathbf{k}, 0)}{\partial k_{i_1} \cdots \partial k_{i_n}} \right|_{\mathbf{k}=\mathbf{0}} \frac{1}{i^n} \frac{\partial^n}{\partial x_{i_1} \cdots \partial x_{i_n}} \int \tilde{G}(\mathbf{k}, t) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \frac{d^N \mathbf{k}}{(2\pi)^N} \\ &= \sum_{n=n^*}^{n_\infty-1} \frac{(-1)^n}{n!} \sum_{i_1, i_2, \dots, i_n=1}^N \langle x_{i_1} \cdots x_{i_n} \rangle_0 \frac{\partial^n G(\mathbf{x}, t)}{\partial x_{i_1} \cdots \partial x_{i_n}}. \end{aligned} \quad (5.68)$$

Naturalmente devemos usar a troca n_∞ por n_G nesse resultado, quando $n_G < n_\infty$, em que n_G é a ordem a partir da qual $\tilde{G}(k, t)$ não tem derivada definida. O que acabamos de fazer foi verificar como a expansão (5.56) é obtida via transformada de Fourier. Esse resultado corresponde a

situações nas quais a condição inicial $\rho(\mathbf{x}, 0)$ é de cauda suficientemente curta para garantir a finitude de pelo menos um momento. Por exemplo, se $\rho(\mathbf{x}, 0)$ for normalizável ($\langle 1 \rangle_0$ não nulo e finito) e tiver um comportamento de cauda do tipo $|\mathbf{x}|^{-\sigma}$, em que *sigma* deve ser tal que $\sigma > N$. Casos com $\sigma \leq N$ serão investigados na próxima seção, situação a qual chamaremos de cauda longa num espaço N -dimensional.

5.5 Caso N -Dimensional com Cauda Longa

Analisaremos nesta seção situações com cauda longa para a vertente N -dimensional. Essa denominação cauda longa, de maneira mais precisa, refere-se aos casos em que o primeiro momento não-nulo é divergente, ou seja, esta classe inclui condições iniciais não-normalizáveis.

Dessa forma, se o primeiro momento não-nulo for divergente, uma expansão como a usada na eq. (5.68) não existe. Nessa situação, precisamos considerar as eqs. (5.57) ou (5.62) diretamente. Como na situação unidimensional, ao analisarmos casos de cauda longa, basearemos nossos estudos nas transformadas de Fourier de $\rho(\mathbf{x}', 0)$ e $G(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t)$, ou seja, partiremos da eq. (5.62).

Quando a cauda for curta, como vimos na eq. (5.67), o termo dominante para $\tilde{\rho}(\mathbf{k}, 0)$ é da ordem de $|\mathbf{k}|^{n^*}$ (mais precisamente, proporcional a $k_{i_1} \cdots k_{i_{n^*}}$), em que n^* é um inteiro não nulo. Motivados por esta proporcionalidade e de maneira a tratarmos de condições iniciais com cauda longa, dirigiremos primeiramente nossa discussão a situações assintóticas tal que $\tilde{\rho}(\mathbf{k}, 0) \simeq A|\mathbf{k}|^\sigma$ para $|\mathbf{k}|$ pequeno, em que A e σ são constantes com $\sigma < 0$. Esse caso corresponde a condição inicial $\rho(\mathbf{x}, 0) \sim |\mathbf{x}|^{-(N+\sigma)}$ para $|\mathbf{x}|$ grande, pois em

$$\rho(\mathbf{x}, t) \sim \int |\mathbf{k}|^\sigma e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} d^N \mathbf{k} \quad (5.69)$$

a integral pode ser estimada via análise dimensional: $|\mathbf{k}| \sim 1/|\mathbf{x}|$.

A substituição da aproximação $\tilde{\rho}(\mathbf{k}, 0) \simeq A|\mathbf{k}|^\sigma$ na eq. (5.62), nos leva a

$$\rho(\mathbf{x}, t) \simeq \int \tilde{G}(\mathbf{k}, t) A|\mathbf{k}|^\sigma e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \frac{d^N \mathbf{k}}{(2\pi)^N}. \quad (5.70)$$

Por sua vez, o uso da eq. (3.15) para $G(\mathbf{x}, t)$,

$$\mathcal{F} \left\{ \frac{\partial^\sigma}{\partial |\mathbf{x}|^\sigma} G(\mathbf{x}, t) \right\} = -|\mathbf{k}|^\sigma \tilde{G}(\mathbf{k}, t), \quad (5.71)$$

nos proporciona

$$\begin{aligned}
\rho(\mathbf{x}, t) &\simeq -A \int \mathcal{F} \left\{ \frac{\partial^\sigma}{\partial |\mathbf{x}|^\sigma} G(\mathbf{x}, t) \right\} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \frac{d^N \mathbf{k}}{(2\pi)^N} \\
&= -A \frac{\partial^\sigma}{\partial |\mathbf{x}|^\sigma} G(\mathbf{x}, t).
\end{aligned} \tag{5.72}$$

A exemplo do caso unidimensional, uma outra situação assintótica ligada à cauda longa pode ser $\tilde{\rho}(\mathbf{k}, 0) \simeq A' |\mathbf{k}|^{\sigma-1} k_i$, por exemplo, com $i = 1$. Para essa nova possibilidade, temos um correspondente as condições iniciais ímpares, em contraste com a par (simétrica) que acabamos de investigar, $\tilde{\rho}(\mathbf{k}, 0) \simeq A |\mathbf{k}|^\sigma$. Nessa situação, em analogia com o caso anterior, deparamos com $\rho(\mathbf{x}, 0) \sim x_i |\mathbf{x}|^{-(N+\sigma+1)}$ para $|\mathbf{x}|$ grande, pois

$$\begin{aligned}
\rho(\mathbf{x}, t) &\sim \int |\mathbf{k}|^{\sigma-1} k_i e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} d^N \mathbf{k} \\
&\sim \frac{\partial}{\partial x_i} \int |\mathbf{k}|^{\sigma-1} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} d^N \mathbf{k} \\
&\sim x_i |\mathbf{x}|^{-(N+\sigma+1)}.
\end{aligned} \tag{5.73}$$

Além disso, se procedermos analogamente ao caso anterior, verificamos que

$$\begin{aligned}
\rho(\mathbf{x}, t) &= \int \tilde{G}(\mathbf{k}, t) \tilde{\rho}(\mathbf{k}, 0) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \frac{d^N \mathbf{k}}{(2\pi)^N} \\
&\simeq \int \tilde{G}(\mathbf{k}, t) A' |\mathbf{k}|^{\sigma-1} k_i e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \frac{d^N \mathbf{k}}{(2\pi)^N} \\
&= -iA' \int \tilde{G}(\mathbf{k}, t) |\mathbf{k}|^{\sigma-1} \left(\frac{\partial}{\partial x_i} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right) \frac{d^N \mathbf{k}}{(2\pi)^N} \\
&= -iA' \frac{\partial}{\partial x_i} \int \tilde{G}(\mathbf{k}, t) |\mathbf{k}|^{\sigma-1} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \frac{d^N \mathbf{k}}{(2\pi)^N} \\
&= iA' \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial^{\sigma-1}}{\partial |\mathbf{x}|^{\sigma-1}} G(\mathbf{x}, t).
\end{aligned} \tag{5.74}$$

5.6 Exemplos - Caso N -dimensional

De maneira a aplicar as generalizações que acabamos de apresentar para o caso N -dimensional, façamos alguns exemplos. Naturalmente, nesses exemplos, consideraremos que o primeiro momento não nulo é divergente. Mais uma vez, deve ser notado que neste trabalho a passagem da

difusão anômala para a equação de Schrödinger fracionária é feita quando substituímos D por $i\hbar/(2m)$.

Exemplo 5.6.1

Vamos agora usar uma condição inicial do tipo

$$\rho(\mathbf{x}, 0) \propto \frac{1}{(b^2 + |\mathbf{x}|^2)^\nu} \quad (5.75)$$

com $0 < \nu < N/2$. Empregamos $\nu > 0$ para que a condição inicial represente uma função com uma localização mais acentuada em torno de $\mathbf{x} = \mathbf{0}$. A escolha $\nu < N/2$ foi feita de modo que $\rho(\mathbf{x}, 0)$ não seja normalizável, isto é, seu momento de ordem zero, $\langle 1 \rangle_0$, é divergente. De fato, se $\nu < N/2$, vemos que

$$\begin{aligned} \langle 1 \rangle_0 &= \int \rho(\mathbf{x}, 0) d^N \mathbf{x} \\ &\sim \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \int_a^\Lambda |\mathbf{x}|^{-2\nu} d^N \mathbf{x} \\ &= \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \frac{|\mathbf{x}|^{N-2\nu}}{N-2\nu} \Big|_a^\Lambda = \infty, \end{aligned} \quad (5.76)$$

em que a é um número positivo finito. Por outro lado, a condição inicial (5.75), para $|\mathbf{x}| \gg b$, nos conduz a $\rho(\mathbf{x}, 0) \propto |\mathbf{x}|^{-(N+\sigma)}$ com $\sigma = 2\nu - N$ e, portanto, $\tilde{\rho}(\mathbf{k}, 0) \propto |\mathbf{k}|^\sigma$. A partir do uso da eq. (5.72) e $G_\mu(\mathbf{x}, t)$ da eq. (3.56), obtemos que

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{x}, t) &\propto \frac{\partial^\sigma}{\partial |\mathbf{x}|^\sigma} G_\mu(\mathbf{x}, t), \\ &\propto \frac{\partial^\sigma}{\partial |\mathbf{x}|^\sigma} \left(\frac{1}{(Dt)^{N/\mu}} \int e^{-Dt|\mathbf{k}|^\mu + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \frac{d^N \mathbf{k}}{(2\pi)^N} \right) \\ &\propto \frac{1}{(Dt)^{N/\mu}} \int |\mathbf{k}|^\sigma e^{-Dt|\mathbf{k}|^\mu + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \frac{d^N \mathbf{k}}{(2\pi)^N} \\ &\propto \frac{1}{(Dt)^{(\sigma+N)/\mu}} \int |\mathbf{q}|^\sigma e^{-|\mathbf{q}|^\mu + i\frac{\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}}{(Dt)^{1/\mu}}} \frac{d^N \mathbf{q}}{(2\pi)^N}, \end{aligned} \quad (5.77)$$

em que empregamos $\mathbf{q} = (Dt)^{1/\mu} \mathbf{k}$. Portanto, quando $|\mathbf{x}| \ll (Dt)^{1/\mu}$, o comportamento assintótico de (5.77) é (veja também as eqs. (3.62) e (3.64))

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{x}, t) &\propto \frac{1}{(Dt)^{(\sigma+N)/\mu}} \int |\mathbf{q}|^\sigma e^{-|\mathbf{q}|^\mu} \frac{d^N \mathbf{q}}{(2\pi)^N} \\ &\propto t^{-(\sigma+N)/\mu} \\ &= t^{-2\nu/\mu}. \end{aligned} \quad (5.78)$$

Devemos ainda observar que o caso $\nu = N/2$ também conduz a divergência de $\langle 1 \rangle_0$, discutiremos essa situação num próximo exemplo.

Exemplo 5.6.2

Como próximo exemplo em que a expansão (5.68) não pode ser aplicada, vamos examinar a condição inicial

$$\rho(\mathbf{x}, 0) \propto \frac{x_j}{(b^2 + |\mathbf{x}|^2)^\nu} \quad (5.79)$$

com $1/2 < \nu < (N + 2)/2$. A condição $\nu > 1/2$ garante que $\rho(\mathbf{x}, 0)$ tenda a zero quando $|\mathbf{x}| \rightarrow \infty$, pois nesse limite $\rho(\mathbf{x}, 0) \propto x_j |\mathbf{x}|^{-2\nu}$ ($\tilde{\rho}(\mathbf{k}, 0) \propto k_j |\mathbf{k}|^{\sigma-1}$ com $\sigma = 2\nu - N - 1$). Por outro lado, para a condição inicial em questão, temos o momento de ordem zero,

$$\langle 1 \rangle_0 = \int \frac{x_j}{(b^2 + |\mathbf{x}|^2)^\nu} d^N \mathbf{x} , \quad (5.80)$$

nulo quando $\nu > (N + 1)/2$, pois a integral em questão é convergente e o integrando é ímpar em x_j . Em contraste, quando $\nu < (N + 1)/2$, chegamos a

$$\langle 1 \rangle_0 \sim \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \int^\Lambda |\mathbf{x}|^{N-2\nu} d|\mathbf{x}| \quad (5.81)$$

e, portanto, à divergência de $\langle 1 \rangle_0$. Se $\langle 1 \rangle_0 = 0$, devemos investigar os momentos de primeira ordem,

$$\langle x_i \rangle_0 = \int \frac{x_i x_j}{(b^2 + |\mathbf{x}|^2)^\nu} d^N \mathbf{x} . \quad (5.82)$$

Essa integral convergirá se $\nu > (N + 2)/2$ com $\langle x_i \rangle_0 = 0$ se $i \neq j$ e $\langle x_i \rangle_0 \neq 0$ quando $i = j$. Caso $\nu < (N + 2)/2$, $\langle x_i \rangle_0$ divergirá, visto que

$$\langle x_i \rangle_0 \sim \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \int^\Lambda |\mathbf{x}|^{N-2\nu+1} d|\mathbf{x}| . \quad (5.83)$$

Esses resultados justificam, portanto, a escolha que fizemos no início desse parágrafo, $1/2 < \nu < (N + 2)/2$, para que a expansão (5.68) não possa ser empregada.

O uso da eq. (5.74) e da função de Green dada pela eq. (3.56),

no fornece

$$\begin{aligned}
\rho(\mathbf{x}, t) &\propto \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial^{\sigma-1}}{\partial |\mathbf{x}|^{\sigma-1}} G_\mu(\mathbf{x}, t) \\
&\propto \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial^{\sigma-1}}{\partial |\mathbf{x}|^{\sigma-1}} \left(\frac{1}{(Dt)^{N/\mu}} \int e^{-Dt|\mathbf{k}|^\mu + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \frac{d^N \mathbf{k}}{(2\pi)^N} \right) \\
&\propto \frac{\partial}{\partial x_i} Q_{\mu(\sigma-1)}^N, \tag{5.84}
\end{aligned}$$

em que empregamos a eq. (3.58). Dessa forma, quando $|\mathbf{x}| \ll (Dt)^{1/\mu}$, o comportamento assintótico de (5.84), via as eqs. (3.62) e (3.64), é dado por

$$\begin{aligned}
\rho(\mathbf{x}, t) &\propto \frac{1}{(Dt)^{(\sigma-1+N)/\mu}} \frac{\partial}{\partial x_i} \left[b_0^N + b_1^N \left(\frac{|\mathbf{x}|}{(Dt)^{1/\mu}} \right)^2 \right] \\
&\propto t^{-(\sigma+N+1)/\mu} \\
&= t^{-2\nu/\mu}. \tag{5.85}
\end{aligned}$$

Portanto, seguindo a linha de argumentação do último parágrafo do exemplo anterior, constatamos que $\rho(\mathbf{x}, t) \sim t^{-2\nu/\mu}$ quando $0 < |\mathbf{x}| \ll |Dt|^{1/\mu}$.

Exemplo 5.6.3

Neste exemplo, trataremos do comportamento de $\rho(\mathbf{x}, t)$ quando a condição inicial é da forma

$$\rho(\mathbf{x}, 0) = \frac{1}{(b^2 + |\mathbf{x}|^2)^{N/2}}. \tag{5.86}$$

Para o momento de ordem zero dessa condição inicial, temos

$$\begin{aligned}
\langle 1 \rangle_0 &= \int \rho(\mathbf{x}, 0) d^N \mathbf{x} \\
&= \int \frac{d^N \mathbf{x}}{(b^2 + |\mathbf{x}|^2)^{N/2}} \\
&\sim \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \int_a^\Lambda |\mathbf{x}|^{-1} d|\mathbf{x}| \\
&= \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \ln |\mathbf{x}| \Big|_a^\Lambda, \tag{5.87}
\end{aligned}$$

que é divergente.

Para calcularmos transformada de Fourier de $\rho(\mathbf{x}, 0)$, vamos escolher um sistema de coordenadas no qual a componente k_N é paralelo ao

vetor \mathbf{x} . Nesse caso, obtemos

$$\begin{aligned}\tilde{\rho}(\mathbf{k}, 0) &= \int \frac{e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}}{(b^2 + |\mathbf{x}|^2)^{N/2}} d^N \mathbf{x} \\ &= \int \frac{\cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x})}{(b^2 + |\mathbf{x}|^2)^{N/2}} d^N \mathbf{x} \\ &= \int T(|\mathbf{k}|, \theta) d\Omega_N\end{aligned}\quad (5.88)$$

com

$$T(|\mathbf{k}|, \theta) = \int_0^{+\infty} \frac{\cos(|\mathbf{k}| \cos(\theta) |\mathbf{x}|) |\mathbf{x}|^{N-1}}{(b^2 + |\mathbf{x}|^2)^{N/2}} d|\mathbf{x}|. \quad (5.89)$$

Para obtermos a segunda igualdade, fizemos uma mudança de variável tal que $\mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x}$, comparamos a expressão anterior a mudança de variável e por fim constatamos que somente a parte em cosseno não é nula. Por sua vez, para $a \gg b$ e $|\mathbf{k}| \ll 1$, verificamos que

$$\begin{aligned}T(|\mathbf{k}|, \theta) &\simeq \int_0^a \frac{\cos(|\mathbf{k}| \cos(\theta) |\mathbf{x}|) |\mathbf{x}|^{N-1}}{(b^2 + |\mathbf{x}|^2)^{N/2}} d|\mathbf{x}| + \int_a^{+\infty} \frac{\cos(|\mathbf{k}| \cos(\theta) |\mathbf{x}|)}{|\mathbf{x}|} d|\mathbf{x}| \\ &\simeq A_N'' + B_N'' \ln |\mathbf{k}|,\end{aligned}\quad (5.90)$$

em que A_N'' e B_N'' não dependem de $|\mathbf{k}|$, pois a primeira integral é uma constante no limite $|\mathbf{k}| \rightarrow 0$ e a segunda pode ser escrita em termos do cosseno integral (veja eq. (5.45)), cuja expansão é dada em (5.46). A substituição desse resultado na eq. (5.88), após a integração no ângulo sólido, nos mostra que

$$\tilde{\rho}(\mathbf{k}, 0) \simeq A_N' + B_N' \ln |\mathbf{k}| \quad (5.91)$$

quando $|\mathbf{k}| \ll 1$. Aqui A_N' e B_N' são duas novas constantes.

Agora, passemos a calcular $\rho(\mathbf{x}, t)$ para t longo. Conseqüentemente, usemos a eq. (5.91) na eq. (5.62) com $\tilde{G}(\mathbf{k}, t)$ dado na eq. (3.56) para verificar que

$$\begin{aligned}\rho(\mathbf{x}, t) &\simeq \int e^{-Dt|\mathbf{k}|^\mu + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} (A_N' + B_N' \ln |\mathbf{k}|) \frac{d^N \mathbf{k}}{(2\pi)^N} \\ &= \frac{1}{(Dt)^{N/\mu}} \int e^{-|\mathbf{q}|^\mu + i\frac{\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}{(Dt)^{1/\mu}}} [A_N' + B_N' (\ln |\mathbf{q}| + \ln(Dt)^{-1/\mu})] \frac{d^N \mathbf{q}}{(2\pi)^N} \\ &= A_N(\mathbf{x}, t) t^{-N/\mu} [1 + B_N(\mathbf{x}, t) \ln(t)],\end{aligned}\quad (5.92)$$

em que usamos $\mathbf{q} = (Dt)^{1/\mu} \mathbf{k}$ e

$$\begin{aligned}A_N(\mathbf{x}, t) &= \frac{1}{(Dt)^{N/\mu}} \int e^{-|\mathbf{q}|^\mu + i\frac{\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}{(Dt)^{1/\mu}}} [A_N' + B_N' (\ln |\mathbf{q}| + \ln(D)^{-1/\mu})] \frac{d^N \mathbf{q}}{(2\pi)^N} \\ B_N(\mathbf{x}, t) &= \frac{B_N'}{(Dt)^{N/\mu} A_N(\mathbf{x}, t)} \int e^{-|\mathbf{q}|^\mu + i\frac{\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}{(Dt)^{1/\mu}}} \frac{d^N \mathbf{q}}{(2\pi)^N}.\end{aligned}\quad (5.93)$$

Para $|\mathbf{x}| \ll (Dt)^{1/\mu}$, as contribuições dominantes em (5.93) correspondem a empregar $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ e, portanto são constantes. Dessa forma,

$$\rho(\mathbf{x}, t) \sim t^{-N/\mu} [\ln(t) + cte] \quad (5.94)$$

para t longo e $|\mathbf{x}| \ll (Dt)^{1/\mu}$.

Exemplo 5.6.4

Investiguemos agora o uso da condição inicial

$$\rho(\mathbf{x}, 0) = \frac{x_j}{(b^2 + |\mathbf{x}|^2)^{(N+2)/2}}. \quad (5.95)$$

Para essa função, temos que o momento de ordem zero é dado por

$$\begin{aligned} \langle x^0 \rangle_0 &= \int \frac{x_j}{(b^2 + |\mathbf{x}|^2)^{(N+2)/2}} d^N \mathbf{x} \\ &= 0, \end{aligned} \quad (5.96)$$

pois o integrando é ímpar e tende suficientemente rápido a zero quando $|\mathbf{x}| \rightarrow \infty$. Para o momento seguinte, o de ordem um, verificamos que

$$\begin{aligned} \langle x^1 \rangle_0 &= \int \frac{x_j^2}{(b^2 + |\mathbf{x}|^2)^{(N+2)/2}} d^N \mathbf{x} \\ &= \frac{\Omega_N}{N} \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \int_0^\Lambda \frac{|\mathbf{x}|^{N+1}}{(b^2 + |\mathbf{x}|^2)^{(N+2)/2}} d|\mathbf{x}| \\ &\sim \frac{\Omega_N}{N} \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \int_a^\Lambda |\mathbf{x}|^{-1} d|\mathbf{x}| \\ &= \frac{\Omega_N}{N} \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \ln |\mathbf{x}| \Big|_a^{+\Lambda}. \end{aligned} \quad (5.97)$$

Portanto, o momento de ordem um, como no exemplo anterior para o momento de ordem zero, é divergente.

Como próximo passo, vamos para a transformada de Fourier da condição inicial (5.95), isto é,

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(\mathbf{k}, 0) &= \int \frac{x_j}{(b^2 + |\mathbf{x}|^2)^{(N+2)/2}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} d^N \mathbf{x} \\ &= \int \frac{\partial}{\partial x_j} \left(-\frac{1}{N} \frac{1}{(b^2 + |\mathbf{x}|^2)^{N/2}} \right) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} d^N \mathbf{x} \\ &= i \frac{k_j}{N} \int \left(\frac{1}{(b^2 + |\mathbf{x}|^2)^{N/2}} \right) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} d^N \mathbf{x} \\ &= i \frac{k_j}{N} \int T(|\mathbf{k}|, \theta) d\Omega_N, \end{aligned} \quad (5.98)$$

em que empregamos as eqs. (5.88) e (5.89). Além disso, usamos essencialmente a relação entre a transformada de Fourier de uma função e sua derivada[35]: $\mathcal{F}\{\partial f(\mathbf{x})/\partial x_j\} = ik_j \mathcal{F}\{f(\mathbf{x})\}$.

A exemplo do caso unidimensional, observemos que

$$\begin{aligned}\rho(\mathbf{x}, t) &= \int \tilde{G}(\mathbf{k}, t) \left(\frac{ik_j}{N}\right) \tilde{\rho}_0(\mathbf{k}, 0) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \frac{d^N \mathbf{k}}{(2\pi)^N} \\ &= \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial x_j} \int \tilde{G}(\mathbf{k}, t) \tilde{\rho}_0(\mathbf{k}, 0) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \frac{d^N \mathbf{k}}{(2\pi)^N} \\ &= \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_0(\mathbf{x}, t),\end{aligned}\quad (5.99)$$

com

$$\rho_0(\mathbf{x}, t) = \int \tilde{G}(\mathbf{k}, t) \tilde{\rho}_0(\mathbf{k}, 0) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \frac{d^N \mathbf{k}}{(2\pi)^N}. \quad (5.100)$$

Portanto, verificamos que se uma condição inicial for a derivada de outra, esta relação será preservada em qualquer instante.

Dediquemos agora a investigar o comportamento $\rho(\mathbf{x}, t)$ para t longo. Para tal, vamos usar a eq. (5.99) e o exemplo anterior, pois nele temos o $\rho_0(\mathbf{x}, 0)$ multiplicado pelo negativo de N . Nesse contexto, o análogo da eq. (5.92) é

$$\begin{aligned}\rho(\mathbf{x}, t) &\simeq -\frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial x_j} \int e^{-Dt|\mathbf{k}|^\mu + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} (A'_N + B'_N \ln |\mathbf{k}|) \frac{d^N \mathbf{k}}{(2\pi)^N} \\ &= -\frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial x_j} \int e^{-|\mathbf{q}|^\mu + i\frac{\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}{(Dt)^{1/\mu}}} \frac{[A'_N + B'_N (\ln |\mathbf{q}| + \ln(Dt)^{-1/\mu})]}{(Dt)^{N/\mu}} \frac{d^N \mathbf{q}}{(2\pi)^N} \\ &= A_N(\mathbf{x}, t) t^{-N/\mu} [1 + B_N(\mathbf{x}, t) \ln(t)],\end{aligned}\quad (5.101)$$

em que usamos $\mathbf{q} = (Dt)^{1/\mu} \mathbf{k}$ e

$$\begin{aligned}A_N(\mathbf{x}, t) &= -\frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial x_j} \int e^{-|\mathbf{q}|^\mu + i\frac{\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}{(Dt)^{1/\mu}}} \frac{[A'_N + B'_N (\ln |\mathbf{q}| + \ln(D)^{-1/\mu})]}{(Dt)^{N/\mu}} \frac{d^N \mathbf{q}}{(2\pi)^N} \\ B_N(\mathbf{x}, t) &= -\frac{B'_N}{N(Dt)^{N/\mu} A_N(\mathbf{x}, t)} \frac{\partial}{\partial x_j} \int e^{-|\mathbf{q}|^\mu + i\frac{\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}{(Dt)^{1/\mu}}} \frac{d^N \mathbf{q}}{(2\pi)^N}.\end{aligned}\quad (5.102)$$

Quando $|\mathbf{x}| \ll (Dt)^{1/\mu}$, as contribuições dominantes em (5.102) podem ser obtidas via uma expansão em série como a que está na eq. (3.64). Aqui, diferentemente daquele caso, temos no integrando um logaritmo, mas isto em nada muda a forma geral da série. Assim, devido a presença da derivada parcial em x_j , o termo dominante nas expansões é o proporcional a

$$\frac{1}{(Dt)^{N/\mu}} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{|\mathbf{x}|}{(Dt)^{1/\mu}} \right)^2. \quad (5.103)$$

Portanto,

$$\rho(\mathbf{x}, t) \sim t^{-(N+2)/\mu} [\ln(t) + cte] \quad (5.104)$$

para t longo e $0 < |\mathbf{x}| \ll (Dt)^{1/\mu}$.

Capítulo 6

Conclusões

Neste trabalho, investigamos o comportamento assintótico temporal de soluções de equações lineares que descrevem um “comportamento difusivo”. Devido a linearidade, escrevemos as soluções dessas equações em termos das funções de Green e das condições iniciais. Em linhas gerais, nosso estudo foi direcionado a situações nas quais a distribuição alarga-se com o decorrer do tempo. É justamente esse tipo de situação que referimos aqui como comportamento difusivo. Naturalmente, o exemplo mais imediato de tal vertente é o da difusão na ausência de forças externas. Nesse caso, a função de Green é uma Gaussiana que se alarga progressivamente ao longo do tempo. Outro exemplo de destaque é o da equação de Schrödinger para a partícula livre, pois a correspondente função de Green porta-se qualitativamente de forma similar.

A partir desse comportamento difusivo, desenvolvemos toda a nossa análise. Como resultado de tal estudo, obtivemos os diversos comportamentos assintóticos em termos da função de Green e da condição inicial. Além dessa investigação de natureza geral, fizemos vários exemplos que empregam casos específicos para a função de Green e a condição inicial. Nessas ilustrações, verificamos quantitativamente como as formas da condição inicial e da função de Green ditam o comportamento assintótico temporal. Por exemplo, fica claro de nossa investigação que o famoso comportamento $t^{-1/2}$ obtido por Einstein no estudo do movimento Browniano corresponde apenas a uma escolha particular, apesar de sua grande relevância, da condição inicial para a equação de difusão usual.

As aplicações de nossos resultados gerais foram inicialmente di-

reacionadas às equações de difusão usual na ausência de força externa e de Schrödinger também sem força externa. Por isso, começamos este trabalho com uma breve revisão dessas equações e suas soluções em termos da função de Green. Com o objetivo de investigar situações mais abrangentes, nos concentramos ainda em um tipo de difusão anômala e em uma equação de Schrödinger fracionária. O tipo de difusão anômala investigada aqui é aquela que envolve derivada fracionária no espaço e cuja função de Green é uma distribuição de Lévy. Nesse contexto formal, optamos por uma equação de Schrödinger fracionária em que consideramos o mesmo tipo de derivada fracionária usado na difusão anômala. Portanto, a função de Green nesse caso também será do tipo Lévy. Enfatizemos ainda que essas duas novas vertentes foram escolhidas de maneira a termos situações bastante gerais e ao mesmo tempo preservarmos a estrutura de cálculo das situações usuais.

Quando escolhemos condições iniciais para ilustrarmos algumas situações, é comum optarmos por aquelas bem localizadas, por exemplo, uma Gaussiana. Muitas vezes, sem nos alertarmos convenientemente para esse fato, tomamos o resultado obtido como se fosse geral. Entretanto, tal postura não é conveniente em muitos casos. Com a intenção de estarmos alertas às diversas possibilidades, as condições iniciais empregadas aqui variam desde a situação localizada (cauda curta) até aquelas pouco localizadas (cauda longa). Numa primeira etapa, entendemos por cauda curta aqueles casos em que a integral da condição inicial sobre todo espaço é finita e cauda longa quando esta integral não é finita. Em contraste para o caso de cauda curta, a presença de uma cauda longa para a condição inicial “atrapalha” o processo difusivo, no sentido de fazer com que o alargamento do pacote inicial fosse mais lento, fato que ressaltaremos posteriormente.

Quanto a exposição de nosso trabalho, tentamos fazê-la de uma maneira bem detalhada, no sentido de minimizar a dificuldade de alguém que esteja iniciando no tema (como eu). Assim, com o objetivo de valorizar inicialmente os conceitos básicos que direcionaram nossos desenvolvimentos, discutimos primeiramente os aspectos unidimensionais. Como continuação, desenvolvemos a vertente em dimensão arbitrária. Nesse sentido, as últimas partes de cada capítulo estão dedicadas ao caso N -dimensional. Também numa direção crescente de complexidade dos temas enfocados, consideramos como ponto de partida as equações de difusão usual e a de Schrödinger. A seguir, passamos para a apresentação das equações de difusão e Schrödinger fracionárias. Além disso, com a intenção de facilitar ainda mais o entendimento dos resultados gerais alcançados neste trabalho, ilustramos via exemplos as várias etapas de nossa discussão.

A idéia central de nosso trabalho foi supor que a função de Green sofre um alargamento progressivo com o tempo. Isso, para tempos longos, faz

com que a condição inicial fique bastante concentrada em relação a função de Green, e a partir daí possamos fazer nossas aproximações. Essas estimativas, que são nossas principais conclusões, podem ser expressas, essencialmente, em termos dos momentos da condição inicial e de derivadas de mesma ordem da função de Green. A partir da contribuição dominante para tempos longos e pequenas distâncias, obtivemos o comportamento do campo difusivo junto a origem em várias situações. Esses casos estão resumidos na tabela 6.1. Cabe ressaltar que além das discussões usuais vinculadas a equação de Schrödinger, empregamos aqui uma extensão para a vertente com derivadas fracionárias espaciais para a equação de Schrödinger e de difusão. Do ponto de vista qualitativo, podemos resumir, a partir dos exemplos discutidos aqui, nossos resultados assintóticos temporais.

i) Quando a condição inicial tem cauda longa, o alargamento da função evoluída no tempo é mais lento que aquele gerado por uma condição inicial de cauda mais curta. Isso, dito a grosso modo, seria como se mais cauda gerasse uma inércia maior. Nesse caso, supomos que o agente espalhador, a função de Green, é sempre o mesmo.

ii) Essa inércia também é acentuada a medida que a condição inicial é mais oscilante.

iii) Para uma dada condição inicial, a função evoluída no tempo alarga-se mais quanto mais espalhador for o agente (quanto menor for μ).

Fora os exemplos citados nesta dissertação, seria factível fazermos outras aplicações de nossos resultados gerais, além de analisar outros casos como os da tabela 6.1. De fato, essas expressões, em termos de séries, também poderiam ser empregadas para investigar sistemas em que estão presentes forças externas. Quanto a vertente assintótica, uma possibilidade seria o uso das soluções aproximadas para discutir aspectos de espalhamento. Enfim, situações em que na mecânica quântica e na difusão tempos longos são relevantes.

$\langle x_i^0 \rangle_0 \neq 0$	$\rho(\mathbf{x}, 0) \sim \mathbf{x} ^{-(\sigma+N)}$	$\tilde{\rho}(\mathbf{k}, 0)$	$\rho(\mathbf{0}, t)$
cauda curta	$\sigma > 0$	$ \mathbf{k} ^0$	$t^{-N/\mu}$
caso limiar	$\sigma = 0$	$a + b \ln \mathbf{k} $	$t^{-N/\mu} \ln t$
cauda longa	$\sigma < 0$	$ \mathbf{k} ^\sigma$	$t^{-(\sigma+N)/\mu}$

$\langle x_i^1 \rangle_0 \neq 0$	$\rho(\mathbf{x}, 0) \sim x_i \mathbf{x} ^{-(\sigma+N+1)}$	$\tilde{\rho}(\mathbf{k}, 0)$	$\rho(\mathbf{0}, t)$
cauda curta	$\sigma > 1$	k_i	$t^{-(N+2)/\mu}$
caso limiar	$\sigma = 1$	$k_i(a + b \ln \mathbf{k})$	$t^{-(N+2)/\mu} \ln t$
cauda longa	$\sigma < 1$	$k_i \mathbf{k} ^{\sigma-1}$	$t^{-(\sigma+N+1)/\mu}$

Tabela 6.1: Apresentamos o comportamento assintótico temporal em termos da função de Green e do comportamento assintótico espacial da condição inicial $\rho(\mathbf{x}, 0)$. Na primeira coluna, informamos o tipo de cauda de $\rho(\mathbf{x}, 0)$ quanto a finitude ou não de $\langle x_i^0 \rangle_0$ e $\langle x_i^1 \rangle_0$. Na segunda coluna, mostramos um possível comportamento assintótico de $\rho(\mathbf{x}, 0)$ e na terceira coluna o correspondente para a sua transformada de Fourier, $\tilde{\rho}(\mathbf{k}, 0)$. Na quarta coluna, temos o consequente comportamento assintótico de $\rho(\mathbf{0}, t)$. Nesses casos, estamos empregando a função de $G_\mu(\mathbf{x}, t)$ da difusão anômala (Schrödinger) fracionária, que para $\mu = 2$ recupera as situações usuais, que é o caso discutido na literatura[10, 11, 12, 13, 15, 17, 18, 19, 20, 38] em uma e três dimensões.

Referências Bibliográficas

- [1] E. L. Cussler, *Diffusion Mass Transfer in Fluid Systems* (Cambridge University Press, New York, 2003).
- [2] H. Risken, *The Fokker-Planck Equation: Methods of Solution and Applications* (Springer-Verlag, Berlin, 1984).
- [3] C. W. Gardiner, *Handbook of Stochastic Methods for Physics, Chemistry and Natural Sciences* (Springer-Verlag, Berlin, 1983).
- [4] N. G. Van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry* (North-Holland, Amsterdam, 1981).
- [5] T. Tomé e M. J. Oliveira, *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade* (Editora da Universidade de São Paulo, São Paulo, 2001).
- [6] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics* (John Wiley, New York, 1998).
- [7] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu e F. Laloë, *Quantum Mechanics*, vol. 1 e 2 (John Wiley, New York, 1977).
- [8] E. W. Montroll and J. T. Bendler, *On Lévy (or stable) Distributions and the Williams-Watts model of Dielectric-Relaxation*, J. Stat. Phys. **34**, 129-162 (1984).
- [9] J.-P. Bouchaud and A. Georges, *Anomalous diffusion in Disordered media: statistical mechanisms, models and physical applications*, Phys. Rep. **195**, 127-293 (1990).
- [10] N. Laskin, *Fractional Quantum Mechanics and Lévy Path Integrals*, Phys. Lett. A **268**, 298-305 (2000).
- [11] N. Laskin, *Fractional Quantum Mechanics*, Phys. Rev. E **62**, 3135-3145 (2000).
- [12] N. Laskin, *Fractional Schrödinger equation*, Phys. Rev. E **66**, 056108(1-7) (2002).

- [13] K. Unnikrishnan, *On the asymptotic decay law for wave in free space*, Am. J. Phys. **65**, 526-527 (1997).
- [14] R. Ketzmerick, K. Kruse, and T. Geisel, *What Determines the Spreading of a Wave Packet?*, Phys. Rev. Lett., **79**, 1959-1963 (1997).
- [15] K. Unnikrishnan, *An exhaustive analysis of the asymptotic time dependence of wave packets in one dimensional*, Am. J. Phys. **66**, 632-633 (1998).
- [16] R. S. Mendes and C. Anteneodo, *Comment on "Anomalous Spreading of Power-Law Quantum Wave Packets"*, cond-mat/0003366.
- [17] J. A. Damborenea, I. L. Egusquiza, and J. G. Muga, *Asymptotic behaviour of the probability density in one dimension*, Am. J. Phys. **70**, 738-740 (2002).
- [18] M. Miyamoto, *The various power decays of the survival probability at long times for a free quantum particle*, J. Phys. A: Math Gen. **35**, 7159-7171 (2002).
- [19] M. Miyamoto, *Initial Wave Packets and the Various Power-Law Decreases of Scattered Wave Packets at Long Times*, Phys. Rev. A **69**, 042704(1-4) (2004).
- [20] F. Lillo and R. N. Mantegna, *Anomalous Spreading of Power-Law Quantum Wave Packets*, Phys. Rev. Lett. **84**, 1061-1065 (2000).
- [21] Erratum. F. Lillo and R. N. Mantegna, *Anomalous Spreading of Power-Law Quantum Wave Packets*, Phys. Rev. Lett. **84**, 4516 (2000).
- [22] F. W. Sears e G. L. Salinger, *Thermodynamics, Kinetic Theory, and Statistical Thermodynamics* (Addison-Wesley, New York, 1975).
- [23] I. T. Pedron, *Estudos em Difusão Anômala* Tese de doutorado (DFI-UEM, Maringá-PR, 2003).
- [24] E. Butkov, *Física Matemática* (Editora Guanabara Dois S.A. Rio de Janeiro-RJ, 1978).
- [25] R. S. Mendes, *Notas de aula - Mecânica Estatística Fora do Equilíbrio* (DFI-UEM, Maringá, 2004).
- [26] W. Feller, *An Introduction to Probability Theory and its Applications* (John Wiley, New York, 1965).
- [27] G. M. Zaslavsky, *Chaos, fractional kinetics, and anomalous transport*, Phys. Rep. **371**, 461-580 (2002).

- [28] E. K. Lenzi, R. S. Mendes, K. S. Fa, L. R. da Silva, and L. S. Lucena, *Solutions for a fractional nonlinear diffusion equation: Spatial time dependent diffusion coefficient and external forces*, J. Math. Phys. **45**, 3444-3452 (2004).
- [29] K. B. Oldham and J. Spanier, *The Fractional Calculus* (Academic Press, New York, 1974).
- [30] M. Riesz, **L'integrale de Riemann-Liouville et le Probleme de Cauchy*, Acta Math., **81** 1-218, (1949).
- [31] K. S. Miller and B. Ross, *An Introduction to the Fractional Differential Equations* (John Wiley, New York, 1993).
- [32] A. I. Saichev and W. A. Woyczynski, *Distributions in the Physical and Engineering Sciences*, vol. 1 (Birkhäuser, Boston, 1997).
- [33] P. Lévy, *Théorie de l'addition des variables aléatoires* (Gauthier-Villars, Paris, 1937).
- [34] T. M. Apostol, *Análisis Matemático* (Editorial Reverté S. A., Barcelona, 1960).
- [35] T. M. Apostol, *Cálculus-Calculo en varias variables con aplicaciones a las Probabilidades y al Análisis vectorial*, vol. 2 (Nueva York, Editorial Reverté S. A., 1965).
- [36] R. Metzler, J. Klafter, *The Random Walk's Guide to Anomalous Diffusion: A Fractional Dynamics Approach*. Phys. Rep. **339**, 1-77 (2000).
- [37] P. Ramond, *Field Theory: A Modern Primer* (Addison Wesley, New York, 1990).
- [38] J. Klafter, A. Blumen, and M. F. Shlesinger, Phys. Rev. A **35**, 3081-3085 (1987).
- [39] M. Miyamoto, *Free Initial Packets and the Long-Time Behaviour of the Survival and Nonescape Probabilities*, Phys. Rev. A, **68**, 022702(1-5) (2003).
- [40] S. Wolfram, *Mathematica: A System for doing Mathematics by Computer* (Addison-Wesley, New York, 1990).
- [41] M. Abramowitz e I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions With Formula, Graphs, and Mathematical Tables* (National Bureau of Standards, Washington, 1970).
- [42] I. S. Gradshteyn, I. M. Ryzhik, *Table of Integrals Series and Products* (Academic Press, New York, 1965).

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

Josiane Cristina Dias

Comportamento assintótico temporal de
soluções de equações do tipo difusão

*Dissertação de Mestrado submetida
ao Departamento de Física da
Universidade Estadual de Maringá.*

ORIENTADOR: Prof. Dr. Renio dos Santos Mendes

Maringá

2005