

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ  
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA  
PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

MAIKE ANTONIO FAUSTINO DOS SANTOS

**SOBRE DIFUSÕES NORMAL E ANÔMALA -  
FORMALISMOS E APLICAÇÕES**

MARINGÁ

2015

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ  
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA  
PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

MAIKE ANTONIO FAUSTINO DOS SANTOS

**SOBRE DIFUSÕES NORMAL E ANÔMALA -  
FORMALISMOS E APLICAÇÕES**

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção do título de mestre em Física do Programa de Pós-graduação em Física, da Universidade Estadual de Maringá.

Orientador: Prof. Dr. Ervin Kaminski Lenzi

Maringá  
2015

*“[...] I’m starting with the man in the mirror  
I’m asking him to change his ways  
And no message could have been any clearer  
If you wanna make the world a better place  
Take a look at yourself and then make a  
change [...].” (Michael Jackson)*

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)  
(Biblioteca Central - UEM, Maringá, PR, Brasil)

S237s Santos, Maíke Antonio Faustino dos  
Sobre difusões normal e anômala - formalismos e  
aplicações / Maíke Antonio Faustino dos Santos. --  
Maringá, 2015.  
81 f. : il. color., figs. + Apêndice

Orientador: Prof. Dr. Ervin Kaminski Lenzi.  
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de  
Maringá, Centro de Ciências Exatas, Departamento de  
Física, Programa de Pós-Graduação em Física, 2015.

1. Mecânica estatística. 2. Difusão anômala. 3.  
Equações não-lineares. 4. Equação de difusão. 5.  
Equações fracionárias. I. Lenzi, Ervin Kaminski,  
orient. II. Universidade Estadual de Maringá. Centro  
de Ciências Exatas. Departamento de Física. Programa  
de Pós-Graduação em Física. III. Título.

CDD 21.ed. 530.13

MN-001986

# Sumário

Agradecimentos	iii
Resumo	iv
Abstract	v
Introdução	1
<b>1 Uma breve história da difusão</b>	<b>5</b>
<b>2 Aspectos formais na dinâmica das difusões normal e anômala</b>	<b>11</b>
2.1 Dinâmica de Langevin e extensões . . . . .	11
2.1.1 Equação de Langevin generalizada . . . . .	13
2.1.2 Conexão entre equação de Kramers equação de Langevin Generalizada	15
2.2 Dinâmica da equação mestra . . . . .	16
2.2.1 Equações de Fokker-Planck linear e não linear . . . . .	18
2.2.2 Equações de Fokker-Planck, teorema H e entropias . . . . .	19
2.3 Dinâmica do caminhante CTRW . . . . .	22
2.3.1 Equações de difusão fracionárias . . . . .	24
<b>3 Difusão em um sistema com armadilhas - Modelo do Pente</b>	<b>27</b>
3.1 Introdução ao tópico . . . . .	27
3.2 Sobre o modelo do pente generalizado . . . . .	29
3.3 Modelo do pente com parede absorvedora . . . . .	31
3.4 Modelo do pente generalizado e com parede absorvedora . . . . .	37
3.5 Síntese do capítulo . . . . .	41
<b>4 Equações de difusão não-lineares no contexto da mecânica estatística não extensiva</b>	<b>42</b>
4.1 Introdução ao tópico . . . . .	42
4.2 Sobre a equação de difusão não-linear $d$ -dimensional com simetria radial . .	45
4.3 A equação de difusão não-linear independente do tempo . . . . .	46
4.4 A equação de difusão não-linear dependente do tempo . . . . .	49

4.5	As equações de Fisher e de Verhulst generalizadas . . . . .	50
4.6	Síntese do capítulo . . . . .	54
<b>5</b>	<b>Soluções dependentes do tempo para a equação de Schrödinger fracio- nária com potenciais tipo delta</b>	<b>55</b>
5.1	Introdução ao tópico . . . . .	55
5.2	Integral de Feynman sobre trajetórias de Lévy . . . . .	56
5.3	Equação de Schrödinger fracionária para o potencial tipo delta . . . . .	58
5.4	Equação de Schrödinger fracionária para o potencial com duas delta . . . . .	61
5.5	Equação de Schrödinger com operador fracionário temporal . . . . .	63
5.6	Síntese do capítulo . . . . .	66
	<b>Conclusões</b>	<b>67</b>
	<b>Apêndice A</b>	<b>69</b>
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>74</b>

# Agradecimentos

A Deus.

À minha mãe, Marcia, que sempre me incentivou.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Ervin Kaminski Lenzi, pela orientação, motivação, paciência e apoio.

Ao meu amigo Renato Guimarães, pelas discussões importantes para o desenvolvimento deste texto.

A todos/as os/as professores/as que contribuíram direta ou indiretamente para minha formação.

A todos/as os/as funcionários/as do Departamento de Física da Universidade Estadual de Maringá.

À minha irmã, Edilaine Faustino dos Santos, pelo companheirismo.

À Capes, ao CNPq, à Fundação Araucária, ao INCT-SC e ao Departamento de Física da Universidade Estadual de Maringá, pela oportunidade que me foi dada.

E a meus/minhas diversos bons(as) amigos e amigas, pelas conversas, risadas e discussões a respeito dos mais diversos assuntos.

# Resumo

Os processos difusivos têm sido extensivamente estudados nos últimos anos por meio de experimentos, teorias ou simulações numéricas. Neste trabalho, primeiramente, enfatizamos alguns conceitos relacionados às origens da difusão, que decorrem de diversas pesquisas iniciadas no século XIX, além de introduzirmos as definições de difusão anômala. Em um segundo momento, estudamos o desenvolvimento de alguns formalismos que, no cenário da difusão, incorporam os processos anômalos, que são de origem não-markoviana. Em seguida, investigamos alguns problemas que envolvem processos anômalos e obtivemos as soluções utilizando o método da função de Green de duas formas: para um sistema governado por uma equação de Fokker-Planck relacionada com o modelo de pente; e para a equação de Schrödinger fracionária. Finalmente, discutimos, também, algumas ideias oriundas da mecânica estatística não extensiva para investigarmos um sistema governado por uma equação de Fokker-Planck não-linear.

**Palavras-chaves:** Difusão Anômala. Equações Não-Lineares. Equações Fracionárias.

# Abstract

The diffusion processes has been extensively studied in recent decades through experiments, theory and numerical simulations. In this work, firstly, we emphasized some concepts associated to the origins of the diffusion, which follow several researches started in the XIX century, and also introduced the denifition of anomalous diffusion. Secondly, we studied the development of some formalisms that incorporate the non-Markovian anomalous processes in the diffusion scenario. Finally, we investigated some problems involving anomalous processes and obtained the solutions using the method of Green's function for a system governed by a Fokker-Planck equation related to the comb model, and for a fractional Schrödinger equation. We also used some ideas from the nonextensive statistical mechanics to investigate a system governed by a nonlinear Fokker-Planck equation.

**Keywords:** Anomalous Diffusion. Nonlinear Equations. Fractional Equations.

# Lista de Figuras

1.1	Meio poroso . . . . .	8
1.2	Trajectoria típica de macacos aranha . . . . .	10
3.1	Neurônio e modelo do Pente . . . . .	28
3.2	Simulação do modelo do Pente com o ruído branco . . . . .	30
3.3	Simulação do modelo do Pente com o ruído colorido . . . . .	30
3.4	Modelo do pente com parede absorvedora . . . . .	31
3.5	Probabilidade de sobrevivência para o modelo na presença de uma parede absorvedora . . . . .	34
3.6	Segundo momento para o modelo na presença de uma parede absorvedora . . . . .	34
3.7	Probabilidade de sobrevivência . . . . .	36
3.8	Distribuição de primeira passagem no tempo . . . . .	37
3.9	Comportamento do deslocamento quadrático médio para o modelo do Pente fracionário na presença de parede absorvedora . . . . .	40
3.10	Comportamento da probabilidade de sobrevivência para o modelo do Pente fracionário com parede absorvedora . . . . .	40
4.1	Trajectoria para partícula livre de uma equação de difusão não-linear com cauda longa . . . . .	44
4.2	Trajectoria para partícula livre de uma equação de difusão não-linear com cauda curta . . . . .	44
4.3	Distribuição estacionária para equação de Fokker-Planck não-linear . . . . .	48
4.4	Regiões de difusões anômala e usual para o problema não-linear . . . . .	50
4.5	Comportamento da equação de Verhulst generalizada . . . . .	52
4.6	Comportamento associado à regularização . . . . .	53
5.1	Fluxograma relacionando integral de Feynman com equação de Schrödinger . . . . .	55
5.2	Amplitude de propagador para índices fracionários no espaço . . . . .	61
5.3	Amplitude de propagador para índices fracionários no espaço e no tempo . . . . .	65

# Introdução

Historicamente, a ciência teve êxito em muitas descobertas que envolveram sistemas estudados em uma escala menor, ou microscópica, demonstrando, assim, que compreender a dinâmica, a estrutura, dentre outros aspectos, em escalas menores, é de fundamental importância para descrever um comportamento macroscópico. Na Física, por exemplo, a termodinâmica [1] pode ser explicada pela mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs [2], que estuda as leis que regem os sistemas em uma escala microscópica.

Na matemática, temos um exemplo disso dado pelas estruturas fractais que a natureza possui, as quais se repetem quando aumentamos ou diminuimos a escala de observação delas. Descobertas pelo matemático Benoit Mandelbrot, as estruturas fractais, abundantes na natureza, tornaram-se úteis, mais tarde, para diversos sistemas naturais, como a Borboleta de Hofstadter em mecânica quântica [3], os padrões fractais de descongelamento polar de Marte [4], e os cristais de gelo formados em vidros [5]. Os conjuntos de Mandelbrot e Cantor são exemplos de fractais famosos em matemática. O próprio Mandelbrot desenvolveu um estudo sobre rugosidade, em que sua ideia era mensurar um número para qualquer coisa rugosa.<sup>1</sup> E depois, ele ainda mediu a rugosidade do movimento browniano - que será descrito adiante, mas que pode ser visto como uma difusão de partículas microscópicas - e encontrou o número 1,33. Isso é um exemplo evidente da necessidade de mensurar tudo quanto for possível na natureza.

No cenário sobre dinâmica de difusão<sup>2</sup>, o precursor foi o botânico Robert Brown, que investigou, de maneira mais descritiva, o movimento irregular e incessante de grãos de pólen suspensos em água, e que ficou conhecido como *movimento browniano*. A primeira explicação formal desse fenômeno foi desenvolvida pelo físico Albert Einstein que, em 1905, publicou o artigo intitulado “Über die von der molekularen kinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen”

---

<sup>1</sup>Em uma palestra dada por Mandelbrot no TED (do inglês *Technology, Entertainment, Design* - Tecnologia, Entretenimento, Desenvolvimento), intitulada *Fractals and the art of roughness* (Fractais e a arte da rugosidade), ele disse: “*So what I did actually is to study this problem, and I found something quite surprising. That one can measure roughness by a number...*” - Então, o que eu fiz, na verdade, foi estudar o problema, e eu encontrei algo bem surpreendente. E isso pode medir rugosidade por um número... (MANDELBROT, 2010, tradução nossa).

<sup>2</sup>A palavra *difusão* é originária do latim *diffusionem*, cuja forma está associada ao verbo *diffundere*, composto pelo prefixo *dif* (separar, em todas as direções) mais o sufixo *fundere* (derramar, espalhar).

(Sobre a Teoria Cinética Molecular do movimento térmico de partículas suspensas em líquidos quiescentes), em que fornece uma descrição para o movimento browniano. Algumas explicações do movimento browniano foram formuladas posteriormente [6], o que só enriqueceu o estudo sobre difusão. Com o avanço tecnológico, vários experimentos em vários campos da Física foram realizados, mas, novamente, nenhum dos formalismos explicavam os dados obtidos, por se tratar de fenômenos que possuíam interações, o que fez emergir uma nova classe de problemas difusivos. Tais sistemas difusivos foram denominados de anômalos, por fugirem das considerações feitas por Einstein e outros, e por não considerarem as correlações presentes no sistema.

A teoria da difusão *usual*, ou *normal*, que engloba o formalismo de Einstein, é uma das aplicações da mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs. De acordo com a mecânica clássica, conhecendo o hamiltoniano de um sistema de muitos corpos e suas condições iniciais, podemos determinar as equações de movimento e descrever o sistema, mas, para sistemas com muitos corpos interagindo, isso se torna uma tarefa árdua. Uma alternativa consiste em passar de uma descrição microscópica para uma descrição mesoscópica, investigando a evolução probabilística de somente um componente do sistema na presença de uma força externa e de uma variável estocástica, a qual representa, por sua vez, o efeito médio das interações externas. Por isso, é muito importante estudar aspectos probabilísticos da difusão.

Tendo em vista isso tudo, esta dissertação tem como objetivo estudar os formalismos que envolvem os processos difusivos e suas aplicações. Para tanto, o primeiro capítulo trata da difusão somente no que diz respeito à sua história. No segundo capítulo, procuramos introduzir algumas ideias sobre difusão e a necessidade de descrever tais fenômenos matematicamente. No decorrer desse capítulo, foi feito o desenvolvimento de três importantes formalismos que, no âmbito da difusão anômala, possuem grande impacto por introduzirem os fenômenos difusivos anômalos de maneira elegante e convincente. O primeiro desses investiga a dinâmica sob a perspectiva do físico Paul Langevin que, em suma, é simplesmente a segunda lei de Newton com uma força estocástica (aleatória). O segundo formalismo é o que envolve a dinâmica da equação mestra, assim, introduzimos taxas de transição nessa equação, o que pode nos conduzir à equação de difusão, à equação de Fokker-Planck usual e não-linear; investigamos, também, a conexão dessas equações com formas entrópicas. O último dos formalismos é o CTRW (*Continuous Time Random Walk*),<sup>3</sup> que fornece uma equação que depende da distribuição do comprimento dos passos e da distribuição dos tempos entre cada passo. Tal formalismo implica as equações de difusão fracionárias [7]. Os próximos capítulos tratam de problemas que foram abordados utilizando algumas generalizações apresentadas no capítulo 2, de modo a incorporar as anomalias no transporte. Esses três últimos capítulos, que correspondem a aplicações, podem ser lidos independentemente, isso porque o contexto físico deles são distintos e os

---

<sup>3</sup>Caminhante aleatório contínuo no tempo.

formalismos que descrevem os processos difusivos são diversos.

Sobre as aplicações abordadas nesta dissertação, a primeira é sobre um modelo de difusão bidimensional em que a difusão no eixo  $x$ , considerando o sistema de coordenadas cartesiano, ocorre somente em  $y = 0$ . Para  $y \neq 0$ , a difusão ocorre somente em  $y$  fixando a variável  $x$ . A ideia é simples, no entanto, esse sistema difusivo é anômalo, como será mostrado no terceiro capítulo. O problema é investigado via equação de difusão e na presença de uma parede absorvente em  $x = 0$ . Introduzimos, também, derivadas fracionárias temporais nos coeficientes de difusão em ambas as coordenadas. Os índices fracionários são independentes e o intuito é incorporar efeitos de memória e correlações entre as partículas e, por fim, analisar os efeitos que a parede e as derivadas fracionárias possuem sobre algumas propriedades do sistema. Tal problema pode ser tratado via equações de Langevin, o problema sem a presença da parede pode ser visto na referência [8].

No quarto capítulo, em um contexto diferente do anterior, mas ainda envolvendo a equação de difusão, investigaremos as soluções de uma equação de Fokker-Planck não-linear com termos de reação. Era sabido que a equação de Fokker-Planck linear está conectada com a entropia de Boltzmann-Gibbs via teorema H [1]. Como grande parte dos fenômenos na natureza estão intimamente ligados a equações não-lineares, o físico Constantino Tsallis estabeleceu uma conexão da equação de Fokker-Planck não-linear com uma entropia mais geral proposta por ele. Tal entropia carrega um parâmetro  $q$  e, quando  $q \rightarrow 1$ , ela se torna a entropia de Boltzmann-Gibbs. Diversos problemas, não obstante, foram abordados com a proposta de Tsallis [9] para sistemas não extensivos. Nesse contexto, investigaremos a equação de Fokker-Planck não-linear com termos de reação e com um laplaciano  $d$ -dimensional em uma simetria radial. Ainda no mesmo capítulo, investigamos algumas soluções para as equações de Verhulst e Fisher generalizadas [10], que descrevem a dinâmica de populações, tanto espacial quanto temporalmente.

Uma questão interessante é investigar os efeitos da difusão anômala na mecânica quântica, o que será assunto do quinto capítulo deste trabalho. O físico Richard Feynman redescobriu a mecânica quântica assumindo um argumento feito pelo físico Paul Dirac, que dizia que a amplitude de transição de probabilidade de um estado para outro deve ser proporcional à exponencial da ação do sistema. Logo, todos os caminhos na ação contribuíam para a amplitude de transição, e tal forma deveria satisfazer o princípio da correspondência de Born. Assim sendo, Feynman construiu a equação de Schrödinger. Inspirado nessa formulação, o físico Nick Laskin generalizou essa ideia assumindo que a amplitude de transição de probabilidade entre dois estados quânticos era proporcional a uma distribuição de Lévy da ação [11], o que implicaria uma equação de Schrödinger fracionária, a qual, por sua vez, estaria ligada a dimensões fractais. Neste capítulo, procuramos encontrar soluções para a equação de Schrödinger com derivadas fracionárias no tempo e no espaço, considerando os seguintes potenciais: (i)  $V(x) = \mathcal{V}\delta(x)$  e (ii)

$$V(x) = \mathcal{V}_1\delta(x - l_1) + \mathcal{V}_2\delta(x - l_2).$$

Por fim, fazemos uma conclusão geral, abordando os resultados mais interessantes e pertinentes mencionados no trabalho.

# Capítulo 1

## Uma breve história da difusão

A difusão é um fenômeno que está presente em diversos sistemas das mais diversas áreas da ciência. Na natureza, a difusão é um processo que tende a modificar o sistema até que ele atinja um estado de equilíbrio. Compreender os formalismos que descrevem tais fenômenos difusivos é de grande importância, pois nos possibilita entender as causas do mecanismo e suas generalidades. E isso sem considerar sua vasta área de aplicação, já que o fenômeno difusivo ocorre em diversos sistemas físicos e complexos, por exemplo: para difusão de massa, de energia, de torque, de momento.

A importância de se compreender os processos difusivos surgiu com a necessidade de entender como se dava a condução de calor. O matemático Jean Baptiste Joseph Fourier foi um dos pioneiros a estudar e elucidar alguns conceitos centrais sobre difusão [6], especificamente no estudo de condução de calor Eq.1.1. Após alguns pesquisadores importantes para a história da difusão, como Thomas Graham, Adolph Eugen Fick e William Chandler Roberts-Austen, que investigaram a difusão de gases em sólidos, leis fenomenológicas entre outros aspectos, a equação de difusão assumiu uma forma conhecida, que mais tarde seria redescoberta por outros cientistas, como Einstein e Smoluchowski:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \left( \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) \quad (1.1)$$

O matemático francês Pierre Simon de Laplace tentou dar uma prova matemática para o teorema do limite central, que, na época, era de grande importância para a teoria de probabilidades. Tal teorema afirma que a soma de  $n$  variáveis aleatórias distribuídas independente e identicamente  $x_1, x_2, \dots, x_n$ , com valor médio 0 e variância 2, assintoticamente se aproximam de uma distribuição normal ou Gaussiana com valor médio  $\mu$  e variância  $\sigma^2$ . Após esse feito, Fourier, em sua grande obra intitulada *Théorie Analytique de la Chaleur*<sup>1</sup> [12], publicada em 1822, considerou, por exemplo, uma linha infinita contendo uma certa quantidade de calor distribuída em um pequeno segmento  $\omega$  localizado

---

<sup>1</sup>Teoria Analítica do Calor.

em  $x = 0$  e em  $t = 0$ , cuja temperatura aumenta para um valor  $f$ . Em qualquer outra região, a temperatura é zero. Fourier demonstrou que a equação diferencial para esse problema é satisfeita por

$$T = \frac{\omega f}{\sqrt{4\pi\eta t}} e^{-\frac{x^2}{4t}}. \quad (1.2)$$

Sendo  $\omega f$  a força da fonte e  $\eta = K/CD$  é a difusividade térmica.

Após tal feito, iniciou-se os primeiros passos da teoria que ficaria conhecida como *Random Walk* ou caminhada aleatória.

Em 1828, o botânico Robert Brown publicou uma descrição de suas observações microscópicas [13] realizadas em 1827, quando ele estudou o movimento irregular e incessante de partículas suspensas na água, as quais ele denominou de moléculas (*molecules*). A esse movimento, deu-se o nome de movimento browniano, que foi elucidado pelo físico Albert Einstein em 1905, em seu artigo intitulado “Uber die von der molekular kinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flussigkeiten Suspendierten Teilchen” [14], no qual ele descreve a sua teoria de difusão de pequenas esferas em suspensão. Einstein considerou partículas irregularmente dispersas em um líquido no estado de equilíbrio dinâmico, sobre as quais atua uma força que depende somente da posição, e, por simplicidade, o caso é unidimensional. Assumindo que a variação da energia livre é nula em um comprimento infinitesimal  $\delta x$ , Einstein encontrou a relação para o coeficiente de difusão,  $D$ :

$$D = \frac{RT}{N} \frac{1}{6\pi kP}, \quad (1.3)$$

onde  $P$  é o raio das partículas,  $k$  é a viscosidade do líquido,  $N$  é o número de mols,  $T$  a temperatura e  $R$  a constante universal dos gases. Dessa maneira, Einstein demonstrou que o coeficiente de difusão depende (exceto pelas constantes universais e pela temperatura absoluta) somente do coeficiente de viscosidade do líquido e do tamanho das partículas suspensas. Tal relação mais tarde foi encontrada pelo físico francês Paul Langevin, que utilizou um formalismo ainda mais simples e mais intuitivo - que discutiremos com mais detalhes no decorrer deste capítulo. Ainda neste mesmo artigo [14], Einstein sugeriu que o movimento entre as partículas fosse independente e que o tempo observável fosse muito maior que o tempo de colisão entre as partículas, por conseguinte, derivou uma equação diferencial para a densidade de partículas em função do espaço e do tempo, [14]:

$$\frac{\partial}{\partial t} f(x, t) = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x, t). \quad (1.4)$$

Dessa forma, Einstein obteve a expressão do percurso quadrático médio do movimento

irregular das partículas suspensas em um líquido,

$$\langle x^2 \rangle = 2Dt = \frac{RT}{N} \frac{1}{3\pi kP} t. \quad (1.5)$$

Tal expressão forneceu um caminho para determinar o número de Avogadro.<sup>2</sup> As experiências de Jean Perrin [15] e colaboradores consistiram em registrar a observação no microscópico do movimento de um conjunto grande de partículas em suspensão, cuja forma esférica podia ser muito bem controlada. Nas suspensões utilizadas, essas experiências verificaram o comportamento ideal da pressão osmótica e a lei de força de Stokes, ingredientes importantes na teoria de Einstein. Além disso, produziram, também, uma nova estimativa para o número de Avogadro. Em 1926, Perrin ganhou o prêmio Nobel de Física devido ao trabalho intitulado *Discontinuous Structure of Matter* [15], no qual se encontram as medidas do movimento browniano com base nos trabalhos de Einstein e Smoluchowski.

O físico polonês Marian Smoluchowski ressaltou que não é possível estimar a velocidade de uma partícula ao observá-la no microscópio, apenas observar a sequência das posições médias da partícula, resultante da soma de uma enorme quantidade de segmentos diminutos e totalmente invisíveis, ao longo da qual a partícula realiza movimento térmico rápido. O resultado visível é o movimento difusivo no espaço da posição com mudanças de direção, permitindo a descrição em termos de um aparente caminho livre médio. Ou seja, o movimento de uma partícula browniana é resultado da flutuação no número de colisões com os átomos do fluido e, enquanto Einstein obteve o percurso médio quadrático partindo de leis gerais da mecânica estatística e da difusão, Smoluchowski o fez por meio de uma análise detalhada do mecanismo da partícula browniana [16], [17] e [18].

Smoluchowski inicialmente encontrou que a probabilidade (condicional)  $W(x, t)$  de que uma partícula suspensa que começa do ponto  $x_0$ , na ausência de um campo externo, alcance o ponto  $x$  no tempo  $t$  é dada por uma distribuição gaussiana. Ele também encontrou a probabilidade condicional do movimento browniano para uma partícula sujeita a um campo externo simples, como o gravitacional, o centrífugo e o de um oscilador harmônico simples,  $V(x) = \alpha x^2$ , em que Smoluchowski pode identificar uma forma para a equação de difusão que implicava nessas soluções encontradas por ele [19] e [20]. Tal equação tinha a forma daquela que, tempos depois, seria chamada de Fokker-Planck.

Neste seguimento sobre o movimento browniano, o físico Adriaan Daniel Fokker publicou, em 1914, um artigo intitulado “Die mittlere Energie rotierender elektrischer Dipole im Strahlungsfeld”<sup>3</sup> [21], no qual considerou um grande número de dipolos elétricos na presença de um campo de radiação, tendo como objetivo determinar a distribuição de probabilidade para o caso estacionário e, conseqüentemente, a energia média de rotação

<sup>2</sup>É o número de átomos em 12 gramas do isótopo de carbono-12.

<sup>3</sup>Energia média de rotação de dipolos elétricos em um campo de radiação.

em função do campo. Fokker obteve uma equação que diz ser uma generalização daquela obtida por Einstein em seu trabalho sobre o movimento browniano. Tal artigo de Fokker foi útil para Max Planck estudar o calor específico de moléculas diatômicas e suas linhas espectrais. Em 1917, Fokker publicou o artigo intitulado “Uber einen Satz der statistischen Dynamik und seine Erweiterung in der Quantentheorie” [22], no qual Planck estendeu o resultado de Fokker, além de demonstrá-lo formalmente. A equação publicada por Planck possui a forma

$$\frac{\partial}{\partial t}W(q, t) = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial q^2}g(q)W(q, t) - \frac{\partial}{\partial q}f(q)W(q, t), \quad (1.6)$$

que fornece a probabilidade de se encontrar uma partícula browniana em um dado momento  $q$  para um dado tempo  $t$ , sob a influência de uma força externa  $f(t) = \frac{dq}{dt}$ .

Desde então, diversos formalismos e generalizações foram feitos neste palco sobre difusão e as formulações para descrever tais sistemas tomaram grandes proporções, por exemplo: hoje é possível simular tais processos considerando a interação de muitos corpos, a geometria da partícula, entre outros fatores. Mas a natureza certamente é mais complexa do que podemos imaginar. De fato, se considerarmos a interação, a energia, o momento, a dimensão, a inhomogeneidade do meio (por exemplo, meio poroso Fig.(1.1), entre outros fatores, a natureza do processo de difusão, na maioria das vezes, torna-se anômala, por não poder ser aproximada para um caso mais ideal.

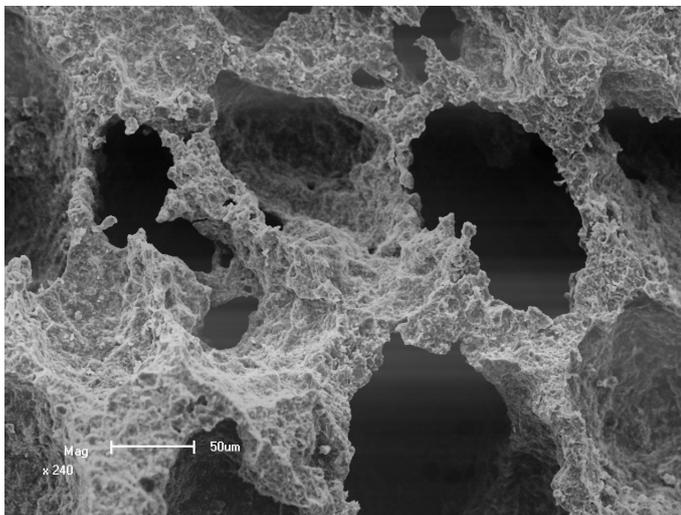


Figura 1.1: Meio poroso. Fonte: Imagem obtida por meio da técnica da Microscopia Eletrônica de Varredura no Laboratório de Materiais - Física/UEM - Crédito: Taiana Bonadio.

Em 1926, o cientista inglês Lewis Fry Richardson publicou o artigo “Atmospheric Diffusion shown on a Distance-Neighbour Graph” [23], que se baseia em medidas da difusividade  $D$  de sistemas que vão desde tubos capilares até ciclones, para propor um formalismo coerente que compreenda toda essa variação da difusividade. Richardson, ao

notar que a equação de Fick<sup>4</sup> não fornecia resultados satisfatório, propôs uma equação com o coeficiente de difusão dependente da variável espacial e denominou-a de *Non-Fickian Diffusion*. Com esse coeficiente de difusão, ele ajustou os dados à variância e percebeu que esta era proporcional a  $t^3$ , comportamento que denominado superdifusão, porque a variância crescia de uma forma mais rápida que a usual descoberta por Einstein e Langevin.

Três décadas depois, a difusão anômala apareceu principalmente nas pesquisas sobre polímeros [24]- [25]. Na década seguinte, várias pesquisas experimentais demonstraram a existência de difusão não usual em plasmas [26]- [27], em metais [28] e em semicondutores [29], ou seja, desde essa época, a difusão anômala é estudada na teoria de transporte. Apesar de tantas evidências experimentais, os modelos teóricos da época não conseguiam explicar as anomalias difusivas, necessitando, portanto, de novas teorias para descrever tais fenômenos.

Em relação a essas novas teorias, houve várias generalizações para que esses diversos comportamentos fossem incorporados. Uma ferramenta de grande importância para o desenvolvimento de novas propostas foi a generalização do teorema do limite central. Os matemáticos Boris Vladimirovich Gnedenko e Andrey Kolmogorov generalizaram o teorema do limite central para distribuições com variância infinita, em que o segundo ou o primeiro momento é infinito. Tal teorema fornece que, assintoticamente, se obtém uma distribuição de Lévy. Se o teorema do limite central representava a difusão usual, este representa uma difusão mais anômala, pois o comprimento dos passos pode ser maior, ou seja, a cauda da distribuição é longa<sup>5</sup>, que possui aplicações como no movimento de animais durante forrageamento [30], na difusão de átomos frios [31] e em alguns sistemas fora do equilíbrio [32]. As distribuições de Lévy e outras que possuem cauda longa foram encontradas a partir de resoluções de equações de difusão: de ordem não inteira *fracionárias*, não-lineares, com um potencial de longo alcance, com termos de reação, com coeficiente de difusão com dependência espacial e temporal (*caminhante turbulento*), não-lineares no contexto da mecânica estatística não extensiva, entre outras; e a partir de outros formalismos, como a equação de Langevin generalizada com correlação de longo alcance, a equação mestra, as equações para o caminhante aleatório *Random Walk*. Vários experimentos foram realizados e, juntamente com os avanços dos formalismos, tornou-se convenção classificar difusão anômala em relação à distribuição gaussiana do movimento browniano como sistemas superdifusivos e subdifusivos através da variância  $\sigma^2 \sim t^\alpha$ , sendo que  $\alpha = 1$  representa a difusão normal,  $\alpha > 1$  representa a superdifusão e  $\alpha < 1$  representa a subdifusão, que é uma maneira simples de analisar o comportamento da cauda da

---

<sup>4</sup>A equação de Fick no equilíbrio dinâmico é dada por:  $\frac{\delta y}{\delta t} = D \frac{\delta^2 y}{\delta x^2}$ , sendo  $y$  a concentração da solução.

<sup>5</sup>A cauda longa é o nome de uma característica conhecida de algumas distribuições estatísticas (como as leis de potência, a distribuição de Pareto e a lei de Zipf). Quando comparada a uma distribuição normal, ou Gaussiana, a distribuição de cauda longa apresenta uma quantidade muito maior de dados ao longo da cauda.

distribuição.

Juntamente com o desenvolvimento dos formalismos, os fenômenos anômalos começaram a aparecer nos mais diversos sistemas. Atualmente, diversos formalismos têm sido desenvolvidos e as aplicações ocorrem nas mais diversas áreas da Física [33] como em sistemas complexos. Um exemplo interessante em sistemas complexos está presente no comportamento do macaco-aranha Fig. 1.2.

No capítulo seguinte, vamos descrever três formalismos importantes no cenário da difusão anômala, por gerar distribuições generalizadas. O primeiro deles é sobre a dinâmica da equação de Langevin, que, de maneira intuitiva e clara, explica o movimento browniano. No segundo caso, a dinâmica da equação mestra, e como ela gera a equação de Fokker-Planck usual e não-linear no contexto da mecânica estatística generalizada. A terceira seção trata do caminhante aleatório contínuo no tempo (*Continuous Times Random Walks*) e, desse formalismo, derivamos equações de difusão fracionárias, que são fundamentais nesse contexto de movimento browniano generalizado.

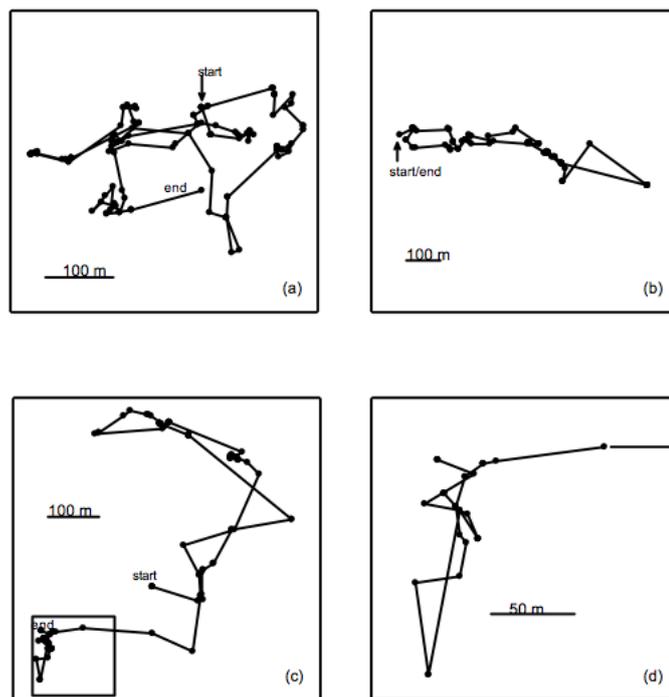


Figura 1.2: Típicas trajetórias de macacos-aranha na floresta da península de Yucatan no México, que correspondem a um processo difusivo não usual [34].

## Capítulo 2

# Aspectos formais na dinâmica das difusões normal e anômala

Neste capítulo, o principal objetivo é apresentar os aspectos formais que modelam matematicamente um fenômeno importante na natureza, a difusão. Para tanto vamos apresentar brevemente como os principais formalismos foram construídos e porque eles podem incorporar um tipo de difusão mais geral.

### 2.1 Dinâmica de Langevin e extensões

Neste cenário sobre difusão, o formalismo desenvolvido pelo físico francês Paul Langevin no artigo intitulado “Sur la théorie du mouvement brownien” [35] descreve o processo de maneira diferente das ideias de Einstein e Smoluchowski. O formalismo de Langevin permitia que vários problemas envolvendo difusão pudessem ser tratados de maneira mais fácil, e algumas generalizações foram desenvolvidas juntamente com as equações de difusão e suas extensões.

Langevin considerou, primeiramente, o teorema da equipartição da energia cinética para vários graus de liberdade de um sistema em equilíbrio térmico, em que a partícula suspensa em qualquer tipo de líquido tem uma energia cinética média  $\frac{RT}{2N}$ , igual a de uma molécula de gás em uma dada direção na mesma temperatura, sendo  $R$  a constante universal dos gases,  $T$  a temperatura do gás e  $N$  o número de mols do gás. Se  $\nu = \frac{dx}{dt}$  é a velocidade na direção em consideração, temos, então, que, na média de um grande número de partículas idênticas de massa  $m$ ,

$$m\overline{\nu^2} = \frac{RT}{N}. \quad (2.1)$$

A partícula considerada é grande em relação à distância média entre as moléculas do líquido. E, movendo-se com velocidade  $\nu$  em relação ao fluido, ela sofre uma reação viscosa

dada por  $-6\pi a m \nu$  de acordo com a fórmula de Stokes, em que  $a$  é o raio da partícula e  $\nu$  é a viscosidade do fluido. Na verdade, esse valor é apenas uma média e, em virtude da irregularidade dos impactos das moléculas ao redor, a interação do fluido com a partícula oscila em torno do valor precedente de tal maneira que a equação de movimento é dada por

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -6\pi a \mu \frac{dx}{dt} + X. \quad (2.2)$$

A força externa  $X$  é a variável estocástica que define a dinâmica no sistema. Tal força é aleatória e pode ser positiva ou negativa, sendo que a correlação temporal é da forma  $\langle X(t)X(t') \rangle \sim \delta(t - t')$ , ou seja, o sistema possui uma correlação de curto alcance, o que descreve o caso sem interação. Quando isso ocorre, tal variável é dita ser um ruído branco ou gaussiano [36]. Mais adiante, vamos discutir o caso em que o ruído possui uma função correlação de longo alcance.

Seguindo a discussão de Langevin, a equação (2.2) multiplicada por  $x$  pode ser reescrita da seguinte forma,

$$\frac{m}{2} \frac{d^2}{dt^2} x^2 - \nu^2 = -3\pi a \mu \frac{d}{dt} x^2 + Xx. \quad (2.3)$$

Se considerarmos um número grande de partículas idênticas e tomarmos a média da Eq. (2.3) escrita para cada uma delas, o valor médio do termo  $Xx$  é, evidentemente, nulo, devido às irregularidades das forças complementares  $X$ . Se escolhermos  $z = \frac{dx^2}{dt}$ , temos que

$$\frac{m}{2} \frac{dz}{dt} + 3\pi \mu a z = \frac{RT}{N}. \quad (2.4)$$

A solução geral,

$$z = \frac{RT}{N} \frac{1}{3\pi \mu a} + C e^{-\frac{6\pi \mu a}{m} t},$$

entra em um regime constante, no qual ela assume o valor constante do primeiro termo no fim de um tempo da ordem de  $\frac{m}{6\pi \mu a}$  ou de aproximadamente  $10^{-8}$  segundos para as partículas para as quais o movimento browniano é observável.

Portanto, para uma taxa constante de agitação, temos

$$\overline{\frac{dx^2}{dt}} = \frac{RT}{N} \frac{1}{3\pi \mu a}, \quad (2.5)$$

e, conseqüentemente para um intervalo  $\tau$ ,

$$\overline{x^2} - \overline{x_0^2} = \frac{RT}{N} \frac{1}{3\pi \mu a} \tau, \quad (2.6)$$

o deslocamento da partícula é dado por

$$x = x_0 + \Delta_x.$$

E, uma vez que esses deslocamentos são indiferentemente positivos e negativos, podemos escrever

$$\overline{\Delta_x^2} = \overline{x^2} - \overline{x_0^2} = \frac{RT}{N} \frac{1}{3\pi\mu a} \tau. \quad (2.7)$$

Dessa maneira, Langevin, aplicando a segunda lei de Newton para representar uma partícula browniana e introduzindo uma variável estocástica, obteve a mesma fórmula obtida por Einstein. Esse formalismo, mais tarde, passou a ser formalmente investigado e amplamente utilizado.

Na próxima seção, apresentaremos a Equação de Langevin Generalizada.

### 2.1.1 Equação de Langevin generalizada

A equação de Langevin, quando generalizada, considera uma classe de ruídos e funções correlações que podem ser, por sua vez, uma ferramenta poderosa para analisar vários sistemas físicos e complexos. Por exemplo, a dinâmica estocástica de processos não-markovianos presentes em vários cenários, tal como as reações de fusão nuclear [37], cuja não localidade pode induzir um efeito memória na velocidade da partícula; a dinâmica anômala em polímeros no processo de relaxação [38]; os meios viscoelásticos [39]; o decaimento não exponencial no tempo em processos de dinâmica molecular [40]; e os sistemas quânticos não estacionários [41].

A origem da Equação de Langevin Generalizada (ELG) se remonta ao ano de 1964, quando Hazime Mori desenvolveu um formalismo que permitiu investigar processos onde a interação entre as partículas não é instantânea [42]. Tal formalismo tornou-se uma nova ferramenta para os estudos de sistemas com memória, em que o ruído em um dado instante está correlacionado com o ruído em outro momento e a trajetória da partícula permanece como se o passado tivesse influência no presente. A equação de Langevin unidimensional generalizada é dada por

$$m \frac{d^2}{dt^2} x(t) = -m\gamma \int_0^t \zeta(t-t') \frac{d}{dt'} x(t') dt' + X(t), \quad (2.8)$$

em que  $\zeta(t)$  é a função correlação do sistema e  $X(t)$  consiste na força estocástica a que a partícula está sendo submetida. A memória surge aqui explicitamente e, em princípio, permite estudar um amplo número de processos correlacionados. As funções  $\zeta(t)$  e  $X(t)$

satisfazem as seguintes propriedades

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \zeta(t) = 0, \quad (2.9)$$

$$\langle X(t) \rangle = 0, \quad (2.10)$$

e

$$\mathcal{C}(t - t') = \langle X(t)X(t') \rangle = m\gamma k_B T \zeta(t - t'). \quad (2.11)$$

Essa última equação representa a correlação entre as forças aleatórias que agem no sistema tanto no tempo presente  $t$ , quanto nos tempos passados  $t'$ , e isso representa um efeito memória no sistema. Note que a Eq.(2.9) mostra que o passado distante não tem influência sobre o sistema e representa uma condição de mistura, pois grande parte da informação do passado foi perdida, ou seja, o sistema independe da maneira como foi preparado, está termalizado. Para o caso em que o sistema não apresenta correlação, temos  $\zeta(t - t') = \delta(t - t')$  (ruído branco), o que implica

$$\langle X(t)X(t') \rangle = m\gamma k_B T \delta(t - t'),$$

que é conhecido como teorema da flutuação e dissipação [43], pois relaciona as forças estocásticas responsáveis pela flutuação com a viscosidade do sistema  $\gamma$ . Mas, neste caso, o instante  $t$  não tem relação nenhuma com o instante  $t'$  para  $t \neq t'$ .

Sobre a força estocástica  $X(t)$ , ela pode ser escolhida aleatoriamente de uma distribuição com cauda longa ou gerada de uma outra equação de Langevin com ruído branco. Se assim o for, dizemos que o ruído pode não ser mais branco, e sim colorido, pois não é mais tirado de uma distribuição gaussiana. Se a força estocástica satisfaz a Eq. (2.11), dizemos, então, que ela satisfaz o teorema da dissipação e flutuação generalizado.

Um exemplo de ruído que possui correlação de longo alcance é o ruído fracionário, que possui a função correlação  $\langle B_b(t')B_h(t-t') \rangle \sim t^{2h-2}$ , em que  $h$  é o expoente de Hurst [44]. Para  $h = 1/2$ , recuperamos o ruído branco; para  $h < 1/2$ , o sistema é superdifusivo; e, para  $h > 1/2$ , o sistema é subdifusivo.

A constante de difusão definida por Kubo [45],  $D = \int_0^\infty \mathcal{C}(t')dt'$ , faz sentido apenas quando a integral temporal de  $\mathcal{C}(t)$  converge. O resultado também não faz muito sentido quando a integral é nula. Assim, podemos escrever a constante de difusão da seguinte forma

$$D = \int_0^t \mathcal{C}(t')dt',$$

e, logo, o desvio quadrático médio

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle x^2 \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} 2D(t)t. \quad (2.12)$$

Portanto, a equação de Langevin generalizada inclui processos não-markovianos e anômalos. Há outras generalizações da equação de Langevin, inclusive uma importante foi feita pelo matemático Kiyoshi Itô [46], que escreveu a seguinte equação:

$$\frac{dx}{dt} = \mathcal{A}(x, t) + \mathcal{B}(x, t)X(t) \quad (2.13)$$

que, para um *ensemble*<sup>1</sup> de partículas, e onde  $\mathcal{A}(x, t)$  e  $\mathcal{B}(x, t)$  são funções quaisquer, a equação 2.13 corresponde à equação:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = -\frac{\partial}{\partial x} [\mathcal{A}(x, t)P(x, t)] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [\mathcal{B}^2(x, t)P(x, t)]. \quad (2.14)$$

Na próxima seção, estudaremos, via equação mestra, como se obtém a Eq. (2.14). Antes disso, vamos destacar alguns pontos da equação que descreve a probabilidade no espaço de fase e que representa a ELG Eq. (2.8).

## 2.1.2 Conexão entre equação de Kramers equação de Langevin Generalizada

Agora, vamos focar na equação generalizada de Kramers, que nos fornece a densidade de probabilidade  $\rho(x, v, t)$  no espaço de fase para um dado instante de tempo  $t$ . Segundo a abordagem proposta por Khan e Reynolds [47], tal equação nos fornece uma equação de difusão generalizada que engloba efeitos que podem incorporar comportamentos anômalos para difusão. Ela é dada por

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial}{\partial t} + v \frac{\partial}{\partial x} \right) \rho(x, v, t) &= -\frac{\partial}{\partial v} \left[ \rho(x, v, t) \int_0^t \zeta(t-t')v(t')dt' \right] \\ &+ \frac{\partial^2}{\partial v^2} \int_0^t dt' \langle X(t)X(t') \rangle \left\langle \delta(v(t) - v) \exp \left( \int_\tau^t \zeta(u)du \right) \right\rangle, \end{aligned} \quad (2.15)$$

e é correspondente a ELG, como apontado em [48], exceto pelo comportamento balístico que a equação de Langevin apresenta para tempos curtos. Observamos que a equação de difusão sempre envolve a variável espacial. Dessa forma, é possível obter as seguintes equações:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{P} + \frac{\partial}{\partial x} \mathcal{P}\bar{v} = 0 \quad (2.16)$$

---

<sup>1</sup>É um conjunto de sistemas, que diferem em condições intrínsecas (força estocástica), mas são estatisticamente idênticos.

e

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{P}\bar{v} + \frac{\partial}{\partial x} \mathcal{P}\bar{v}^2 + \int_0^t \zeta(t-t')(\mathcal{P}\bar{v})dt' = 0, \quad (2.17)$$

onde  $\mathcal{P} = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x, v, t)dv$ ,  $\mathcal{P}\bar{v} = \int_{-\infty}^{\infty} v\rho(x, v, t)dv$  e  $\mathcal{P}\bar{v}^2 = \int_{-\infty}^{\infty} v^2\rho(x, v, t)dv$ . Formalmente, a Eq. (2.16) é a equação de continuidade e foi obtida integrando a Eq. (2.15) em relação a  $v$ . A Eq. (2.17) foi obtida multiplicando a Eq. (2.16) por  $v$  e integrando nessa mesma variável. Substituindo a Eq. (2.16) na Eq. (2.17), obtemos a seguinte equação de difusão:

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathcal{P} + \int_0^t dt' \frac{\partial}{\partial t'} \mathcal{P}\zeta(t-t') = \frac{\partial^2}{\partial x^2} (\mathcal{P}\bar{v}^2). \quad (2.18)$$

Dependendo da escolha de  $\zeta(t)$  e da escala temporal considerada, a Eq. (2.18) pode ser relacionada a diversos casos, tal como as equações de difusão fracionárias que discutiremos, com mais profundidade, mais adiante. Em particular, a Eq. (2.18) pode ser considerada uma generalização da equação de Cattaneo [49], que é definida para  $\zeta(t-t') = \delta(t-t')$ , que se trata de uma equação de difusão hiperbólica. Com a equação de Cattaneo podemos tratar situações em que o número de colisões é finito no tempo, situação esta que não está presente na equação de difusão usual. De fato, a equação de difusão é uma aproximação válida sempre que a escala de tempo é grande se comparada à escala das colisões microscópicas.

Como apontado em [50], uma das propriedades mais intrigantes da equação de difusão é que a velocidade de propagação da informação é infinita. No entanto, a inclusão de uma frequência de colisão finita no sistema pode criar dificuldades adicionais para tratar o problema. Em contrapartida, a Eq. (2.18) possui o termo de segunda derivada no tempo e um *Kernel* de convolução com a função de correlação, e tais termos implementam memória temporal no sistema e incorporam processos não-markovianos. Em particular, o primeiro termo do lado esquerdo da Eq. (2.18) representa uma equação do tipo Cattaneo; e o segundo pode incorporar efeitos memória por poder incluir funções correlações do tipo lei de potência, que, em alguns casos, podem representar uma derivada de ordem não inteira (fracionária).

## 2.2 Dinâmica da equação mestra

A equação que governa a dinâmica estocástica de processos markovianos<sup>2</sup> (memória temporal curta) é conhecida como equação mestra, sendo importante em física estatística devido a sua vasta área de aplicação. A mesma tem sido aplicada, também, a diversos

---

<sup>2</sup>A probabilidade de que um objeto passe de um estado para outro (que pode ser o mesmo que o inicial) em um período de tempo depende apenas desses dois estados.

problemas em química, biologia, dinâmica de populações, semicondutores, entre outros casos.

Uma vez que esses sistemas estocásticos evoluem no tempo, a probabilidade de encontrar o sistema em um dado estado muda até ele atingir um estado estacionário, dinâmica esta incorporada à equação mestra.

Nesta seção, vamos dar uma ideia da construção dessa equação e mostrar quais considerações devem ser feitas para que se possa obter a equação de Fokker Planck.

Para dar uma prova breve, vamos tomar a relação de Chapman-Kolmogorov [51], que é dada por

$$P(n, t_f; i, t_i) = \sum_m P(m, t_m; i, t_i) P(n, t_f; m, t_m).$$

Somando sobre as variáveis iniciais, temos

$$P(n, t_f) = \sum_m P(m, t; ) P(m, t; n, t_f).$$

sendo  $t_m = t$ . Vamos interpretar  $P(m, t; n, t_f)$  como uma probabilidade de transição e, para tanto, considerar  $t_f = t + \Delta t$ . Fazendo a derivada no tempo em  $P(n, t)$ , temos

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} P(n, t) &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left( \frac{P(n, t + \Delta t) - P(n, t)}{\Delta t} \right) \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \sum P(m, t) (P(m, t; n, t + \Delta t) - \delta_{m,n}). \end{aligned} \quad (2.19)$$

Como  $\Delta t$  é muito pequeno, podemos expandir  $P(n, t + \Delta t)$  em torno de zero, obtendo, assim,

$$P(m, t; n, t + \Delta t) = \delta_{m,n} \left[ 1 - \Delta t \sum_l w_{l,n}(t) \right] + w_{m,n} \Delta t + \dots, \quad (2.20)$$

em que  $w_{m,n}$  é a taxa de probabilidade de transição. Na Eq. (2.20),  $w_{m,n} \Delta t$  é a probabilidade de ocorrer uma transição do estado  $m$  para  $n$  no intervalo  $\Delta t$ . Similarmente,  $\left[ 1 - \Delta t \sum_l w_{l,n}(t) \right]$  é a probabilidade de não ocorrer tal transição. Substituindo a Eq. (2.20) em Eq. (2.19), obtemos a chamada equação mestra:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(n, t) = \sum_m [P(m, t) w_{m,n}(t) - P(n, t) w_{n,m}(t)]. \quad (2.21)$$

Ela nos fornece a taxa de mudança da probabilidade  $P(n, t)$  devido a transições do estado  $n$  para todos os demais estados (primeiro termo do lado direito da Eq.(2.21) e devido à transição dos demais estados para o estado  $n$  (segundo termo do lado direito da Eq.(2.21)).

A equação mestra em sua forma contínua pode ser escrita como:

$$\frac{\partial}{\partial t}P(x, t) = \int dx' [P(x', t)w_{x',x}(t) - P(x, t)w_{x,x'}(t)]. \quad (2.22)$$

Na próxima seção, estudaremos equações de difusão fracionárias e mostraremos uma conexão do formalismo do caminhante aleatório com a equação mestra.

### 2.2.1 Equações de Fokker-Planck linear e não linear

Vamos iniciar o procedimento de obtenção da equação de Fokker Planck fazendo a derivação da equação de difusão a partir da equação mestra. Sabemos que, para o movimento aleatório, a probabilidade do caminhante dar um passo para a direita ou para a esquerda é a mesma, portanto, a equação mestra pode ser escrita como

$$\frac{\partial}{\partial t}P(\Delta n, t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} [P(\Delta m, t)w_{m,n}(\Delta, t) - P(\Delta n, t)w_{n,m}(\Delta, t)], \quad (2.23)$$

em que  $P(\Delta n, t)$  é a probabilidade de se encontrar o caminhante no ponto  $x = \Delta n$  no tempo  $t$ . Para esse caso, a taxa de transição será dada por

$$w_{k,l}(\Delta, t) = \frac{\mathcal{D}}{\Delta^2}(\delta_{k,l+1} + \delta_{k,l-1}). \quad (2.24)$$

Substituindo a Eq.(2.24) em Eq.(2.23), obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}P(x, t) &= \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{\mathcal{D}}{\Delta^2} [P(\Delta + x, t) + P(x - \Delta, t) - 2P(x, t)] \\ &= \mathcal{D} \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t). \end{aligned} \quad (2.25)$$

Concluimos, então, que, no limite de passos infinitesimais, a equação mestra se reduz à equação de difusão. Para obtermos a equação de Fokker Planck, devemos escolher a taxa de transição de probabilidade como sendo

$$w_{k,l}(\Delta, t) = \delta_{k,l+1}A(k\Delta) + \frac{\mathcal{D}}{\Delta^2}(\delta_{k,l+1} + \delta_{k,l-1}), \quad (2.26)$$

e tal equação incorpora uma força sobre o sistema. E, como foi feito anteriormente, obtemos

$$\frac{\partial}{\partial t}P(x, t) = -\frac{\partial}{\partial x}[A(x)P(x, t)] + \mathcal{D} \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t), \quad (2.27)$$

que é a equação de Fokker-Planck. Na próxima seção, iremos derivar a equação de Fokker-Planck não linear e estabelecer a conexão dessa com uma entropia generalizada.

Nesse cenário de equação mestra, podemos investigar a difusão anômala. Esse tipo de difusão, como dito, pode envolver distribuições de cauda longa ou curta, devido aos efeitos do comportamento coletivo das partículas constituintes entre outros fatores. Para tentar obter uma equação de difusão não linear via equação mestra, a construção é feita de maneira fenomenológica, impondo a seguinte taxa de transição:

$$w_{k,l}(\Delta, t) = -\frac{1}{\Delta}\delta_{k,l+1}f(k\Delta)a[P(k\Delta, t)] + \frac{1}{\Delta^2}(\delta_{k,l+1} + \delta_{k,l-1})\Gamma[P(k\Delta, t), R(l\Delta, t)]. \quad (2.28)$$

Na equação acima,  $f(k\Delta)$  representa uma força externa,  $a[P]$  e  $\Gamma[P, R]$  são funcionais que dependem de  $P$  e  $R$  de estados  $k$  e  $l$  diferentes. Comparando com a Eq. (2.26), notamos que os funcionais modificam as taxas de transição, que antes eram lineares. Fazendo  $x = l\Delta$  e, posteriormente, aplicando o limite de  $\Delta \rightarrow 0$ , obtemos a seguinte equação:

$$\frac{\partial}{\partial t}P(x, t) = -\frac{\partial}{\partial x}\{f(x)\Psi[P(x, t)]\} + \frac{\partial}{\partial x}\left\{\Omega[P(x, t)]\frac{\partial}{\partial x}P(x, t)\right\}, \quad (2.29)$$

sendo

$$\Psi[P(x, t)] = P(x, t)a[P(x, t)], \quad (2.30)$$

e

$$\Omega[P(x, t)] = \left[\Gamma[P(x, t)] + P(x, t)\left(\frac{\partial}{\partial P}\Gamma[P, R] - \frac{\partial}{\partial R}\Gamma[P, R]\right)\right]_{P=R}. \quad (2.31)$$

A equação Eq. (2.29) descreve a difusão do sistema em condições não lineares e na presença de uma força externa  $f(x) = -d\phi(x)/dx$ . Os funcionais  $\Omega[P]$  e  $\Gamma[P]$  são de classe  $C^1$ , ou seja, a primeira derivada é contínua.

A Eq. (2.29) é uma generalização da equação de Fokker-Planck, e tal proposta é interessante, pois ela está conectada a uma generalização da entropia através do teorema H.

## 2.2.2 Equações de Fokker-Planck, teorema H e entropias

A termodinâmica é uma teoria fenomenológica [1], diferente, portanto, da mecânica estatística, cuja teoria estuda os componentes de um sistema e assume que, para um *ensemble*, esses possuem um comportamento estatístico idêntico. A mecânica estatística [2] teve início com as pesquisas dos físicos James Clerk Maxwell e Ludwig Boltzmann, que conseguiram explicar a termodinâmica usando médias sobre os constituintes do sistema. Os dois pesquisadores atribuíram uma série de vínculos matemáticos e hipóteses, o que restringiu a teoria de ser aplicada em sistemas mais complexos e fora do equilíbrio. Na

termodinâmica, a entropia é uma grandeza que mensura o grau de irreversibilidade de um sistema e, na mecânica estatística, ela aparece como uma função do número de estados acessíveis do sistema. Nesse caso, ela ficou conhecida como entropia de Boltzmann-Gibbs. A entropia  $S_{BG}$  de Boltzmann-Gibbs está conectada à equação de Fokker-Planck por meio do teorema H, pois a equação de Fokker-Planck tem como soluções formas que maximizam a forma entrópica.

O teorema H foi proposto também por Boltzmann, que investigou a evolução temporal das distribuições de partículas de um gás diluído com inomogeneidades. Se nenhuma força externa atua sobre o sistema, criando, assim, soluções estacionárias, o sistema deve tender ao equilíbrio após um tempo suficientemente longo. Tal resultado ficou conhecido como teorema H [2]. A ideia é simples, seja  $f(t)$  uma função monótona, decrescente e limitada inferiormente, ela se torna estacionária para o limite  $t \rightarrow \infty$  e obedece à seguinte relação:  $\frac{df}{dt} \leq 0$ . A função H de Boltzmann é um caso da função anterior. Podemos definir um funcional semelhante para sistemas fora do equilíbrio e na presença de campo potencial [52].

Para proceder com o raciocínio, suponhamos uma forma entropica geral, escrita da seguinte forma:

$$S[P] = \int_{-\infty}^{\infty} dx g[P(x, t)]; \quad g(0) = g(1) = 0; \quad \frac{d^2 g}{dP^2} \leq 0, \quad (2.32)$$

a desigualdade define a concavidade da entropia e impomos que  $g[P]$  é de classe  $C^2$ . Vamos definir energia livre e energia interna como

$$F = U - \frac{1}{\beta} S; \quad U = \int_{-\infty}^{\infty} dx \phi(x) P(x, t), \quad (2.33)$$

respectivamente, sendo  $\beta = \frac{1}{T k_B}$ . Queremos mostrar que

$$\frac{dF}{dt} \leq 0.$$

Fazendo a derivada no tempo para Eq. (2.33) e usando a definição para a energia interna e a entropia, obtemos:

$$\begin{aligned} \frac{dF}{dt} &= \frac{d}{dt} \left( \int_{-\infty}^{\infty} dx \phi(x) P(x, t) - \frac{1}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} dx g[P(x, t)] \right) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \left( \phi(x) - \frac{1}{\beta} \frac{dg[P]}{dP} \right) \frac{dP}{dt}. \end{aligned} \quad (2.34)$$

Substituindo a Eq. (2.29) na Eq. (2.34) e desenvolvendo as integrais, obtemos

$$\begin{aligned} \frac{dF}{dt} &= - \int_{-\infty}^{\infty} dx \left\{ \Psi[P] \frac{d\phi(x)}{dx} + \Omega[P] \frac{\partial P}{\partial x} \right\} \\ &\times \left\{ \frac{d\phi(x)}{dx} - \frac{1}{\beta} \frac{d^2 g[P]}{dP^2} \frac{\partial P}{\partial x} \right\}. \end{aligned} \quad (2.35)$$

A condição para a derivada temporal é obtida se assumirmos uma relação entre a forma entrópica e a equação de Fokker-Planck não linear

$$-\frac{1}{\beta} \frac{d^2 g[P]}{dP^2} = \frac{\Omega[P]}{\Psi[P]}. \quad (2.36)$$

Assim sendo, temos que essa condição é suficiente para provar o teorema H,

$$\frac{dF}{dt} = - \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi[P] \left( \frac{d\phi(x)}{dx} + \frac{\Omega[P]}{\Psi[P]} \frac{\partial P}{\partial x} \right)^2 \leq 0. \quad (2.37)$$

Note que, para  $\Omega[P] = 1$  e  $\Psi[P] = P$ , recuperamos o caso usual para a equação de Fokker-Planck. Da mesma forma, usando a Eq. (2.36), podemos recuperar a entropia de Boltzmann Gibbs. É interessante notar que outra classe de entropias pode ser encontrada dependendo das escolhas que tomamos para os funcionais  $\Omega[P]$  e  $\Psi[P]$ . Se escolhermos a razão  $\Omega/\Psi \sim P^{q-2}$ , podemos encontrar a forma entrópica proposta por Constantino Tsallis [9]. Tal generalização da entropia possui um parâmetro  $q$  e, no limite de  $q \rightarrow 1$ , a entropia de Boltzmann-Gibbs é recuperada. A entropia  $S_q$  está conectada com a equação de Fokker Planck não linear, que possui como soluções funções  $q$ -gaussiana para a partícula livre e soluções com *ansatz* com base em funções  $q$ -exponenciais. Tais soluções apresentam um comportamento difusivo anômalo, pois apresentam comportamento de cauda longa e descrevem um comportamento não linear entre os componentes do sistema. Sendo assim, tudo indica que a entropia generalizada de Tsallis incorpora fenômenos fora da região boltzmanniana, onde as interações são fracas o suficiente para serem desprezadas e as grandezas físicas são extensivas.

Uma constatação importante de ser mencionada é que, para a equação de Fokker-Planck com  $f(x) = 0$  (caso de partícula livre), o teorema H é satisfeito por uma classe de equação de difusão, fracionarias, não lineares, entre outras, mas, sem ser possível definir uma entropia associada àquelas. Logo, concluímos que a presença de um potencial no sistema quebra a degenerescência entre as entropias associadas às equações de difusão.

No capítulo 3, faremos uma breve discussão a respeito da entropia generalizada de Tsallis e da equação de Fokker-Planck não linear associada a ela. Resolveremos uma equação de Fokker-Planck não linear com um laplaciano  $d$ -dimensional. Por ora, na sequência deste capítulo, iremos desenvolver a dinâmica do caminhada aleatória.

## 2.3 Dinâmica do caminhante CTRW

No caso do caminhante aleatório contínuo no tempo ou CTRW<sup>3</sup> [53], diferentemente do caso anterior, o intervalo de tempo entre os passos é dado por um infinitésimo de tempo. O caminhante dá um passo de comprimento  $L$  na direção  $x$ , com sentido arbitrário, em um dado intervalo de tempo entre  $t$  e  $t+dt$ . Os passos são estatisticamente independentes, ocorrendo em intervalos de tempo aleatórios. Podemos escrever, então, o comprimento do salto como uma função densidade de probabilidade,

$$\lambda(x) = \int_0^\infty \psi(x, t) dt, \quad (2.38)$$

assim como o tempo de espera

$$w(t) = \int_{-\infty}^\infty \psi(x, t) dx, \quad (2.39)$$

em que  $\lambda(x)dx$  corresponde à probabilidade de um salto de comprimento  $L$  em um dado intervalo  $x \rightarrow x + dx$ ; e  $w(t)dt$  corresponde à probabilidade de um tempo de espera  $T_W$  em um intervalo de tempo  $t \rightarrow t + dt$ . Dessa forma, o caminhante pode ser descrito por uma função densidade de probabilidade  $\psi(x, t)$ , sendo  $L$  e  $T_W$  variáveis randômicas independentes, que podem ser desacopladas da seguinte maneira:  $\psi(x, t) = w(t)\lambda(x)$ . Assim, podemos ter divergência tanto no tempo de espera quanto no comprimento dos saltos, dependendo da natureza das funções  $w(t)$  e  $\lambda(t)$ . Dos casos desacoplados, temos, por exemplo, o caso com tempo de espera médio finito e a variância do comprimento de salto divergente, caracterizando distribuições do tipo Lévy ou, ainda, o caso em que o tempo de espera médio diverge, permanecendo a variância do comprimento dos saltos constante e caracterizando o caminhante aleatório com tempo fractal.

Estabelecemos, agora, um paralelo entre os caminhantes aleatórios com tempo discreto e contínuo. No caso em que o tempo é uma variável discreta, temos saltos sucessivos ocorrendo entre intervalos de tempo uniformes; já no caso em que o tempo evolui continuamente, a duração entre os saltos constitui a variável aleatória. Dessa maneira, a previsão da posição seguinte do caminhante pode não requerer somente um conhecimento local da caminhada, mas também do momento em que a anterior ocorreu. Essa dependência com relação ao estado do sistema e sua história passada revela que o CTRW (Caminhante Aleatório Contínuo no Tempo) é um processo não-markoviano [54]. Tendo visto algumas características com respeito ao problema do CTRW, vamos olhar para o processo difusivo a que ele se associa.

A equação de difusão pode ser obtida por meio da equação integral para o CTRW, utilizando a transformada de Fourier, procedimento este apresentado a seguir. Consideramos

---

<sup>3</sup>*Continuous Time Random Walk.*

o tempo médio de espera,

$$\langle T_W \rangle = \int_0^\infty tw(t)dt, \quad (2.40)$$

e a variância do comprimento do salto [53],

$$\sigma^2 = \int_{-\infty}^\infty x^2\lambda(x)dx. \quad (2.41)$$

Por meio dessas médias, podemos caracterizar diferentes tipos de CTRW, considerando natureza finita ou divergente dessas quantidades. Para o caminhante aleatório em uma estrutura fractal, podemos ter a variância  $\sigma^2$  finita, mas o tempo médio de espera  $\langle T_W \rangle$  divergente. Em um caso mais geral, qualquer desses diferentes CTRW podem ser descritos através da equação integral

$$\eta(x, t) = \int_{-\infty}^\infty dx' \int_0^\infty \eta(x', t')\psi(z - x', t - t')dt' + \delta(x)\delta(t), \quad (2.42)$$

em que  $\eta(x, t)$  é a probabilidade por unidade de deslocamento e de tempo de um caminhante aleatório que tenha chegado em  $x$  no tempo  $t$  e em  $x'$  no tempo  $t'$ ; e o último termo (produto de duas deltas) é a condição inicial do caminhante.

Assim sendo, a função densidade de probabilidade  $P(x, t)$  do caminhante inicialmente em  $x$  no tempo  $t$  é dada por

$$P(x, t) = \int_0^\infty \eta(x, t') \Phi(t - t')dt', \quad (2.43)$$

em que

$$\Phi(t) = 1 - \int_0^t w(t') dt' \quad (2.44)$$

é a probabilidade do caminhante não saltar durante o intervalo de tempo  $(0, t)$ , ou seja, de se manter na posição inicial. Aplicando a transformada de Laplace nas Eqs. (2.43) e (2.44) e utilizando o teorema da convolução, temos

$$P(x, s) = \frac{1}{s}\eta(x, s)[1 - w(s)]. \quad (2.45)$$

Para determinar  $\eta(x, s)$ , devemos voltar à Eq. (2.42) e aplicar a transformada de Laplace sobre a variável temporal e a de Fourier sobre a variável espacial. Fazendo uso das transformadas integrais, temos

$$\eta(k, s)[1 - \psi(k, s)] = 1. \quad (2.46)$$

Utilizando o resultado anterior, obtemos, para uma condição inicial genérica  $P_0(x)$ ,

$$P(k, s) = \frac{[1 - w(s)]P_0(k)}{s[1 - \psi(k, s)]}. \quad (2.47)$$

Essa equação se aplica tanto a sistemas que apresentam o comprimento do salto acoplado ao tempo de espera, como no caso em que eles são separáveis.

### 2.3.1 Equações de difusão fracionárias

Analisando de maneira formal, podemos dizer que a Eq. (2.47) corresponde a uma equação mestra generalizada do tipo

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \int_0^{\infty} K(x - x', t - t') P(x', t') dt'. \quad (2.48)$$

Essa equivalência fica evidente se forem aplicadas as transformadas integrais na Eq. (2.47) e, particularmente, se for utilizado o *kernel*

$$K(k, s) = \frac{[\psi(k, s) - w(s)]s}{1 - w(s)} \quad (2.49)$$

na Eq. (2.48). Reescrevendo a equação mestra generalizada em termos da função densidade de probabilidade de salto,  $\psi(x, t)$ , como uma equação integral, temos

$$P(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \int_0^{\infty} \psi(x - x', t - t') P(x', t') dt' + \Phi(t)\delta(x), \quad (2.50)$$

em que  $\Phi(t)$  é a probabilidade do sistema de se manter no estado inicial, do mesmo modo que a Eq. (2.44). A equação anterior é, em essência, a equação de Chapman-Kolmogorov [51] e equações desse tipo são largamente utilizadas para truncar aproximações em equações de difusão fracionárias [55].

Escrevendo a função densidade de probabilidade  $P(k, t)$ , Eq. (2.47), para um caminhar aleatório cuja distribuição de tempo de espera seja caracterizada pelo comportamento assintótico

$$w(t) \sim (\tau/t)^{1+\gamma}, \quad 0 < \gamma < 1, \quad (2.51)$$

podemos assumir a gaussiana como a função densidade de probabilidades de passos,

$$\lambda(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/(2\sigma^2)}, \quad (2.52)$$

sendo que  $\sigma$ , o desvio padrão, é finito. Utilizando essas equações e ignorando os termos

de ordens superiores na Eq. (2.47), obtemos

$$P(k, s) = \frac{P_0(k)}{s + \sigma^2 k^2 \tau^{-\gamma} s^{1-\gamma}/2}. \quad (2.53)$$

Invertendo a transformada de Laplace e utilizando propriedades da função de Mittag-Leffler, podemos escrever

$$P(k, t) = P_0(k) E_\gamma \left[ -\sigma^2 k^2 (t/\tau)^\gamma / 2 \right], \quad (2.54)$$

sendo  $E_\gamma(-\lambda^\gamma t^\gamma)$  a função de Mittag-Leffler (para mais detalhes, veja o apêndice) e  ${}_0\mathcal{D}_t^{1-\gamma}(\dots)$  o operador fracionário na representação de Riemann-Liouville. Invertendo, agora, a transformada de Fourier, em que  $k^2$  corresponde ao operador de derivada parcial de segunda ordem, temos, então, a equação de difusão fracionária

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = \mathcal{K}_\gamma {}_0\mathcal{D}_t^{1-\gamma} \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t), \quad (2.55)$$

com o coeficiente de difusão dado por

$$\mathcal{K}_\gamma = \lim_{\tau \rightarrow 0, \sigma^2 \rightarrow 0} \sigma^2 / (2\tau^\gamma). \quad (2.56)$$

Soluções fundamentais para um caminhante partindo de  $x_0 = 0$  no tempo inicial  $t = 0$ , dadas em termos das funções H de Fox, podem ser escritas como

$$P(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\mathcal{K}_\gamma t^\gamma}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n! \Gamma(1 - \gamma[n+1]/2)} \left( \frac{x^2}{\mathcal{K}_\gamma t^\gamma} \right)^{n/2}, \quad (2.57)$$

que, no limite assintótico  $|x| \gg \sqrt{\mathcal{K}_\gamma t^\gamma}$ , conduz a

$$P(x, t) \sim \frac{1}{\sqrt{4\pi \mathcal{K}_\gamma t^\gamma (2-\gamma)}} \left( \frac{\gamma |x|}{2\sqrt{\mathcal{K}_\gamma t^\gamma}} \right)^{-\frac{1-\gamma}{2-\gamma}} e^{-(1-\frac{\gamma}{2})(\frac{\gamma}{2})^{\gamma/(2-\gamma)} (|x|/\sqrt{\mathcal{K}_\gamma t^\gamma})^{\frac{2}{2-\gamma}}}. \quad (2.58)$$

A abordagem apresentada considera o movimento Browniano contínuo no tempo. Em consequência disso, foi obtida uma equação de difusão com derivadas de ordem não inteira também na variável temporal. Podemos considerar, também, os casos com continuidade nos passos do caminhante aleatório, obtendo uma equação de difusão com derivadas fracionárias na posição.

Quando a derivada fracionária relacionada ao formalismo de CTRW é aplicada à variável temporal, temos alteração na distribuição de tempo de espera. Essa alteração pode ser analisada através do cálculo do segundo momento. No caso em que a derivada fracionária é aplicada à variável espacial, a alteração ocorre na distribuição do comprimento

dos saltos, conduzindo às distribuições de Lévy, que apresentam comportamento superdifusivo com o segundo momento divergente. Ao fazer o desenvolvimento que demonstra essa situação usando a Eq. (2.53) e assumindo que  $\lambda(x)$  seja uma distribuição de Lévy, obtemos

$$P(k, s) = \frac{P_0(k)}{s + \mathcal{K}_\mu k^\mu}, \quad (2.59)$$

que representa a seguinte equação de difusão:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = \mathcal{K}_\mu \frac{\partial^\mu}{\partial x^\mu} P(x, t), \quad (2.60)$$

em que o operador espacial no espaço de Fourier é dado por  $\mathcal{F} \{ \partial_x^\mu f(x) \} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-ikx} |k|^\mu \bar{f}(k)$ , que corresponde ao operador fracionário de Riesz-Welly [7].

Os formalismos apresentados nesse capítulo podem ser estendidos para mais dimensões. No próximo capítulo, iremos estudar um modelo de armadilhas bidimensional conhecido como *modelo do pente* e introduzimos a ele derivadas fracionárias nos coeficientes de difusão, o que incorpora as ideias apresentadas nesta seção.

## Capítulo 3

# Difusão em um sistema com armadilhas - Modelo do Pente

Neste capítulo, investigaremos as soluções, a probabilidade de sobrevivência e tempo de primeira passagem para um processo difusivo bidimensional sujeito à restrição geométrica de uma estrutura dorsal. Consideraremos que tal processo é governado pela equação de Fokker-Planck fracionária com condições de contorno de um meio semi-infinito,  $\rho(0, y, t) = \rho(\infty, y, t) = 0$ ,  $\rho(x, \pm\infty, t) = 0$  e condição inicial arbitrária. Ao longo do capítulo, discutiremos os comportamentos que o sistema apresenta sobre essas condições, assim como a influência dos parâmetros fracionários presentes na equação de Fokker-Planck.

### 3.1 Introdução ao tópico

Para introduzir o modelo de armadilhas que iremos investigar, é de suma importância compreender alguns conceitos que envolvem *clusters* e fractais. Os cientistas pioneiros que investigaram limiar de percolação foram Simon R. Broadbent e John M. Hammersley [56], que deram importantes contribuições ao introduzirem: modelos de rede para o fluxo de um fluido através de um meio estático e aleatório e o conceito de probabilidade de percolação. Pierre-Gilles de Gennes [57] denominou o problema do passeio aleatório em *clusters* de percolação de *the ant in the labyrinth* (a formiga no labirinto). A analogia é simples, se uma formiga fosse posta em um labirinto com diversos caminhos (*clusters*), alguns não a levariam a lugar algum (*armadilhas*), apenas um que a levaria ao fim do labirinto, e tal caminho principal pode ser definido como um *backbone* (espinha dorsal), enquanto os outros, secundários, como armadilhas ou ramificações. Quando a formiga encontra o fim do labirinto, dizemos que ela *percolou* ou encontrou um *cluster de percolação* [58]. Outros pioneiros no estudo de *clusters* foram Skal e Shkovski (1977), e Harry Eugene Stanley (1977) [59].

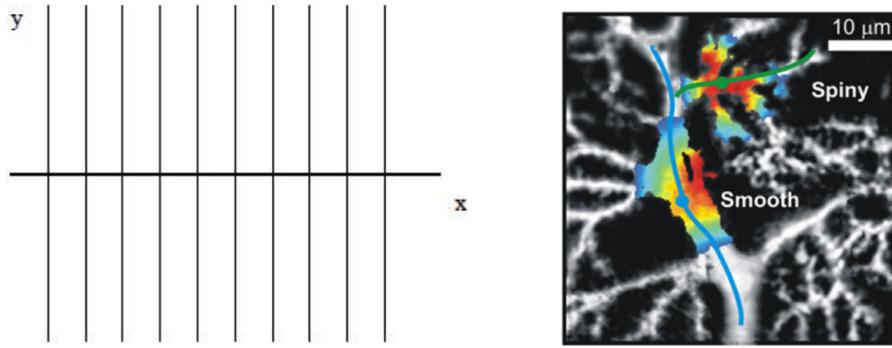


Figura 3.1: A figura a esquerda ilustra o modelo do pente; a figura à direita mostra a estrutura de um neurônio onde a dinâmica de íons neste pode ser similiar ao sistema do modelo do pente.

Tais estudos foram mais investigados com afinco na década de 1980, quando a geometria fractal foi introduzida por Beneit B. Mandelbrot [60] e [61], vindo a ser amplamente investigada nas mais diversas situações na natureza. Em um fractal, a difusão, em geral, é anômala, pois a dimensão fractal  $d_w$  está vinculada ao valor médio quadrático da seguinte maneira:

$$\langle x^2 \rangle \sim t^{\frac{2}{d_w}}.$$

Quando  $d_w = 2$ , o que corresponde ao espaço euclidiano, ocorre a difusão usual. Com base na geometria fractal, Gefen et al. (1982) [62] demonstraram teoricamente a ocorrência de difusão anômala em *clusters* de percolação na criticalidade (isto é, no limiar da transição). Este resultado foi confirmado por meio de simulação numérica, a qual teve como base o método de Monte-Carlo e o passeio aleatório por Daniel ben-Avraham e Shlomo Havlin (1982) [63], H. Panday e Dietrich Stauffer (1983) [64].

O modelo de White e Barma tem como base o passeio aleatório em uma cadeia linear (*backbone*) de sítios uniformemente espaçados. De cada sítio do *backbone*<sup>1</sup> origina-se um cadeia linear finita (uma ramificação) de sítios. Essas ramificações ocorrem na direção do campo e o comprimento delas é dado de maneira aleatória por meio de distribuição de probabilidade. Devido à semelhança com um pente, o *backbone* corresponde à haste e às ramificações, essa estrutura foi denominada de *random comb*, *comblike structure* ou *comb model*, a qual chamaremos agora de modelo do pente, que está ilustrado na Fig. 3.1.

Uma descrição contínua da caminhada aleatória para o modelo do pente, foi proposta em 1991, por Arkhincheev e Baskin, no artigo intitulado *Anomalous diffusion and drift in a comb model of percolation clusters*. A ideia principal dos autores consiste em modificar a equação de difusão bidimensional Eq. [3.1], homogênea no espaço, colocando uma função delta  $\delta(y)$ , que implica, por sua vez, uma difusão que só ocorrerá na direção  $x$  quando  $y = 0$  e em  $y$  para  $x$  qualquer. As equações são escritas como segue:

---

<sup>1</sup>espinha dorsal

### Modelo de difusão em duas dimensões

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x, y; t) = \mathcal{K}_y \frac{\partial^2}{\partial y^2}\rho(x, y; t) + \mathcal{K}_x \frac{\partial^2}{\partial x^2}\rho(x, y; t), \quad (3.1)$$

### Modelo do pente

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x, y; t) = \mathcal{K}_y \frac{\partial^2}{\partial y^2}\rho(x, y; t) + \delta(y)\mathcal{K}_x \frac{\partial^2}{\partial x^2}\rho(x, y; t) \quad (3.2)$$

sendo  $\mathcal{K}_y$  e  $\mathcal{K}_x$  os coeficientes de difusão nas direções  $x$  e  $y$ . A Eq. (3.1) nos fornece os seguintes desvios quadráticos  $\langle y^2 \rangle \sim t$  e  $\langle x^2 \rangle \sim t^{\frac{1}{2}}$ . A difusão na direção  $x$  é anômala, o que demonstra que as restrições geométricas no sistema implica, naturalmente, um comportamento anômalo para a difusão. Além de elucidar alguns conceitos sobre difusão, e revelar conexões com *clusters* e fractais, o modelo do pente pode ser usado para descrever a dinâmica de íons em dendritos dos neurônios [65]; apesar de o neurônio possuir uma forma complexa e o sistema neural ser um sistema complexo, podemos usar esse sistema simples como uma possível descrição para a complexidade deste processo, ver Fig. (3.1).

Neste capítulo, investigaremos a Eq. 3.2 para situações mais gerais, considerando o caso com paredes de adsorção e com derivadas fracionárias no tempo. Para investigarmos os efeitos de tal sistema físico, buscaremos compreender o comportamento da probabilidade de sobrevivência do sistema, definida como

$$\mathcal{S}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \rho(x, y, t), \quad (3.3)$$

e a primeira passagem no tempo, que é a distribuição do tempo que a partícula fica no sistema sem ser absorvida, dada por

$$\mathcal{F}(t) = -\frac{d}{dt}\mathcal{S}(t). \quad (3.4)$$

Além disso, analisaremos alguns comportamentos da variância do sistema. Tal investigação será feita para derivadas fracionárias com índices diferentes nas duas dimensões.

## 3.2 Sobre o modelo do pente generalizado

O modelo do pente possui diversas generalizações que envolvem processos difusivos não Markovianos [66], [67] e [68], que podem ser investigados por meio de equações de Langevin [8]. As Figs. (3.2) e (3.3) ilustram o comportamento da caminhada nessa estrutura. Essas figuras foram geradas por meio da equação de Langevin e suas extensões.

Com a geometria do modelo e o mecanismo da difusão anômala, iremos utilizar esta geometria com outro mecanismo (derivadas fracionárias) que pode levar a uma dinâmica anômala para o sistema.

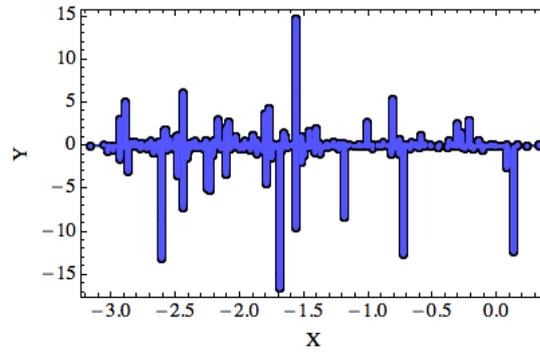


Figura 3.2: Simulação do modelo do pente para uma única partícula através de equação de Langevin, com ruído branco.

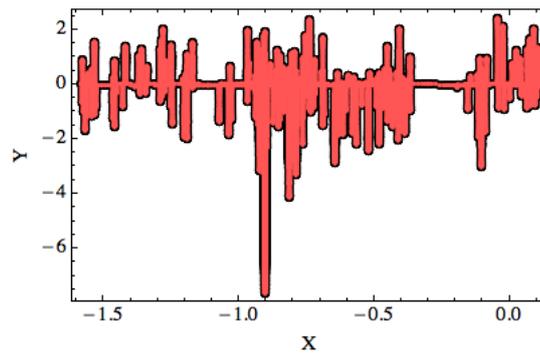


Figura 3.3: Simulação do modelo do pente para uma única partícula através de equação de Langevin, para um ruído colorido gerado pela equação de Langevin com ruído branco.

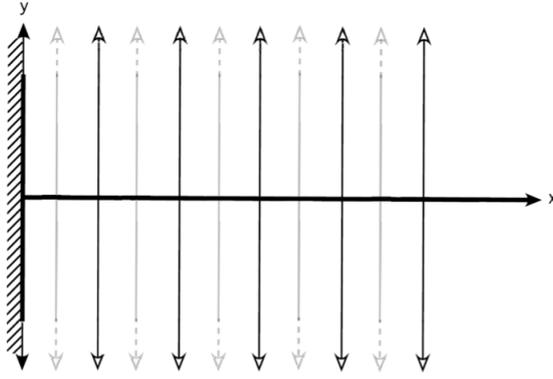


Figura 3.4: Modelo do pente com parede absorvedora.

Na próxima seção, investigaremos uma equação que origina uma rica classe de fenômenos divisivos, dada por [69]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, y; t) = {}_0\mathcal{D}_t^{1-\gamma_y} \left( \mathcal{K}_y \frac{\partial^2}{\partial y^2} \rho(x, y; t) \right) + \delta(y) {}_0\mathcal{D}_t^{1-\gamma_x} \left( \mathcal{K}_x \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, y; t) \right), \quad (3.5)$$

em que  ${}_0\mathcal{D}_t^{1-\gamma_y}(\dots)$  e  ${}_0\mathcal{D}_t^{1-\gamma_x}(\dots)$  são derivadas fracionárias no tempo. Em particular, consideraremos a derivada fracionária de Riemann-Liouville's [7], isto é,

$${}_0\mathcal{D}_t^{1-\gamma}(\rho(x, y; t)) = \frac{1}{\Gamma(k-\gamma)} \frac{d^k}{dt^k} \int_0^t dt' \frac{\rho(x, y; t')}{(t-t')^{\gamma-n+1}}, \quad (3.6)$$

com  $k-1 < \gamma < k$ . A Eq. (3.5) generaliza a Eq. (3.2) por incorporar as derivadas fracionárias no tempo, que podem ser conectadas com vários processos não-Markovianos. No nosso caso, consideraremos diferentes índices ( $\gamma_x$  e  $\gamma_y$ ) para as derivadas fracionárias no tempo. Tal consideração pode representar um sistema anisotrópico onde as correlações no tempo estão fortemente ligadas a uma direção espacial. As condições de contorno usadas para investigar as soluções das Eq. (3.2) e Eq. (3.5) são  $\rho(0, y; t) = \rho(\infty, y; t) = 0$  e  $\rho(x, \pm\infty; t) = 0$ , que caracterizam uma superfície absorvedora em  $x = 0$ . Nós iremos considerar a condição inicial arbitrária  $\rho(x, y; 0) = \Phi(x, y)$  com  $\Phi(x, y)$  sendo uma função normalizada.

### 3.3 Modelo do pente com parede absorvedora

Iremos iniciar nossa discussão considerando a Eq.(3.2), que corresponde a um caso particular da Eq. (3.5) para  $\gamma_y = 1$  e  $\gamma_x = 1$ . Feito isso, vamos estender nossa discussão para a Eq. (3.5), quando  $\gamma_y \neq 1$  e  $\gamma_x \neq 1$  são considerados. Esta discussão é acompanhada das condições de contorno previamente mencionadas e da condição inicial. A solução da Eq. (3.2), sujeita as condições de contorno mencionadas, podem ser obtidas utilizando transformadas integrais (Laplace e Fourier) e funções de Green. De fato, aplicando a

transformada de Laplace, é possível mostrar que

$$\mathcal{D}_y \frac{\partial^2}{\partial y^2} \rho(x, y; s) + \delta(y) \mathcal{D}_x \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, y; s) = s\rho(x, y; s) - \Phi(x, y). \quad (3.7)$$

A equação (3.7), usando a transformada de Fourier, pode ser reescrita como

$$\rho(x, y; s) = \frac{1}{\sqrt{4s\mathcal{K}_y}} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(x, y) e^{-\sqrt{\frac{s}{\mathcal{K}_y}}|y-\bar{y}|} d\bar{y} + \frac{e^{-\sqrt{\frac{s}{\mathcal{K}_y}}|y|}}{\sqrt{4s\mathcal{K}_y}} \mathcal{D}_x \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, 0; s) \quad (3.8)$$

e, consequentemente, para  $y = 0$ , é possível obter

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, 0; s) - \frac{1}{\mathcal{K}_x} \sqrt{4s\mathcal{K}_y} \rho(x, 0; s) = -\frac{1}{\mathcal{K}_x} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(x, y) e^{-\sqrt{\frac{s}{\mathcal{K}_y}}|y|} d\bar{y}. \quad (3.9)$$

Utilizando o formalismo das funções de Green, a solução da Eq. (3.9) é dada por

$$\rho(x, 0; s) = - \int_0^{\infty} d\bar{x} \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{y} \hat{\rho}(x, y) e^{-\sqrt{\frac{s}{\mathcal{K}_y}}|\bar{y}|} \mathcal{G}_b(x, \bar{x}; s), \quad (3.10)$$

em que a função de Green,  $\mathcal{G}_b(x, \bar{x}; s)$ , é obtida por meio da equação

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \mathcal{G}_b(x, \bar{x}; s) - \frac{1}{\mathcal{K}_x} \sqrt{4s\mathcal{K}_y} \mathcal{G}_b(x, \bar{x}; s) = \delta(x - \bar{x}) \quad (3.11)$$

sujeita às condições de contorno  $\mathcal{G}_b(0, \bar{x}; s) = \mathcal{G}_b(\infty, \bar{x}; s) = 0$ .

Usando a transformada seno-Fourier, após alguns cálculos, é possível mostrar que a Eq. (3.11) é satisfeita por

$$\mathcal{G}_b(k_x, \bar{x}; s) = -\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin(k_x \bar{x})}{\sqrt{4\mathcal{K}_y s / \mathcal{K}_x + k_x^2}}. \quad (3.12)$$

Fazendo a transformada inversa seno-Fourier na Eq. (3.12), obtemos a função de Green que governa o processo difusivo no eixo  $x$ , e ela é dada por

$$\mathcal{G}_b(x, \bar{x}; t) = -\sqrt{\frac{\mathcal{K}_x}{8\sqrt{\mathcal{K}_y s}}} \left( e^{\sqrt{\frac{2}{\mathcal{D}_x} \sqrt{\frac{\mathcal{D}_y}{t}} |x-\bar{x}|} } - e^{\sqrt{\frac{2}{\mathcal{D}_x} \sqrt{\frac{\mathcal{D}_y}{t}} |x+\bar{x}|} } \right) \quad (3.13)$$

e, consequentemente, pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \rho(x, y; t) &= -\frac{1}{4\sqrt{\mathcal{K}_y s}} \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{y} \hat{\rho}(x, \bar{y}) \left( e^{-\sqrt{s/\mathcal{K}_y} (|y|+|\bar{y}|)} - e^{-\sqrt{s/\mathcal{K}_y} |y-\bar{y}|} \right) \\ &\quad - \frac{1}{\mathcal{K}_x} \int_0^{\infty} d\bar{x} \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{y} e^{\sqrt{\frac{2}{\mathcal{D}_x} \sqrt{\frac{\mathcal{D}_y}{t}} (|\bar{y}|+|\bar{x}|)}} \hat{\rho}(\bar{x}, \bar{y}) \mathcal{G}_b(x, \bar{x}; s). \end{aligned} \quad (3.14)$$

Note que a distribuição obtida emerge no espaço de Laplace e calculando o expoente

da variância na direção  $x$ , obtemos o valor  $1/2$ , o que representa um processo difusivo anômalo. Após invertermos a transformada de Laplace na Eq. (3.14), o propagador pode ser escrito como

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_b(x, \bar{x}; t) &= -\sqrt{\frac{\mathcal{K}_x}{8\sqrt{\mathcal{K}_y t^3}}} \\ &\times \text{H}_{1,1}^{1,0} \left[ \sqrt{\frac{2}{\mathcal{D}_x} \sqrt{\frac{\mathcal{D}_y}{t}}} |x - \bar{x}| \left| \begin{matrix} (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}) \\ (0, 1) \end{matrix} \right. \right], \end{aligned} \quad (3.15)$$

em que H é a função de Fox (apêndice). A distribuição é dada por

$$\rho(x, 0; t) = \int_0^\infty d\bar{x} \int_{-\infty}^\infty d\bar{y} \int_0^t d\bar{t} \frac{|\bar{y}|}{\sqrt{4\pi\mathcal{K}_y \bar{t}^3}} e^{-\frac{\bar{y}^2}{4\mathcal{K}_y \bar{t}}} \hat{\rho}(\bar{x}, \bar{y}) \mathcal{G}_b(x, \bar{x}; t - \bar{t}). \quad (3.16)$$

Assim, podemos reescrever a Eq. (3.14) como

$$\begin{aligned} \rho(x, y; t) &= \int_{-\infty}^\infty d\bar{y} \hat{\rho}(x, \bar{y}) \left( \mathcal{G}_u(|y - \bar{y}|; t) - \mathcal{G}_u(|y| + |\bar{y}|; t) \right) \\ &- \int_0^\infty d\bar{x} \int_{-\infty}^\infty d\bar{y} \int_0^t d\bar{t} \frac{|y| + |\bar{y}|}{\sqrt{4\pi\mathcal{K}_y \bar{t}^3}} e^{-\frac{(|y| + |\bar{y}|)^2}{4\mathcal{K}_y \bar{t}}} \hat{\rho}(\bar{x}, \bar{y}) \mathcal{G}_b(x, \bar{x}; t - \bar{t}), \end{aligned} \quad (3.17)$$

sendo  $\mathcal{G}_u(y; t) = e^{y^2/(4\mathcal{K}_y t)} / \sqrt{4\mathcal{K}_y t}$ . Note que a presença do primeiro termo na Eq. (3.17) depende da condição inicial, em particular, se  $\rho(x, y; 0) = \rho_x(x)\delta(y)$ . Outro ponto interessante conectado com este termo é a presença de diferentes regimes nas distribuições de probabilidade de sobrevivência e da primeira passagem no tempo. Essa característica implica que, dependendo da condição inicial do sistema, ela pode apresentar diferentes comportamentos para essas quantidades devido ao diferente comportamento difusivo apresentado, veja as figuras 3.5 e 3.8. O deslocamento quadrático médio na direção  $x$ ,  $\sigma_x^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$ , associado à Eq. 3.14, para  $\rho(x, y, 0) = \delta(x - x')\delta(y - y')$ , é dado por

$$\begin{aligned} \sigma_x^2 &= 2\mathcal{K}_x \sqrt{\frac{t}{\pi\mathcal{K}_y}} e^{\frac{y'^2}{4\mathcal{K}_y(t-t')}} - \frac{\mathcal{K}_x}{\sqrt{\mathcal{K}_y}} \int_0^t dt' \frac{e^{\frac{y'^2}{4\mathcal{K}_y(t-t')}}}{\sqrt{\pi(t-t')}} \text{H}_{1,1}^{1,0} \left[ \sqrt{\frac{2}{\mathcal{K}_x} \sqrt{\frac{\mathcal{K}_y}{t'}}} x' \left| \begin{matrix} (1, \frac{1}{4}) \\ (0, 1) \end{matrix} \right. \right] \\ &+ x'^2 \int_0^t dt' e^{\frac{y'^2}{4\mathcal{K}_y(t-t')}} \sqrt{\pi(t-t')} \text{H}_{0,1}^{\frac{1}{2}, \frac{1}{4}} \left[ \sqrt{\frac{2}{\mathcal{K}_x} \sqrt{\frac{\mathcal{K}_y}{t'}}} x' \left| \begin{matrix} (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}) \\ (0, 1) \end{matrix} \right. \right]. \end{aligned} \quad (3.18)$$

No limite assintótico de  $t \rightarrow \infty$ , a expressão previamente escrita pode ser aproximada para

$$\sigma_x^2 = \sqrt{\frac{2\mathcal{K}_x}{\sqrt{\mathcal{K}_y}}} x' \frac{t^{\frac{1}{4}}}{\Gamma(5/4)}.$$

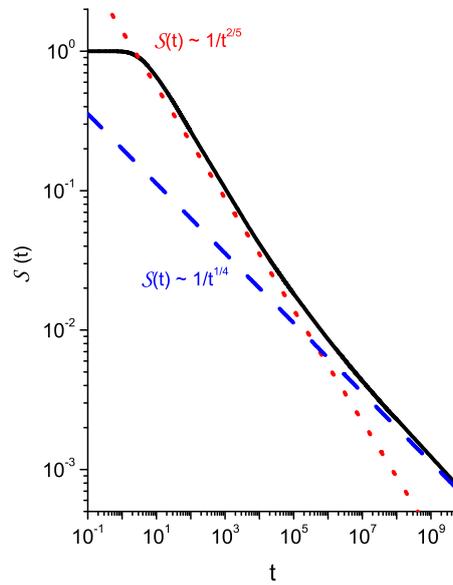


Figura 3.5: Comportamento da equação (3.19) considerando  $\mathcal{K}_x = 10$  e  $\mathcal{K}_y = 0.1$ , sendo a condição inicial  $\rho(x, y; 0) = \delta(x - \bar{x}) \delta(y - \bar{y})$  com  $\bar{x} = 1$  e  $\bar{y} = 1.2$ . As linhas tracejadas em vermelho e azul evidenciam os dois diferentes regimes temporais da probabilidade de sobrevivência, representada pela Eq.(3.31).

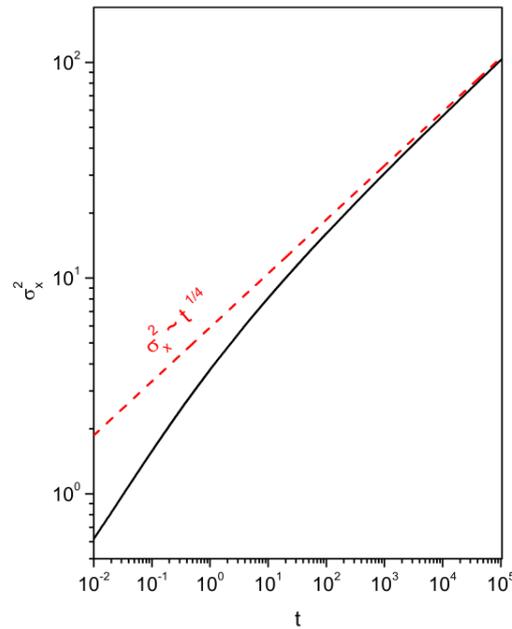


Figura 3.6: Comportamento do segundo momento no tempo (curva cheia preta), equação Eq.(3.18), juntamente com limite assintótico (linha pontilhada vermelha), equação (3.18) considerando  $\mathcal{K}_x = 10$  e  $\mathcal{K}_y = 0.1$ , com a condição inicial  $\rho(x, y; 0) = \delta(x - \bar{x}) \delta(y)$ , sendo  $\bar{x} = 1.2$ .

A Fig. 3.6 ilustra o comportamento da Eq. (3.18) na curva de cor preta e a reta tracejada em vermelho representa o limite assintótico desse resultado. O expoente  $1/4$  pode ser obtido também a partir do modelo do pente tridimensional para o espaço ilimitado. Nesse caso, o expoente é menor que o expoente para o modelo do pente ilimitado, devido a superfície absorvente, pois, a medida que as partículas colidem com a superfície, elas sobem do sistema e o processo difusivo no espaço livre tem um número menor de possibilidades.

Buscaremos, agora, obter a probabilidade de sobrevivência e a distribuição de tempos de primeira passagem. Além das soluções analíticas em termos de equações integrais, iremos mostrar os limites assintóticos de tais distribuições.

A probabilidade de sobrevivência é dada por  $\mathcal{S}(t) = \int_0^\infty dx \int_{-\infty}^\infty dy \rho(x, y, t)$  e, substituindo quem é  $\rho(x, y, t)$ , podemos escrever

$$\begin{aligned} \mathcal{S}(t) &= \int_0^\infty dx \int_{-\infty}^\infty dy \Phi(x, y) \operatorname{erf} \left( \frac{|y|}{\sqrt{4\mathcal{K}_y t}} \right) + \int_0^\infty dx \int_{-\infty}^\infty dy |y| \Phi(x, y) \\ &\times \int_0^t \frac{dt'}{\sqrt{4\pi\mathcal{K}_y t'^3}} e^{-\frac{y^2}{4\mathcal{K}_y t'}} \left\{ 1 - \operatorname{H}_{1,1}^{1,0} \left[ \sqrt{\frac{2}{\mathcal{K}_x} \sqrt{\frac{\mathcal{K}_y}{t-t'}}} |x| \left| \begin{matrix} (1, \frac{1}{4}) \\ (0, 1) \end{matrix} \right. \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.19)$$

O limite assintótico para tempo longo é dado por

$$\mathcal{S}(t) \sim \int_0^\infty dx \int_{-\infty}^\infty dy \Phi(x, y) \left( \frac{|y|}{\sqrt{\pi\mathcal{K}_y t}} + \sqrt{\frac{2}{\mathcal{K}_x} \sqrt{\mathcal{K}_y}} \frac{|x|}{\Gamma(\frac{3}{4}) t^{1/4}} \right). \quad (3.20)$$

A Fig. (3.7) ilustra o comportamento da Eq. (3.19) para valores de  $\mathcal{K}_x$ ,  $\mathcal{K}_y$ ,  $\bar{x}$ , and  $\bar{y}$ . Nessa figura, podemos notar a presença de diferentes regimes difusivos. Um manifestado para tempos longos e outro para tempos curtos, como podem ser observados pela retas vermelha e azul respectivamente. Em particular, o comportamento para tempos longos corresponde ao segundo termo da Eq. (3.31). Para  $t \rightarrow \infty$ , o primeiro termo não contribui por ser muito pequeno. A Fig. (3.7) ilustra o comportamento da Eq. (3.19) para diferentes escolhas de  $\bar{y}$ , que corresponde a diferentes posições iniciais. Os resultados obtidos para diferentes escolhas de  $\bar{y}$  mostram que os diferentes regimes dependem da condição inicial.

A primeira passagem no tempo pode ser obtida utilizando a definição  $\mathcal{F}(t) = -\partial_t \mathcal{S}(t)$ . Depois de alguns cálculos, é possível mostrar que a distribuição de primeira passagem está conectada à Eq. (3.19) e é dada por

$$\mathcal{F}(t) = \int_0^\infty dx \int_{-\infty}^\infty d\bar{y} \Phi(x, y) \int_0^t \frac{d\bar{t}}{\bar{t}} \frac{y e^{-\frac{\bar{y}^2}{4\mathcal{K}_y(t-\bar{t})}}}{\sqrt{4\pi\mathcal{K}_y (t-\bar{t})^3}} \operatorname{H}_{1,1}^{1,0} \left[ \sqrt{\frac{2}{\mathcal{D}_x} \sqrt{\frac{\mathcal{D}_y}{\bar{t}}}} |x| \left| \begin{matrix} (1, \frac{1}{4}) \\ (0, 1) \end{matrix} \right. \right]. \quad (3.21)$$

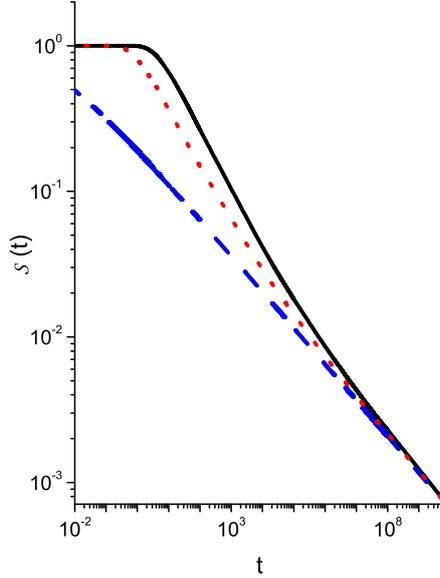


Figura 3.7: A figura ilustra o comportamento para Eq.(3.19), considerando  $\mathcal{K}_y = 0.1$  e  $\mathcal{K}_x = 10$ , e a condição inicial dada por  $\phi(x, y) = \delta(x - x')\delta(y - y')$  com  $x' = 1$  para diferentes valores de  $y'$ , mostrando assim a influencia da condição inicial no comportamento da probabilidade de sobrevivência. As curvas azul, vermelha e preta correspondem aos casos  $y' = 0$ ,  $y' = 0.5$  e  $y' = 1.2$  respectivamente.

O comportamento assintótico da Eq. (3.21) para tempos longos é dado por

$$\mathcal{F}(t) \sim \int_0^\infty dx \int_{-\infty}^\infty dy \Phi(x, y) \left( \frac{|y|}{2t\sqrt{\pi\mathcal{K}_y t}} + \sqrt{\frac{2}{\mathcal{K}_x}} \sqrt{\mathcal{K}_y} \frac{x}{4\Gamma(\frac{3}{4}) t^{5/4}} \right). \quad (3.22)$$

Similarmente aos resultados previamente obtidos para probabilidade de sobrevivência, dependendo da condição inicial, o primeiro ou o segundo termo pode governar o comportamento assintótico da Eq. 3.21. Nesse sentido, podemos recuperar os resultados para os comportamentos assintóticos de dois modelos diferentes para difusão anômala, devido à restrição geométrica presente no sistema. O primeiro é  $\mathcal{F}(t) \sim t^{-\frac{3}{2}}$  e está relacionado à caminhada aleatória; o segundo é  $\mathcal{F}(t) \sim t^{-\frac{5}{4}}$  e está relacionado ao modelo do pente (descrição contínua). A Fig. 3.8 ilustra o comportamento da distribuição de primeira passagem do tempo. Os resultados exibidos na Fig. 3.7, possuem dois diferentes regimes conectados com a escolha da condição inicial do sistema. Isso demonstra que, após o tempo transiente, algumas partículas passam longos períodos aprisionadas no eixo  $y$  antes de serem, finalmente, absorvidas em  $x = 0$ .

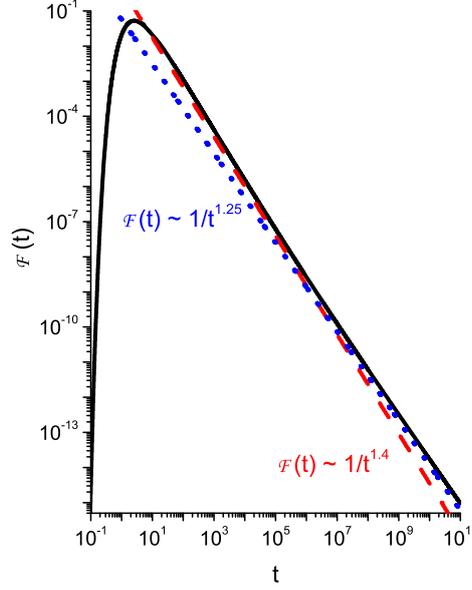


Figura 3.8: Comportamento da Eq. (3.32) considerando  $\mathcal{K}_x = 10$  e  $\mathcal{K}_y = 0.1$ , sendo a condição inicial  $\rho(x, y; 0) = \delta(x - \bar{x}) \delta(y - \bar{y})$  com  $\bar{x} = 1$  e  $\bar{y} = 1.2$ . As linhas tracejadas em vermelho e azul evidenciam a existência de diferentes regimes de comportamento do tempo de primeira passagem no tempo.

### 3.4 Modelo do pente generalizado e com parede absorvedora

O foco desta seção é estudar um caso mais geral, em que  $\gamma_y \neq 1$  e  $\gamma_x \neq 1$ . Portanto, introduzimos efeitos de memória conectados com as derivadas fracionárias no tempo presentes na Eq. (3.5). Dessa forma, após alguns cálculos, é possível mostrar que

$$\begin{aligned} \rho(x, y; t) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{y} \rho(x, \bar{y}; 0) (\bar{\mathcal{G}}_y(|y - \bar{y}|; t) - \bar{\mathcal{G}}_y(|y| + |\bar{y}|; t)) + \int_0^{\infty} d\bar{x} \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{y} \int_0^t d\bar{t} \rho(\bar{x}, \bar{y}; 0) \\ &\times \mathcal{G}_y(|y| + |\bar{y}|; t - \bar{t}) (\mathcal{G}_b(|x - \bar{x}|; \bar{t}) - \mathcal{G}_b(|x + \bar{x}|; \bar{t})) \end{aligned} \quad (3.23)$$

com

$$\bar{\mathcal{G}}_y(y; t) = \frac{1}{\sqrt{4\mathcal{K}_y t^{\gamma_y}}} \mathbf{H}_{1,1}^{1,0} \left[ \frac{|y - \bar{y}|}{\sqrt{\mathcal{K}_y t^{\gamma_y}}} \left| \begin{matrix} (1 - \frac{\gamma_y}{2}, \frac{\gamma_y}{2}) \\ (0, 1) \end{matrix} \right. \right], \quad (3.24)$$

$$\mathcal{G}_y(y; t) = \frac{1}{t \sqrt{4\mathcal{K}_y / t^{\gamma_y}}} \mathbf{H}_{1,1}^{1,0} \left[ \frac{|y| + |\bar{y}|}{\sqrt{\mathcal{K}_y \bar{t}^{\gamma_y}}} \left| \begin{matrix} (1 - \frac{\gamma_y}{2}, \frac{\gamma_y}{2}) \\ (0, 1) \end{matrix} \right. \right], \quad (3.25)$$

e

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_b(x; t) &= \sqrt{\frac{2\sqrt{\mathcal{K}_y t^{\gamma_y}}}{\mathcal{K}_x t^{2\gamma_x}}} \left( \mathbb{H}_{1,1}^{1,0} \left[ \sqrt{\frac{2\sqrt{\mathcal{K}_y t^{\gamma_y}}}{\mathcal{K}_x t^{\gamma_x}}} |x| \left|_{(0,1)}^{(1-\frac{1}{2}(\gamma_x-\frac{\gamma_y}{2}), \frac{1}{2}(\gamma_x-\frac{\gamma_y}{2}))} \right. \right] \right. \\ &\quad \left. - \mathbb{H}_{1,1}^{1,0} \left[ \sqrt{\frac{2\sqrt{\mathcal{K}_y t^{\gamma_y}}}{\mathcal{K}_x t^{\gamma_x}}} |x| \left|_{(0,1)}^{(1-\frac{1}{2}(\gamma_x-\frac{\gamma_y}{2}), \frac{1}{2}(\gamma_x-\frac{\gamma_y}{2}))} \right. \right] \right). \end{aligned} \quad (3.26)$$

O desvio quadrático médio fica escrito como

$$\begin{aligned} \sigma_x^2(t) &= \frac{\mathcal{K}_x}{\sqrt{\mathcal{K}_y}} t^\eta \mathbb{H}_{1,1}^{1,0} \left[ \sqrt{\frac{2}{\mathcal{K}_x t^{\gamma_x}}} \sqrt{\mathcal{K}_y t^{\gamma_y}} \bar{x} \left|_{(0,1)}^{(1+\eta, \gamma_y/2)} \right. \right] \\ &\quad - \frac{\mathcal{K}_x}{\sqrt{\mathcal{K}_y}} \int_0^t \frac{d\bar{t}}{\bar{t}^{1-\eta}} \mathbb{H}_{1,1}^{1,0} \left[ \frac{|y|}{\sqrt{\mathcal{K}_y (t-\bar{t})^{\gamma_y}}} \left|_{(0,1)}^{(1, \gamma_y/2)} \right. \right] \times \\ &\quad \mathbb{H}_{1,1}^{1,0} \left[ \sqrt{\frac{2}{\mathcal{K}_x \bar{t}^{\gamma_x}}} \sqrt{\mathcal{K}_y \bar{t}^{\gamma_y}} \bar{x} \left|_{(0,1)}^{(1+\eta, \eta/2)} \right. \right] \\ &\quad + \bar{x}^2 \int_0^t \frac{d\bar{t}}{\bar{t}} \mathbb{H}_{1,1}^{1,0} \left[ \frac{|y|}{\sqrt{\mathcal{K}_y (t-\bar{t})^{\gamma_y}}} \left|_{(0,1)}^{(1, \gamma_y/2)} \right. \right] \times \\ &\quad \mathbb{H}_{1,1}^{1,0} \left[ \sqrt{\frac{2}{\mathcal{K}_x \bar{t}^{\gamma_x}}} \sqrt{\mathcal{K}_y \bar{t}^{\gamma_y}} \bar{x} \left|_{(0,1)}^{(0, \eta/2)} \right. \right], \end{aligned} \quad (3.27)$$

sendo  $\eta = \gamma_x - \gamma_y/2$ . No limite assintótico, temos

$$\sigma_x^2(t) \sim \sqrt{\frac{2\mathcal{K}_x}{\sqrt{\mathcal{K}_y}}} \frac{t^{\eta/2}}{\Gamma(1+\eta/2)}. \quad (3.28)$$

Para esse caso assintótico, a dependência no tempo é caracterizada como anômala para os expoentes de  $x$  e  $y$ . Note que a presença do efeito de memória nas armadilhas e na direção principal pode levar a uma lenta difusão do sistema. A Fig. 3.9 ilustra o comportamento temporal da Eq. (3.27) para valores de  $\gamma_x$  e  $\gamma_y$ . Um interessante ponto é a presença de um regime estacionário para  $\sigma_x^2$ , dependendo da escolha de  $\gamma_x$  e  $\gamma_y$ . Os comportamentos estacionário e subdifusivo do desvio quadrático médio possuem expoentes 1/4 e podem ser relacionados ao movimento confinado de um aglomerado de partículas, como relatam em experimentos que mapeiam a trajetória de uma única partícula em células [70] e [71]. Particularmente, Metzler R. e outros mostraram que essa dinâmica de relaxação anômala é influenciada por efeitos de confinamento das moléculas (devido à presença de micelas) e das armadilhas ópticas (pinça óptica). De fato, essas ferramentas não triviais de efeito memória e restrição geométrica também aparecem nas distribuições de probabilidade de sobrevivência e de tempo de primeira passagem. Portanto, usando os resultados previamente obtidos, podemos escrever as propriedades de transporte a seguir:

$$\begin{aligned}
\mathcal{S}(t) &= 1 - \int_0^\infty dx \int_{-\infty}^\infty dy \int_0^t dt' \frac{\Phi(x, y)}{\sqrt{t'(t-t')}} \mathbb{H}_{1,1}^{1,0} \left[ \frac{|y|}{\sqrt{\mathcal{K}_y(t-t')^{\gamma_y}}} \middle| \begin{matrix} (0, \frac{\gamma_y}{2}) \\ (0, 1) \end{matrix} \right] \\
&\times \mathbb{H}_{1,1}^{1,0} \left[ \sqrt{\frac{2\sqrt{\mathcal{K}_y t'^{\gamma_y}}}{\mathcal{K}_x t'^{\gamma_x}}} |x| \middle| \begin{matrix} (0, \frac{1}{2}(\gamma_x - \frac{\gamma_y}{2})) \\ (0, 1) \end{matrix} \right]
\end{aligned} \tag{3.29}$$

e

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}(t) &= \int_0^\infty dx \int_{-\infty}^\infty dy \int_0^t dt' \frac{\Phi(x, y)}{t'(t-t')} \mathbb{H}_{1,1}^{1,0} \left[ \frac{|y|}{\sqrt{\mathcal{K}_y(t-t')^{\gamma_y}}} \middle| \begin{matrix} (0, \frac{\gamma_y}{2}) \\ (0, 1) \end{matrix} \right] \\
&\times \mathbb{H}_{1,1}^{1,0} \left[ \sqrt{\frac{2\sqrt{\mathcal{K}_y t'^{\gamma_y}}}{\mathcal{K}_x t'^{\gamma_x}}} |x| \middle| \begin{matrix} (0, \frac{1}{2}(\gamma_x - \frac{\gamma_y}{2})) \\ (0, 1) \end{matrix} \right].
\end{aligned} \tag{3.30}$$

O limite assintótico para tempos longos é dado por

$$\begin{aligned}
\mathcal{S}(t) &\sim \int_0^\infty dx \int_{-\infty}^\infty dy \Phi(x, y) \\
&\times \left( \frac{|y|}{\Gamma(1 - \frac{\gamma_y}{2}) \sqrt{\mathcal{K}_y t^{\gamma_y}}} + \sqrt{\frac{2}{\mathcal{K}_x t^{\gamma_x}} \sqrt{\mathcal{K}_y t^{\gamma_y}}} \frac{x}{\Gamma(1 - \frac{1}{2}(\gamma_x - \frac{\gamma_y}{2}))} \right)
\end{aligned} \tag{3.31}$$

e

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}(t) &\sim \frac{1}{2t} \int_0^\infty dx \int_{-\infty}^\infty dy \Phi(x, y) \\
&\times \left( \frac{\gamma_y |y|}{\Gamma(1 - \frac{\gamma_y}{2}) \sqrt{\mathcal{K}_y t^{\gamma_y}}} + \sqrt{\frac{2}{\mathcal{K}_x t^{\gamma_x}} \sqrt{\mathcal{K}_y t^{\gamma_y}}} \frac{(\gamma_x - \gamma_y/2) x}{\Gamma(1 - \frac{1}{2}(\gamma_x - \frac{\gamma_y}{2}))} \right).
\end{aligned} \tag{3.32}$$

A Fig. 3.9 ilustra o deslocamento quadrático médio para dois casos:  $\gamma_x = \gamma_y/2$  com  $\gamma_y = 1$  e  $\gamma_x = \gamma_y = 1$ .

A Fig. 3.10 ilustra o comportamento da probabilidade de sobrevivência da Eq. (3.29) para o caso em que  $\gamma_x = \gamma_y/2$  com  $\gamma_y = 1$  e quando  $\gamma_x = \gamma_y = 1$ . No primeiro caso, uma parte das partículas do sistema fica presa nas armadilhas que o sistema possui e é verificado que o comportamento de  $\mathcal{S}(t)$  no limite assintótico para tempos grandes é constante, em contraste com o segundo caso. Esse fato sugere que o efeito memória pode mudar a probabilidade de sobrevivência, isto é, parte das partículas do sistema ficam presas nas armadilhas e, conseqüentemente, não são absorvidas pela superfície em  $x = 0$ . A equação que governa o limite assintótico é dada por  $\mathcal{S}(t) \sim 1/t^{\frac{\eta}{2}}$ , que é influenciado pelas correlações temporais nas armadilhas, que são representadas, por sua vez, pelo expoente  $\gamma_y$ . Esses fatos juntos sugerem que os resultados obtidos para a probabilidade de sobrevivência não são triviais, devido ao efeito memória que podem aparecer independente

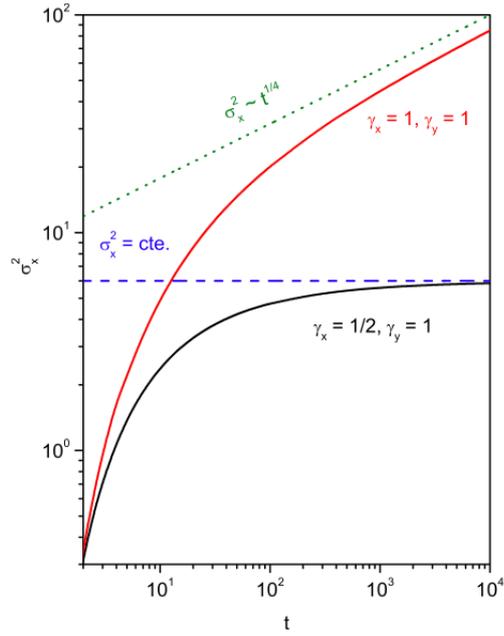


Figura 3.9: Comportamento do segundo momento no tempo equação (3.27), juntamente com limite assintótico Eq. (3.28), para os casos usual (linha vermelha) e fracionário (linha preta), cujos valores de  $\gamma_x$  e  $\gamma_y$  constam no gráfico. Considerando  $\mathcal{K}_x = 10$  e  $\mathcal{K}_y = 0.1$ , com a condição inicial  $\rho(x, y; 0) = \delta(x - \bar{x}) \delta(y - \bar{y})$ , sendo  $\bar{x} = 1$  e  $\bar{y} = 1.2$ .

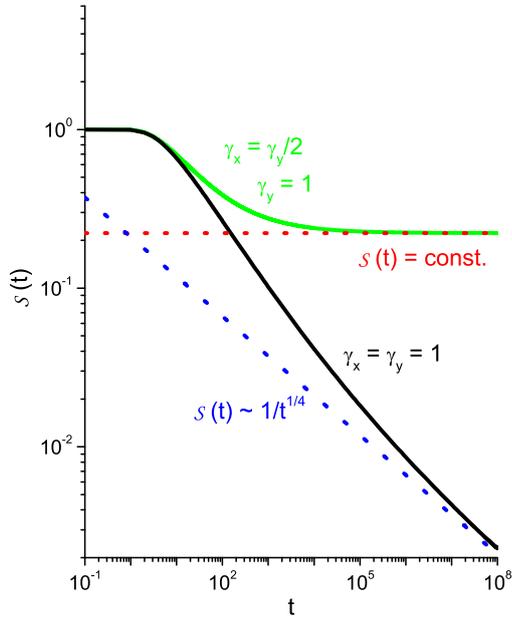


Figura 3.10: Comportamento da Eq. (3.29) considerando  $\mathcal{K}_x = 10$ ,  $\mathcal{K}_y = 0.1$  e as condições iniciais  $\rho(x, y; 0) = \delta(x - \bar{x}) \delta(y - \bar{y})$  com  $\bar{x} = 1$  e  $\bar{y} = 1.2$ . A linha em verde consiste no caso em que a derivada é não inteira, como mostra a figura, as linhas pontilhadas azul e vermelha mostram os limites assintóticos dos casos fracionário e usual respectivamente.

das escolhas para condição inicial e escala de tempo.

### 3.5 Síntese do capítulo

Nas seções anteriores, investigamos as soluções da equação de difusão bidimensional fracionária que define o modelo do pente. Resolvemos, primeiramente, o problema com expoentes fracionários  $\gamma_x = \gamma_y = 1$ , que descrevem o caso usual para o modelo do pente no espaço semi-infinito,  $x \geq 0$ , com uma parede absorvedora em  $y = 0$ . Analisamos, assim, algumas propriedades vinculadas a esse sistema, como as distribuições de tempo de primeira passagem e a probabilidade de sobrevivência, além da variância, que apresenta um comportamento anômalo devido à restrição geométrica que impomos no sistema. Nesse capítulo, investigamos, também, as soluções generalizadas com  $\gamma_x \neq 1$  e  $\gamma_y \neq 1$  e analisamos as mesmas propriedades do primeiro caso. Ao generaliza-lo, notamos alguns comportamentos interessantes que surgem devido ao efeito memória, e que se tornaram claros após termos analisados alguns comportamentos assintóticos generalizados, como  $\mathcal{S}(t) \sim 1/t^{\frac{\eta}{2}}$  e  $\sigma_x^2(t) \sim t^{\frac{\eta}{2}}$ , em que  $\eta = \gamma_x - \gamma_y/2$ .

# Capítulo 4

## Equações de difusão não-lineares no contexto da mecânica estatística não extensiva

Neste capítulo, investigaremos algumas soluções para a equação de difusão generalizada na presença de força externa, contendo um termo não-linear e termos de reação. As soluções encontradas aqui serão expressas em termos de funções  $q$ -exponenciais, essas que estão presentes no formalismo da mecânica estatística generalizada de Tsallis. Nessa generalização, a distribuição de probabilidades pode apresentar cauda curta ou longa, e tal característica está ligada a processos de difusão anômala, como já discutido no texto. Em particular, no limite assintótico, estabelecemos a conexão entre a função  $q$ -exponencial e a distribuição de Lévy. Utilizamos, ainda, a equação não-linear que será investigada para generalizar as equações de Verhulst e Fisher.

### 4.1 Introdução ao tópico

Antes de introduzir o tema referente a equações de difusão não-lineares em mecânica estatística não extensiva, é importante ressaltar que, no capítulo 1, estabelecemos a conexão entre a equação de Fokker-Planck e a entropia de Boltzmann-Gibbs<sup>1</sup> por meio do teorema H, e tal relação também foi desenvolvida para a equação de Fokker-Planck não-linear mostrando, assim, que esta está conectada a uma entropia mais geral.

A mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs se baseia em uma entropia extensiva e ergótica [2] que, ao longo do século XX, trouxe avanços consideráveis na compreensão de diversos sistemas físicos e em áreas além da física, como biologia, química e em sistemas complexos, nestes tais avanços têm sido obtidos mais recentemente conforme discutido na

---

<sup>1</sup>Entropia é algo que está relacionado indiretamente com o grau de desorganização do sistema. A entropia termodinâmica proposta por Boltzmann foi escrita como  $S = k_b \ln \Omega$ , em que  $\Omega$  é o número de microestados do sistema.

seção 1.3.

A forma entrópica de Boltzmann-Gibbs é dada pela expressão [2]:

$$S = - \int dx P(x, t) \ln P(x, t),$$

que é considerada uma entropia termodinâmica e que pode ser relacionada às configurações do sistema. Tal forma entrópica tem suas limitações se comparada à grande complexidade de fenômenos microscópicos presentes nos processos relacionados a interações. Algumas dessas limitações são: homogeneidade, interações de curto alcance entre os componentes e, principalmente, ergodicidade dos sistemas.

Em 1988, Constantino Tsallis surgiu com um proposta para generalizar a entropia de Boltzmann-Gibbs. Inspirado em equações fractais, ele propôs a seguinte forma entrópica [9]:

$$S_q = \frac{1 - \int dx P(x, t)^q}{1 - q}, \quad (4.1)$$

em que  $q$  é um parâmetro ligado à correlação do sistema e, quando  $q = 1$ , resgatamos o caso usual proposto por Boltzmann-Gibbs. Tal entropia generalizada, segundo Tsallis, é não extensiva para algumas grandezas físicas e, devido à sua versatilidade em relação ao parâmetro  $q$ , ela tem sido aceita em vários campos da ciência. Dentre suas aplicações, estão: flutuações do campo magnético em ventos solares [72]; átomos frios em redes ópticas [72]; sinais de câncer em mamografias [73]; e partículas geradas no *Large Hadron Collider* [74].

Como vimos no capítulo 2, é possível conectar a equação de Fokker-Planck não-linear à entropia generalizada  $S_q$ , e tais equações não-lineares podem descrever fenômenos intimamente ligados à difusão anômala, como o movimento de partículas em meios porosos [75], difusão anômala [76], difusão em sistemas não-lineares com adsorção [77], difusão anômala e entropia [78], entre outros. A equação de Fokker-Planck em meios porosos<sup>2</sup> para uma partícula sujeita a uma força  $F(x)$  pode ser escrita como

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = \mathcal{D} \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t)^{2-q} - \frac{\partial}{\partial x} P(x, t) F(x), \quad (4.2)$$

e tal equação tem como solução uma função  $q$ -gaussiana para o caso em que  $F(x) = 0$ .

Ainda, no contexto de equações diferenciais não-lineares, é sabido que suas aplicações estão presentes nas mais diversas vertentes da ciência. Um exemplo disso é conectar a equação de difusão não-linear a equações relacionadas à dinâmica de população, como a equação de Fisher, que descreve a evolução de uma população no tempo e no espaço [10].

<sup>2</sup>A caminhada aleatória de uma partícula livre representada pela Eq. (4.2) foi simulada pelas equações de Itô-Langevin,  $\dot{x} = \sqrt{2\mathcal{D}}P(x, t)^{\frac{1-q}{2}}\eta(t)$ ,  $\dot{y} = \sqrt{2\mathcal{D}}P(y, t)^{\frac{1-q}{2}}\beta(t)$ , em que  $\eta(t)$  e  $\beta$  são ruídos brancos.

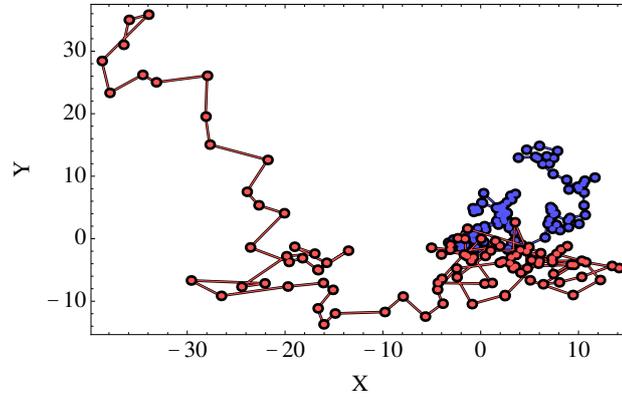


Figura 4.1: A figura mostra uma trajetória típica de uma partícula governada pela Eq. (4.2). A trajetória em preto e a em verde correspondem a  $q = 1$  e  $q = 1,5$  respectivamente.

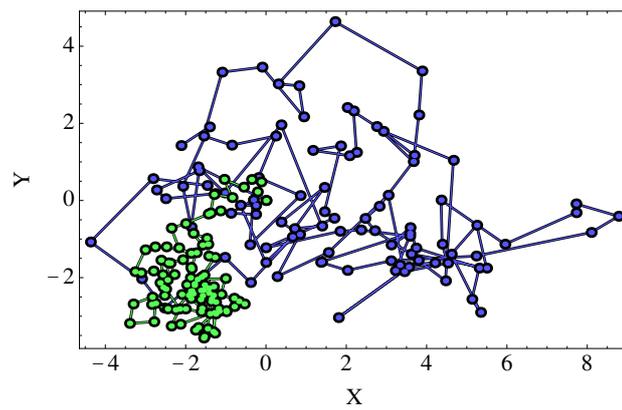


Figura 4.2: A figura mostra uma trajetória típica de uma partícula governada pela Eq. (4.2). A trajetória em azul e verde correspondem a  $q = 1$  e  $q = 0,2$  respectivamente.

Tal equação tem sido amplamente investigada, por exemplo: fazendo algumas considerações, é possível mostrar que a equação de difusão não-linear está conectada com a equação de Verhulst; e o mesmo vale para suas generalizações. Neste capítulo estabelecemos a conexão entre equação de difusão generalizada e as equações de Fisher e Verhulst.

Na próxima seção, vamos propor o problema que será o tema central deste capítulo.

## 4.2 Sobre a equação de difusão não-linear $d$ -dimensional com simetria radial

Nesta seção, focaremos uma equação de difusão não-linear generalizada e faremos algumas discussões a respeito de suas possíveis aplicações, que podem se tornar muito interessantes quando consideramos a presença de forças externas e termos de reação. Em alguns casos, as soluções podem ser expressas em termos da função  $q$ -exponencial, que está presente no contexto da mecânica estatística não extensiva, como esclarecido nas seções 1.3 e 3.1.

Com o intuito de generalizar ainda mais as equações de difusão não-lineares, introduzimos o laplaciano radial  $d$ -dimensional, em que  $d$  pode assumir um valor positivo não inteiro. Tal consideração pode ser esclarecida no trabalho de Frank H. Stillinger, no qual ele discorre a respeito do assunto argumentando que existem quatro axiomas ligados à topologia e um axioma envolvendo a medida de integração. Tais axiomas são os fundamentos do laplaciano de dimensão fracionária.

Aqui, investigaremos a equação de difusão não-linear  $d$ -dimensional com simetria radial:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho(r, t) &= \frac{1}{r^{d-1}} \frac{\partial}{\partial r} \left\{ r^{d-1} \left[ \tilde{\mathcal{D}}(r, t) \left| \frac{\partial}{\partial r} \rho(r, t) \right|^\eta \frac{\partial}{\partial r} \rho^\nu(r, t) \right] \right\} - \\ &\quad - \frac{1}{r^{d-1}} \frac{\partial}{\partial r} [r^{d-1} F(r, t) \rho(r, t)] - \bar{\alpha}(\rho, r, t), \end{aligned} \quad (4.3)$$

em que  $\tilde{\mathcal{D}}(r, t)$  é o coeficiente de difusão dependente do tempo,  $F(r, t)$  é uma força externa aplicada ao sistema e  $\bar{\alpha}(\rho, r, t)$  é um termo de reação. Se  $\bar{\alpha}(\rho, r, t) = 0$ , pode ser verificado que a quantidade  $\int_0^\infty dr r^{d-1} \rho(r, t)$  é independente do tempo, conseqüentemente, se  $\rho(r, t)$  é normalizada em  $t = 0$ , então, ela irá permanecer assim. De fato, se escrevermos a equação como  $\partial_t \rho = -r^{1-d} \partial_r \mathcal{J}$ , obtemos

$$\mathcal{J}(r, t) = -\tilde{\mathcal{D}}(r, t) \left| \frac{\partial}{\partial r} \rho(r, t) \right|^\eta \frac{\partial}{\partial r} \rho^\nu(r, t) + F(r, t) \rho(r, t) \quad (4.4)$$

e, assumindo que a condição de contorno é dada por  $\mathcal{J}(\infty, t) = 0$ , isso mostra que  $\int_0^\infty dr r^{d-1} \rho(r, t)$  é uma constante de movimento.

Note que as soluções que emergem da equação Eq. (4.3), considerando as condições de

contorno adequadas, têm como casos particulares várias situações, tal como o modelo não-linear de condução de calor [79], os problemas de difusão não-lineares em hidrodinâmica [80], as equações de difusão não-lineares fracionárias [81], a lei de Chezy para grandes seções [82], a dinâmica de populações [10], os processos de recombinação em física de plasmas e cinética de transições de fase.

Para investigarmos a Eq. (4.3) mais detalhadamente, iniciaremos considerando a presença de uma força externa  $F(r, t)$  arbitrária e a ausência de termos de reação. Nesse caso, é assumido que  $\mathcal{D}(r, t) \rightarrow \mathcal{D}(r)$  e  $F(r, t) \rightarrow f(r)$  no limite  $t \rightarrow \infty$  para obtermos  $\rho(r, t) \rightarrow \rho_s(r)$ . Depois, analisaremos os casos dependentes do tempo que emergem quando consideramos  $\tilde{\mathcal{D}}(r, t) = \bar{\mathcal{D}}(t)r^{-\theta}$ , a força externa  $F(r, t) = -k(t)r$  e

$$\bar{\alpha}(\rho, r, t) = \alpha(t)\rho(r, t) - \alpha_\gamma(t)r^\lambda\rho^\gamma(r, t).$$

O termo  $\bar{\alpha}(\rho, r, t)$  pode representar uma fonte, como mostraremos mais adiante, ele está conectado com a dinâmica de crescimento de Verhulst. Em outros casos, expressamos os resultados em termos da função  $q$ -exponencial que, no limite assintótico, está conectada com as distribuições de Lévy. A função exponencial generalizada  $e_q(x)$  foi amplamente estudada em outros contextos matemáticos. Há, por exemplo, propostas de generalizar algumas transformadas integrais para se obter  $q$ -transformadas, como a de Fourier [83] e Laplace [84].

Na próxima seção, buscaremos compreender mais sobre a solução no limite assintótico  $t \mapsto \infty$ , logo, iremos procurar a solução para a Eq. (4.3) no regime estacionário.

### 4.3 A equação de difusão não-linear independente do tempo

Nessa seção, buscaremos encontrar uma solução da equação de difusão não-linear independente do tempo, pois ela nos permite propor um *ansatz*, que pode ser usado na tentativa de encontrar uma solução para o caso dependente do tempo.

Vamos iniciar as discussões sobre as soluções estacionárias aplicando à Eq. (4.3) as condições discutidas na seção anterior. Para o caso estacionário, a Eq. (4.5) pode ser escrita como

$$\mathcal{D}(r) \left| \frac{\partial}{\partial r} \rho_s(r) \right|^n \frac{\partial}{\partial r} \rho_s^\nu(r) - f(r)\rho_s(r) = 0, \quad (4.5)$$

em que  $f(r) = -\partial_r V(r)$  e  $V(r)$  representa o potencial com a concavidade adequada presente no estado estacionário. A solução da Eq. (3.5) está sujeita à condição de contorno,  $\lim_{r \rightarrow \infty} \rho_s(r) = 0$ , de modo a satisfazer a condição de normalização. Para obtermos a solução da Eq. (4.5), é interessante notar que devemos recuperar, no limite apropriado, as

soluções para meios porosos e para a equação de difusão usual. Por essa razão, propomos como solução o *ansatz*

$$\rho_s(r) = \exp_q[-\beta\mathcal{G}(r)]/\mathcal{Z}, \quad (4.6)$$

em que

$$\exp_q[x] = \begin{cases} (1 + (1 - q)x)^{\frac{1}{1-q}} & \text{se } 1/(1 - q) \leq x \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (4.7)$$

é a função  $q$ -exponencial presente no contexto da mecânica estatística generalizada,  $\mathcal{G}(r)$  é a função a ser determinada e as constantes  $\beta$  e  $\mathcal{Z}$  são definidas pela condição de normalização. Aqui, podemos mencionar que a solução da forma da Eq. (4.6) pode ser obtida se utilizarmos o princípio da máxima entropia quando a entropia  $S_q = (1 - \int_0^\infty dr r^{d-1} \rho_s(r))/(q-1)$  é considerada sobre as restrições apropriadas. Por substituição da Eq. (4.6) na Eq. (4.5), podemos escrever

$$\mathcal{D}(r)\mathcal{Z}^{(q-1)(\eta+1)} \left| \beta \frac{\partial}{\partial r} \mathcal{G}(r) \right|^{1+\eta} \rho_s(r)^{q\eta+\eta-1+q} - f(r)\rho_s(r) = 0 \quad (4.8)$$

e, resolvendo a equação diferencial obtida para  $\mathcal{G}(r)$ , obtemos que

$$\mathcal{G}(r) = \int^r \left( \frac{1}{\nu\mathcal{D}(\xi)} \frac{\partial}{\partial \xi} V(\xi) \right)^{\frac{1}{1+\eta}} d\xi, \quad (4.9)$$

com  $\beta = \mathcal{Z}^{1/(1-q)}$  e  $\nu = 2 - q(1 + \eta)$ , conseqüentemente,

$$\rho_s(r) = \exp_q \left[ -\beta \int^r \left( \frac{1}{\nu\mathcal{D}(\xi)} \frac{\partial}{\partial \xi} V(\xi) \right)^{\frac{1}{1+\eta}} d\xi \right] / \mathcal{Z}. \quad (4.10)$$

Para  $\eta = 0$ , a Eq. (4.10) recupera a solução estacionária para meios porosos e a usual é obtida para  $\eta = 0$  e  $\nu = 1$ .

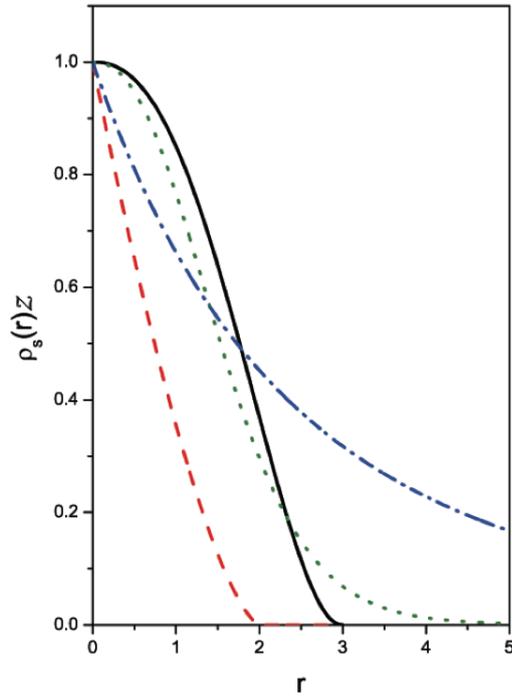


Figura 4.3: O comportamento da Eq.(4.10) versus  $r$  é ilustrado para diferentes valores de  $q$ ,  $\theta$  e  $\eta$ , na ausência de termos de fonte (sumidouro). Por simplicidade, consideramos  $D = 1$  e  $V(r) = kr^2/2$  com  $k = 1$ . As curvas tracejada de vermelho e a sólida preta foram obtidas para  $q = 1/2$ ,  $\theta = 1$ ,  $\eta = 1/2$  e  $q = 1/3$ ,  $\theta = 1$  e  $\eta = 1$  respectivamente. As curvas, verde pontilhada e a vermelha tracejada foram obtidas para  $q = 6/5$ ,  $\theta = 1$ ,  $\eta = 1/2$  e  $q = 6/5$ ,  $\theta = 1$  e  $\eta = 1/3$  respectivamente.

## 4.4 A equação de difusão não-linear dependente do tempo

Agora, focamos a atenção para as soluções dependentes do tempo da Eq. (4.3). Primeiramente, consideramos o coeficiente de difusão  $\tilde{\mathcal{D}}(r, t) = \overline{\mathcal{D}}(t)r^{-\theta}$  e a força externa  $F(r, t) = -k(t)r$  na ausência de termos de reação. Dessa forma, temos que

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\rho(r, t) &= \frac{\overline{\mathcal{D}}(t)}{r^{d-1}} \frac{\partial}{\partial r} \left\{ r^{d-1} \left[ r^{-\theta} \left| \frac{\partial}{\partial r}\rho(r, t) \right|^\eta \frac{\partial}{\partial r}\rho^\nu(r, t) \right] \right\} \\ &- \frac{1}{r^{d-1}} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r^{d-1} (-k(t)r) \rho(r, t) \right]. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Note que a força externa pode exibir soluções estacionárias dadas pela Eq. (4.10), que satisfaz às condições de contorno requeridas, se  $k(t) \rightarrow \text{constante}$  para  $t \rightarrow \infty$ . Esta característica nos leva a considerar que a solução dependente do tempo para a Eq. (4.11), conectada à Eq. (4.10) é dada por

$$\rho(r, t) = \exp_q [-\beta(t)r^\lambda] / \mathcal{Z}(t), \quad (4.12)$$

com  $\lambda = 1 + (1 + \theta)/(1 + \eta)$  e  $\nu = 2 - q(1 + \eta)$ .

As funções dependentes do tempo  $\beta(t)$  e  $\mathcal{Z}(t)$  podem ser obtidas substituindo a Eq. (4.12) na Eq. (4.11). Nesse sentido, depois da realização de alguns cálculos, é possível mostrar que as funções  $\beta(t)$  e  $\mathcal{Z}(t)$  satisfazem o seguinte conjunto de equações acopladas

$$\frac{1}{\mathcal{Z}} \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{Z} = \nu \mathcal{D}(t) d\mathcal{Z}^{(q-1)(1+\eta)} \lambda \beta |\lambda \beta|^\eta - dk(t), \quad (4.13)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \beta = \lambda k(t) \beta - \nu \mathcal{D}(t) \mathcal{Z}^{(q-1)(1+\eta)} (\lambda \beta)^2 |\lambda \beta|^\eta. \quad (4.14)$$

Dessas equações, obtemos a seguinte relação entre  $\beta(t)$  e  $\mathcal{Z}(t)$ :

$$\mathcal{Z}(t) \beta^{\frac{d}{\lambda}}(t) = \mathcal{N}, \quad (4.15)$$

vinculada à condição de normalização de  $\rho(r, t)$ , isto é,  $\int_0^\infty dr r^{d-1} \rho(r, t) = 1$ , a partir da qual a constante  $\mathcal{N}$  pode ser obtida. Usando a Eq. (4.15), obtemos que

$$\beta(t) = \beta_0 e^{-\int_0^t dt' k(t')} \left[ 1 + \mathcal{C} \int_0^t d\bar{t} \mathcal{D}(\bar{t}) e^{-\lambda \sigma \left( \int_0^{\bar{t}} dt' k(t') - \int_0^t dt' k(t') \right)} \right]^{1/\sigma}, \quad (4.16)$$

sendo  $\mathcal{C} = \nu \mathcal{N}^\delta \lambda^2 |\lambda|^\eta \beta_0^\sigma$ ,  $\sigma = 1 + \eta + (1 - q)(1 + \eta)d/\lambda$ ,  $\delta = (q - 1)(1 + \eta)$  e  $\beta_0$  uma constante definida pela condição inicial. A função  $\mathcal{Z}(t)$  é obtida usando a Eq. (4.15) e a Eq. (4.16). Usando a Eq. (4.12), podemos encontrar que o espalhamento do sistema é governado pela equação  $\langle (r - \langle r \rangle)^2 \rangle \sim t^\zeta$ , com  $\zeta = 2/(\lambda\sigma)$ , quando  $\mathcal{D}(t) = \text{constante}$  e  $k(t) = 0$ . É importante mencionar que, para  $q > 1 - \lambda/(d + 1)$ , os momentos obtidos para a solução não são definidos e, no limite assintótico, a distribuição obtida pode ser

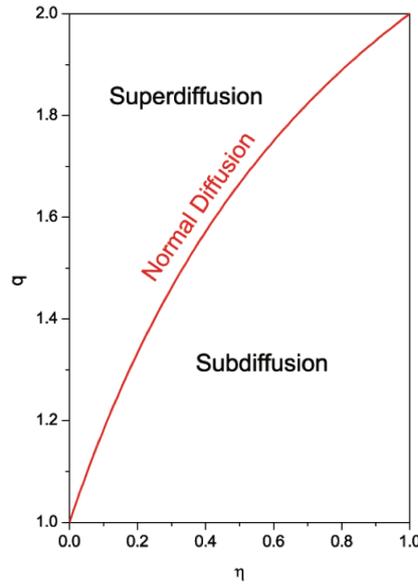


Figura 4.4: Esta figura ilustra regiões onde o sistema pode apresentar um comportamento usual ou anômalo para o desvio quadrático médio dependendo de valores de  $q$  e  $\eta$ ; por simplicidade, para  $d = 1$  e  $\lambda = 2$ .

conectada com as distribuições de Lévy.

## 4.5 As equações de Fisher e de Verhulst generalizadas

Nesta seção, vamos investigar as implicações da Eq. (4.3) no contexto da dinâmica de populações. Nessa área, o matemático Pierre François Verhulst deu uma das primeiras contribuições, que ficou conhecida como equação logística ou de Verhulst. Tal equação complementou a teoria do crescimento exponencial de Thomas Malthus, pois incorpora termos que representam os fatores de inibição do crescimento. A equação de Verhulst é dada por

$$\frac{d}{dt}\mathcal{P}(t) = rN\mathcal{P}(t) \left(1 - \frac{\mathcal{P}(t)}{K}\right), \quad (4.17)$$

em que  $\mathcal{P}(t)$  representa o número de indivíduos no tempo  $t$ ,  $r$  é a taxa de crescimento intrínseca e  $K$  é a capacidade de carga ou o número máximo de indivíduos que o ambiente suporta.

Em 1937, Ronald Fisher propôs um modelo para dinâmica de populações *biológicas* [85], [86]. Tal modelo generaliza a equação de Verhulst para uma dinâmica espacial e temporal  $\rho(\vec{r}, t)$ , na qual a difusão pode ser investigada com mais rigor. O modelo proposto por Fisher é dado por

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\vec{r}, t) = \mathcal{D}\nabla^2\rho(\vec{r}, t) + r\rho(\vec{r}, t) - u\rho^2(\vec{r}, t). \quad (4.18)$$

Se lembrarmos da análise sobre a equação de difusão não-linear Eq.(4.3) com o seguinte termo de reação:

$$\bar{\alpha}(\rho, r, t) = \alpha(t)\rho(r, t) - \alpha_\gamma(t)r^\lambda\rho^\gamma(r, t), \quad (4.19)$$

e

$$F(t) = -k(t)r. \quad (4.20)$$

É interessante notar que esses termos, quando incorporados à Eq. (4.3), representam uma extensão da equação de Fisher dada pela Eq. (4.18) que, por conseguinte, nos fornece uma simples generalização da equação logística de Verhulst para a dinâmica de populações [85] e [86].

Neste capítulo, a Eq. (4.19) incorporada à Eq.(4.3) é usada para descrever o local das mudanças na dinâmica da população e o termo de difusivo governa a dinâmica de difusão da população no espaço, tendo, como casos particulares, a equação de difusão usual e a equação de meios porosos. Nesse sentido, fazendo a integração da Eq. (4.3) com  $\bar{\alpha}(\rho, r, t)$  dado pela Eq. (4.19), obtemos

$$\frac{d}{dt}\mathcal{P}(t) = \alpha(t)\mathcal{P}(t) - \alpha_\gamma(t) \int_0^\infty dr r^{d-1} [r^\lambda\rho^\gamma(r, t)], \quad (4.21)$$

em que  $\mathcal{P}(t) = \int_0^\infty dr r^{d-1} \rho(r, t)$  pode ser considerado como a população total.

Nesse contexto, podemos considerar dois mecanismos para a regularização da população global: o primeiro, (i), nos leva à equação de Verhulst de dinâmica para população; e o outro, (ii), nos conduz para a população total constante. Para o caso (i), o mecanismo de regularização é dado pela função

$$\alpha_\gamma(t) = \Phi(t) \left( \int_0^\infty dr r^{d-1} \rho(r, t) \right)^q / \int_0^\infty dr r^{d-1} [r^\lambda\rho^\gamma(r, t)], \quad (4.22)$$

com  $\Phi(t)/\alpha(t) \rightarrow \text{constante}$  para  $t \rightarrow \infty$ . Substituindo a Eq. (4.22) na Eq. (4.21), obtemos a seguinte equação:

$$\frac{d}{dt}\mathcal{P}(t) = \alpha(t)\mathcal{P}(t) - \Phi(t)\mathcal{P}^q(t), \quad (4.23)$$

que é a extensão da equação de Verhulst e que tem como solução

$$\mathcal{P}(t) = \mathcal{P}(0) e^{\int_0^t dt' \alpha(t')} \exp_q \left[ -\frac{1}{\mathcal{P}^{1-q}(0)} \int_0^t dt' \Phi(t') e^{-(1-q)\int_0^{t'} dt'' \alpha(t'')} \right]. \quad (4.24)$$

A Fig. (4.5) ilustra o comportamento para  $\mathcal{P}(t)$ . Para  $q > 1$ , com  $\Phi(t)$  e  $\alpha(t)$  constantes,

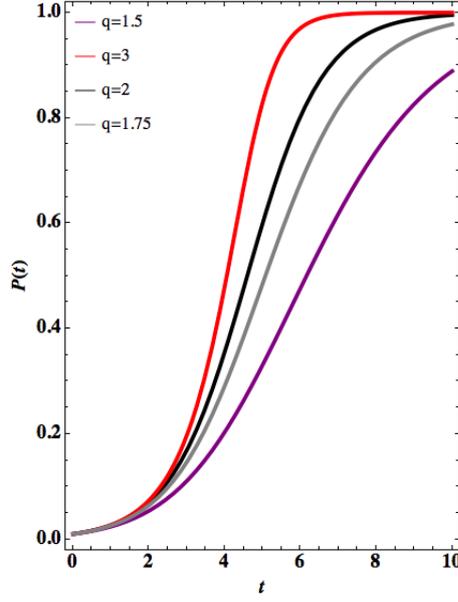


Figura 4.5: O gráfico mostra o número de indivíduos pelo tempo.

no limite de  $t \rightarrow \infty$ , obtemos da Eq. (4.24) que  $\mathcal{P}(t) \rightarrow (\alpha/\Phi)^{1/(q-1)}$ . A forma alternativa de obter o mecanismo de regularização global implica relacionar  $\alpha(t)$  e  $\alpha_\gamma(t)$  como seguem:

$$\alpha(t) = \alpha_\gamma(t) \int_0^\infty dr r^{d-1} [r^\lambda \rho^\gamma(r, t)] / \int_0^\infty dr r^{d-1} \rho(r, t) . \quad (4.25)$$

Nesse caso, obter a solução não estacionária com  $\lambda$  e  $\gamma$  arbitrários é uma tarefa difícil. Portanto, a Eq. (4.12) ainda é a solução para o caso  $\lambda = 1 + (1 + \theta)/(1 + \eta)$  com  $\gamma = q$ , com as equações satisfazendo as funções dependentes do tempo dadas por:

$$-\frac{1}{\mathcal{Z}} \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{Z} = -\nu d \mathcal{Z}^{(q-1)(1+\eta)} \lambda \beta |\lambda \beta|^\eta + dk(t) + \alpha(t) \quad (4.26)$$

$$-\frac{\partial}{\partial t} \beta = \nu \mathcal{Z}^{(q-1)(1+\eta)} |\lambda \beta|^\eta (\lambda \beta)^2 - \lambda \beta k(t) - \mathcal{Z}^{q-1} \alpha_\gamma(t) . \quad (4.27)$$

Note que a Eq. (4.15) é satisfeita se  $\alpha(t) = \alpha_\gamma(t) \mathcal{Z}^{1-q}/(\lambda \beta)$ , implicando que

$$\beta(t) = \beta_0 e^{-\lambda \left( \int_0^t dt' (k(t') - \alpha(t')/d) \right)} / \left[ 1 + \mathcal{C} \int_0^t d\bar{t} \mathcal{D}(\bar{t}) e^{\lambda(\sigma-1) \left( \int_0^{\bar{t}} dt' (k(t') - \alpha(t')/d) \right)} \right]^{\frac{1}{1-\sigma}} \quad (4.28)$$

De outra maneira, essas soluções não podem ser verificadas quando  $\alpha(t)$  e  $\alpha_\gamma(t)$  são arbitrários. Essa característica está ilustrada na Fig. (4.6) para uma escolha particular de  $\alpha(t)$  e  $\alpha_\gamma(t)$ . Outro aspecto interessante é obtido a partir da Eq. (4.3) para  $\alpha(t)$  arbitrário e  $\alpha_\gamma = 0$ . Desse modo, a Eq. 4.3 se torna uma equação de difusão com um termo de

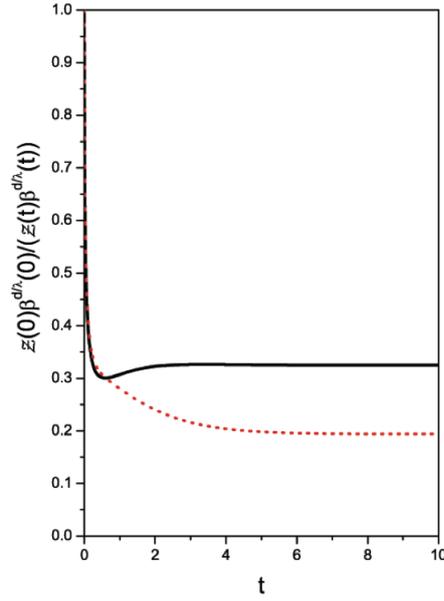


Figura 4.6: O comportamento de  $\mathcal{Z}(0)\beta d(0)/\mathcal{Z}(t)\beta d(t)$  versus  $t$  é ilustrado para valores de  $q$ ,  $\eta$  e  $\theta$ , considerando a presença dos termos de reação  $\alpha(t) = \alpha e^{-t}$  e  $\alpha_\gamma(t) = \alpha_\gamma e^{-t}$  e considerando, por simplicidade,  $\alpha = 1$  e  $\alpha_\gamma = 1$ . As curvas vermelha pontilhada e sólida preta foram obtidas para  $q = 1/2$  e  $q = 6/5$ , respectivamente, com  $\theta = 1$  e  $\eta = 1/2$ .

reação de primeira ordem. Obtemos, assim:

$$\beta(t) = \beta_0 e^{-\lambda \int_0^t dt' (k(t'))} \left/ \left[ 1 + \mathcal{C} \int_0^t d\bar{t} \mathcal{D}(\bar{t}) e^{\lambda(\sigma-1) \left( \int_0^{\bar{t}} dt' (k(t')) - d\bar{t} \right)} \right]^{\frac{1}{1-\sigma}} \right., \quad (4.29)$$

com  $d = (1 - q)(1 + \eta)d/\lambda$  e  $\mathcal{Z}\beta^{\frac{d}{\lambda}} = \mathcal{N} e^{-d \int_0^t dt' \alpha(t')}$ , implicando a não conservação da normalização.

## 4.6 Síntese do capítulo

Nesse capítulo investigamos alguns aspectos da solução da equação de difusão não-linear  $d$ -dimensional (Eq. (4.3)), considerando algumas situações dependendo da escolha dos parâmetros  $d$ ,  $\theta$ ,  $\eta$  e  $\nu$ . Forças externas e termos de sorção (fonte) foram levados em consideração em nossa investigação. Nós mostramos que tais considerações admitem soluções exatas, contemplando as variáveis espacial e temporal. Em particular, estendemos os resultados obtidos para a equação de difusão não-linear com dimensão fracionária e com termos de reação. Estabelecemos uma conexão das soluções com as distribuições de Lévy para os casos caracterizados por um comportamento de cauda longa na distribuição, que sugere uma conexão com o formalismo de Tsallis. Em especial, para estabelecer essa relação, é preciso dar uma base termoestatística para a difusão não-linear. Nessa direção, a presença da função  $q$ -exponencial nas soluções sugere que elas estão conectadas com o princípio da máxima entropia e a entropia não aditiva de Tsallis. Ainda nesse capítulo, fizemos um estudo da equação não-linear do ponto de vista da dinâmica de população. Generalizando a equação de Fisher, reduzimos, assim, a equação de difusão não-linear a uma equação de Verhulst generalizada, e fizemos uma breve análise do fator de regularização. Por fim, os resultados obtidos nesse capítulo descrevem alguns sistemas físicos que são governados por equações não-lineares e estão conectados com processos difusivos anômalos.

# Capítulo 5

## Soluções dependentes do tempo para a equação de Schrödinger fracionária com potenciais tipo delta

Neste capítulo, vamos introduzir alguns conceitos fundamentais que definem a equação de Schrödinger fracionária, seguindo o esquema mostrado no fluxograma da Fig. 5.1. Inicialmente, faremos uma abordagem sobre o tópico para contextualizá-lo o leitor. Em seguida, utilizando as distribuições de Lévy, demonstraremos a equação de Schrödinger fracionária. E nas seções subsequentes, iremos resolvê-la para alguns casos de potenciais tipo delta, com operadores fracionários no tempo e no espaço.

### 5.1 Introdução ao tópico

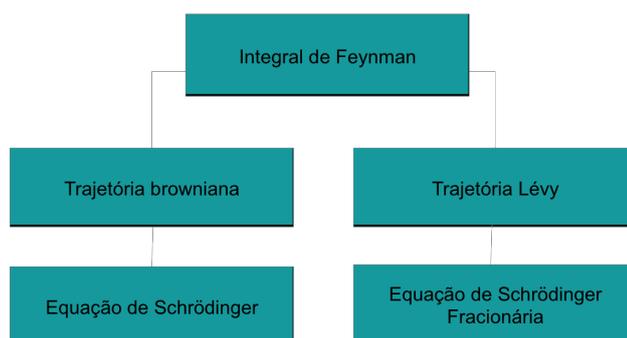


Figura 5.1: Fluxograma mostrando alguns conceitos fundamentais que definem a equação de Schrödinger fracionária.

Nossa experiência até este momento do texto nos leva a acreditar que o tipo de trajetória, que está vinculado à caminhada aleatória da partícula ou à estrutura do sistema, conduz a generalizações, tais como a não-localidade e os processos não-Markovianos. Portanto, na mecânica quântica, não seria diferente se tal processo de mudança fosse con-

siderado de modo a ser possível derivar uma equação de Schrödinger generalizada. Um aspecto interessante desse formalismo concerne nos efeitos não locais e não-Markovianos, como mencionado, que podem ser elegantemente incorporados nas equações de evolução por meio de uma extensão adequada dos operadores diferenciais de ordem inteira para operadores diferenciais de ordem fracionária, conforme visto no capítulo 2.

A primeira generalização da equação de Schrödinger foi feita por Nick Laskin, que recorreu a argumentos que relacionam fractais [87] a trajetórias não diferenciáveis, utilizando a formulação da mecânica quântica desenvolvida por Feynman que, a priori, soma todas as trajetórias brownianas do sistema. Laskin generalizou essa formulação ao considerar trajetórias do tipo Lévy [11, 88–90] usando uma extensão da integral de trajetória de Feynman e investigando a incorporação de operadores fracionários na equação de Schrödinger [91]. Outras situações sobre o contexto da equação de Schrödinger fracionária que emergem dessa vertente são exaustivamente investigadas em diversos trabalhos [92–102].

Seguindo esse desenvolvimento, nosso objetivo é obter soluções dependentes do tempo utilizando o formalismo das funções de Green (ou *propagadores*), que desempenha um importante papel nesse cenário da equação de Schrödinger fracionária na presença de potenciais do tipo delta de Dirac. Isso será realizado neste capítulo, no qual investigaremos a equação de Schrödinger fracionária considerando os seguintes potenciais: (i)  $V(x) = \mathcal{V}\delta(x)$  e (ii)  $V(x) = \mathcal{V}_1\delta(x-l_1) + \mathcal{V}_2\delta(x-l_2)$ . O primeiro caso corresponde ao potencial com uma distribuição delta na origem, o segundo, ao potencial composto por duas distribuições delta nas posições  $l_1$  e  $l_2$ .

## 5.2 Integral de Feynman sobre trajetórias de Lévy

De acordo com a mecânica quântica, para calcular a amplitude de probabilidade de transição de um estado quântico para outro, temos que considerar todas as trajetórias possíveis, mesmo aquelas que diferem muito das clássicas. Com base no princípio da correspondência de Bohr<sup>1</sup> e em um comentário ardiloso feito por Dirac<sup>2</sup>, que, em linguagem matemática, se resume a dizer que

$$\exp\left(i \int_{t_1}^{t_2} \frac{L(x, \dot{x})}{\hbar}\right) \text{ corresponde a } \widehat{\mathcal{G}}(x_2, x_1; t_2, t_1), \quad (5.1)$$

em que  $\widehat{\mathcal{G}}(x_2, x_1; t_2, t_1)$  é a amplitude de probabilidade de transição e  $L(x, \dot{x})$  é a função lagrangiana clássica do sistema, Feynman redescobriu a mecânica quântica na sua proposta, que consiste na integração de um número infinito e não enumerável de trajetórias

<sup>1</sup>O princípio da correspondência de Bohr afirma que, no limite macroscópico, a mecânica quântica deve corresponder à mecânica clássica.

<sup>2</sup>Dirac, em seu artigo intitulado "The lagrangian in quantum mechanics", afirma que "[...] there will be a transformation function ( $q, Q'$ ) connecting the two representations. We shall now show that this transformation function is the quantum analog of  $\exp(iS/\hbar)$  [...]"

em  $\widehat{\mathcal{G}}(x_2, x_1; t_2, t_1)$ .

As trajetórias não diferenciáveis são brownianas, portanto, a relação entre os deslocamentos no espaço e no tempo é escrita como  $|x_j - x_{j-1}| \propto (\hbar/m)^{\frac{1}{2}}(\Delta t)^{\frac{1}{2}}$ . Isso implica que a dimensão fractal das trajetórias de Feynman é  $d_{fractal}^{Feynman} = 2$ , o que leva à mecânica quântica padrão. Para o caso de a distribuição ser do tipo Lévy na Eq. (5.1), temos  $|x_j - x_{j-1}| \propto (\hbar/m)^{\frac{1}{2}}(\Delta t)^{\frac{1}{\alpha}}$ , e tal relação de escala nos conduz à seguinte dimensão fractal para as trajetórias de Lévy,  $d_{fractal}^{Feynman} = \alpha$  [89].

Vamos iniciar nosso formalismo a respeito do *kernel*, que, nesse capítulo, vai ser chamado de função de Green (ou propagador da função de onda), considerando que uma partícula esteja inicialmente na posição  $x'$  para um tempo  $t'$  e na posição final  $x$  para um tempo final  $t$ . Usando a integral de Feynman, integramos sobre todas as trajetórias possíveis sob a influência do potencial. Podemos escrever o propagador da função de onda como

$$\widehat{\mathcal{G}}(x, x'; t, t') = \int_{x'}^x \mathcal{D}[x(t)] \int \mathcal{D}[p(t)] e^{\frac{i}{\hbar} S_\alpha(p(t), \overline{x(t)})}, \quad (5.2)$$

em que  $S_\alpha$  é a ação mecânica para a trajetória  $\{p(t), x(t)\}$  no espaço de fase, escrita, por sua vez, como

$$S_\alpha = \int_{t'}^t d\tau [p(\tau)\dot{x} - H_\alpha(p(\tau), x(\tau), \tau)], \quad (5.3)$$

com o hamiltoniano fracionário  $H_\alpha$  dado por  $H_\alpha(p, x) = \mathcal{D}_\alpha |p|^\alpha + V(x)$ . Se  $\alpha = 2$ , temos  $\mathcal{D} = 1/2m$  e a parte cinética da energia fica dada por  $\frac{p^2}{2m}$ . Dessa forma, a Eq. (3.5) se torna a integral de Feynman.

A integral de trajetória no espaço de fase da Eq. (5.2) é definida por

$$\begin{aligned} \int_{x'}^x \mathcal{D}[x(t)] \int \mathcal{D}[p(t)] \dots &= \int_{-\infty}^{\infty} \prod_1^{n=\infty} \frac{dx_n}{(2\pi\hbar)^{3n}} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_1^{n=\infty} dp_n \times \\ &\times \exp\left(i \frac{p_1(x_1 - x')}{\hbar} - i \frac{\mathcal{D}_\alpha \zeta |p_1|^\alpha}{\hbar}\right) \times \dots \\ &\times \exp\left(i \frac{p_n(x - x_{n-1})}{\hbar} - i \frac{\mathcal{D}_\alpha \zeta |p_n|^\alpha}{\hbar}\right) \dots, \end{aligned} \quad (5.4)$$

em que  $\zeta = (t - t')/N$  e  $\mathcal{D}[x(t)]$  é a medida de integração introduzida por Feynman. O *kernel*  $\widehat{\mathcal{G}}$  governa a dinâmica do sistema quântico de tal forma que a função de onda fica escrita como

$$\Psi(x, t) = \int dx' \widehat{\mathcal{G}}(x, x'; t, t_0) \Psi(x', t_0). \quad (5.5)$$

Para obtermos a equação diferencial para a equação de onda, tomemos o caso em que a

variação no tempo é infinitesimal, de modo que  $t \rightarrow t + \epsilon$  e  $t_0 = t$ , com  $\epsilon \ll 1$ . Usando a aproximação de Feynman,  $\int_t^{t+\epsilon} V(x(\tau), \tau) d\tau = V\left(\frac{x+x'}{2}, t\right)$ , na Eq. (5.2), temos que

$$\Psi(x, t + \epsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx'}{(2\pi\hbar)^3} \int_{-\infty}^{\infty} dp \exp\left(\frac{ip(x' - x)}{\hbar} - \frac{i\mathcal{D}_\alpha \epsilon |p|^\alpha}{\hbar} - \frac{i\epsilon}{\hbar} V\left(\frac{x' + x}{2}, t\right)\right) \Psi(x', t). \quad (5.6)$$

Fazendo a expansão de primeira ordem em  $\epsilon$ , obtemos

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) + \epsilon \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx'}{(2\pi\hbar)} \int_{-\infty}^{\infty} dp \exp\left(\frac{ip(x' - x)}{\hbar}\right) \times \\ &\times \left(1 - \frac{i\mathcal{D}_\alpha \epsilon |p|^\alpha}{\hbar}\right) \left(1 - \frac{i\epsilon}{\hbar} V\left(\frac{x' + x}{2}, t\right)\right) \Psi(x', t). \end{aligned} \quad (5.7)$$

E definindo a derivada fracionária de Riesz,

$$\mathcal{F} \left\{ (-\hbar^2 \nabla^2)^{\frac{\alpha}{2}} \Psi(x, t) \right\} = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{-i\frac{p}{\hbar}x} |p|^\alpha \bar{\Psi}(p, t), \quad (5.8)$$

podemos reescrever a Eq. (5.7) como

$$\Psi(x, t) + \epsilon \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \Psi(x, t) - \frac{i\mathcal{D}_\alpha \epsilon}{\hbar} (-\hbar^2 \nabla^2)^{\frac{\alpha}{2}} \Psi(x, t) - \frac{i\epsilon}{\hbar} V(x, t) \Psi(x, t). \quad (5.9)$$

A equação acima nos leva à generalização da equação de Schrödinger com o operador espacial de ordem não inteira dado por

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \mathcal{D}_\alpha (-\hbar^2 \nabla^2)^{\frac{\alpha}{2}} \Psi(x, t) + V(x, t) \Psi(x, t). \quad (5.10)$$

Utilizando argumentos simples e uma formulação ardilosa feita por Feynman, foi possível mostrar que essa generalização possui um fundamento plausível que envolve o tipo de caminhante associado à distribuição de Lévy. A Eq. (5.10) pode ser mais geral ainda, como veremos na última seção deste capítulo. Na próxima seção, iremos resolver essa equação para o caso de potenciais tipo delta.

### 5.3 Equação de Schrödinger fracionária para o potencial tipo delta

Vamos iniciar nossa investigação a respeito das soluções dependentes do tempo para a equação de Schrödinger fracionária, Eq. (5.10), na presença do potencial  $V(x) = \mathcal{V}\delta(x)$  com as condições de contorno  $\Psi(\pm\infty, t) = 0$  e com uma condição inicial arbitrária

$\Psi(x, 0) = \Phi(x)$ . Para este caso, a Eq. (5.10) pode ser escrita como [103]:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \mathcal{D}_\mu (-\hbar^2 \nabla^2)^{\frac{\mu}{2}} \Psi(x, t) + \mathcal{V} \delta(x) \Psi(x, t), \quad (5.11)$$

em que  $\mathcal{D}_\mu$  é uma constante. Note que o operador espacial no espaço de Fourier<sup>3</sup> é dado por  $\mathcal{F} \left\{ (-\hbar^2 \nabla^2)^{\frac{\mu}{2}} \Psi(x, t) \right\} = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{-i\frac{p}{\hbar}x} |p|^\mu \bar{\Psi}(p, t)$ , que corresponde ao operador fracionário de Riesz-Welly [7]. O caso usual é recuperado pela escolha do índice fracionário  $\mu = 2$  e, conseqüentemente, pela escolha  $\mathcal{D}_{\mu=2} = 1/2m$ . A discussão envolvendo a presença da derivada fracionária será realizada mais adiante.

As soluções e propriedades que envolvem a Eq. (5.10) têm sido investigadas em diversos contextos, por exemplo, as Refs. [101], [102], e [104]. Aqui, iremos focar nossa atenção em diferentes pontos: a dependência temporal das soluções e, conseqüentemente, a influência da derivada fracionária espacial no espalhamento da solução usando a função de Green.

Nesse contexto, a solução da Eq. (5.11) pode ser escrita como

$$\Psi(x, t) = \int_0^t dt' \int_{-\infty}^{\infty} dx' \mathcal{G}(x, x'; t, t') \Phi(x), \quad (5.12)$$

com a função de Green governada pela seguinte equação:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{G}(x, x'; t, t') - \mathcal{H} \mathcal{G}(x, x'; t, t') = i\hbar \delta(x - x') \delta(t - t'), \quad (5.13)$$

em que

$$\mathcal{H} \mathcal{G}(x, x'; t, t') = \mathcal{D}_\mu (-\hbar^2 \nabla^2)^{\frac{\mu}{2}} \mathcal{G}(x, x'; t, t') + \mathcal{V} \delta(x) \mathcal{G}(x, x'; t, t'), \quad (5.14)$$

com  $\mathcal{G}(\pm\infty, x'; t, t') = 0$  e  $\mathcal{G}(x, x'; t, t') = 0$  para  $t < t'$  (condição de causalidade). Aplicando a transformada de Laplace<sup>4</sup> e a transformada de Fourier na Eq. (5.13), obtemos que

$$\tilde{\mathcal{G}}(p, x'; s, t') = \tilde{\mathcal{G}}_f(p, s) e^{-i\frac{p}{\hbar}x'} e^{-st'} + \mathcal{V} \tilde{\mathcal{G}}_f(p, s) \tilde{\mathcal{G}}(0, x'; s, t'), \quad (5.15)$$

em que

$$\tilde{\mathcal{G}}_f(p, s) = \frac{1}{s + i\mathcal{D}_\mu |p|^\mu / \hbar}. \quad (5.16)$$

A Eq. (5.16) corresponde à mesma função de Green analisada nas Refs. [11, 88–90], nos quais a equação de Schrödinger fracionária é considerada na ausência de potencial, ou seja,  $\mathcal{V}(x, t) = 0$ . Para uma região não limitada no espaço e para  $\mu = 2$ , recuperamos

---

<sup>3</sup>  $\mathcal{F}\{\Psi(x, t)\} = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-i\frac{p}{\hbar}x} \Psi(x, t) = \bar{\Psi}(p, t)$  e  $\mathcal{F}^{-1}\{\bar{\Psi}(p, t)\} = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{i\frac{p}{\hbar}x} \bar{\Psi}(p, t) = \Psi(x, t)$ .  
<sup>4</sup>  $\mathcal{L}\{\Psi(x, t)\} = \int_0^{\infty} dt e^{-st} \Psi(x, t) = \tilde{\Psi}(x, s)$  e  $\mathcal{L}^{-1}\{\tilde{\Psi}(x, s)\} = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty+\gamma}^{\infty+\gamma} ds e^{st} \tilde{\Psi}(x, s) = \Psi(x, t)$ .

o propagador para o caso usual. Fazendo alguns cálculos, é possível mostrar que

$$\tilde{\mathcal{G}}(0, x'; s, t') = \frac{e^{-st'}}{1 - \mathcal{V}\tilde{\mathcal{G}}_f(0, s)} \tilde{\mathcal{G}}_f(x', s) \quad \text{e que} \quad (5.17)$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_f(0, s) = \frac{1}{\mu} \left( \frac{\hbar}{i\mathcal{D}_\mu} \right)^{\frac{1}{\mu}} \frac{s^{\frac{1}{\mu}-1}}{\sin(\pi/\mu)}. \quad (5.18)$$

Por substituição das Eqs. (5.16), (5.17) e (5.18) na Eq. (5.15), e fazendo as transformadas inversas de Laplace e Fourier, obtemos que

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(x, x'; t, t') &= \mathcal{G}_f(x - x', t)\theta(t - t') \\ &+ \mathcal{V}\theta(t - t') \int_0^t d\eta \mathcal{G}_f(x, t - \eta) \times \\ &\times \left( \mathcal{G}_f(x', \eta) + \int_0^\eta d\xi \Delta_{\mathcal{V}}(\eta - \xi) \mathcal{G}_f(x', \xi) \right), \end{aligned} \quad (5.19)$$

com

$$\mathcal{G}_f(x, t) = \frac{1}{\mu|x|} \mathbb{H}_{2,2}^{1,1} \left[ \frac{|x|}{(\mathcal{D}_\mu i t / \hbar)^{\frac{1}{\mu}}} \middle| \begin{matrix} (1, \frac{1}{\mu}) & (1, \frac{1}{2}) \\ (1, 1) & (1, \frac{1}{2}) \end{matrix} \right] \quad (5.20)$$

e

$$\Delta_{\mathcal{V}}(t) = \mathcal{V}\mathcal{E}t^{-1/\mu} \mathbb{E}_{1-1/\mu, 1-1/\mu}(\mathcal{V}\mathcal{E}t^{1-1/\mu}), \quad (5.21)$$

$$\mathcal{E} = \frac{1}{\mu} \left( \frac{\hbar}{i\mathcal{D}_\mu} \right)^{\frac{1}{\mu}} \frac{1}{\sin(\pi/\mu)}, \quad (5.22)$$

em que  $\mathbb{E}_{\alpha, \beta}(x)$  é a função generalizada de Mittag-Leffler [105, 106]. A função  $\mathbb{H}$  de Fox (algumas de suas propriedades estão no Apêndice A) presente na Eq. (5.20) é assintoticamente governada por um comportamento lei de potência, em contraste com o caso usual, que é caracterizado pela relaxação do tipo exponencial. De fato, é possível mostrar que  $\mathcal{G}_f(x, t) \sim i\mathcal{D}_\mu t / (\mu\hbar|x|^{1+\mu})$  para  $\mu \neq 1$ . A função generalizada de Mittag-Leffler na Eq. (5.21) possui um comportamento lei de potência no limite assintótico para tempos grandes.

As características que incorporam a Eq. (5.19) conduz a comportamentos diferentes do caso usual. Nas Figs. (5.2a) e (5.2b), ilustramos o comportamento da Eq. (5.19) para um potencial com característica repulsiva e atrativa, isto é,  $\mathcal{V} > 0$  e  $\mathcal{V} < 0$  respectivamente. No primeiro caso, a partícula experimenta uma barreira ultrafina e, no segundo, há um estado ligado. Note que a influência do potencial aumenta para valores de  $\mu \rightarrow 1$  e decresce para  $\mu$  próximo do caso usual ( $\mu \rightarrow 2$ ). Esse aspecto está conectado ao comportamento assintótico manifestado pela função de Green para  $x \rightarrow \infty$ , que possui cauda longa para  $\mu \rightarrow 1$  e cauda curta, similar ao caso usual, para  $\mu \rightarrow 2$ . Em adição, a Eq. (5.19)

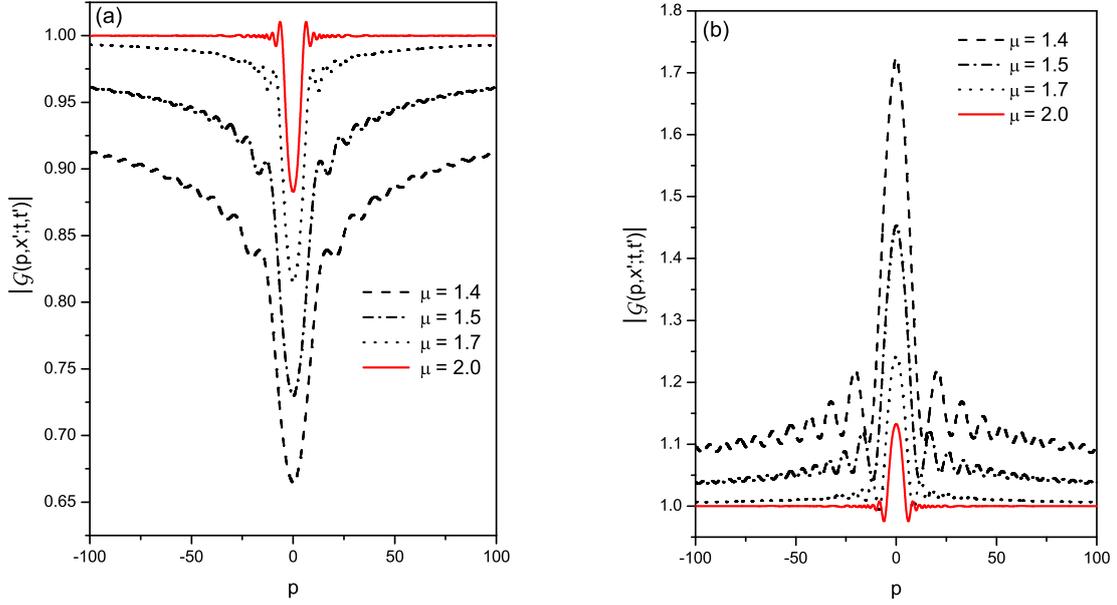


Figura 5.2: As figuras (a) e (b) ilustram o comportamento da Eq. (5.19) para os casos repulsivo ( $\mathcal{V} = 1$ ) e atrativo ( $\mathcal{V} = -1$ ) respectivamente, considerando diferentes valores de  $\mu$  e sendo  $x' = 0$ ,  $t = 0.1$ ,  $\hbar = 1$ , e  $\mathcal{D}_\mu = 1$  por simplicidade.

estende os resultados apresentados no caso padrão nas Refs. [107] e [108] para a equação Schrödinger fracionária.

## 5.4 Equação de Schrödinger fracionária para o potencial com duas delta

Agora vamos estender a discussão anterior considerando a equação de Schrödinger fracionária na presença do potencial

$$V(x) = \mathcal{V}_1\delta(x - l_1) + \mathcal{V}_2\delta(x - l_2). \quad (5.23)$$

Esse potencial é caracterizado por duas distribuições do tipo delta: uma na posição  $x = l_1$  e outra na posição  $x = l_2$ . Essa estrutura de barreira dupla é eletronicamente análoga ao interferômetro de Fabry-Perot. Em adição, a estrutura de barreira dupla pode ser usada para aproximar várias configurações, tal como a relacionada ao tunelamento ressonante em semicondutores com estruturas quântica e em transporte quântico, onde a separação espacial das barreiras é grande se comparada com a espessura de uma só [107].

Por substituição do potencial da Eq. (5.23) na Eq. (5.10), obtemos

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \mathcal{D}_\mu (-\hbar^2 \nabla^2)^{\frac{\mu}{2}} \Psi(x, t) + \mathcal{V}_1 \delta(x - l_1) \Psi(x, t) + \mathcal{V}_2 \delta(x - l_2) \Psi(x, t). \quad (5.24)$$

De modo a resolver essa equação, usaremos o mesmo procedimento da seção anterior. Por meio das funções de Green e das transformadas de Laplace-Fourier, temos que

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{G}}(p, x'; s, t') &= \tilde{\mathcal{G}}_f(p, s) e^{-i\frac{p}{\hbar} x'} e^{-st'} + \mathcal{V}_1 e^{-i\frac{p}{\hbar} l_1} \tilde{\mathcal{G}}(l_1, x'; s, t') \tilde{\mathcal{G}}_f(p, s) \\ &+ \mathcal{V}_2 e^{-i\frac{p}{\hbar} l_2} \tilde{\mathcal{G}}(l_2, x'; s, t') \tilde{\mathcal{G}}_f(p, s). \end{aligned} \quad (5.25)$$

Aplicando a inversa das transformadas de Fourier e Laplace na Eq. (5.25), é possível mostrar que

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(x, x'; t, t') &= \mathcal{G}_f(x - x', t) \theta(t - t') + \mathcal{V}_1 \int_0^t d\bar{t} \mathcal{G}_f(x - l_1, t - \bar{t}) \mathcal{G}(l_1, x'; \bar{t}, t') \\ &+ \mathcal{V}_2 \int_0^t d\bar{t} \mathcal{G}_f(x - l_2, t - \bar{t}) \mathcal{G}(l_2, x'; \bar{t}, t'). \end{aligned} \quad (5.26)$$

O primeiro termo no lado direito da Eq. (5.26) corresponde à função de Green do caso livre e os outros termos demonstram os efeitos do potencial no primeiro termo. Para determinar formalmente a função de Green anterior, temos que encontrar as funções  $\mathcal{G}(l_1, x'; t, t')$  e  $\mathcal{G}(l_2, x'; t, t')$ . Fazendo uso da transformada de Laplace, é possível mostrar que estas podem ser escritas como

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(l_1, x'; t, t') &= \theta(t - t') \int_0^t d\vartheta \Upsilon(t - \xi) \left\{ \mathcal{G}_f(l_1 - x', \xi) \right. \\ &\left. + \mathcal{V}_2 \int_0^\xi d\eta \left[ \mathcal{G}_f(l_1 - l_2, \xi - \eta) \mathcal{G}_f(l_2 - x', \eta) - \mathcal{G}_f(0, \vartheta - \eta) \mathcal{G}_f(l_1 - x', \eta) \right] \right\} \end{aligned} \quad (5.27)$$

e

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(l_2, x'; t, t') &= \theta(t - t') \int_0^t d\xi \Upsilon(t - \xi) \left\{ \mathcal{G}_f(l_1 - x', \xi) \right. \\ &\left. + \mathcal{V}_1 \int_0^\xi d\eta \left[ \mathcal{G}_f(l_1 - l_2, \xi - \eta) \mathcal{G}_f(l_1 - x', \eta) - \mathcal{G}_f(0, \vartheta - \eta) \mathcal{G}_f(l_2 - x', \eta) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (5.28)$$

em que

$$\Upsilon(t) = \Xi(t) + \sum_{n=1}^{\infty} (\mathcal{V}_1 \mathcal{V}_2)^n \int_0^t dt_n \Theta(t - t_n) \cdots \int_0^{t_2} dt_1 \Theta(t_2 - t_1) \int_0^{t_1} d\xi \Theta(t_1 - \xi) \Xi(\xi), \quad (5.29)$$

com

$$\Theta(t) = \int_0^t d\zeta \Lambda_{\mathcal{V}_1}(t - \zeta) \Lambda_{\mathcal{V}_2}(\zeta), \quad (5.30)$$

$$\Lambda_{\mathcal{V}_1, \mathcal{V}_2} = \mathcal{G}_f(|l_1 - l_2|, t) + \int_0^t d\xi \Delta_{\mathcal{V}_1, \mathcal{V}_2}(\xi) \mathcal{G}_f(|l_1 - l_2|, t - \xi) \quad (5.31)$$

e

$$\Xi(t) = \delta(t) + \frac{\mathcal{V}_2^2 t^{-\frac{1}{\mu}}}{\mathcal{V}_2 - \mathcal{V}_1} \mathcal{E}E_{1-\frac{1}{\mu}, 1-\frac{1}{\mu}} \left( \mathcal{V}_2 \mathcal{E} t^{1-\frac{1}{\mu}} \right) - \frac{\mathcal{V}_1^2 t^{-\frac{1}{\mu}}}{\mathcal{V}_2 - \mathcal{V}_1} \mathcal{E}E_{1-\frac{1}{\mu}, 1-\frac{1}{\mu}} \left( \mathcal{V}_1 \mathcal{E} t^{1-\frac{1}{\mu}} \right). \quad (5.32)$$

O resultado obtido acima estende, para o caso fracionário, o resultado obtido em [109], que, conforme discutido na seção 4.3, é caracterizado pelo processo de relaxação diferente do caso usual.

Vamos discutir as mudanças geradas por essas soluções quando a Eq. (5.10) possui uma derivada fracionária temporal. Por simplicidade, focaremos a análise daquela equação, sem perda de generalidade.

## 5.5 Equação de Schrödinger com operador fracionário temporal

A solução para essa equação, quando usamos a derivada temporal usual, é recuperada pela derivada fracionária temporal se utilizamos a do tipo Caputo, definida posteriormente. Assim,

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\Gamma(1 - \gamma)} \int_0^t \frac{d\bar{t}}{(t - \bar{t})^\gamma} \int_{-\infty}^{\infty} dx' \mathcal{G}_\gamma(x, x'; \bar{t}, t') \Phi(x'). \quad (5.33)$$

A função de Green é obtida resolvendo a seguinte equação

$$i\hbar \frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \mathcal{G}_\gamma(x, x'; t, t') - \mathcal{H} \mathcal{G}_\gamma(x, x'; t, t') = i\hbar \delta(x - x') \delta(t - t'), \quad (5.34)$$

com  $0 < \gamma < 1$ , sujeito às condições de contorno  $\mathcal{G}(\pm\infty, x'; t, t') = 0$ , em que a derivada temporal fracionária é definida como

$$\frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \mathcal{G}_\gamma(x, x'; t, t') = \frac{1}{\Gamma(n - \gamma)} \int_0^t \frac{d\bar{t}}{(t - \bar{t})^{\gamma+n-1}} \mathcal{G}_\gamma^{(n)}(x, x'; \bar{t}, t'), \quad (5.35)$$

com  $n - 1 < \gamma < n$  e  $\mathcal{G}_\gamma^{(n)}(x, x'; t, t') = \partial_t^n \mathcal{G}_\gamma(x, x'; t, t')$ . Empregando o procedimento realizado nos cálculos anteriores, é possível mostrar que a solução da equação Eq. (5.34),

no espaço de Fourier é dada por

$$\mathcal{G}_\gamma(p, x'; t, t') = \bar{\mathcal{G}}_{f,\gamma}(p, t) e^{-i\frac{p}{\hbar}x'} \theta(t - t') + \mathcal{V} \int_0^t \bar{\mathcal{G}}_{f,\gamma}(p, \bar{t}) \tilde{\mathcal{G}}_\gamma(0, x'; t - \bar{t}, t') d\bar{t}, \quad (5.36)$$

com  $\bar{\mathcal{G}}_{f,\gamma}(p, t) = t^{\gamma-1} \mathbf{E}_{\gamma,\gamma}(-i\mathcal{D}_\mu |p|^\mu t^\gamma / \hbar)$ ,

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_\gamma(0, x'; t, t') &= \mathcal{G}_{f,\gamma}(x', t) \theta(t - t') + \theta(t - t') \int_0^t \mathcal{G}_{f,\gamma}(x', \eta) \Delta_{\mathcal{V},\gamma}(t - \eta) d\eta \quad \text{an(5.37)} \\ \Delta_{\mathcal{V},\gamma}(t) &= \mathcal{V} \mathcal{E} t^{(1-1/\mu)\gamma-1} \mathbf{E}_{\gamma-\gamma/\mu, \gamma-\gamma/\mu}(\mathcal{V} \mathcal{E} t^{\gamma-\gamma/\mu}). \end{aligned}$$

Nesse ponto de vista, é interessante observar a presença da função generalizada de Mittag-Leffler  $E_{\alpha,\beta}$  na solução. Essa função possui o comportamento lei de potência para  $\bar{\mathcal{G}}_{f,\gamma}(p, t)$  no limite assintótico de  $|p| \rightarrow \infty$ . Em contraste, o caso anterior é governado por uma exponencial (*stretched*) alongada no espaço de Fourier, que muda o comportamento das soluções. Após fazer as transformadas inversas de Fourier na Eq. (5.36), obtemos

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_\gamma(x, x'; t, t') &= \mathcal{G}_{f,\gamma}(x - x', t) \theta(t - t') + \mathcal{V} \int_0^t \mathcal{G}_{f,\gamma}(x, \bar{t}) \tilde{\mathcal{G}}_\gamma(0, x'; t - \bar{t}, t') d\bar{t}, \\ \mathcal{G}_{f,\gamma}(x, t) &= \frac{1}{\mu|x|} \mathbf{H}_{3,3}^{2,1} \left[ \frac{|x|}{(\mathcal{D}_\mu i t / \hbar)^{\frac{1}{\mu}}} \left| \begin{matrix} (1,1) & (\gamma, \frac{\gamma}{\mu}) & (1, \frac{1}{2}) \\ (1, \frac{1}{\mu}) & (1, \frac{1}{\mu}) & (1, \frac{1}{2}) \end{matrix} \right. \right]. \end{aligned} \quad (5.38)$$

A Fig. (4.3a) ilustra a solução dada pela Eq. (5.33) para  $\gamma = 1/2$  e para diferentes valores de  $\mu$ ; e a Fig. (5.3b) ilustra o comportamento da função de Green dada pela Eq. (5.36) para diferentes tempos, com  $\gamma = 1/2$  e  $\mu = 1, 5$ . Note que, diferentemente dos resultados obtidos anteriormente para  $\gamma = 1$  (veja Fig. (5.2) em que  $|\mathcal{G}(p, x'; t, t')| \rightarrow 1$  para  $|p| \rightarrow \infty$ ), o caso  $\gamma \neq 1$  leva a um diferente regime assintótico para a função de Green. Esse aspecto está relacionado à presença da função generalizada de Mittag-Leffler na solução do caso partícula livre e introduz um comportamento assintótico não exponencial para a solução.

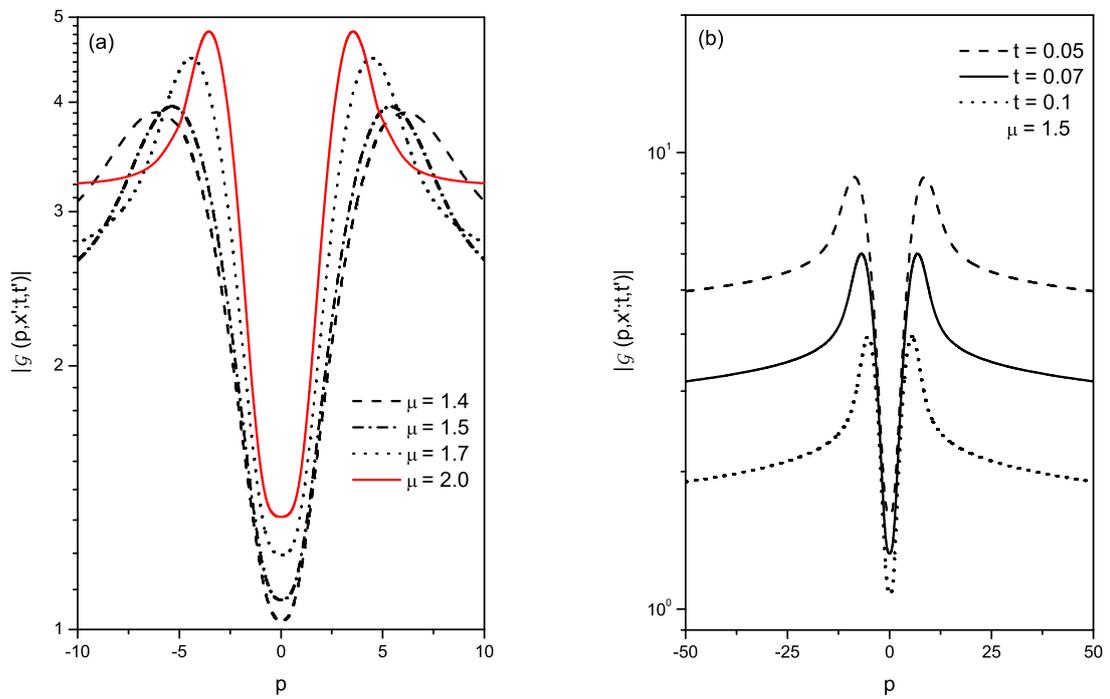


Figura 5.3: As figuras (a) e (b) ilustram o comportamento da Eq.(5.36) para diferentes valores de  $\mu$  e  $t$  considerando, por simplicidade,  $\mathcal{V} = 1$ ,  $x' = 0$ ,  $\hbar = 1$  e  $\mathcal{D}_\mu = 1$ .

## 5.6 Síntese do capítulo

Nas seções anteriores, nós investigamos as soluções da equação de Schrödinger fracionária na presença de potenciais do tipo delta. Primeiro, consideramos a equação de Schrödinger na presença de um único potencial delta e obtivemos a solução dependente do tempo para uma condição inicial arbitrária em termos da função de Green relacionada. Nas Figs. (5.2a) e (5.2b), ilustramos, para esse caso, o comportamento da função de Green considerando diferentes valores de  $\mu$  e mostramos a influência do efeito causado pelo potencial na evolução temporal do sistema. Este último ponto está relacionado ao comportamento de cauda longa da solução imposta pela derivada fracionária espacial que depende do índice  $\mu$ . No segundo caso, obtivemos a solução em termos da função de Green, similarmente ao primeiro caso. Após as análises, investigamos o efeito nas soluções quando substituímos a derivada fracionária espacial pela temporal. Em particular, discutimos alguns aspectos das diferenças da função de Green  $|\mathcal{G}_\gamma(p, x'; t, t')|$ , no limite  $|p| \rightarrow \infty$  da solução obtida em  $\gamma = 1$ , como foi ilustrado na Fig. (5.2).

# Conclusões

Nesse trabalho, no primeiro capítulo, apresentamos uma breve história sobre o desenvolvimento da difusão, que é importante para compreender os conceitos e a importância dos desenvolvimentos e que enriquece, por sua vez, os formalismos apresentados no segundo capítulo. Neste, apresentamos como e por que cada equação que descreve a difusão pode ser generalizada, tornando as teorias que permeiam a difusão anômala menos fenomenológicas. Tais desenvolvimentos foram feitos para as equações de Langevin, a mestra, e para o caminhante aleatório, o que serviu de fundamento para as propostas apresentadas nos capítulos posteriores.

Resumidamente, portanto, na primeira parte desse trabalho, vimos as propriedades, as definições, e os conceitos sobre difusão, suas variedades e seus aspectos formais e, principalmente, suas generalizações, que incluem anomalias nos processos difusivos. Com toda essa informação, na outra parte, fizemos aplicações em sistemas físicos, com o intuito de generalizar as distribuições de probabilidades para eles e incluir anomalias devido à complexidade dos casos mais tangíveis à realidade.

O objetivo dos capítulos subsequentes ao segundo foi generalizar algumas equações diferenciais, tais como a de difusão para o modelo de armadilhas (*penne*) e para um modelo não-linear. Generalizamos, também, a equação de Schrödinger, considerando um comportamento não-markoviano. Para incorporar esse tipo de comportamento de não localidade para a variável espacial e para a temporal, utilizamos equações não-lineares e fracionárias, que estão relacionadas à mecânica estatística generalizada (*Tsallis*) e ao cálculo fracionário, respectivamente.

Na primeira das aplicações, referente ao capítulo três, investigamos os efeitos que a generalização via derivadas fracionárias no tempo possui no modelo do pente (armadilhas). Além de tal generalização, assumimos a presença de uma parede absorvedora, e calculamos as distribuições de probabilidade para a primeira passagem no tempo e a probabilidade de sobrevivência. Tais distribuições forneceram informações importantes a respeito do sistema em questão. Analisamos os limites assintóticos de tais distribuições e constatamos que existem índices fracionários para os quais a probabilidade de sobrevivência é constante, ou seja, parte das partículas não são absorvidas pela parede, devido ao comportamento não-markoviano presente no sistema. Mostramos que o sistema possui regimes anômalos

devido ao fato de que a variância nos eixos  $x$  e  $y$  tem uma evolução não-linear no tempo, que aparece em função dos índices fracionários  $\gamma_x$  e  $\gamma_y$ . Ao generaliza-lo, notamos alguns comportamentos interessantes que surgem devido ao efeito memória, e que se tornaram claros após obtermos comportamentos assintóticos generalizados, como  $\mathcal{S}(t) \sim 1/t^{\frac{\eta}{2}}$  e  $\sigma_x^2(t) \sim t^{\frac{\eta}{2}}$ , em que  $\eta = \gamma_x - \gamma_y/2$ .

No quarto capítulo, encontramos algumas soluções para as equações de difusão não-lineares em um espaço  $d$ -dimensional. Primeiramente, obtivemos as soluções estacionárias e, inspirado nelas, encontramos as soluções não-estacionárias, e em um dos casos, o deslocamento quadrático médio é dado por  $\langle (r - \langle r \rangle)^2 \rangle \sim t^\zeta$ , em que  $\zeta$  depende de parâmetros que descrevem o comportamento não linear do sistema. A equação tratada possui diversas aplicações, inclusive algumas, relacionadas a sistemas que envolvem dinâmica de populações, onde notamos que, o parâmetro  $q$  esta intimamente ligado a taxa de evolução da população. Relacionamos o parâmetro  $d$  associado à dimensão com o parâmetro  $q$ , que está conectado à mecânica estatística generalizada, como mostrado no terceiro capítulo.

O último capítulo é referente ao problema da equação de Schrödinger generalizada com respeito a derivadas de ordem não inteira. Mostramos a ideia de como obter tal equação, que está fundamentada nos trabalhos feitos por Nick Laskin. Nesse capítulo, tratamos da equação de Schrödinger fracionária na presença dos potenciais (i)  $V(x) = \mathcal{V}\delta(x)$  e (ii)  $V(x) = \mathcal{V}_1\delta(x - l_1) + \mathcal{V}_2\delta(x - l_2)$  e analisamos alguns limites assintóticos bem como as mudanças no comportamento dos propagadores para escolhas diferentes de índices fracionários.

# Apêndice A

## Função de Mittag-Leffler

A função de Mittag-Leffler foi introduzida por G. M. Mittag-Leffler e estudada por outros [7]. Ela é escrita como

$$E_{\alpha}(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\Gamma(\alpha k + 1)}, \quad (5.39)$$

inicialmente representada para um parâmetro  $\alpha$ , mas posteriormente generalizada para três parâmetros. A generalização para dois parâmetros da função de Mittag-Leffler foi proposta por Agarwal, sendo escritas posteriormente diversas relações. A função de Mittag-Leffler para dois parâmetros apresenta a seguinte forma:

$$E_{\alpha,\beta}(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\Gamma(\alpha k + \beta)}, \quad (\alpha > 0, \beta > 0). \quad (5.40)$$

A partir dela, podemos escrever algumas propriedades:

$$E_{1,1}(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{k!} = e^z; \quad (5.41)$$

$$E_{1,m}(z) = \frac{1}{z^{m-1}} \left\{ e^z - \sum_{k=0}^{m-2} \frac{z^k}{k!} \right\}, \quad (m = 1, 2, \dots); \quad (5.42)$$

$$E_{2,1}(z^2) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^{2k}}{(2k!)} = \cosh(z); \quad (5.43)$$

$$E_{2,2}(z^2) = \frac{1}{z} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^{2k+1}}{(2k+1)!} = \frac{\sinh(z)}{z}; \quad (5.44)$$

$$E_{1/2,1}(z) = e^{z^2} \operatorname{erfc}(-z); \quad (5.45)$$

$$E_{\alpha,\beta}(z) = zE_{\alpha,\alpha+\beta}(z) + \frac{1}{\Gamma(\beta)}; \quad (5.46)$$

$$E_{\alpha,1}(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\Gamma(\alpha+1)} \equiv E_{\alpha}(z). \quad (5.47)$$

Podemos, ainda, escrever uma versão mais geral para a função de Mittag-Leffler contendo três índices:

$$E_{\alpha,\beta}^{\gamma}(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\gamma)_k z^k}{\Gamma(\alpha k + \beta) k!}, \quad (\alpha, \beta, \gamma > 0). \quad (5.48)$$

Essa representação também pode ser escrita em termos das integrais de Mellin-Branes da seguinte forma [110]:

$$E_{\alpha,\beta}^{\gamma}(z) = \frac{1}{2\pi i \Gamma(\gamma)} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} \frac{\Gamma(s)\Gamma(\gamma-s)}{\Gamma(\beta-\alpha s)} (-z)^{-s} ds, \quad |\arg z| < \pi, \quad (5.49)$$

sendo  $\alpha$  um número real positivo,  $\beta$  e  $\gamma$  complexos, em que a parte real de  $\beta$  deve ser maior que zero, sendo, ainda,  $\gamma \neq 0, -1, -2, \dots$

Como foi dito, as transformadas integrais da função de Mittag-Leffler são de grande importância. Na sequência, consideramos a função de Mittag-Leffler de dois parâmetros. Seja a transformada de Laplace,

$$F(s) = \mathcal{L}\{f(t); s\} = \int_0^{\infty} e^{-st} f(t) dt, \quad (5.50)$$

$$f(t) = \mathcal{L}^{-1}\{F(s); t\} = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} e^{st} F(s) ds, \quad (5.51)$$

na função de Mittag-Leffler de dois parâmetros, temos que

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}\{t^{\beta-1}E_{\alpha,\beta}(ax^\alpha); s\} &= \int_0^\infty e^{-sx}x^{\beta-1}E_{\alpha,\beta}(ax^\alpha)dx \\
&= \int_0^\infty e^{-sx}x^{\beta-1}\sum_{k=0}^\infty \frac{a^kx^{\alpha k}}{\Gamma(ak+\beta)}dx \\
&= \frac{s^{\alpha-\beta}}{s^\alpha-a},
\end{aligned} \tag{5.52}$$

ou seja se  $\beta = 1$ , podemos escrever a transformada de Laplace da função de Mittag-Leffler

$$\mathcal{L}\{E_\alpha(ax^\alpha); s\} = \frac{s^{\alpha-1}}{s^\alpha-a}. \tag{5.53}$$

Torna-se interessante, também, escrever a inversão que nos fornece a função de Mittag-Leffler:

$$\mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{s^{\alpha-1}}{s^\alpha-a}; x\right\} = E_\alpha(ax^\alpha). \tag{5.54}$$

## Função H de Fox

Mencionada anteriormente a motivação que torna importante o estudo dessa função. Denominada de função H por Fox, em 1961 [7], ela é apresentada como uma generalização de muitas funções especiais: a  $E$  de MacRobert, a hipergeométrica de Wrigth, a função  $G$  de Meijer e, também, a de Mittag-Leffler (seção anterior) entre outras.

$$\begin{aligned}
\mathbb{H}_{p,q}^{m,n} \left[ x \left| \begin{matrix} (a_p, A_p) \\ (b_q, B_q) \end{matrix} \right. \right] &= \mathbb{H}_{p,q}^{m,n} \left[ x \left| \begin{matrix} (a_1, A_1), \dots, (a_p, A_p) \\ (b_1, B_1), \dots, (b_q, B_q) \end{matrix} \right. \right] = \frac{1}{2\pi i} \int_L \chi(\xi)x^{-\xi}d\xi \\
\chi(\xi) &= \frac{\prod_{j=1}^m \Gamma(b_j - B_j\xi) \prod_{j=1}^n \Gamma(1 - a_j + A_j\xi)}{\prod_{j=m+1}^q \Gamma(1 - b_j + B_j\xi) \prod_{j=n+1}^p \Gamma(a_j - A_j\xi)},
\end{aligned} \tag{5.55}$$

sendo  $m, n, p$  e  $q$  inteiros tais que  $0 \leq n \leq p$  e  $1 \leq m \leq q$ .

Algumas propriedades da função H de Fox podem ser encontradas na referência [110], as quais,

(i) para  $k > 0$ :

$$\mathbb{H}_{p,q}^{m,n} \left[ x \left| \begin{matrix} (a_p, A_p) \\ (b_q, B_q) \end{matrix} \right. \right] = k \mathbb{H}_{p,q}^{m,n} \left[ x^k \left| \begin{matrix} (a_p, kA_p) \\ (b_q, kB_q) \end{matrix} \right. \right]; \tag{5.56}$$

(ii) para multiplicação:

$$x^k \mathbf{H}_{p,q}^{m,n} \left[ x \left| \begin{matrix} (a_p, A_p) \\ (b_q, B_q) \end{matrix} \right. \right] = \mathbf{H}_{p,q}^{m,n} \left[ x \left| \begin{matrix} (a_p+k, A_p, A_p) \\ (b_q+k, B_q, B_q) \end{matrix} \right. \right]; \quad (5.57)$$

(iii) para  $n \geq 1$  e  $q > m$ :

$$\mathbf{H}_{p,q}^{m,n} \left[ x \left| \begin{matrix} (a_1, A_1)(a_2, A_2) \cdots (a_p, A_p) \\ (b_1, B_1) \cdots (b_{q-1}, B_{q-1})(a_1, A_1) \end{matrix} \right. \right] = \mathbf{H}_{p-1, q-1}^{m, n-1} \left[ x \left| \begin{matrix} (a_2, A_2) \cdots (a_p, A_p) \\ (b_1, B_1) \cdots (b_{q-1}, B_{q-1}) \end{matrix} \right. \right]; \quad (5.58)$$

(iv) para  $m \geq 2$  e  $p > n$ :

$$\mathbf{H}_{p,q}^{m,n} \left[ x \left| \begin{matrix} (a_1, A_1) \cdots (a_{p-1}, A_{p-1})(b_1, B_1) \\ (b_1, B_1)(b_2, B_2) \cdots (b_q, B_q) \end{matrix} \right. \right] = \mathbf{H}_{p-1, q-1}^{m-1, n} \left[ x \left| \begin{matrix} (a_2, A_2) \cdots (a_{p-1}, A_{p-1}) \\ (b_2, B_2) \cdots (b_q, B_q) \end{matrix} \right. \right]; \quad (5.59)$$

(v) para relações com a função de Mittag-Leffler:

$$\begin{aligned} E_\alpha(x) &= \mathbf{H}_{1,2}^{1,1} \left[ -x \left| \begin{matrix} (0,1) \\ (0,1)(0,\alpha) \end{matrix} \right. \right], \\ E_{\alpha,\beta}(x) &= \mathbf{H}_{1,2}^{1,1} \left[ -x \left| \begin{matrix} (0,1) \\ (0,1)(1-\beta,\alpha) \end{matrix} \right. \right], \\ E_{\alpha,\beta}^\gamma(x) &= \frac{1}{\Gamma(\gamma)} \mathbf{H}_{1,2}^{1,1} \left[ -x \left| \begin{matrix} (1-\gamma,1) \\ (0,1)(1-\beta,\alpha) \end{matrix} \right. \right]; \end{aligned} \quad (5.60)$$

(vi) para relação com a função exponencial:

$$\mathbf{H}_{1,0}^{0,1} \left[ x \left| \begin{matrix} \\ (0,1) \end{matrix} \right. \right] = e^{-x}; \quad (5.61)$$

(vii) para a transformada de cos-Fourier:

$$\int_0^\infty \mathbf{H}_{p,q}^{m,n} \left[ k \left| \begin{matrix} (a_p, A_p) \\ (b_q, B_q) \end{matrix} \right. \right] \cos(kx) dx = \frac{\pi}{x} \mathbf{H}_{q+1, p+2}^{n+1, m} \left[ x \left| \begin{matrix} (1-b_q, B_q), (1, 1/2) \\ (1, 1), (1-a_p, A_p), (1, 1/2) \end{matrix} \right. \right]; \quad (5.62)$$

(viii) para a transformada de Laplace:

$$\mathcal{L} \left\{ x^{\gamma-1} \mathbf{H}_{p,q}^{m,n} \left[ ax^\sigma \left| \begin{matrix} (a_p, A_p) \\ (b_q, B_q) \end{matrix} \right. \right]; s \right\} = s^{-\gamma} \mathbf{H}_{p+1, q}^{m, n+1} \left[ as^{-\sigma} \left| \begin{matrix} (1-\gamma, \sigma), (a_p, A_p) \\ (b_q, B_q) \end{matrix} \right. \right]; \quad (5.63)$$

(ix) para a transformada Inversa de Laplace:

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ s^{-\gamma} \mathbf{H}_{p,q}^{m,n} \left[ a s^\sigma \middle| \begin{matrix} (a_p, A_p) \\ (b_q, B_q) \end{matrix} \right]; t \right\} = t^{\gamma-1} \mathbf{H}_{p+1,q}^{m,n} \left[ a t^{-\sigma} \middle| \begin{matrix} (a_p, A_p), (\gamma, \sigma) \\ (b_q, B_q) \end{matrix} \right]. \quad (5.64)$$

Existem muitas outras relações e propriedades da função H de Fox, além de variadas relações com muitas outras funções conhecidas, estando a função de Fox e de Mittag-Leffler entre as mais úteis em cálculo de ordem não inteira.

# Referências Bibliográficas

- [1] H. B. Callen. *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*. Wiley, 1985.
- [2] R. C. Tolman. *The Principles of Statistical Mechanics*. Dover Books on Physics Series. Dover Publications, 1938.
- [3] D. Powell. Iphysicists net fractal butterfly. *Nature*, 501:144–145, 2013.
- [4] URL [http://en.wikipedia.org/wiki/Fractal\#mediaviewer/File:Fractal\\\_defrosting\\\_patterns\\\_on\\\_Mars.jpg](http://en.wikipedia.org/wiki/Fractal\#mediaviewer/File:Fractal\_defrosting\_patterns\_on\_Mars.jpg).
- [5] Schnobby, 2010. URL [http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Fros\\\_patterns\\\_2.jpg](http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Fros\_patterns\_2.jpg).
- [6] Angel A. *Desenvolvimento do Conceito de Difusão: De Fourier ao Modelo de Pente*. Universidades Estadual de Maringá - Departamento de Física, 2010.
- [7] I. Podlubny. *Fractional Differential Equations: An Introduction to Fractional Derivatives, Fractional Differential Equations, to Methods of Their Solution and Some of Their Applications*. Mathematics in Science and Engineering. Elsevier Science, 1998.
- [8] H. V. Ribeiro, A. A. Tateishi, L. G. A. Alves, R. S. Zola, and E. K. Lenzi. Investigating the interplay between mechanisms of anomalous diffusion via fractional brownian walks on a comb-like structure. *New Journal of Physics*, 16(9):093050, 2014.
- [9] C. Tsallis. *Introduction to Nonextensive Statistical Mechanics: Approaching a Complex World*. Springer, 2009.
- [10] P. Troncoso, O. Fierro, S. Curilef, and A. R. Plastino. A family of evolution equations with nonlinear diffusion, verhulst growth, and global regulation: Exact time-dependent solutions. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 375(2): 457–466, 2007.
- [11] N. Laskin. Fractional quantum mechanics. *Phys. Rev. E*, 62:3135–3145, 2000.

- [12] J. B. J. Fourier. *Théorie Analytique de la Chaleur*. Paris, 1822.
- [13] R. Brown. A brief account of microscopical observations made in the months of june, july, and august, 1827, on the particles contained in the pollen of plants; and on the general existence of active molecules in organic and inorganic bodies. *Philosophical Magazine*, pages 161–173, 1828.
- [14] A. Einstein. über die von der molekularkinetischen theorie der wärme geforderte bewegung von in ruhenden flüssigkeiten suspendierten teilchen. *Physik*, pages 549–560, 1905.
- [15] J. B. Perrin. Discontinuous structure of matter. *Nobel Lecture*, 1926.
- [16] M. Smoluchowski. Sur le chemin moyen parcouru par les molécules d'un gaz et sur son rapport avec la théorie de la diffusion. pages 202–203, 1906.
- [17] M. Smoluchowski. Essai d'une théorie cinétique du mouvement brownien et des milieux troubles, bull. *Acad. Scie*, pages 577–602, 1926.
- [18] M. Smoluchowski. Zur kinetischen theorie der brownischen molekularebewegung und der suspensionen. *Nobel Lecture*, pages 533–539, 1917.
- [19] M. Smoluchowski. *Phys. Z*, 21:557–585, 1916.
- [20] M. Smoluchowski. *Ann. Phys*, pages 557–585, 1915.
- [21] A. D. Fokker. Die mittlere energie rotierender elektrischer dipole im strahlungsfeld. *Ann. Physik*, pages 810–820, 1914.
- [22] M. Planck. über einen satz der statistischen dynamik und seine erweiterung in der quantentheorie, sitzungsber. *Phys.Math*, pages 324–341, 1917.
- [23] L. F. Richardson. Atmospheric diffusion shown on a distance-neighbour graph. *R. Soc. Lond*, pages 709–737, 1926.
- [24] J. Crank and G. S. Park. Diffusion in high polymers: some anomalies and their significance. *Trans. Faraday Soc.*, 47:1072–1084, 1951.
- [25] J. G. Downes. Anomalous diffusion in polymers. *J. Poly. Sci.*, 36:519, 1959.
- [26] W. E. Drummond and M. N. Rosenbluth. Anomalous diffusion arising from microinstabilities in a plasma. *Phys. Fluid*, 5:1507–1513, 1962.
- [27] S. Yoshikawa and D. J. Rose. Anomalous diffusion of a plasma across a magnetic field. *Phys. Fluids*, 5:334–340, 1962.

- [28] D. L. Styris and C. T. Tomikuza. Anomalous diffusion rate for small penetration distance in copper. *Appl. Phys.*, 34, 1963.
- [29] K. H. Nicholas. Studies of anomalous diffusion of impurities in silics, solid-state electron. pages 35–47, 1966.
- [30] J.-H. Jeon and R. Metzler. Environmental context explains lévy and brownian movement patterns of marine predators. *Nature*, 465, 2010.
- [31] Y. Sagi, M. Brook, I. Almog, and N. Davidson. Observation of anomalous diffusion and fractional self-similarity in one dimension. *Phys. Rev. Lett.*, 108(093002), 2012.
- [32] F. Bardou, J. Bouchaud, A. Aspect, and C. Cohen-Tannoudji. Lévy statistics and laser cooling. *Phys. Rev. Lett.*, 108(093002), 2002.
- [33] J.-P. Bouchaud and A. Georges. Anomalous diffusion in disordered media: Statistical mechanisms, models and physical applications. *Physics Reports*, 195:127–293, 1990.
- [34] G. Ramos-Fernández, J. L. Mateos, O. Miramontes, G. Cocho, H. Larralde, and B. Ayala-Orozco. Lévy walk patterns in the foraging movements of spider monkeys (ateles geoffroyi). *arxiv.org/0301019*, 2003.
- [35] D. S. Lemons and A. Gythiel. Paul langevin’s 1908 paper - on the theory of brownian motion (sur la theorie du mouvement brownien). *C. R. Acad. Sci. (Paris)*, 146:530–533, 1997.
- [36] L. A. Sakhnovich. *Lévy Processes, Integral Equations, Statistical Physics: Connections and Interactions*. Operator Theory: Advances and Applications. Springer Basel, 2012.
- [37] J.-D. Bao and Y.-Z. Zhuo. Investigation on anomalous diffusion for nuclear fusion reactions. *Phys. Rev. C*, 67:064606, 2003.
- [38] D. Panja. Generalized langevin equation formulation for anomalous polymer dynamics. *J. Stat. Mech.*, 2010.
- [39] I. Goychuk. Viscoelastic subdiffusion: From anomalous to normal. *Phys. Rev. E*, 80:046125, 2009.
- [40] Chaudhury, D. Chartterjee, and B. J. Cherayil. *J. Chem. Phys.*, 2008.
- [41] S. A. Kalandarov, Z. Kanokov, G. G. Adamian, N. V. Antonenko, and W. Scheid. Non-markovian dynamics of an open quantum system with nonstationary coupling. *Phys. Rev. E*, 83:041104, 2011.

- [42] H. Mori. Transport, collective motion, and brownian motion. 33(3):423–455, 1965.
- [43] L. D. Landau and E. M. Lifshitz. *Statistical Physics*, volume 5. Elsevier Science, 2013.
- [44] R. N. Mantegna and H. E. Stanley. *Introduction to Econophysics: Correlations and Complexity in Finance*. Cambridge University Press, 1999.
- [45] R. Kubo. *Statistical Mechanics: An Advanced Course with Problems and Solutions*. North-Holland Publishing Company, 1988.
- [46] B. Øksendal. *Stochastic Differential Equations: An Introduction with Applications*. Hochschultext / Universitext. Springer, 2003.
- [47] K. Sharon and A. M. Reynolds. Derivation of a fokker-planck equation for generalized langevin dynamics. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 350(2-4):183–188, 2005.
- [48] P. H Anggi and P. Talkner. On the equivalence of time-convolutionless master equations and generalized langevin equations. *Physics Letters A*, 68(1):9–11, 1978.
- [49] C. Cattaneo. *Atti Semin. Mat. Fis. Univ. Modena*, 3, 1948.
- [50] W. Horsthemke. Spatial instabilities in reaction random walks with direction-independent kinetics. *Phys. Rev. E*, 60:2651–2663, 1999.
- [51] W. Coffey, Y. P. Kalmykov, and J. T. Waldron. *The Langevin Equation: With Applications to Stochastic Problems in Physics, Chemistry, and Electrical Engineering*. World Scientific series in contemporary chemical physics. World Scientific, 2004.
- [52] G. A. Casas, F. D. Nobre, and E. M. F. Curado. Entropy production and nonlinear fokker-planck equations. *Phys. Rev. E*, 86:061136, 2012.
- [53] K. J. E. Al. *Fractional Dynamics: Recent Advances*. World Scientific.
- [54] J. F. Douglas. Aspects and applications of the random walk. *Journal of Statistical Physics*, 79(1-2):497–500, 1995.
- [55] P. H. Cootner. *The Random Character of Stock Market Prices*. M.I.T.P, 1964.
- [56] S. R. Broadbent and J. M. Hammersley. Percolation processes. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 53:629–641, 7 1957.
- [57] P. G. De Gennes. On a relation between percolation theory and the elasticity of gels. *J. Physique Lett.*, 37(1):1–2, 1976.
- [58] K. Pearson. volume 72.

- [59] H. E. Stanley. Cluster shapes at the percolation threshold: and effective cluster dimensionality and its connection with critical-point exponents. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 10(11):L211, 1977.
- [60] B. B. Mandelbrot. *Fractals: Form, Chance, and Dimension*. Mathematics Series. W. H. Freeman, 1977.
- [61] B. B. Mandelbrot. *The Fractal Geometry of Nature*. Henry Holt and Company, 1983.
- [62] Y. Gefen, A. Aharony, and S. Alexander. Anomalous diffusion on percolating clusters. *Phys. Rev. Lett.*, 50:77–80, 1983.
- [63] D. Ben-Avraham and S. Havlin. Diffusion on percolation clusters at criticality. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 15(12):L691, 1982.
- [64] R. B. Pandey and D. Stauffer. Confirmation of dynamical scaling at the percolation threshold. *Phys. Rev. Lett.*, 51:527–529, 1983.
- [65] A. Iominb V. Méndeza. Comb-like models for transport along spiny dendrites. *Chaos, Solitons e Fractals*, 53(0):46–51, 2013.
- [66] A. A. Tateishi, E. K. Lenzi, H. V. Ribeiro, L. R. Evangelista, R. S. Mendes, and L. R. da Silva. Solutions for a diffusion equation with a backbone term. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2011(02):P02022, 2011.
- [67] V. E. Arkhincheev. Unified continuum description for sub-diffusion random walks on multi-dimensional comb model. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 389(1):1–6, 2010.
- [68] V. E. Arkhincheev. Anomalous diffusion and charge relaxation on comb model: exact solutions. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 280:304–314, 2000.
- [69] A. A. Tateishi, F. S. Michels, M. A. F. dos Santos, E. K. Lenzi, and H. V. Ribeiro. First passage time for a diffusive process under a geometric constraint. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, (09):P09017, 2013.
- [70] J.-H. Jeon, N. Leijnse, L. B. Oddershede, and R. Metzler. Anomalous diffusion and power-law relaxation of the time averaged mean squared displacement in worm-like micellar solutions. *New Journal of Physics*, 15(4):045011, 2013.
- [71] J.-H Jeon and R. Metzler. Inequivalence of time and ensemble averages in ergodic systems: Exponential versus power-law relaxation in confinement. *Phys. Rev. E*, 85:021147, 2012.

- [72] J. Cartwright. Roll over, boltzmann. *Physics World*, 2014.
- [73] Mohanalin, Beenamol, P. K. Kalra, and N. Kumar. A novel automatic microcal-  
cification detection technique using tsallis entropy & a type {II} fuzzy index. *Computers & Mathematics with Applications*, 60(8):2426–2432, 2010.
- [74] V. Khachatryan et. al. Transverse-momentum and pseudorapidity distributions of  
charged hadrons in  $pp$  collisions at  $\sqrt{s} = 7$  TeV. *Phys. Rev. Lett.*, 105:022002,  
2010.
- [75] B. B. Mandelbrot. *The Flow of Homogeneous Fluids Through Porous Media*. New  
York & London, 1937.
- [76] A. Compte, D. J., and Y. Katayama. Anomalous diffusion in linear shear flows. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 30(4):1023, 1997.
- [77] G. Drazer, H. Wio, and C. Tsallis. Anomalous diffusion with absorption: Exact  
time-dependent solutions. *Phys. Rev. E*, 61:1417–1422, 2000.
- [78] C. Tsallis and D. J. Bukman. Anomalous diffusion in the presence of external forces:  
Exact time-dependent solutions and their thermostistical basis, *phys. Phys. Rev. E*,  
pages 52–57, 1996.
- [79] H. Pascal. A nonlinear model of heat conduction. *Journal of Physics A: Mathema-  
tical and General*, 25(4):939, 1992.
- [80] E. Daly and A. Porporato. Similarity solutions of nonlinear diffusion problems  
related to mathematical hydraulics and the fokker-planck equation. *Phys. Rev. E*,  
70:056303, 2004.
- [81] E. K. Lenzi, L. C. Malacarne, R. S. Mendes, and I. T. Pedron. Anomalous diffusion,  
nonlinear fractional fokker-planck equation and solutions. *Physica A: Statistical  
Mechanics and its Applications*, 319(0):245–252, 2003.
- [82] J. Gratton, F. Minotti, and S. Mahajan. Theory of creeping gravity currents of a  
non-newtonian liquid. *Phys. Rev. E*, 60:6960–6967, 1999.
- [83] A. Plastino and M. C. Rocca. Reflections on the q-fourier transform and the q-  
gaussian function. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 392(18):  
3952–3961, 2013.
- [84] W. Chung, T. Kim, and H. Kwon. On the q-analog of the laplace transform. *Russian  
Journal of Mathematical Physics*, 21(2):156–168, 2014.

- [85] J. Mazumdar. *An Introduction to Mathematical Physiology and Biology*. Cambridge University Press, 1999.
- [86] P. F. Verhulst. *Recherches mathematiques sur la loi d'accroissement de la population*. 1845.
- [87] B. B. Mandelbrot. *The Fractal Geometry of Nature*. Henry Holt and Company, 1983.
- [88] N. Laskin. Fractional quantum mechanics and lévy path integrals. *Physics Letters A*, 268:298–305, 2000.
- [89] N. Laskin. Fractals and quantum mechanics. *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, 10(4):780–790, 2000.
- [90] N. Laskin. Fractional schrödinger equation. *Phys. Rev. E*, 66:056108, 2002.
- [91] M. Naber. Time fractional schrödinger equation. *Journal of Mathematical Physics*, 45(8):3339–3352, 2004.
- [92] J. Dong. Green's function for the time-dependent scattering problem in the fractional quantum mechanics. *Journal of Mathematical Physics*, 52(4), 2011.
- [93] S. S. Bayin. Time fractional schrödinger equation: Fox's h-functions and the effective potential. *Journal of Mathematical Physics*, 54(1), 2013.
- [94] S. S. Bayin. On the consistency of the solutions of the space fractional schrödinger equation. *Journal of Mathematical Physics*, 53(4), 2012.
- [95] E. K. Lenzi, H. V. Ribeiro, H. Mukai, and R. S. Mendes. Continuous-time random walk as a guide to fractional schrödinger equation. *Journal of Mathematical Physics*, 51(9), 2010.
- [96] M. Jeng, S. L. Y. Xu, E. Hawkins, and J. M. Schwarz. On the nonlocality of the fractional schrödinger equation. *Journal of Mathematical Physics*, 51(6), 2010.
- [97] H. Ertik, D. Demirhan, H. Sirin, and F. Büyükkiliç. Time fractional development of quantum systems. *Journal of Mathematical Physics*, 51(8), 2010.
- [98] X. Jiang, H. Qi, and M. Xu. Exact solutions of fractional schrödinger-like equation with a nonlocal term. *Journal of Mathematical Physics*, 52(4), 2011.
- [99] E. K. Lenzi, B. F. de Oliveira, L. R. da Silva, and L. R. Evangelista. Solutions for a schrödinger equation with a nonlocal term. *Journal of Mathematical Physics*, 49(3), 2008.

- [100] Y. Luchko. Fractional schrödinger equation for a particle moving in a potential well. *Journal of Mathematical Physics*, 54(1), 2013.
- [101] E. C. de Oliveira and J. V. Jr. Tunneling in fractional quantum mechanics. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 44(18):185303, 2011.
- [102] I. M. Sami. Solutions of a particle with fractional  $\delta$ -potential in a fractional dimensional space. *International Journal of Theoretical Physics*, 49(9):2095–2104, 2010.
- [103] M. A. F. dos Santos R. Rossato E. K. Lenzi, H. V. Ribeiro and R. S. Mendes. *Journal of Mathematical Physics*, 54, 2013.
- [104] E. C. de Oliveira, F. S. Costa, and J. Vaz. The fractional schrödinger equation for delta potentials. *Journal of Mathematical Physics*, 51(12), 2010.
- [105] A. M. Mathai, R. K. Saxena, and H. J. Haubold. *The H-Function: Theory and Applications*. Springer, 2009.
- [106] F. Mainardi, G. Pagnini, and R. K. Saxena. Fox functions in fractional diffusion. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 178:321–331, 2005.
- [107] M. Kleber. Exact solutions for time-dependent phenomena in quantum mechanics. *Physics Reports*, 236(6):331–393, 1994.
- [108] S. Blinder. Green’s function and propagator for the one-dimensional  $\delta$ -function potential. *Phys. Rev. A*, 37:973–976, 1988.
- [109] I. Cacciari and P. Moretti. Propagator for the double delta potential. *Physics Letters A*, 359(5):396–401, 2006.
- [110] A. M. Mathai, R. K. Saxena, and H. J. Haubold. *The H-Function: Theory and Applications*. Springer, 2009.