Difusão anômala e equações fracionárias de difusão

Giane Gonçalves[1], Marcelo Kaminski Lenzi[1,2], Luciana de Souza Moraes[1], Ervin Kaminski Lenzi[3*] e Marcelo Freitas de Andrade[3]

*[1]Departamento de Engenharia Química, Universidade Estadual de Maringá, Av. Colombo, 5790, 87020-900, Maringá, Paraná, Brasil. [2]Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Paraná, Setor de Tecnologia, Jardim das Américas, Caixa Postal 19011, 81531-990, Curitiba, Paraná, Brasil. [3]Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá, Av. Colombo, 5790, 87020-900, Maringá, Paraná, Brasil. *Autor para correspondência. e-mail: eklenzi@dfi.uem.br*

RESUMO. Neste trabalho investigaremos as equações de difusão, usualmente aplicadas na descrição da difusão anômala, que empregam derivadas fracionárias tanto na variável temporal quanto na variável espacial. Em particular, para essas equações obteremos soluções exatas levando em conta uma condição inicial genérica e formularemos uma teoria de perturbação para o estudo de situações mais complexas. Também verificaremos que as derivadas fracionárias, quando aplicadas na parte temporal, possibilitam-nos o estudo de um processo de difusão anômala com o segundo momento finito, i.e., $\langle x^2 \rangle \propto t^{\alpha}$ ($0 < \alpha < 1$, e $\alpha > 1$, correspondendo aos casos, sub e superdifusivo, respectivamente). Em contraste, com a derivada fracionária aplicada na variável espacial que resulta em uma difusão anômala cujo segundo momento não é finito. Complementando o cenário acima, empregaremos o formalismo de caminhantes aleatórios para explorar as implicações obtidas por usar derivadas fracionárias na equação de difusão.

Palavras-chave: difusão anômala**,** equação de difusão, distribuições de Lévy.

ABSTRACT. Anomalous diffusion and fractional diffusion equations. In this work we investigate the anomalous diffusion equations, usually applied to describe the anomalous diffusion, which employ fractional derivatives for the time or the spatial variables. In particular, we obtain exact solutions by taking a generic initial condition into account and developing a perturbation theory to investigate complex situations. We also verify that the fractional derivatives, when applied to the time variable, lead us to a anomalous diffusion with second moment finite, i.e., $\langle x^2 \rangle \propto t^{\alpha}$ ($0 < \alpha < 1$ *and* $\alpha > 1$, corresponding to sub and superdifusive behavior, respectively). By way of contrast, the fractional derivative applied to the spatial variable results in a anomalous diffusion where the second moment is not finite. These equations generalize the usual diffusion equation in order to incorporate several situations. We also employ the continuous time random walking formalism to investigate the implications obtained by using fractional derivatives in the diffusion equation.

Key words: anomalous diffusion, diffusion equation, Lévy distributions.

Introdução

Os processos difusivos são um dos poucos processos elementares onipresentes na natureza, resultando de um movimento altamente irregular em nível microscópico e com uma regularidade macroscópica. Particularmente, questões relacionadas à difusão anômala têm-se mostrado de grande interesse e aplicação em várias áreas do conhecimento, tais como, física, engenharias, biologia e economia. Esse tipo de difusão ocorre tipicamente em situações como crescimento de superfícies (Spohn, 1993), transporte de um fluido através de um meio poroso, análise do histograma obtido a partir das batidas do coração de um indivíduo saudável (Peng *et al.,* 1993) micelas dissolvidas em água salgada (Ott *et al.,* 1990), Bouchaud *et al.,* 1991), no transporte caótico de um fluido em um fluxo laminar de uma mistura de glicerol e água em um cilindro rodando rapidamente (Solomon, 1993), na difusão através de uma superfície líquida e nas flutuações de sistemas financeiros (Plerou, 2000). Na maioria das situações em que está presente a difusão anômala, como aquelas mencionadas acima, podemos ter o segundo momento finito ou não (tipo Lévy) (Prato e Tsallis, 2000; Shlesinger *et al.,* 1994). A difusão

anômala com o segundo momento finito geralmente tem como característica $\langle x^2 \rangle \propto t^{\alpha}$ (e $\alpha > 1$ correspondendo a sub- e superdifusão, respectivamente). Neste contexto, uma equação representativa na descrição destes fenômenos é a equação fracionária (Klafter *et al.*, 1996; Hilfer, 2000; Metzler e Klafter, 2000;) do tipo

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x,t) = {}_0\mathcal{D}_t^{1-\gamma}\left(\mathcal{K}_\gamma \frac{\partial^2}{\partial x^2}\rho(x,t)\right) \qquad (1)$$

onde ${}_0\mathcal{D}_t^{1-\gamma}(...)$ é a derivada de Riemann-Lioville e $\mathcal{K}_\gamma$ representa o coeficiente de difusão. Essa equação têm sido aplicada em várias situações de interesse físico, tais como, difusão em fractais (Roman. 2004), relaxação ao equilíbrio em sistemas com memória temporal longa (por exemplo, cadeias de polímeros e membranas) (Schriessel e Blumen, 1995), na descrição de transporte anômalo em sistemas desordenados (Metzler *et al.,* 1999), modelagem de processos dinâmicos não markovianos em proteínas (Plotkin e Wolynes, 1998) e em turbulência. Por sua vez, a difusão anômala do tipo Lévy, em contraste com a difusão anômala do tipo correlacionada, não tem o segundo momento finito, sendo caracterizada pelas distribuições de Lévy (Prato e Tsallis, 2000; Shlesinger *et al.,* 1994). Dentro deste contexto, temos a equação fracionária de difusão

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x,t) = \mathcal{K}_\mu \frac{\partial^\mu}{\partial |x|^\mu}\rho(x,t) \qquad (2)$$

cuja solução é a distribuição de Lévy,

$$L_\mu(x,t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{ikx - \mathcal{K}_\mu |k|^\mu t} \qquad (3)$$

que satisfaz o teorema de Lévy-Gnedenko, i.e., uma generalização do teorema central do limite.

A cada uma das situações, caracterizadas por suas equações de difusão, podemos relacionar com um contexto termo-estatístico seja ele caracterizado pela mecânica estatística usual (Risken, 1994) ou pela mecânica estatística não extensiva (Tsallis, 1988). De fato, os processos difusivos que ocorrem na natureza que são descritos pela equação de difusão usual podem ser associados a um contexto termo-estatístico caracterizado pelas distribuições de Boltzmann-Gibbs. De maneira análoga podemos relacionar, por exemplo, processos difusivos anômalos cuja dinâmica é regida pela equação (1) têm suas soluções associadas a uma distribuição do tipo Boltzmann-Gibbs (Sokolov, 2001a, b) enquanto a equação (2) tem sua solução relacionada com a distribuição que emerge da termo-estatística não extensiva. Investigações dessa natureza são importantes pois podem nos dizer mais sobre as interações que estão presentes no sistema e dar suporte a procedimentos aproximados de cálculo. Neste ponto, cabe ressaltar que o emprego de equações diferenciais na descrição da difusão anômala nos proporciona um tratamento mais simples quando temos campos externos aplicados ao sistema, mantendo de maneira geral todas as propriedades presentes nos formalismos alternativos (e.g. caminhadas aleatórias). Devido a este fato vamos empregar em nosso trabalho essencialmente equações de difusão e quando se fizer necessário abordaremos a conexão entre as equações de difusão e outros formalismos.

De um ponto de vista formal, como deve estar claro a partir da discussão prévia, a difusão anômala pode ser manifestada através de diferentes tipos de equações diferenciais. Além disso, podemos associar a elas um contexto termodinâmico, seja usando a entropia usual de Boltzmann-Gibbs (Groot e Mazur, 1984) ou a entropia de Tsallis (Tsallis, 1988). De fato, tais tipos de equações permitem descrever uma grande variedade de situações físicas. Neste sentido, pretendemos dedicar esse trabalho ao estudo das equações que empregam derivadas fracionárias na variável temporal e/ou na variável espacial. Basicamente, vamos concentrar nossa atenção para uma equação do tipo Fokker-Planck fracionária:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\rho(x,t) = {}_0\mathcal{D}_t^{1-\gamma}&\left(\mathcal{K}_{\gamma,\mu}\frac{\partial^\mu}{\partial |x|^\mu}\rho(x,t)\right)\\ &-{}_0\mathcal{D}_t^{1-\gamma}\left(\frac{\partial}{\partial x}\big(F(x,t)\rho(x,t)\big)\right)\end{aligned} \qquad (4)$$

onde $\mathcal{K}_{\gamma,\mu}$ é o coeficiente de difusão, $F(x,t)$ é a força externa e ${}_0\mathcal{D}_t^{1-\gamma}(...)$ é o operador fracionário que consideraremos na representação de Riemann-Lioville (Oldham e Spanier, 1974), Metzler e Klafter (2000), Hilfer (2000)) e para $\partial^\mu / \partial |x|^\mu$ empregaremos a representação de Riez (Metzler e Klafter, 2000; Hilfer, 2000). Observe que a equação acima recupera a equação de Fokker-Planck usual para $\mu = 2$ e $\gamma = 1$. Em nosso trabalho, vamos abordar as derivadas fracionárias na variável temporal e espacial. Assim, o artigo encontra-se dividido em quatro seções. A primeira seção, que foi apresentada acima, é dedicada a introdução do trabalho. Na segunda seção, faremos uma análise da equação de difusão que emprega derivada fracionária no tempo, i.e., $\mu = 2$

e $0 < \gamma \leq 1$. Na terceira seção, faremos um estudo das equações de difusão que possuem derivadas fracionárias no espaço, i.e., $\gamma = 1$ e $0 < \mu \leq 2$. Em ambos os casos, obteremos soluções na ausência de força externa e considerando uma condição inicial genérica e faremos um desenvolvimento que possibilita um tratamento perturbativo quando consideramos uma força externa genérica *F(x,t)*. Por fim, a quarta seção é dedicada às discussões e conclusões.

Equação de difusão: derivadas fracionárias no tempo

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

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x,t) = {}_0\mathcal{D}_t^{1-\gamma}\left(\mathcal{K}_{\gamma,2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\rho(x,t)\right) - {}_0\mathcal{D}_t^{1-\gamma}\left(\frac{\partial}{\partial x}\left(F(x,t)\rho(x,t)\right)\right) \tag{5}$$

onde ${}_0\mathcal{D}_t^{1-\gamma}(\ldots)$ corresponde à derivada fracionária de Riemann-Louville aplicada à variável temporal. Esse operador é definido como:

$${}_0\mathcal{D}_t^{1-\gamma}\left(\rho(x,t)\right) = \frac{1}{\Gamma(n-\gamma)}\frac{d^n}{dt^n}\int_0^t dt'\frac{\rho(x,t')}{(t-t')^{\gamma+1-n}} \tag{6}$$

com $n-1 < \gamma \leq n$. $F(x,t)$ representa uma força externa aplicada ao sistema e $\mathcal{K}_{\gamma,2}$ é o coeficiente de difusão. Note que essa equação generaliza a equação de difusão usual pelo emprego de uma derivada fracionária na variável temporal, ao invés de uma derivada usual. No limite de $\gamma \to 1$ recuperamos a equação de difusão usual. Investigaremos as soluções da equação (5), que podem ser obtidas através de vários métodos. Relembrando que o procedimento a ser adotado está intimamente relacionado com as condições de contorno impostas ao sistema e a simetria que ele apresenta. O procedimento mais comum é o método de separação de variáveis seguido dos métodos que empregam transformadas integrais. Assim, dependendo da situação que pretendemos analisar, empregaremos o método que melhor aproveita as condições impostas pelo sistema. Começaremos então por considerar a equação fracionária de Fokker-Planck na ausência de força externa, $F(x,t) = 0$ e submetida a uma condição inicial do tipo $\rho(x,0) = \tilde{\rho}(x)$. A equação (5) então adquire o seguinte aspecto:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x,t) = {}_0\mathcal{D}_t^{1-\gamma}\left(\mathcal{K}_{\gamma,2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\rho(x,t)\right) \tag{7}$$

Como condição de contorno, teremos $\rho(x = \pm\infty, t) = 0$. Ao considerarmos tal condição de contorno o uso das transformadas de Laplace e Fourier simplificaram o nosso problema. Portanto, tomando a transformada de Laplace e Fourier da equação (7) obtemos

$$\rho(k,s) = \frac{\rho(k,0)}{s + \mathcal{K}_{\gamma,2}s^{1-\gamma}k^2} \tag{8}$$

para $0 < \gamma \leq 1$. Para obtermos a equação (8) usamos

$$\mathcal{L}\left\{{}_0\mathcal{D}_t^{1-\gamma}\left(\rho(x,t)\right)\right\} = s^\gamma\rho(x,s) + \sum_{i=0}^{n-1}s^i\,{}_0\mathcal{D}_t^{1-\gamma-i}\left(\rho(x,t)\right)\Big|_{t=0} \tag{9}$$

válida para $n-1 < \gamma \leq n$, onde

$$\mathcal{L}\left\{\rho(x,t)\right\} = \int_0^\infty dt\, e^{-st}\rho(x,t) = \rho(x,s), \quad \left(\rho(x,t) = \frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty i+\sigma}^{\infty i+\sigma} ds\, e^{st}\rho(x,s)\right) \tag{10}$$

é a transformada de Laplace. Agora o nosso problema reside em inverter as transformadas. Começaremos então invertendo a transformada de Fourier. Assim, empregando o teorema de convolução ao invertermos a transformada de Fourier, obtemos

$$\rho(x,s) = \int_{-\infty}^{\infty} dx'\mathcal{G}(x-x',s)\tilde{\rho}(x') \tag{11}$$

Com

$$\mathcal{G}(x,s) = \frac{1}{2s}\left(\frac{s^\gamma}{\mathcal{K}_{\gamma,2}}\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left(-\left(\frac{s^\gamma}{\mathcal{K}_{\gamma,2}}\right)^{\frac{1}{2}}|x|\right) \tag{12}$$

Observe que escrevemos a nossa solução, a equação (11), o mais geral possível de forma a contemplar qualquer condição inicial. Em particular, a equação (12) é a nossa função de Green relativa à condição inicial. Para inverter a transformada de Laplace usaremos o seguinte procedimento: *(i)* passaremos da transformada de Laplace para uma transformada de Mellin, e depois, *(ii)* inverteremos a transformada de Mellin, obtendo $\rho(x,t)$. Usaremos este artifício devido a facilidade com que

vamos poder identificar a nossa solução com a função de Fox H (Mathai e Saxena, 1978),

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

$$\chi(s) = \frac{\Pi_{i=1}^{m}\Gamma(b_i - B_i s)\Pi_{i=1}^{n}\Gamma(1-a_i + A_i s)}{\Pi_{i=m+1}^{q}\Gamma(1-b_i + B_i s)\Pi_{i=n+1}^{p}\Gamma(a_i - A_i s)} \qquad (13)$$

Agora relembraremos que ambas as transformadas de Laplace e de Mellin estão relacionadas uma com a outra. A transformada de Laplace de $\rho(x,t)$ em relação ao tempo é

$$\rho(x,s) = \int_0^\infty dt\, e^{-st}\rho(x,t) \qquad (14)$$

e a transformada de Mellin (Morse e Feshback, 1953) da mesma função em relação à variável temporal é

$$\rho(x,t) = \int_0^\infty dt t^{s'-1}\rho(x,s') \quad , \qquad \left(\rho(x,t) = \frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty i+\sigma}^{\infty i+\sigma} ds' t^{-s'}\rho(x,s')\right) \qquad (15)$$

Ambas as transformadas podem ser relacionadas como segue:

$$\rho(x,s') = \frac{1}{\Gamma(1-s')}\int_0^\infty ds\ s^{s'}\rho(x,s) \qquad (16)$$

Usando esta última equação em (12) obtemos

$$\mathcal{G}(x,s') = \frac{1}{|x|}\left(\frac{\gamma|x|}{\mathcal{K}_{\gamma,2}}\right)^{2\gamma s'}\frac{\Gamma\left(1-\frac{2}{\gamma}s'\right)}{\Gamma(1-s')} \qquad (17)$$

Invertendo a transformada de Mellin da equação acima obtemos

$$\mathcal{G}(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\mathcal{K}_{\gamma,2}t^\gamma}}\mathrm{H}_{1\ 2}^{2\ 0}\left[\frac{x^2}{4\mathcal{K}_{\gamma,2}t^\gamma}\Big|_{\left(\frac{1}{2},1\right)\ \ (0,1)}^{\left(1-\frac{\gamma}{2},\gamma\right)}\right] \qquad (18)$$

Na Figura 1 mostramos o comportamento da equação acima para alguns valores típicos de γ. Observe que a equação (18) apresenta um comportamento diferente da Gaussiana ($\gamma = 1$), fato este que é notório quando considerarmos valores próximos da origem e o seu comportamento assintótico para grandes argumentos. Em particular, o comportamento assintótico da equação (18) para grandes argumentos, o qual esta ilustrado na Figura 2, é do tipo $\mathcal{G}(x) \sim x^{(\gamma-1)/(2-\gamma)}\exp(-C\,x^{2/(2-\gamma)})$. Esta última igualdade é obtida por comparação direta da integral resultante da inversão de Mellin com a representação integral dada acima para a função de Fox H. Substituindo esta equação em (11) temos a solução para uma condição inicial genérica como segue:

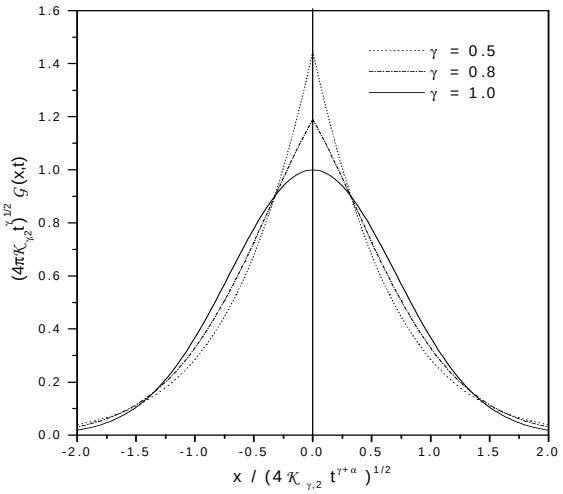

Figura 1. Nesta figura ilustramos o comportamento da equação (18) no gráfico de $4\pi\mathcal{K}_{\gamma,2}t^{\frac{\gamma}{2}}\mathcal{G}(x,t)$ versus $x/\left(4K_{\gamma,2}t^\gamma\right)^{\frac{1}{2}}$ para alguns valores típicos de γ.

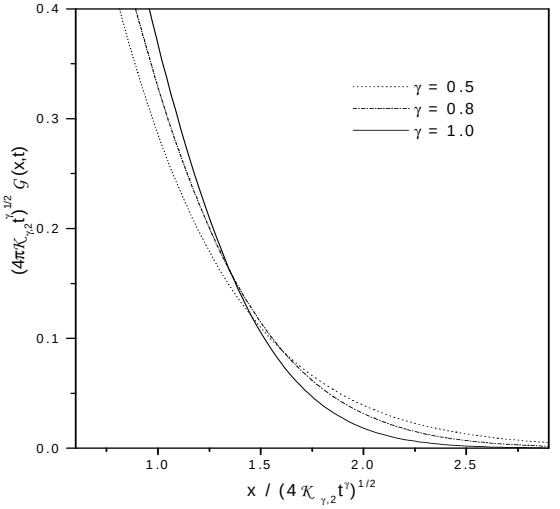

Figura 2. Nesta figura ilustramos o comportamento assintótico da equação (18) no gráfico de $4\pi\mathcal{K}_{\gamma,2}t^{\frac{\gamma}{2}}\mathcal{G}(x,t)$ versus $x/\left(4K_{\gamma,2}t^\gamma\right)^{\frac{1}{2}}$ para alguns valores típicos de γ.

$$\rho(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\mathcal{K}_{\gamma,2}t^{\gamma}}} \times \int_{-\infty}^{\infty} dx' \, \tilde{\rho}(x') H_{1\,2}^{2\,0}\left[\frac{(x-x')^2}{4\mathcal{K}_{\gamma,2}t^{\gamma}} \middle| \begin{matrix} \left(1-\frac{\gamma}{2},\gamma\right) \\ \left(\frac{1}{2},1\right) \quad (0,1) \end{matrix} \right] \tag{19}$$

No caso de termos condições de contorno finitas, por exemplo, $\rho(0,t) = \rho(L,t) = 0$, definidas em um intervalo do tipo [0,L] podemos usar o procedimento de separação de variáveis. Tal situação é caracterizada fisicamente por termos barreiras absorventes em $x=0$ e $x=L$. Para obtermos a solução para a equação (7) com tais condições de contorno vamos usar uma transformada finita. Em particular, estamos considerando que a nossa solução pode ser expressa em termos de uma série de Fourier. Assim,

$$\rho(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} \mathcal{B}_n(t) sen\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \tag{20}$$

Com

$$\mathcal{B}_n(t) = \int_0^L dx sen\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\rho(x,t) \tag{21}$$

Desta forma, aplicando $\int_0^L dx sen(n\pi x/L)$ na equação (6) e identificando $\mathcal{B}_n(t)$, obtemos

$$\frac{d}{dt}\mathcal{B}_n(t) = -\frac{n^2\pi^2}{L^2}\mathcal{K}_{\gamma,2\,0}\mathcal{D}_t^{1-\gamma}\left(\mathcal{B}_n(t)\right)$$

A solução da equação acima é dada em termos da função de Mittag-Leffter,

$$\mathrm{E}_{\gamma}(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{\Gamma(1+\gamma n)} \tag{22}$$

com segue abaixo,

$$\mathcal{B}_n(t) = \mathcal{B}_n(0)\mathrm{E}_{\gamma}\left(-\frac{n^2\pi^2}{L^2}\mathcal{K}_{\gamma,2}t^{\gamma}\right) \tag{23}$$

A função de Mittag-Leffter constitui uma possível generalização da exponencial. No caso de $\gamma \to 1$ a função de Mittag-Leffter recupera a forma exponencial. Substituindo a solução acima em (20) e levando em conta uma condição inicial genérica $\rho(x,0) = \tilde{\rho}(x)$ temos

$$\rho(x,t) = \int_0^L dx' \mathcal{G}(x,x',t)\tilde{\rho}(x') \tag{24}$$
$$\mathcal{G}(x,x',t) = \frac{2}{L}\sum_{n=1}^{\infty} sen\left(\frac{n\pi}{L}x'\right) sen\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \times \mathrm{E}_{\gamma}\left(-\frac{n^2\pi^2}{L^2}\mathcal{K}_{\gamma,2}t^{\gamma}\right)$$

Se ao invés de barreiras absorventes tivéssemos barreiras refletoras, i.e., $\partial_x \rho|_{x=0} = \partial_x \rho|_{x=L} = 0$, a mudança essencial na solução acima seria a presença do coseno (*cos*) no lugar do seno (*sen*) e do termo de ordem zero $L/2$ em $\mathcal{G}(x,x',t)$ e um termo adicional devido solução estacionário.

Continuando nossa discussão, vamos investigar as implicações que obtemos ao empregar derivadas fracionárias na equação de difusão. O primeiro ponto evidente, ao observarmos a solução (19), é que o segundo momento não varia linearmente com o tempo, mas sim com uma potência do tempo, i.e., $\langle x^2 \rangle \propto t^{\gamma}$. Tal tipo de difusão caracteriza uma difusão anômala do tipo correlacionada. Usando conceitos de caminhantes aleatórios (veja o apêndice para detalhes sobre caminhantes aleatórios), é possível demonstrar que a nossa densidade de probabilidade relativa a parte temporal, na ausência de força externa, tem o seguinte aspecto:

$$\omega(t) = \frac{1}{\tau_0}\left(\frac{t}{\tau_0}\right)^{\gamma-1}\mathrm{E}_{\gamma,\gamma}\left(-\frac{t^{\gamma}}{\tau_0{}^{\gamma}}\right) \tag{25}$$

onde τ_0 é uma constante e $\mathrm{E}_{\gamma,\beta}(x)$ é a função de Mittag-Leffter generalizada

$$\mathrm{E}_{\gamma,\beta}(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{\Gamma(\beta+\gamma n)} \tag{26}$$

quando consideramos a equação de difusão. Ressaltando que de acordo com os valores de γ temos a distribuição mais concentrada em tempos curtos ou em tempos longos o que nos levaria a um processo do tipo subdifuso ou superdifuso.

Retornando a equação (5), vamos transformá-la em uma equação integral, procedimento que é muito útil dependendo do potencial a ser analisado e que permite uma solução recursiva sob uma teoria de perturbação. Neste sentido, cabe lembrar que são poucos os tipos de

forças externas que nos permitem obter uma solução exata. Assim, ao desenvolvermos os nossos procedimentos de cálculos consideraremos o termo que contém a força externa como um termo de fonte. Então, temos

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x,t)={}_0\mathcal{D}_t^{1-\gamma}\left(\mathcal{K}_{\gamma,2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\rho(x,t)\right)-\alpha(x,t) \quad (27)$$

Com

$$\alpha(x,t)={}_0\mathcal{D}_t^{1-\gamma}\left(\frac{\partial}{\partial x}\big(F(x,t)\rho(x,t)\big)\right) \quad (28)$$

Repetindo o procedimento de cálculo para o caso livre obtemos que a transformada de Fourier Laplace da equação (27) é

$$\rho(k,s)=\frac{\rho(k,0)}{s+\mathcal{K}_{\gamma,2}s^{1-\gamma}k^2}-\frac{\alpha(k,s)}{s+\mathcal{K}_{\gamma,2}s^{1-\gamma}k^2} \quad (29)$$

Invertendo ambas as transformadas temos

$$\begin{aligned}\rho(x,t)&=\int_{-\infty}^{\infty}dx'\mathcal{G}(x-x',t)\tilde{\rho}(x')\\&-\int_{-\infty}^{\infty}dx'\int_0^t dt'\mathcal{G}(x-x',t-t')\alpha(x',t')\end{aligned} \quad (30)$$

com $\mathcal{G}(x,t)$ definido pela equação (18). Substituindo $\alpha(x,t)$ na equação (28) e integrando por partes este termos, chegamos a

$$\begin{aligned}\rho(x,t)&=\rho^{(0)}(x,t)\\&+\int_{-\infty}^{\infty}dx'\int_0^t dt'\mathcal{G}^{(2)}(x-x',t-t')_0\mathcal{D}_t^{1-\gamma}\big(F(x',t')\rho(x',t')\big)\end{aligned} \quad (31)$$

Onde

$$\mathcal{G}^{(2)}(x,t)=\frac{1}{\sqrt{4\pi\mathcal{K}_{\gamma,2}t^{\gamma}}}\frac{1}{|x|}\mathrm{H}_{2\,3}^{2\,1}\left[\frac{x^2}{4\mathcal{K}_{\gamma,2}t^{\gamma}}\middle|\begin{matrix}(0,2)\ \left(1-\frac{\gamma}{2},\gamma\right)\\ \left(\frac{1}{2},1\right)\ (0,1)\ (1,2)\end{matrix}\right] \quad (32)$$

A equação (31) é justamente a equação que procuramos e é a forma integral correspondente a equação (5) que pode ser usada, por exemplo, para calcular perturbativamente a influência de uma força externa aplicada ao sistema.

Equação de difusão: derivadas fracionárias no espaço

Nesta seção, investigaremos a equação de difusão que emprega derivadas fracionárias na parte espacial. Em particular, faremos um desenvolvimento análogo ao da seção anterior. Assim, começaremos observando que as distribuições de Lévy

$$L_\mu(x,t)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}dk\,e^{ikx-\mathcal{K}_{1,\mu}|k|^{\mu}t} \quad (33)$$

é solução da equação de difusão

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\rho(x,t)&=\mathcal{K}_{1,\mu}\frac{\partial^{\mu}}{\partial|x|^{\mu}}\rho(x,t)\\&-\frac{\partial}{\partial x}\big(F(x,t)\rho(x,t)\big)\end{aligned} \quad (34)$$

quando consideramos a ausência de força externa, *F(x,t)=0*. Na Figura 3 ilustramos o comportamento da equação (33) para alguns valores típicos de μ. Observando que, ao contrario da Gaussiana, as distribuições de Lévy têm um comportamento de cauda longo em comparação com a Gaussiana (veja Figura 4), pois o comportamento assintótico é do tipo lei de potencia, i.e., $\rho(x)\sim 1/|x|^{1+\mu}$. Em particular as distribuições de Levy podem ser assintóticamente relacionadas com as distribuições que emergem da mecânica estatística não extensiva (Tsallis, 1988). Para provarmos tal afirmação basta usarmos o fato de que $\mathcal{F}\left\{\partial^{\mu}_{|x|}(\rho(x,t))\right\}\equiv-|k|^{\mu}\rho(k,t)$, onde $\mathcal{F}\{\rho(x,t)\}=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx}{\sqrt{2\pi}}e^{-ikx}\rho(x,t)$ é a transformada de Fourier. Em particular, para verificarmos a última consideração basta empregarmos a definição

$$\begin{aligned}\frac{\partial^{\mu}}{\partial|x|^{\mu}}\rho(x,t)&=\sqrt{\frac{2}{\pi}}sen\left(\frac{\mu\pi}{2}\right)\\&\times\Gamma(1+\mu)\int_{-\infty}^{\infty}dx'\frac{\rho(x',t)}{|x-x'|^{\mu+1}}\end{aligned} \quad (35)$$

Em contraste com o resultado que obtivemos ao empregarmos derivadas fracionárias na variável temporal as distribuições que emergem ao aplicarmos derivadas fracionárias na variável espacial não tem o segundo momento finito. Isto implica que elas não seguem o teorema do limite central, mas sim, uma generalização do mesmo, conhecida como teorema de Lévy-Gnedenko. Podemos obter mais informação da equação acima ao analisarmos ela sob o enfoque de caminhantes aleatórios. Neste caso, o que acontece é uma mudança nos comprimentos

dos saltos provocada pelo emprego da derivada fracionária na variável espacial. Em particular, o caminhante passa a efetuar saltos longos. A densidade de probabilidade que caracteriza os saltos então adquire um comportamento de cauda longa caracterizando um processo superdifusivo do tipo Lévy.

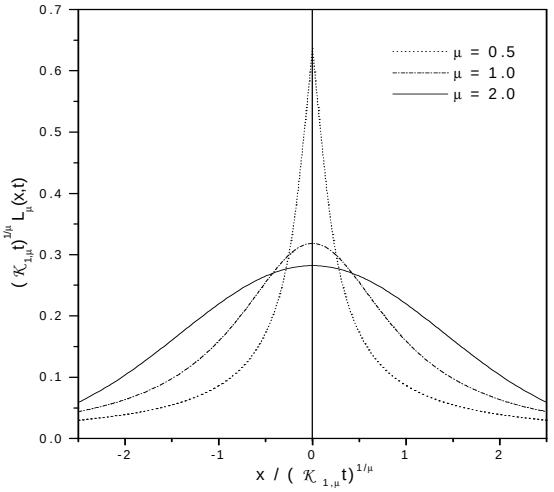

Figura 3. Nesta figura ilustramos o comportamento da equação (33) no gráfico de $(\mathcal{K}_{1,\mu}t)^{\frac{1}{\mu}}L_\mu(x,t)$ versus $x/(\mathcal{K}_{1,\mu}t)^{\frac{1}{\mu}}$ para alguns valores típicos de μ.

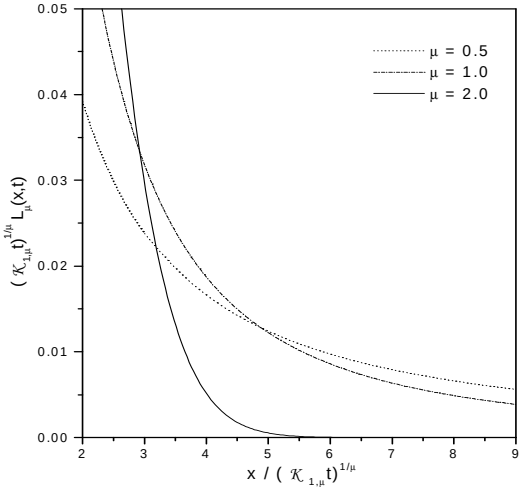

Figura 4. Nesta figura ilustramos o comportamento assintótico da equação (33) no gráfico de $(\mathcal{K}_{1,\mu}t)^{\frac{1}{\mu}}L_\mu(x,t)$ versus $x/(\mathcal{K}_{1,\mu}t)^{\frac{1}{\mu}}$ para alguns valores típicos de μ.

Vamos agora analisar a equação (34) na ausência de forças externas e considerando uma condição inicial do tipo $\rho(x,0)=\tilde{\rho}(x)$. Para tal tomaremos a transformada de Laplace e Fourier da equação (34) que conduz a

$$\rho(k,s)=\frac{\rho(k,0)}{s+\mathcal{K}_{1,\mu}\mid k\mid^{\mu}} \tag{36}$$

Invertendo a equação acima, obtemos

$$\rho(x,t)=\int_{-\infty}^{\infty}dx'\mathcal{G}_\mu(x-x',t)\tilde{\rho}(x') \tag{37}$$

onde $\mathcal{G}_\mu(x,t)=L_\mu(x,t)$. Observe que a equação (36) leva em conta uma condição inicial genérica assim como a equação (19) obtida anteriormente para o caso em que temos uma derivada fracionária aplicada a variável temporal. E a equação integral associada a equação (34) quando temos uma força externa qualquer atuando é dada por

$$\begin{aligned}\rho(x,t)&=\rho^{(0)}(x,t)\\&-\int_{-\infty}^{\infty}dx'\int_0^t dt'\,\mathcal{G}_\mu^{(2)}(x-x',t-t')F(x',t')\rho(x',t')\end{aligned} \tag{38}$$

onde

$$\begin{aligned}\mathcal{G}_\mu^{(2)}(x,t)&=-\frac{d}{dx}L_\mu(x,t)\\&=\int_0^{\infty}\frac{dk}{\pi}\,ksen(kx)\,e^{-\mathcal{K}_{1,\mu}|k|^{\mu}t}\end{aligned} \tag{39}$$

Resultados e discussão

Descrevemos de maneira breve as equações que empregam derivadas fracionárias tanto na variável temporal como na variável espacial. Em particular, analisamos a equação de difusão levando em conta derivadas fracionárias tanto na variável espacial como na variável temporal. No primeiro caso as soluções são descritas em termos das funções de Fox H e no segundo caso temos as distribuições de Lévy. A última não tem o segundo momento finito conseqüentemente não satisfaz o teorema do limite central mas sim uma generalização do mesmo feita por Lévy-Gnedenko. Assim, as soluções que obtivemos em cada um dos casos desvia completamente da Gaussiana que usualmente é obtida para equação de difusão normal. Neste contexto, o segundo momento $\langle x^2\rangle$, quando finito, é proporcional a t^{α}, e não de maneira linear como no caso usual. Finalmente, gostaríamos de ressaltar

que com os desenvolvimentos feitos aqui podem ser empregados numa grande variedade de situações físicas onde temos a presença da difusão anômala.

Agradecimentos

Agradecemos ao CNPq e a Fundação Aracaúria pelo suporte financeiro.

Apêndice A: Caminhantes aleatórios

O formalismo de caminhantes aleatórios com o espaço e tempo contínuos (CTRW) é baseado na idéia de usarmos uma formulação microscópica. Tal formulação leva em conta propriedades como a distribuição das distâncias dos *pulos* efetuados pela substância ao se difundir em um substrato e a distribuição temporal de espera entre *pulos* consecutivos. Assim, para formularmos uma abordagem em termos de caminhantes aleatórios temos que definir uma função densidade de probabilidade (pdf) $\psi(x,t)$. De $\psi(x,t)$ podemos obter a distribuição relacionada ao comprimento (tamanho) do pulo

$$\lambda(x) = \int_0^\infty dt\,\psi(x,t) \tag{A1}$$

e a distribuição relacionada ao tempo de espera

$$\omega(t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\,\psi(x,t) \tag{A2}$$

Assim, $\lambda(x)dx$ é a probabilidade de ocorrência de um pulo com um dado comprimento no intervalo $(x,x+dx)$ e $\omega(t)dt$ é a probabilidade de termos um dado tempo de espera entre pulos no intervalo de tempo $(t,t+dt)$. Com estas definições podemos formular o CTRW com a seguinte equação

$$\eta(x,t) = \delta(x)\delta(t) + \int_{-\infty}^{\infty} dx' \int_0^t dt' \eta(x',t')\psi(x-x',t-t') \tag{A3}$$

que relaciona a pdf $\eta(x,t)$ de chegada na posição x no tempo t, com o evento de chegada em x' no tempo t', $\eta(x',t')$. Conseqüentemente, a pdf $\rho(x,t)$ de se encontrar a partícula em x no tempo t é

$$\rho(x,t) = \int_0^t dt' \eta(x,t')\Psi(t-t') \tag{A4}$$

sendo esta última a probabilidade cumulativa definida por

$$\Psi(t) = 1 - \int_0^t dt'\omega(t') \tag{A5}$$

No espaço de Fourier - Laplace temos que,

$$\rho(k,s) = \frac{1-\omega(s)}{s}\frac{\rho_0(k)}{1-\psi(k,s)} \tag{A6}$$

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

Referências

BOUCHAUD, J.P. *et al.* Anomalous diffusion in elongated micelles and its Lévy flight interpretataion. *J. Phys. II,* France, v. 1, p. 1465-1482, 1991.

GROOT, S.R.; MAZUR, P. *Non-Equilibrium Thermodynamics.* New York: Dover Publications, 1984.

HILFER, R. *Applications of Fractional Calculus in Physics*. Singapore: World Scientific, 2000.

KLAFTER, J. *et al*. Beyond Brownian motion, *Phys. Today,* New York, v. 49, p. 33-39, 1996.

MATHAI, A.M.; SAXENA, R.K. *The H-fucntion with Application in Statistics and other Disciplines*, New Delhi: Wiley Eastern, 1978.

METZLER, R. *et al.* Anomalous transport in disordered systems under the influence of external. *Physica A*, Amsterdam, v. 266, p. 343-350, 1999.

METZLER, R.; KLAFTER, J. The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach. *Physics Rep*., Amsterdam, v. 339, p. 1-77, 2000

MORSE, M.P.; FESHBACH, H. *Methods of Theoretical Physics*. New York: Mcgraw-Hill Book Company, Inc., 1953.

OLDHAM, K.B.; SPANIER, J. *The Fractional Calculus*. New York: Academic Press, 1974.

OTT, A. *et al.* Anomalous diffusion in "living polymers": A genuine Levy flight? *Phys. Rev. Lett.,* New York, v. 65, p. 2201-2204, 1990.

PENG, C.K. *et al.* Long-range anticorrelations and non-Gaussian behavior of the heartbeat. *Phys. Rev. Lett*., New York, v. 70, p. 1343-1347, 1993.

PLEROU, V. *et al.* Random matrix approach to cross correlations in financial data. *Phys. Rev. Lett.,* New York, v. 62, p. R3023- R3026, 2000.

PLOTKIN, S.S.; WOLYNES, P.G. Non-Markovian Configurational Diffusion and Reaction Coordinates for Protein Folding. *Phys. Rev. Lett*., New York, v. 80, p. 5015-5018, 1998.

PRATO, D.; TSALLIS, C. Nonextensive foundation of Lévy distributions. *Phys. Rev. E*, New York, v. 60, p. 2398-2401, 1999.

RISKEN H. *The Fokker-Planck Equation*. New York: Springer, 1984.

ROMAN, H.E. How does the diffusion equation on fractals look? *Fractals*, Singapore, v. 12, p.149-156, 2004.

SCHIESSEL, H.; BLUMEN, A. Fractal aspects in

polymer science, *Fractals,* Singapore, v. 3, p. 483-490, 1995.

SHLESINGER, M.F. *et al.* Lévy *Flights and related topics in physics.* Berlin: Springer-Verlag, 1994.

SOKOLOV, I.M. Thermodynamics and fractional Fokker-Planck equations. *Phys. Rev. E*, New York, v. 63, p. 056111, 2001a.

SOKOLOV, I.M. *et al.* Do strange kinetics imply unusual thermodynamics? *Phys. Rev. E*, New York, v. 64, p. 021107, 2001b.

SOLOMON, T.H. *et al.* Observation of anomalous diffusion and Lévy flights in a two-dimensional rotating flow. *Phys. Rev. Lett.,* New York, v. 71, p. 3975-3979, 1993.

SPOHN, H. Surface dynamics below the roughening transition. *J. Phys. I*, France, v. 3, p. 69-81, 1993.

TSALLIS, C. *et al.* The role of constraints within generalized nonextensive statistics. *Physica A*, Amsterdam, v. 261, p. 534-554, 1998.

Received on August 11, 2005.
Accepted on December 02, 2005.