

Soluções exatas para a equação de difusão fracionária: formalismo de função de Green

Giane Gonçalves¹, Luciana de Souza Moraes¹, Onélia Aparecida Andreo dos Santos¹ e Ervin Kaminski Lenzi^{2*}

¹Departamento de Engenharia Química, ²Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá, Av. Colombo, 5790, 87020-900, Maringá, Paraná, Brasil. Author for correspondence: eklenzi@dfi.uem.br

RESUMO. Neste trabalho obtemos uma nova classe de soluções para uma equação de difusão fracionária \mathcal{N} -dimensional com simetria radial usando a técnica de função de Green. Em particular, estas soluções são obtidas empregando uma condição de contorno definida em um intervalo finito $[0, a]$ a qual depois é estendida a uma situação semi-infinita fazendo $a \rightarrow \infty$. Em nossa análise, também consideramos a presença de forças externas e o coeficiente de difusão dependente de variáveis temporais e espaciais. Usando os resultados obtidos discutimos uma ampla classe de processos difusivos, sejam eles normais ou anômalos.

Palavras-chave: equação de difusão, função de Green, derivada fracionária.

ABSTRACT. Exact solutions for fractional diffusion equation: Green function approach. We investigate the solutions for a fractional diffusion equation with radial symmetry, using the green function approach and taking the \mathcal{N} -dimensional case into account. In our analysis, we consider a spatial time dependent diffusion coefficient and the presence of external forces. In particular, we discuss the results obtained by employing boundary condition defined on a finite interval and after, we extend the analysis to a semi-infinite interval of $a \rightarrow \infty$. We also show that a rich class of diffusive processes, including normal and anomalous ones, can be obtained from the solutions found here.

Key words: diffusion equation, Green function, fractional derivative.

Introdução

As equações de difusão fracionárias (por exemplo, $\partial_t^\gamma \rho = \mathcal{D} \nabla^2 \rho$) têm sido amplamente investigadas devido à sua grande utilidade na descrição de fenômenos relacionados a processos difusivos anômalos (Klafter *et al.*, 1996; Kusnezov *et al.*, 1999; Hilfer, 2000; Metzler e Klafter 2000a; West *et al.*, 2002; Zaslavsky 2002; Del-Castillo-Negrete *et al.*, 2003). De fato, elas têm sido aplicadas em várias situações, como por exemplo, relaxamento para equilíbrio em sistemas (como cadeias de polímeros e membranas) com memória temporal longa (Schriessel e Blumen, 1995; Douglas, 2000; Schiessel *et al.* 2000; Crothers *et al.*, 2004), em sistemas desordenados (Metzler *et al.*, 1999a), na descrição da difusão em fractais (Campos *et al.*, 2004) e na modelagem de processos dinâmicos não-markovianos em proteínas (Plotkin e Wolynes, 1998). Os aspectos formais destas equações de difusão fracionárias também têm sido investigados.

Por exemplo, Schneider e Wyss (1989) discutiram equações fracionárias do tipo difusão-onda, Metzler e Klafter (2000b) estudaram alguns problemas de contorno para equações de difusão fracionárias, Metzler *et al.* (1999b) mostraram como uma equação fracionária de Fokker-Planck pode ser derivada de uma equação mestra generalizada, Ryabov (2003) analisou o comportamento na origem das equações de difusão fracionárias, Saied (2000); El-Wakil *et al.* (2001a,b); Ren *et al.* (2003); Mainardi e Pagnini (2003). Achar e Hanneken (2004), obtiveram algumas soluções para uma equação de difusão fracionária, e Barkai e Silbey (2000) formularam uma equação de Kramers fracionária. Da discussão acima, percebemos o grande interesse que essas equações de difusão, que generalizam a equação de difusão usual, têm despertado devido à grande diversidade de aplicações, conforme falamos inicialmente. Entretanto, uma discussão levando em conta condições de contorno definidas em um

intervalo finito, *i.e.*, $[0, a]$, ou mesmo em uma situação semi-infinita, *i.e.*, $[0, \infty)$ com a presença de forças externas em ambos os casos ainda não foi feita de forma apropriada. Assim, pretendemos dedicar este trabalho ao estudo deste tipo de equação de difusão levando em conta condições de contorno definidas em um intervalo finito, *i.e.*, $[0, a]$, o qual depois será estendido a uma situação semi-infinita fazendo $a \rightarrow \infty$. Também vamos considerar a presença de forças externas e um coeficiente de difusão que pode depender tanto de variáveis espaciais como temporais. Mais especificamente, vamos obter uma nova classe de soluções levando em conta as condições de contorno definidas anteriormente para a equação de difusão fracionária:

$$\frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(r, t) = \int_0^t dt' \frac{1}{r^{N-1}} \frac{\partial}{\partial r} \left\{ r^{N-1} \mathcal{D}(r, t-t') \frac{\partial}{\partial r} \rho(r, t') \right\} - \frac{1}{r^{N-1}} \frac{\partial}{\partial r} [r^{N-1} F(r) \rho(r, t)] \tag{1}$$

onde $F(r)$ representa uma força externa aplicada ao sistema, $0 < \gamma \leq 1$, $\rho(r, t)$ representa, por exemplo, uma distribuição de partículas ou uma concentração e $\mathcal{D}(r, t)$ é o coeficiente de difusão que leva em conta uma dependência temporal e espacial. A derivada temporal considerada aqui é do tipo Caputo (Podlubny, 1999), *i.e.*,

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

com $n-1 < \gamma \leq n$ e $\rho^{(n)}(r, t') = \partial_{t'}^n \rho(r, t')$. Note que para $\gamma=1$ a Equação 1 recupera a equação de difusão usual (\mathcal{N} -dimensional com simetria radial) com efeito de memória e que $\int_0^\infty dr r^{N-1} \rho$ é independente

do tempo para qualquer γ . Mostramos a última afirmação escrevendo a equação de difusão fracionária na forma $\partial_{t'}^\gamma \rho = -r^{1-N} \partial_r (r^{N-1} j)$ e assumindo a condição de contorno $j(r \rightarrow \infty, t) \rightarrow 0$. Para investigar as soluções que surgem da equação de difusão fracionária acima, consideramos várias situações que envolvem o coeficiente de difusão e a presença de forças externas. Começamos nosso estudo com o caso livre (*i.e.*, a ausência de força externa no sistema). Para este caso, consideramos o coeficiente de difusão dependente do espaço e do tempo, *i.e.*, $\mathcal{D}(r, t) = \mathcal{D} r^{-\theta} t^{\delta-1} / \Gamma(\delta)$. As soluções são obtidas levando em conta condições de contorno definidas em um intervalo finito e num intervalo semi-infinito. Posteriormente, estudamos as modificações que são obtidas ao introduzirmos uma força externa na Equação 1. A força externa analisada é do tipo $F(r) = -kr + \mathcal{K}r^\epsilon$ com $\epsilon = -1 - \theta$, sendo esta

força analisada primeiramente com $k = 0$ e depois o caso completo. Neste contexto, empregamos, por questão de simplicidade, o coeficiente de difusão $\mathcal{D}(r, t) = \mathcal{D} \delta(t) r^{-\theta}$. Em ambos os casos, as soluções para Equação 1 são obtidas utilizando o formalismo de função de Green. Estes desenvolvimentos são feitos na Sec. II, e na Sec. III apresentamos nossas conclusões.

Equação de Difusão Fracionária

Iniciaremos nosso estudo considerando a equação de difusão fracionária \mathcal{N} -dimensional com simetria radial, na ausência de forças externas e, por simplicidade, com o coeficiente de difusão $\mathcal{D}(r, t) = \mathcal{D} t^{\delta-1} / \Gamma(\delta)$. Para este caso, a Equação 1 fica expressa da seguinte forma:

$$\frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(r, t) = \frac{\mathcal{D}}{\Gamma(\delta) r^{N-1}} \int_0^t dt' (t-t')^{\delta-1} \frac{\partial}{\partial r} \left\{ r^{N-1} \frac{\partial}{\partial r} \rho(r, t') \right\} \tag{2}$$

É interessante observar que para $\gamma = 1$ recuperamos a equação de difusão usual com efeito de memória. Seguindo, vamos analisar a Equação 2 levando em conta a condição de contorno $\rho(a, t) = 0$. Exemplos semelhantes deste tipo de condição de contorno são encontrados na análise dinâmica de polímeros, meios porosos estratificados e no estudo de fotocondutividade em semicondutores amorfos. Resolvendo a equação acima submetida a esta condição de contorno, obtemos:

$$\rho(r, t) = \int_0^a d\xi \xi^{N-1} \bar{\rho}(\xi) \mathcal{G}(r, \xi, t) \tag{3}$$

$$\mathcal{G}(r, \xi, t) = \frac{2}{a^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\xi^{\frac{2-N}{2}} r^{\frac{2-N}{2}}}{\left\{ J_{\frac{N}{2}}(\lambda_n a) \right\}^2} J_{\frac{N-1}{2}}(\lambda_n \xi) J_{\frac{N-1}{2}}(\lambda_n r) E_{\gamma, \delta}(-\lambda_n^2 D t^{\gamma+\delta})$$

para $\mathcal{N} \geq 2$ onde $J_\nu(x)$ é uma função de Bessel, λ_n (autovalor) é obtido da equação $J_{\mathcal{N}/2-1}(\lambda_n a) = 0$ e $\rho(r, 0) = \bar{\rho}(r)$ (veja a Figura 1). Na Equação 4, $\mathcal{G}(r, \xi, t)$ é uma função de Green associada à condição inicial e $E_\gamma(x)$ é a função Mittag-Leffler, dada por

$$E_\gamma(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{x^n}{\Gamma(1+n\gamma)}$$

A função de Mittag-Leffler é uma extensão da função exponencial e a presença desta função na Equação 4 é uma consequência das mudanças produzidas na função densidade de probabilidade de tempo de espera pela derivada fracionária e pela dependência temporal no coeficiente de difusão. Note que para $\gamma + \delta = 1$, recuperamos a equação de difusão usual, uma vez que a função de Mittag-Leffler reduz-se a função exponencial.

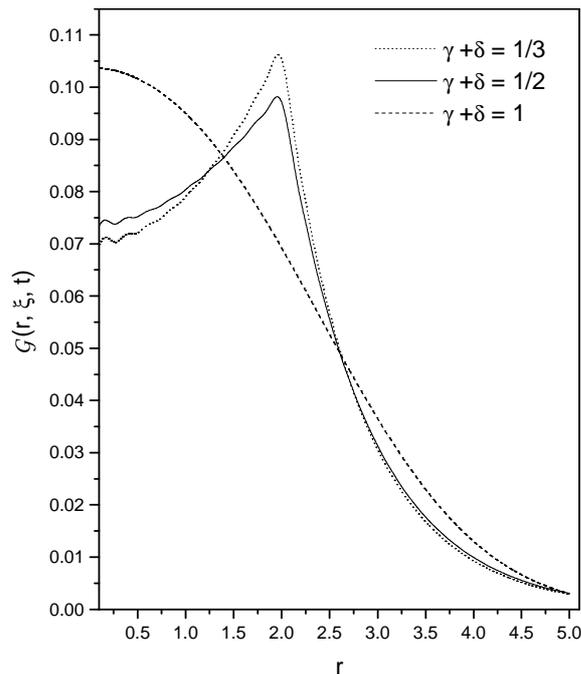


Figura 1. Comportamento de $G(r, \xi, t)$ versus r para valores típicos de γ e δ . Consideramos, por simplicidade, $a = 10,0$, $t = 1,0$, $\xi = 2,0$, $\mathcal{D} = 1,0$ e $\mathcal{N} = 3$.

A Equação 2 também pode ser útil na descrição de processos anômalos de condução de calor. Neste caso, é interessante considerar a Equação 2 sujeita a uma condição de contorno mista, ou seja, uma condição de contorno que envolva a função e sua derivada. De fato, este tipo de condição de contorno aparece naturalmente em processos de condução de calor, por exemplo, quando uma superfície dissipa calor por convecção de acordo com a Lei de resfriamento de Newton. Assim, empregando condições de contorno mistas, *i.e.*, $\partial_r \rho + \mathcal{H}\rho|_{r=a} = 0$, ao invés da condição de Dirichlet, para a Equação 2 obtemos que sua solução fica dada por,

$$\rho(r, t) = \int_0^a d\xi \xi^{\mathcal{N}-1} \bar{\rho}(\xi) G(r, \xi, t)$$

$$G(r, \xi, t) = \frac{2}{a^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\xi^{\frac{2-\mathcal{N}}{2}} r^{\frac{2-\mathcal{N}}{2}}}{\mathcal{N}_n \left\{ J_{\frac{\mathcal{N}}{2}}(\lambda_n a) \right\}^2} J_{\frac{\mathcal{N}-2}{2}}(\lambda_n \xi) J_{\frac{\mathcal{N}-2}{2}}(\lambda_n r) E_{\gamma+\delta}(-\lambda_n^2 \mathcal{D} t^{\gamma+\delta})$$

(4)

com $\mathcal{N}_n = [(\lambda_n/\mathcal{H})^2 + 1 - (\mathcal{N}-2)/(\mathcal{H}a)]$.

Agora vamos incorporar uma dependência espacial no coeficiente de difusão, isto é, $\mathcal{D}(r) = \mathcal{D} r^{\theta} t^{\delta-1} / \Gamma(\delta)$. Esta dependência espacial no coeficiente de difusão tem sido empregada para investigar várias situações físicas, tais como elétrons rápidos em um plasma quente na presença de um campo elétrico, turbulência (Fujisaka *et al.*, 1985; Sokolov *et al.*, 2000), e difusão em fractais (O'Shaughnessy e

Procaccia, 1985). Neste caso a equação de difusão é dada por:

$$\frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(r, t) = \frac{\mathcal{D}}{\Gamma(\delta) r^{\mathcal{N}-1}} \int_0^t dt' (t-t')^{\delta-1} \frac{\partial}{\partial r} \left\{ r^{\mathcal{N}-\theta} \frac{\partial}{\partial r} \rho(r, t') \right\}$$

(5)

A solução para a Equação 5 é

$$\rho(r, t) = \int_0^a d\xi \xi^{\mathcal{N}-1} \bar{\rho}(\xi) G(r, \xi, t)$$

$$G(r, \xi, t) = \frac{2+\theta}{a^{2+\theta}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\xi^{\frac{1}{2}(2+\theta-\mathcal{N})} r^{\frac{1}{2}(2+\theta-\mathcal{N})}}{\left\{ J_{\frac{\mathcal{N}}{2+\theta}} \left(\frac{2\lambda_n}{2+\theta} a^{\frac{1}{2}(2+\theta)} \right) \right\}^2} E_{\gamma+\delta}(-\mathcal{D}\lambda_n^2 t^{\gamma+\delta})$$

$$\times J_{\frac{\mathcal{N}-2-\theta}{2+\theta}} \left(\frac{2\lambda_n \xi^{\frac{2+\theta}{2}}}{2+\theta} \right) J_{\frac{\mathcal{N}-2-\theta}{2+\theta}} \left(\frac{2\lambda_n r^{\frac{2+\theta}{2}}}{2+\theta} \right)$$

(6)

onde $\mathcal{N} \geq 2 + \theta$ e λ_n é determinado por

$$J_{\frac{\mathcal{N}}{2+\theta}-1} \left(\frac{2\lambda_n}{2+\theta} a^{\frac{1}{2}(2+\theta)} \right) = 0 \text{ (veja Figura 2).}$$

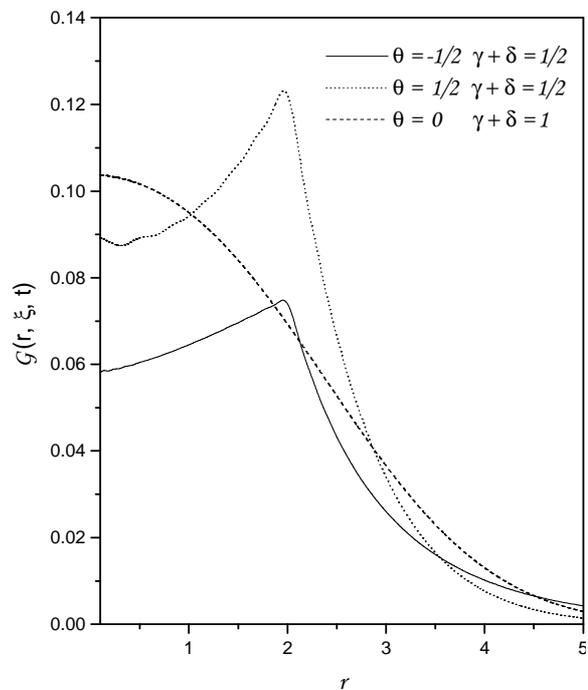


Figura 2. Comportamento de $G(r, \xi, t)$ versus r para valores típicos de θ considerando, por simplicidade, $\gamma + \delta = 1/2$, $t = 1,0$, $\xi = 2,0$, $a = 10,0$, $\mathcal{N} = 3,0$ e $\mathcal{D} = 1,0$.

Para este caso, em que o coeficiente de difusão depende da posição e do tempo, também podemos achar a solução utilizando uma condição de contorno mista, *i.e.*, uma condição de contorno que envolva a função e sua derivada sobre uma superfície considerada, conforme fizemos anteriormente. Em particular, a solução, no caso em que a Equação 5 é analisada com condições de contorno mistas é:

$$\rho(r,t) = \int_0^a d\xi \xi^{N-1} \bar{\rho}(\xi) \mathcal{G}(r,\xi,t)$$

$$\mathcal{G}(r,\xi,t) = \frac{2+\theta}{a^{2+\theta}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\xi^{\frac{1}{2}(2+\theta-N)} r^{\frac{1}{2}(2+\theta-N)}}{\bar{\mathcal{N}}_n \left\{ J_{\frac{N}{2+\theta}} \left(\frac{2\lambda_n}{2+\theta} a^{\frac{1}{2}(2+\theta)} \right) \right\}^2} E_{\gamma+\delta}(-\mathcal{D}\lambda_n^2 t^{\gamma+\delta})$$

$$\times J_{\frac{N-2-\theta}{2+\theta}} \left(\frac{2\lambda_n \xi}{2+\theta} \right) J_{\frac{N-2-\theta}{2+\theta}} \left(\frac{2\lambda_n r}{2+\theta} \right)$$

(7)

sendo $\bar{\mathcal{N}}_n = [(\lambda_n/\mathcal{H})^2 a^0 + 1 - (N - (2+\theta))/(\mathcal{H}a)]$.

Podemos estender o resultado encontrado acima para Equação 5 e por conseguinte para Equação 2 considerando $a \rightarrow \infty$. Para obter a solução pertinente a esta situação, é útil usar

$$\rho(r,t) = \int_0^{\infty} dk C(k,t) \Psi(r,k)$$

$$\Psi(r,k) = r^{\frac{2+\theta-N}{2}} J_{\frac{N-2-\theta}{2+\theta}} \left(\frac{2kr}{2+\theta} \right)$$

(8)

onde $C(k,t)$ é o núcleo da integral a ser encontrado. Note que usar Equação 8 é equivalente empregar uma transformada integral com o núcleo contendo uma função de Bessel. Substituindo Equação 8 em Equação 5, obtemos:

$$\frac{d^\gamma}{dt^\gamma} C(k,t) = \frac{-\mathcal{D}k^2}{\Gamma(\delta)} \int_0^t dt' (t-t')^{\delta-1} C(k,t')$$

(9)

Resolvendo a Equação 9, encontramos $C(k,t) = C(k,0) E_{\gamma+\delta}(-k^2 \mathcal{D} t^{\gamma+\delta})$, onde $C(k,0)$ é determinado pela condição inicial. Utilizando a condição inicial $\rho(r,0) = \bar{\rho}(r)$, verificamos que

$$C(k,0) = \frac{2k}{2+\theta} \int_0^{\infty} d\xi \xi^{N-1} \bar{\rho}(\xi) \Psi(\xi,k)$$

(10)

Assim, a solução fica dada por:

$$\rho(r,t) = \int_0^{\infty} d\xi \xi^{N-1} \bar{\rho}(\xi) \mathcal{G}(r,\xi,t)$$

$$\mathcal{G}(r,\xi,t) = \frac{2}{2+\theta} \int_0^{\infty} dk k \Psi(\xi,k) \Psi(r,k) E_{\gamma+\delta}(-k^2 \mathcal{D} t^{\gamma+\delta})$$

(11)

Em particular, para $\gamma + \delta = 1$, podemos simplificar a equação anterior aplicando a identidade

$$\int_0^{\infty} dk k J_\nu(\alpha k) J_\nu(\beta k) e^{-\alpha^2 k^2} = \frac{1}{2\alpha^2} e^{-\frac{\beta^2 + \alpha^2}{4\alpha^2}} I_\nu \left(\frac{\alpha\beta}{2\alpha^2} \right)$$

(12)

Desta forma, aplicando a Equação 12 na Equação 11, obtemos:

$$\mathcal{G}(r,\xi,t) = \frac{e^{-\frac{\gamma^2 + \xi^2}{(2+\theta)^2 \mathcal{D} t}}}{(2+\theta)(\xi t)^{\frac{N-2-\theta}{2}} \mathcal{D} t^{\frac{N-2-\theta}{2+\theta}}} I_{\frac{N-2-\theta}{2+\theta}} \left[\frac{2(\xi r)}{(2+\theta)^2 \mathcal{D} t} \right]$$

(13)

onde $I_\nu(x)$ é uma função de Bessel modificada (veja Figura 3). Observe que a expressão assintótica

para Equação 13, levando em conta um argumento grande para $I_\nu(x)$ é

$$\mathcal{G}(r,\xi,t) \sim \frac{(\xi r)^{\frac{2+\theta-2N}{4}}}{\sqrt{4\pi \mathcal{D} t}} e^{-\frac{\frac{2+\theta}{(r^2 - \xi^2)^2}}{(2+\theta)^2 \mathcal{D} t}},$$

(14)

o que nos lembra a forma assintótica de um propagador obtido quando consideramos uma difusão em um meio fractal. Nesta mesma direção a Equação 14 também pode ser considerada como uma extensão dos resultados assintóticos relatados por Metzler e Klafter (2000a) para modelos homogêneos e isotrópicos de caminhantes aleatórios. O comportamento assintótico para o segundo momento associado a este processo é $\langle r^2 \rangle \propto t^{2/(2+\theta)}$

quando consideramos tempos longos. Este resultado para o segundo momento nos mostra que podemos ter um comportamento subdifusivo, normal ou superdifusivo, desde que tenhamos $0 < \theta$, $\theta = 0$ ou $-2 < \theta < 0$.

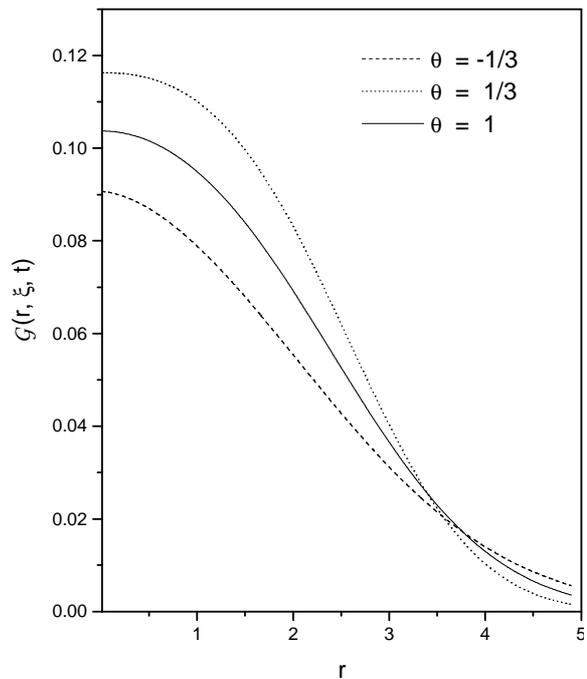


Figura 3. Comportamento de $\mathcal{G}(r,\xi,t)$ versus r para valores típicos de θ considerando, por simplicidade, $\gamma + \delta = 1$, $t = 1.0$, $\xi = 2.0$, $N = 3.0$ e $\mathcal{D} = 1.0$.

Neste ponto, prosseguiremos com nossa análise incorporando forças externas na Equação 1 e investigando quais são as modificações que tais forças externas produzem nas soluções encontradas acima. Para simplificar nossa análise, consideramos o coeficiente de difusão dado por $\mathcal{D}(r,t) = \mathcal{D} r^{-\theta} \delta(t)$. Vamos começar nossa discussão considerando a força externa $F(r) = \mathcal{K} r^\epsilon$ com $\epsilon = -1 - \theta$. Observe que neste caso não temos soluções estacionárias, assim

como no caso livre trabalhado acima. Aplicando estas considerações na Equação 1, obtemos.

$$\frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} \rho(r,t) = \frac{\mathcal{D}}{r^{\mathcal{N}-1}} \frac{\partial}{\partial r} \left\{ r^{\mathcal{N}-1-\theta} \frac{\partial}{\partial r} \rho(r,t) \right\} - \frac{\mathcal{K}}{r^{\mathcal{N}-1}} \frac{\partial}{\partial r} \left\{ r^{\mathcal{N}-1+\varepsilon} \rho(r,t) \right\} \quad (15)$$

Para estudar a Equação 15, consideramos primeiro uma condição de contorno definida em um intervalo finito, *i.e.*, $[0, a]$, e depois estendemos nossa condição de contorno para o caso semi-infinito. Seguindo o procedimento empregado acima e levando em consideração a condição de contorno $\rho(a,t)=0$, obtemos:

$$\rho(r,t) = \int_0^a d\xi \xi^{\mathcal{N}-1-\frac{\mathcal{K}}{\mathcal{D}}} \bar{\rho}(\xi) G(r,\xi,t)$$

$$G(r,\xi,t) = \frac{2+\theta}{a^{2+\theta}} \sum_0^\infty \xi^{\frac{1}{2}(2+\theta-\mathcal{N})+\frac{\mathcal{K}}{2\mathcal{D}} r^{\frac{1}{2}(2+\theta-\mathcal{N})+\frac{\mathcal{K}}{2\mathcal{D}}}} E_\gamma(-\mathcal{D}\lambda_n^2 t^\gamma)$$

$$\times J_{\nu'+1} \left(\frac{2\lambda_n a^{\frac{1}{2}(2+\theta)}}{2+\theta} \right) \times J_{\nu'} \left(\frac{2\lambda_n \xi^{\frac{2+\theta}{2}}}{2+\theta} \right) J_{\nu'} \left(\frac{2\lambda_n r^{\frac{2+\theta}{2}}}{2+\theta} \right) \quad (16)$$

com $\nu' = 2\sqrt{k'+k''}/(2+\theta)$ onde $k' = [\mathcal{N}-(2+\theta)]k/\mathcal{D}$ e $k'' = [\mathcal{N}-(2+\theta)-\mathcal{K}/\mathcal{D}]/2$ e o autovalor λ_n é obtido da equação $J_{\nu'} \left(\frac{2\lambda_n}{2+\theta} a^{\frac{2+\theta}{2}} \right) = 0$. Semelhante ao caso

livre, podemos estender o intervalo fazendo $a \rightarrow \infty$, o que modifica nossa condição de contorno para um intervalo semi-infinito. Neste caso, para obter a solução, precisamos usar

$$\rho(r,t) = \int_0^\infty dk \bar{C}(k,t) \Psi(r,t)$$

$$\Psi(r,k) = r^{\frac{1}{2}(2+\theta-\mathcal{N})+\frac{\mathcal{K}}{2\mathcal{D}}} J_{\nu'} \left(\frac{2kr^{\frac{2+\theta}{2}}}{2+\theta} \right) \quad (17)$$

onde $\bar{C}(k,t)$ é o núcleo a ser encontrado. Substituindo a Equação 8 na Equação 5, obtemos

$$\frac{d^\gamma}{dt^\gamma} \bar{C}(k,t) = -\mathcal{D}k^2 \bar{C}(k,t) \quad (18)$$

Resolvendo a Equação 18, encontramos $\bar{C}(k,0) = \bar{C}(k,0) E_\gamma(-k^2 \mathcal{D} t^\gamma)$ onde $\bar{C}(k,0)$ é determinado pela condição inicial. Usando a condição inicial $\rho(r,0) = \bar{\rho}(r)$, verificamos

$$\bar{C}(k,t) = \frac{2k}{2+\theta} \int_0^\infty d\xi \xi^{\mathcal{N}-1-\frac{\mathcal{K}}{\mathcal{D}}} \bar{\rho}(\xi) \Psi(\xi,k) \quad (19)$$

Assim, a solução é determinada por:

$$\rho(r,t) = \int_0^\infty d\xi \xi^{\mathcal{N}-1-\frac{\mathcal{K}}{\mathcal{D}}} \bar{\rho}(\xi) \Psi(\xi,k)$$

$$G(r,\xi,t) = \frac{2}{2+\theta} \int_0^\infty dk k \Psi(\xi,k) \Psi(r,k) E_\gamma(-k^2 \mathcal{D} t^\gamma) \quad (20)$$

Agora, analisaremos a solução que emerge da Equação 1 devido à presença de força externa $F(r) = -kr + \mathcal{K}r^\varepsilon$, com $\varepsilon = -1-\theta$, a condição de contorno $\rho(\infty,t) = 0$ e a condição inicial $\rho(r,0) = \bar{\rho}(r)$. Para obter a solução, expandimos $\rho(r,t)$ em termos de autofunções, *i.e.*, empregamos

$$\rho(r,t) = r^{-\theta} e^{\frac{kr^{2+\theta}}{(2+\theta)\mathcal{D}}} \sum_{n=0}^\infty \Psi_n(r) \Phi_n(t) \quad (21)$$

com $\Psi_n(r)$ (autofunção), determinado pela equação espacial $\Phi_n(t)$ e obtido da equação que envolve as variáveis temporais. Depois de alguns cálculos, é possível mostrar que

$$\Psi_n(r) = L_n^{(\alpha)} \left(\frac{kr^{2+\theta}}{(2+\theta)\mathcal{D}} \right)$$

$$\Phi_n(t) = \frac{(2+\theta)\Gamma(n+1)}{\Gamma\left(\frac{\mathcal{K}+\mathcal{N}\mathcal{D}}{(2+\theta)\mathcal{D}}+n\right)} \left(\frac{k}{(2+\theta)\mathcal{D}} \right)^{\frac{\mathcal{K}+\mathcal{N}\mathcal{D}}{(2+\theta)\mathcal{D}}} E_\gamma(-\lambda_n t^\gamma)$$

$$\times \int_0^\infty d\xi \xi^{\mathcal{N}-1} \bar{\rho}(\xi) L_n^{(\alpha)} \left(\frac{k\xi^{2+\theta}}{(2+\theta)\mathcal{D}} \right) \quad (22)$$

com $\alpha = \{(\mathcal{K} + \mathcal{N}\mathcal{D})/[(2+\theta)\mathcal{D}]\} - 1$, onde $L_n^{(\alpha)}(x)$ são associados aos polinômios de Laguerre $\lambda_n = (2+\theta)nk$ (veja Figuras 4 e 5). Este resultado estende o resultado encontrado por Metzler e Klafter (2000a) para uma força externa linear e para $\gamma=0$, $\mathcal{N}=1$ e $\theta=0$. Desta forma, recuperamos a solução para o processo Rayleigh apresentado por Gardiner (1996). Também é interessante notar que para este caso a solução é estacionária igual ao usual. Em particular, considerando para este caso o segundo momento, para simplificar, $\theta = \theta e \langle r^2 \rangle (0) = 0$ é determinado por $\langle r^2 \rangle = 2(\mathcal{N}\mathcal{D} + \mathcal{K}) t^\gamma E_{\gamma,\gamma+1}(-2kt^\gamma)$, onde $E_{\alpha,\beta}(x) = \sum_{n=0}^\infty x^n / \Gamma(\alpha n + \beta)$ é a função generalizada de Mittag-Leffler.

Resultados e discussão

Em resumo, investigamos as soluções para uma equação de difusão fracionária \mathcal{N} -dimensional com simetria radial. As soluções que obtivemos para esta equação levam em conta várias situações, tais como a ausência de forças externas, a presença de forças externas, a presença de variáveis espaciais e temporais no coeficiente de difusão e condições

decontorno definidas em um intervalo finito ou semi-infinito. Ressaltando a presença da função de Mittag-Leffler, que é uma extensão do usual da exponencial, nas soluções dependentes do tempo. Em particular, a presença desta função nas soluções que encontramos é uma consequência das mudanças produzidas na densidade de probabilidade de tempo de espera pela da derivada fracionária e pela dependência temporal no coeficiente de difusão. Fato este que pode ser verificado com o uso do formalismo de caminhantes aleatórios (Weiss, 1994). Através das figuras podemos observar, em comparação com o, caso usual, os efeitos de empregarmos este tipo de operadores nas equações de difusão. Estes efeitos se manifestam tanto na forma da distribuição (veja por exemplo a Figura 1) quanto no espalhamento da distribuição, que passa a ter um comportamento diferente do usual. A última consideração pode ser diretamente verificada a partir do segundo momento que foge do comportamento usual.

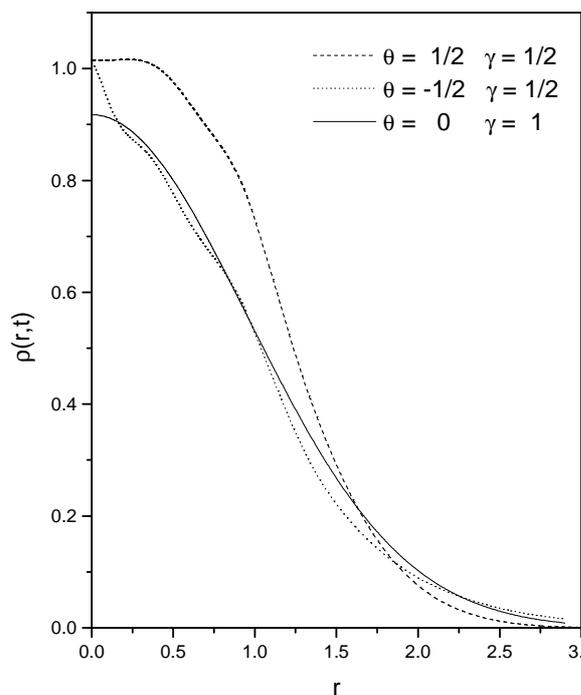


Figura 4. Comportamento de $\rho(r,t)$ versus r para valores típicos de θ e γ considerando, por simplicidade, $t = 1.0$, $k = 1$, $\mathcal{K} = 0$, $\mathcal{N} = 3.0$ e $\mathcal{D} = 1.0$ sujeito a condição inicial $\rho(r,0) = \delta(r-1)/r^{d-1}$.

Na Figura 2, ilustramos os efeitos devido à presença de um coeficiente de difusão que contém uma dependência espacial além da derivada fracionária presente na equação. Nesta figura, note que temos, em comparação com o caso usual, uma curva inferior correspondendo a $\theta = -1/2$ e outra

superior correspondendo a $\theta = 1/2$. As curvas para estes dois valores de θ correspondem a um processo superdifusivo e um processo subdifusivo respectivamente. Lembrando que em um processo superdifusivo temos um rápido espalhamento do sistema que está se difundindo. Por outro lado, no caso de um processo subdifusivo as partículas que compõem o sistema se espalham mais lentamente que um processo difusivo convencional. Observe que os pontos de máximo tanto, na Figura 1 como na Figura 2, são devidos à condição inicial que é dada ao sistema, outro fato que deve ser observado é que as curvas dessas figuras correspondem à nossa função de Green tomada em um determinado tempo. Desta forma, cabe ressaltar que as curvas deverão evoluir no tempo modificando-se e sendo absorvidas pela parede colocada em a devido à condição de Dirichlet $\rho(a,t) = 0$, imposta ao problema. No caso da Figura 3, consideramos apenas o efeito da presença de um coeficiente que depende da posição na equação de difusão. As curvas correspondem respectivamente a um processo superdifusivo ($\theta = -1/3$), normal ($\theta = 0$) e subdifusivo ($\theta = 1/3$) para um determinado tempo, conforme indicado na figura. As situações representadas nestas figuras não possuem uma solução estacionária, fato este devido à ausência de uma força externa capaz de a confinar a distribuição $\rho(r,t)$. Tal situação não ocorre, por exemplo, no caso em que temos uma força externa do tipo $F = -kr + \mathcal{K}r^{-1-\theta}$. É interessante observar que a solução estacionária para este caso é igual à solução que se obtém utilizando a equação de difusão usual. Nas Figuras 4 e 5, ilustramos o comportamento de $\rho(r,t)$, dado pela Equação 21, levando em conta a condição inicial $\rho(r,0) = \delta(r-1)/r^{d-1}$. Mais especificamente, na Figura 4 temos o comportamento de $\rho(r,t)$ versus r para alguns valores típicos dos parâmetros θ , \mathcal{K} , k , γ , \mathcal{N} e \mathcal{D} . Na Figura 5, consideramos a evolução temporal de $\rho(r,t)$ versus r e conforme havíamos mencionado acima a distribuição estacionária para a qual o sistema evolui é igual à obtida com a equação de difusão usual (veja Gardiner, 1996). Desta forma, a derivada provoca uma relaxação anômala em nossa solução até atingirmos a solução estacionária. Situação semelhante é verificada ao considerarmos a equação de difusão fracionária unidimensional na presença de uma força externa do tipo $F(x) = -kx$ (Klafter e Metzler, 2000a). Este rico cenário, conforme discutimos acima, nos possibilita a descrição de uma série de fenômenos relacionados a

processos difusivos anômalos, particularmente àqueles indicados por Hilfer (2000), Metzler e Klafter (2000a) e West *et al.* (2002) que se originam por mudanças na distribuição do tempo de espera levando-nos a um comportamento típico de um formalismo que emprega derivadas fracionárias. Finalmente, esperamos que os resultados obtidos aqui venham a ser úteis na investigação de sistemas que exibem difusão anômala.

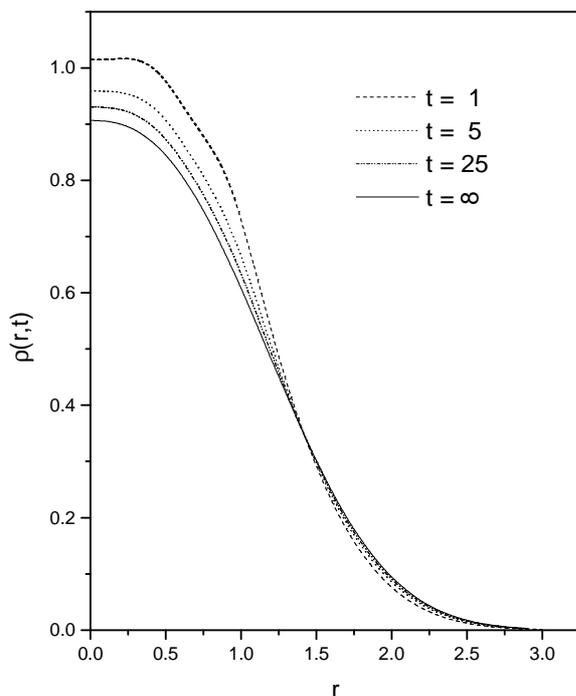


Figura 5. Evolução temporal de $\rho(r,t)$ versus r considerando, por simplicidade, $\gamma = 1/2$, $\theta = 1/2$, $k = 1$, $\mathcal{K} = 0$, $\mathcal{N} = 3.0$ e $\mathcal{D} = 1.0$ sujeito a condição inicial $\rho(r,0) = \delta(r-1)/r^{d-1}$.

Agradecimentos

Agradecemos à Fundação Araucária e ao CNPq pelo apoio financeiro.

Referências

- ACHAR, B. N. N.; HANNEKEN, J. W. Fractional radial diffusion in a cylinder. *J. Mol. Liq.*, Amsterdam, v. 114, p. 147-151, 2004.
- BARKAI, E.; SILBEY, R. J. Fractional Kramers equation. *J. Phy. Chem.* Washington, DC, v. 104, p.3866-3874, 2000.
- CAMPOS, D. *et al.* Description of diffusive and propagative behavior on fractals. *Physical Review*, New York, E, v.69, p.031115, 2004.
- CROTHERS, D.S.F. *et al.* The role of Mittag-Leffler functions in anomalous relaxation, *J. Mol. Liq.*, Amsterdam, v.114, p.27-34, 2004.
- DEL-CASTILLO-NEGRETE, D. *et al.* Front dynamics in reaction-diffusion systems with Levy flights: A fractional

diffusion approach. *Physical Review Letters*. New York, v. 91, p. 018-302, 2003.

DOUGLAS, J. F. Polymer Science Applications of Path-Integration, Integral Equations, and Fractional Calculus. In: HILFER, R. *Applications of Fractional Calculus in Physics*: Singapore: World Scientific, 2000. Cap. 5, p. 241-331.

EL-WAKIL, S. A. *et al.* Fractional (space-time) Fokker-Planck equation. *Chaos Solitons & Fractals*, Oxford, v. 12, p. 1035-1040, 2001a.

EL-WAKIL, S. A.; ZAHRAN, M. A., Fractional representation of Fokker-Planck equation. *Chaos Solitons & Fractals*, Oxford, v. 12, p. 1929-1935, 2001b.

FUJISAKA, H. *et al.* Chaos – Induced diffusion- Analogs to nonlinear Fokker-Planck equations, *Z. Nat. Forsch. A, J. Phys. Sci.*, Tubingen, v. 40, p. 867-873, 1985.

GARDINER, C. W. *Handbook of stochastic methods: for Physics, Chemistry and the Natural Sciences*. New York: Springer Series in Synergetics, 1996.

HILFER, R. *Applications of fractional calculus in Physics*: Singapore: World Scientific, 2000.

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

KUSNEZOV, D. *et al.* Quantum Levy processes and fractional kinetics. *Physical Review Letters*, New York, v. 82, p.1136-1139, 1999.

MAINARDI, F.; PAGNINI, G. The Wright functions as solutions of the time-fractional diffusion equation. *Applied Mathematics and Computation*, New York, v. 141, p. 51-62, 2003.

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

METZLER, R. *et al.* Deriving fractional Fokker-Planck equations from a generalized master equation. *Europhy. Lett.*, Paris, v. 46: p. 431-436, 1999b.

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

METZLER, R.; KLAFTER, J. Boundary value problems for fractional diffusion equations, *Physica A*, Amsterdam, v. 278: p. 107-125, 2000b.

O'SHAUGHNESSY, B.; PROCACCIA, I., Analytical Solutions for diffusion on fractal objects. *Physical Review Letters*, New York, v. 54: p. 455-458, 1985.

PLOTKIN, S.S.; WOLYNES, P.G. Non-Markovian configurational diffusion and reaction coordinates for protein folding. *Physical Review Letters*, New York, v.80, p. 5015-5018, 1998.

PODLUBNY, I. *Fractional differential equations*. San Diego: Academic Press, 1999.

REN, F. Y. *et al.* Nigmatullin, R. R., An anomalous diffusion model in an external force fields on fractals. *Physics Letters A*, v. 312, p.187-197, 2003.

RYABOV, Y. E., Behavior of fractional diffusion at the origin. *Physical Review E*, New York, v. 68, p. 030-102(R), 2003.

- SAIED, E. A. Anomalous diffusion on fractal objects: additional analytic solutions. *Chaos Solitons & Fractals*, Oxford, v. 11, p.1369-1376, 2000.
- SCHNEIDER, W.R.; WYSS W. Fractional Diffusion and Wave equations, *J. Math. Phys.*, New York, v. 30, p.134-144, 1989.
- SCHRIESSEL, H.; BLUMEN, A. Fractal aspects in polymer science. *Fractals*, Singapore, v. 3, p. 483-490, 1995.
- SCHIESSEL, H. et al. Applications to problems in Polymer Physics and Rheology. In: HILFER, R. *Applications of fractional calculus in Physics*. Singapore:World Scientific, 2000. Cap. 7, p. 331-376.
- SOKOLOV, I. M. et al. Ballistic versus diffusive pair dispersion in the Richardson regime. *Physical Review E*, New York, v. 61, p. 2717-2722, 2000.
- WEISS, G. H. *Aspects and applications of the Random Walk*: Amsterdam: North-Holland, 1994.
- WEST, B. J. et al. *Physics of fractal operators*. New York: Springer, 2002.
- ZASLAVSKY, G. M. Chaos, fractional kinetics, and anomalous transport. *Physics Report.*, v. 371, p. 461-580, 2002.

Received on March 26, 2004.

Accepted on October 18, 2004.