



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
DEPARTAMENTO DE FÍSICA – CCEN
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

HUGO DE ANDRADE ARAÚJO

SUPERDIFUSÃO EM ESPAÇOS FINITOS E DERIVADAS FRACIONÁRIAS

Recife
2017

HUGO DE ANDRADE ARAÚJO

SUPERDIFUSÃO EM ESPAÇOS FINITOS E DERIVADAS FRACIONÁRIAS

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para a obtenção do título de Doutor em Física.

Orientador:
Prof. Dr. Ernesto Carneiro Pessoa Raposo
Universidade Federal de Pernambuco

Recife
2017

Catálogo na fonte
Bibliotecária Joana D'Arc Leão Salvador CRB 4-572

A663s Araújo, Hugo de Andrade.
 Superdifusão em espaços finitos e derivadas fracionárias / Hugo de
 Andrade Araújo. – 2017.
 100 f.: fig.

 Orientador: Ernesto Carneiro Pessoa Raposo.
 Tese (Doutorado) – Universidade Federal de Pernambuco. CCEN.
 Física, Recife, 2017.
 Inclui referências e apêndice.

 1. Física estatística. 2. Caminhadas aleatórias. 3. Derivadas
 fracionárias. 4. Equação de difusão. I. Raposo, Ernesto Carneiro Pessoa
 (Orientador). II. Título.

530.1595

CDD (22. ed.)

UFPE-FQ 2017-14

HUGO DE ANDRADE ARAÚJO

SUPERDIFUSÃO EM ESPAÇOS FINITOS E DERIVADAS FRACIONÁRIAS

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para a obtenção do título de Doutor em Física.

Aprovada em: 31/01/2017.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Ernesto Carneiro Pessoa Raposo
Orientador
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Dr. Marcelo Andrade de Filgueiras Gomes
Examinador Interno
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Dr. Maurício Domingues Coutinho Filho
Examinador Interno
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Dr. Fernando Jorge Sampaio Moraes
Examinador Externo
Universidade Federal Rural de Pernambuco

Prof. Dr. Madras Viswanathan Gandhi Mohan
Examinador Externo
Universidade Federal de Rio Grande do Norte

Para Josely

Agradecimentos

A meu orientador, Ernesto Raposo, por me ensinar tanto, e além disso, ser, para mim, um grande exemplo de profissionalismo e senso crítico. Agradeço ainda pela enorme paciência e compreensão sempre dispensada.

À minha família, que tentou sempre me ajudar em momentos de dificuldade e pela torcida.

À minha amada, Josely Leônidas, que vibrou com minhas conquistas, que torceu, que sempre me apoiou, sempre me fazendo sentir capaz e especial. Obrigado por todo carinho esse tempo todo.

Aos meus amigos do DF, Leonardo Medeiros, Rodrigo Azevedo, René Montenegro, Eglânio Pessoa, Tiago Araújo, Thiago Sobral, Tiago Saraiva, Tiago Anselmo, Joana Callado, Marcos George, Matheus Sarmento, Luiz Silva, Mario Rocha e Plínio Ribeiro que compartilharam tantos momentos de dificuldade, em disciplinas, na pesquisa, e pudemos sempre trocar experiências e nos ajudar mutuamente.

A todos da Associação de Kendo do Recife, minha segunda casa, onde aprendi de verdade o que é dedicação. Luís César, Gustavo Gouveia, Josely Leônidas, Júlio Campos, Rodrigo Azevedo, Anderson Lopes, Antônio Paim, Cléber Moraes, Fábio Géber, Ricardo Neves, Agnes Pauli, Filipy Galiza, Luiz Thiago, Márcio Medeiros e Irenilda Medeiros, meu muito obrigado. Vocês não imaginam como me ajudaram.

Resumo

Esta tese tem como objetivo a investigação teórica das propriedades estatísticas de um caminhante aleatório cuja distribuição de passos é dada pela distribuição α -estável de Lévy. Este tipo de distribuição possui um comportamento assintótico do tipo lei de potência, $P(\ell) \sim \ell^{-\mu}$, $\ell \gg 1$, que gera uma divergência de momentos, a depender do expoente $\mu = \alpha + 1$ da distribuição, e introduz superdifusão no sistema. Inicialmente, revisitamos a solução da equação de difusão escrita em termos de derivadas fracionárias, visto que a equação de difusão convencional não consegue modelar sistemas subdifusivos ou superdifusivos. Obtemos a probabilidade $P(x, t)$ de encontrar o caminhante em uma posição x no tempo t em termos das funções de Fox. Em seguida, mostramos como a solução para o espaço finito, com barreiras absorventes, muitas vezes obtida pelo Método das Imagens, viola o teorema de Sparre-Andersen. Abordamos então o problema de difusão anômala em espaços finitos via equações mestras, método anteriormente utilizado para o caso semi-infinito. Calculamos a taxa de sobrevivência do caminhante de Lévy e mostramos a mudança do comportamento da taxa de sobrevivência em seu limite de tempos longos. Finalmente, observamos que para duas barreiras ela apresenta um decaimento exponencial, enquanto que no limite de uma barreira obtemos a dependência do tipo lei de potência, como estabelecido pelo teorema de Sparre-Andersen.

Palavras-chaves: Difusão Anômala. Caminhante Aleatório. Derivadas Fracionárias

Abstract

This thesis has as objective the theoretical investigation of the statistical properties of a random walker whose step distribution is given by the Lévy α -stable distribution. This type of distribution has an asymptotic power law behavior, $P(\ell) \sim \ell^{-\mu}$, $\ell \gg 1$, which generates a divergence of moments depending on the exponent $\mu = \alpha + 1$ of the distribution, and introduces superdiffusion into the system. Initially, we revisit the solution of the diffusion equation in terms of fractional derivatives, since the conventional diffusion equation cannot model subdiffusive or superdiffusive systems. We obtain the probability $P(x, t)$ of finding the walker in a position x in time t in terms of Fox's functions. We also show how the solution in finite space with absorbent barriers, often obtained by Image's Method, violates Sparre-Andersen's theorem. We then address the problem of anomalous diffusion in a finite space via the master equation, a method previously used for the semi-infinite case. We calculate the survival rate of the Lévy walker and show the change in the behavior of the survival rate in the long time limit. Finally, we observe that for two barriers it presents an exponential decay, whereas in the limit case of a single barrier we obtain the power-law dependence, as established by Sparre-Andersen's theorem.

Keywords: Anomalous Diffusion. Random Walker. Fractional Derivatives

Lista de ilustrações

Figura 1 – Gráficos da distribuição de Lévy para $\alpha = 1/2, 1, 3/2, 2$ e $\beta = 0$	22
Figura 2 – Gráficos da distribuição de Lévy para $\alpha = 3/2$ e $\beta = -1, 0, 1$	22
Figura 3 – Comparação da distribuição de Lévy, curva contínua, com o seu limite assintótico dado pela Eq. (1.60), curva tracejada, para $\alpha = 1/2, 1, 3/2$ e $\beta = 0$	23
Figura 4 – Gráfico esquemático de uma CTRW: as linhas contínuas representam os deslocamentos espaciais do caminhante aleatório, enquanto as linhas tracejadas ilustram o tempo de espera.	34
Figura 5 – Gráfico da probabilidade $P(x, t)$, dada pela Eq. (2.63), em função do tempo para $\alpha = 1$, que representa o limite da equação de difusão normal, para $t = 0.05, 0.2, 1$, e $\alpha = 1/2$ para $t = 0.1, 1, 10$, ambos utilizando $K_\alpha = 1$	43
Figura 6 – Comparação da probabilidade $P(x, t)$ dada pela Eq. (2.63) para diversos valores de α em $t = 1$ com $K_\alpha = 1$	44
Figura 7 – Gráfico da probabilidade $P(x, t)$ dada pela Eq. (2.75), em função do tempo para $\alpha = 1$ e $\alpha = 3/2$, para $t = 1, 5, 10$, ambos utilizando $K_\alpha = 1$	47
Figura 8 – Comparação das probabilidade $P(x, t)$ para $t = 10$ dadas pela Eq. (2.75) para diversos valores de α utilizando $K_\alpha = 1$	48
Figura 9 – Esquema da movimentação de um caminhante aleatório em um espaço semi-infinito com barreira absorvente. A caminhada inicia em $x = x_0$ e o caminhante é absorvido pela barreira se passa para o semi-eixo negativo.	53
Figura 10 – Gráfico da probabilidade $P^{(1)}(x, t)$ para o caso difusivo, dada pela Eq. (3.39), para $t = 1, 10, 20$ e $x_0 = 5$. A barreira absorvente está localizada em $x = 0$	54
Figura 11 – Gráfico da probabilidade $P^{(1)}(x, t)$ para o caso difusivo, dada pela Eq. (3.39) $t = 1$ e $x_0 = 1, 5, 10$. A barreira absorvente está localizada em $x = 0$	55
Figura 12 – Gráfico da probabilidade $P^{(1)}(x, t)$ para o caso subdifusivo dado pela Eq. (3.40) para $\alpha = 1/2$ e $x_0 = 1$, para vários $t = 0.2, 2, 20$. A barreira absorvente está localizada em $x = 0$	56
Figura 13 – Gráfico da probabilidade $P^{(1)}(x, t)$ para o caso subdifusivo dado pela Eq. (3.40) para $\alpha = 1/4, 1/2, 3/4, 1$, $x_0 = 1$ e $t = 1$. A barreira absorvente está localizada em $x = 0$	57

Figura 14 – Gráfico da probabilidade $P^{(1)}(x,t)$ para o caso superdifusivo dado pela Eq. (3.41) para $\alpha = 3/2$, $x_0 = 1$ e $t = 1, 2, 5$. A barreira absorvente está localizada em $x = 0$	58
Figura 15 – a probabilidade $P^{(1)}(x,t)$ para o caso superdifusivo dado pela Eq. (3.41) para $x_0 = 1$, $t = 1$ e $\alpha = 1,3/2$. A barreira absorvente está localizada em $x = 0$	59
Figura 16 – Esquema da movimentação de um caminhante aleatório em um espaço finito com barreira absorvente. A caminhada inicia em $x = x_0$ e o caminhante é absorvido pela barreira em $x = 0$ se passa para o semi-eixo negativo e pela barreira em $x = a$ se um passo o leva a uma posição $x > a$	60
Figura 17 – Gráfico da probabilidade $P^{(2)}(x,t)$ para o caso difusivo dada pela Eq. (3.51) para $t = 1$, $a = 10$ e $x_0 = 2, 5$ e 8 . As barreiras absorventes estão localizadas em $x = 0$ e $x = a$	63
Figura 18 – Gráfico da probabilidade $P^{(2)}(x,t)$ para o caso difusivo dada pela Eq. (3.51) para $a = 10$, $x_0 = 5$ e $t = 1, 5$ e 15 . As barreiras absorventes estão localizadas em $x = 0$ e $x = a$	63
Figura 19 – Gráfico da probabilidade $P^{(2)}(x,t)$ para o caso subdifusivo dada pela Eq. (3.52) para $a = 10$, $\alpha = 1/2$, $t = 1$ e $x_0 = 2, 5$ e 8 . As barreiras absorventes estão localizadas em $x = 0$ e $x = a$	65
Figura 20 – Gráfico da probabilidade $P^{(2)}(x,t)$ para o caso subdifusivo dada pela Eq. (3.52) para $a = 10$, $\alpha = 1/2$, $x_0 = 5$ e $t = 1, 5$ e 15 . As barreiras absorventes estão localizadas em $x = 0$ e $x = a$	65
Figura 21 – Gráfico da probabilidade $P^{(2)}(x,t)$ para o caso superdifusivo dada pela Eq. (3.53) para $a = 10$, $\alpha = 1$, $t = 1$ e $x_0 = 2, 5$ e 8 . As barreiras absorventes estão localizadas em $x = 0$ e $x = a$	66
Figura 22 – Gráfico da probabilidade $P^{(2)}(x,t)$ para o caso superdifusivo dada pela Eq. (3.53) para $a = 10$, $\alpha = 1$, $x_0 = 5$ e $t = 1, 2$ e 5 . As barreiras absorventes estão localizadas em $x = 0$ e $x = a$	67
Figura 23 – Representação da movimentação de um caminhante aleatório em um espaço finito com barreiras absorventes. No exemplo mostrado, o caminhante inicia o seu percurso na origem e é absorvido pela barreira da esquerda, uma vez que o seu terceiro passo o levaria para uma posição $x < -x_0$	73
Figura 24 – Representação do contorno Γ , utilizado para a integração no plano complexo definida na Eq. (4.13). Imagem retirada de (43)	75
Figura 25 – Taxa de sobrevivência para o caso Cauchy, $\alpha = 1$, para $L = 10^2$ (a) e $L = 10^3$ (b), posição inicial $x_0/L = 0,002, 0,02, 0,1$ e $b = 1$. O ajuste é realizado com $1/\tau = 2,31/L$	80

Figura 26 – Taxa de sobrevivência para o caso gaussiano $\alpha = 2$. Os resultados em (a) são obtidos para $L = 10^2$, posição inicial $x_0/L = 0.01, 0.1, 0.2$ e $\sigma = 1$. O comportamento exponencial é verificado com o parâmetro de ajuste $\tau^{-1} = 9.55/L^2$. Os resultados em (b) são obtidos para $L = 10^3$, $x_0/L = 5 \times 10^{-5}, 5 \times 10^{-4}$ e $\sigma = 1$. A Eq. (4.54) é representada em linhas tracejadas.	84
Figura 27 – Integrais $I_{n,\alpha}(x)$ em função de n . Note o decaimento monotônico com n , representado para $\alpha = 0.5, 1.0, 1.5, 2.0$, e $x = 1$. No detalhe, vemos o limite $I_{n,\alpha}(x \rightarrow \infty) = \pi$	87
Figura 28 – Comparação dos resultados para $\ln[Q(\omega = 0, z)]$ dado pela equação exata, Eq. (4.76), e pela aproximação que usamos nesta tese, Eq. (4.19).	92

Sumário

1	INTRODUÇÃO	12
1.1	Equações de Fokker-Planck e Difusão	14
1.1.1	Solução da Equação de Fokker-Planck	16
1.1.2	Difusividade	17
1.2	Teorema do Limite Central	18
1.3	Teorema do Limite Central Generalizado	20
1.4	Cálculo Fracionário	23
1.4.1	Derivadas Fracionárias	24
1.4.1.1	Derivada de Riemann-Liouville	25
1.4.1.2	Derivada de Caputo	28
1.4.1.3	Derivada de Riesz	31
1.5	Sumário das Definições de Derivada Fracionária	33
2	EQUAÇÃO DE DIFUSÃO FRACIONÁRIA	34
2.1	Da CTRW à Equação de Difusão Fracionária	34
2.1.1	Caso Difusivo	36
2.1.2	Caso Subdifusivo	38
2.1.3	Caso Superdifusivo	40
2.2	Solução dos Casos Subdifusivo e Superdifusivo	41
2.2.1	Caso Subdifusivo	41
2.2.2	Caso Superdifusivo	44
3	DIFUSÃO COM CONDIÇÕES DE CONTORNO	49
3.1	Funções de Green e Método das Imagens	49
3.1.1	Uma Barreira Absorvente	52
3.1.2	Duas Barreiras Absorventes	60
3.2	Taxa de Sobrevivência	68
3.2.1	Caso Subdifusivo	68
3.2.2	Caso Superdifusivo	69
3.3	Teorema de Sparre-Andersen e Validade das Soluções	70
4	TAXA DE SOBREVIVÊNCIA PARA ESPAÇOS FINITOS	72
4.1	Difusão para Espaços Finitos	72
4.1.1	Distribuição de Cauchy: $\alpha = 1$	77
4.1.2	Distribuição Gaussiana: $\alpha = 2$	81
4.1.2.1	Duas barreiras acessíveis: $x_0 \ll \sigma, L > \sigma, L \gg x_0$	81

4.1.2.2	Uma barreira acessível: $x_0 \ll \sigma \ll L$	82
4.1.3	Caso geral: $0 < \alpha < 2$	85
4.1.3.1	Limite assintótico para duas barreiras	86
4.1.3.2	Limite de uma barreira	86
4.2	Validade da Solução via Equações Mestras	89
5	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	93
	Referências	95
	APÊNDICE A – FUNÇÃO H DE FOX	99

1 Introdução

Na Física, diversos fenômenos não podem ser descritos de maneira exata. Por diversas vezes, não conseguimos ter acesso a informações que nos permitam caracterizar completamente o sistema ou ainda, podemos estar trabalhando com sistemas com muitos componentes de modo que o grande número de graus de liberdade torna impraticável analisar o sistema. Para contornar essa situação, técnicas da Estatística são empregadas para tratar esse tipo de sistema e descrever suas propriedades médias. Um exemplo clássico é o emprego de caminhantes aleatórios para modelar gases e assim obter diversas propriedades termodinâmica, por exemplo, temperatura e pressão, como função da velocidade média das moléculas que o compõem (1).

Caminhante aleatório é a denominação para um modelo onde a movimentação dos componentes do sistema é realizada através de distribuições de probabilidade que regem a direção e/ou tamanho do deslocamento e em alguns casos, o tempo entre um passo e outro. Uma aplicação desse modelo é o estudo da difusão, que é o estudo do transporte de um material através de um meio. Aqui, a densidade de matéria obedece a chamada equação de difusão que pode ser relacionada com a probabilidade de encontrar um caminhante aleatório em uma dada posição e em um dado tempo (2).

Voos e caminhadas de Lévy, tipos particulares de caminhante aleatório, têm sido aplicados para modelar a difusão anômala, caracterizada por uma difusão "mais lenta" ou "mais rápida" que o usual. Definiremos mais precisamente estes termos a seguir. Este tipo de processo está presente em uma série de fenômenos, como o movimento de partículas em escoamento irregular de fluidos, dinâmica de polímeros, movimento de grãos em pilhas de criticalidade auto-organizada, generalizações do modelo de Drude, movimentação de animais em busca de alimentos, óptica quântica e espectroscopia (3, 4). Estes modelos de caminhadas aleatórias são caracterizados pela presença de uma distribuição de "longa cauda" que permite a alternância entre alguns raros saltos muito longos e um grande número de saltos curtos. Esta característica pode levar a uma divergência do segundo momento da distribuição e à emergência de comportamentos superdifusivos. Processos regidos por distribuições com segundo momento divergente convergem para a distribuição de Lévy α -estável após um grande número de passos, conforme o Teorema do Limite Central generalizado (5, 6). Lembramos que processos com segundo momento finito convergem para a distribuição Gaussiana, conforme o Teorema do Limite Central, e possuem um comportamento difusivo (1). O grau de superdifusão nos processos de Lévy é governado pelo índice de Lévy, $0 < \alpha < 2$, com o limite gaussiano sendo obtido para o valor limite $\alpha = 2$ (7).

É possível diferenciar os voos das caminhadas de Lévy por uma simples propriedade. No primeiro, a duração dos passos independe do seu comprimento, estando associado

com uma “velocidade infinita” do caminhante. Já no segundo os passos são realizados com velocidade finita, geralmente considerada constante. Esta diferença aparentemente sutil gera uma correlação espaço-temporal nas propriedades das caminhadas de Lévy. Nesse caso, sabemos que, para um intervalo de tempo Δt , o caminhante em duas dimensões estará dentro de um círculo de raio $v\Delta t$, onde o centro do círculo é sua posição inicial e v sua velocidade (8). Deste modo, o segundo momento de uma caminhada de Lévy só diverge no limite de tempo infinito se ele estiver no espaço livre, sem barreiras (8). Entretanto, quando restrito a um domínio finito, os processos de Lévy (voos ou caminhadas) mostram um comportamento superdifusivo limitado pelo tamanho do domínio que, neste caso, pode ser atingido em um tempo finito (7, 9). Como exemplos, citamos que processos de Lévy têm sido utilizados para modelar diversos fenômenos de transporte e sistemas econômicos (4, 10). Para o caso de uma caminhada aleatória realizada entre barreiras absorventes, uma quantidade importante é a taxa de sobrevivência, ou seja, a probabilidade de que o caminhante aleatório permaneça ativo (não absorvido) após um tempo t ou após um dado número de passos (11). Curiosamente, o comportamento assintótico desta quantidade para tempos longos depende mais das condições de contorno associadas à presença de uma ou mais barreiras, distância até o início da caminhada, etc., do que propriamente do índice de Lévy α . Por exemplo, para um espaço semi-infinito unidimensional, a taxa de sobrevivência para voos de Lévy simétricos tem um comportamento assintótico do tipo lei de potência com o número n de passos na forma $1/\sqrt{n}$, independentemente do valor de α , como veremos a seguir. Este resultado é conhecido como o teorema de Sparre-Andersen (12, 13, 10). A importância de se calcular esta quantidade também se dá pela sua relação com o tempo médio de primeira passagem pelos sítios da fronteira, que corresponde ao número médio de passos e ao comprimento médio da caminhada para voos e caminhadas de Lévy, respectivamente (11).

Nesta tese, nós focaremos no estudo de caminhantes de Lévy unidimensionais com barreiras absorventes. Vamos discutir algumas das técnicas utilizadas para abordar este problema, como o Método de Wiener-Hopf, equações mestras e derivadas fracionárias, estas últimas discutidas já no presente capítulo. Mostraremos a ocorrência de uma transição do comportamento exponencial da taxa de sobrevivência no caso de espaço finito para o comportamento do tipo lei de potência no espaço semi-infinito. Apesar de em diversos fenômenos as caminhadas aleatórias ocorrerem em duas ou três dimensões (14, 15), esse tipo de processo é de difícil tratamento analítico e numérico possuindo alguns resultados aproximados (16).

Este capítulo constitui, portanto, de uma revisão da equação de Fokker-Planck canônica e também de suas versões utilizando derivadas fracionárias. A principal intenção aqui é preparar o terreno para a abordagem do problema via equações diferenciais.

1.1 Equações de Fokker-Planck e Difusão

Iniciamos nossa discussão considerando a equação canônica de Fokker-Planck, a qual veremos estar conectada à dinâmica normal (difusiva ou browniana) de um caminhante aleatório.

Consideremos inicialmente o problema clássico do movimento browniano, em que uma partícula se difunde devido às flutuações térmicas associadas aos choques com outras partículas geralmente de menor extensão. O nosso objetivo a seguir é calcular como a probabilidade $P(x,t)dx$ de encontrar esta partícula em uma posição entre x e $x + dx$ varia no tempo t . Vamos assumir que $P(x,t)$ pode ser completamente determinada sabendo que, num tempo t_0 anterior, a partícula encontrava-se na posição x_0 . Em outras palavras, escrevemos que

$$P(x,t)dx = P(x,t|x_0,t_0)dx = P(x,s|x_0)dx, \quad s \equiv t - t_0. \quad (1.1)$$

A mudança $t \rightarrow s$ acima é feita uma vez que, como não existe dependência com a origem temporal do sistema, então $P = P(x,s)$. Ou seja, vamos calcular a probabilidade de encontrar a partícula em uma posição x sabendo que, em s unidades de tempo anteriores, ela se encontrava em uma posição x_0 . Notamos ainda que para um intervalo de tempo $\tau > s$ a variação na densidade de probabilidade P é igual ao decréscimo devido a partículas no intervalo $[x, x + dx]$ que mudam para o intervalo $[x_1, x_1 + dx_1]$ somadas ao acréscimo dado por partículas no intervalo $[x_1, x_1 + dx_1]$ que mudam para $[x, x + dx]$. Temos então que

$$\begin{aligned} \frac{\partial P}{\partial s} \tau \cdot dx &= - \int_{x_1} P(x,s|x_0)dx \cdot P(x_1,\tau|x)dx_1 + \int_{x_1} P(x,\tau|x_1)dx \cdot P(x_1,s|x_0)dx_1 \\ &= -P(x,s|x_0)dx \int_{x_1} P(x_1,\tau|x)dx_1 + dx \int_{x_1} P(x,\tau|x_1)P(x_1,s|x_0)dx_1, \end{aligned} \quad (1.2)$$

de modo que

$$\frac{\partial P}{\partial s} \tau = -P(x,s|x_0) \underbrace{\int_{x_1} P(x_1,\tau|x)dx_1}_{=1, \text{ por normalização}} + \int_{x_1} P(x,\tau|x_1)P(x_1,s|x_0)dx_1, \quad (1.3)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{\partial P}{\partial s} \tau &= -P(x,s|x_0) + \int_{-\infty}^{\infty} P(x,\tau|x_1)P(x_1,s|x_0)dx_1 \quad x_1 = x - \xi \\ &= -P(x,s|x_0) - \int_{\infty}^{-\infty} P(x,\tau|x - \xi)P(x - \xi,s|x_0)d\xi. \end{aligned} \quad (1.4)$$

Expandindo em seguida o integrando em série de Taylor, obtemos

$$P(x - \xi,s|x_0)P(x,\tau|x - \xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\xi)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial x^n} [P(x,s|x_0)P(x + \xi,\tau|x)]. \quad (1.5)$$

Daí ficamos com

$$\begin{aligned}\frac{\partial P}{\partial s}\tau &= -P(x,s|x_0) + \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\xi)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial x^n} [P(x,s|x_0)P(x+\xi,\tau|x)] d\xi, \\ &= -P(x,s|x_0) + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial x^n} \left[\int_{-\infty}^{\infty} P(x,s|x_0)P(x+\xi,\tau|x)\xi^n d\xi \right],\end{aligned}\quad (1.6)$$

que leva a

$$\begin{aligned}\frac{\partial P}{\partial s}\tau &= -P(x,s|x_0) + \underbrace{P(x,s|x_0) \int_{-\infty}^{\infty} P(x+\xi,\tau|x) d\xi}_{=1, \text{ por normalização}} \\ &\quad + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial x^n} \left[\int_{-\infty}^{\infty} P(x,s|x_0)P(x+\xi,\tau|x)\xi^n d\xi \right]\end{aligned}\quad (1.7)$$

e

$$\begin{aligned}\frac{\partial P}{\partial s} &= \frac{1}{\tau} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial x^n} \left[P(x,s|x_0) \int_{-\infty}^{\infty} P(x+\xi,\tau|x)\xi^n d\xi \right] \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial x^n} [P(x,s|x_0)M_n].\end{aligned}\quad (1.8)$$

Aqui, definimos

$$M_n \equiv \frac{1}{\tau} \int_{-\infty}^{\infty} P(x+\xi,\tau|x)\xi^n d\xi = \frac{\langle (\Delta x)^n \rangle}{\tau}. \quad (1.9)$$

Pode-se mostrar (1) que, quando $\tau \rightarrow 0$, ou seja, considerando um intervalo curto entre colisões, então $\langle (\Delta x)^n \rangle \rightarrow 0$ mais rápido do que τ para $n > 2$. Vamos então utilizar apenas os dois primeiros termos no somatório acima, de modo que

$$\frac{\partial P}{\partial s} = -\frac{\partial}{\partial x} [M_1 P(x,s|x_0)] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [M_2 P(x,s|x_0)]. \quad (1.10)$$

Para os coeficientes M_1 e M_2 temos

$$\begin{aligned}M_1 &= \frac{\langle \Delta x \rangle}{\tau} = \frac{1}{\tau} \langle x - x_1 \rangle = \frac{1}{\tau} \langle x(t+\tau) - x(t) \rangle \\ &= \left\langle \frac{\partial x}{\partial t} \right\rangle = \langle v \rangle\end{aligned}\quad (1.11)$$

e

$$\begin{aligned}M_2 &= \frac{\langle (\Delta x)^2 \rangle}{\tau} = \frac{1}{\tau} \langle (x - x_1)^2 \rangle = \frac{1}{\tau} \langle x^2 + x_1^2 - 2xx_1 \rangle \\ &= \frac{1}{\tau} \langle x^2(t+\tau) + x^2(t) - 2x(t+\tau)x(t) \rangle \\ &= \frac{1}{\tau} \left\langle x^2(t+\tau) + x^2(t) - 2x(t) \left[x(t) + \tau \frac{\partial x}{\partial t} \Big|_t \right] \right\rangle \\ &= \frac{1}{\tau} \left\langle x^2(t+\tau) - x^2(t) - 2x(t) \left[\tau \frac{\partial v}{\partial t} \Big|_t \right] \right\rangle.\end{aligned}\quad (1.12)$$

Por outro lado, podemos realizar também a seguinte manipulação:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \sigma^2}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} \langle (x - \bar{x})^2 \rangle = \left\langle \frac{\partial}{\partial t} [x^2 - 2x\bar{x} + \bar{x}^2] \right\rangle = \left\langle \frac{\partial x^2}{\partial t} - 2\bar{x} \frac{\partial x}{\partial t} + \underbrace{\frac{\partial \bar{x}^2}{\partial t}}_{=0} \right\rangle \\
 &= \left\langle \frac{1}{\tau} [x^2(t + \tau) - x^2(t)] - \frac{2\bar{x}}{\tau} [x(t + \tau) - x(t)] \right\rangle \\
 &= \frac{1}{\tau} \langle [x^2(t + \tau) - x^2(t)] \rangle - \frac{2\bar{x}}{\tau} \left\langle [x(t) + \tau \frac{\partial x}{\partial t} \Big|_t - x(t)] \right\rangle \\
 &= \frac{1}{\tau} \langle x^2(t + \tau) - x^2(t) \rangle - 2\bar{x} \frac{\partial x}{\partial t} \Big|_t = M_2.
 \end{aligned} \tag{1.13}$$

Os resultados acima permitem a interpretação das quantidades M_1 e M_2 . De fato, M_1 é comumente chamado de coeficiente de difusão, estando associada a uma força F externa ao sistema, tal como, por exemplo, a força de atrito ou a viscosidade. Já a grandeza M_2 é chamada de coeficiente de difusão, D , e conecta-se com a dinâmica da variância no tempo. Com estas considerações, a Eq. (1.10) torna-se

$$\frac{\partial P}{\partial s} = -\frac{\partial}{\partial x} [F(x) P] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [D(x) P]. \tag{1.14}$$

Se usarmos o fato que $ds = dt$, chegamos à forma mais conhecida da equação de Fokker-Planck (1):

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} [F(x) P] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [D(x) P]. \tag{1.15}$$

Observamos acima que se fizermos $F = 0$ obtemos a famosa equação de difusão:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [D(x) P]. \tag{1.16}$$

1.1.1 Solução da Equação de Fokker-Planck

A solução geral da equação de Fokker-Planck, Eq. (1.15), para os casos de barreiras absorventes e reflexivas, pode ser encontrada em (17). Vamos resolver a seguir o caso em que F e D são constantes,

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -F \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{D}{2} \frac{\partial^2 P}{\partial x^2}, \tag{1.17}$$

submetido às condições de contorno,

$$P(x, t = 0) = \delta(x - x_0), \quad P(x = \pm\infty, t) = 0. \tag{1.18}$$

Tirando a transformada de Laplace da Eq. (1.17), temos

$$sP(x, s) - P(x, 0) = -F \frac{\partial P(x, s)}{\partial x} + \frac{D}{2} \frac{\partial^2 P(x, s)}{\partial x^2}, \tag{1.19}$$

$$sP(x,s) - \delta(x - x_0) = -F \frac{\partial P(x,s)}{\partial x} + \frac{D}{2} \frac{\partial^2 P(x,s)}{\partial x^2}. \quad (1.20)$$

Aplicando agora a transformada de Fourier, obtemos

$$sP(k,s) - e^{-ikx_0} = -FikP(k,s) + \frac{D(ik)^2}{2} P(k,s). \quad (1.21)$$

Logo,

$$P(k,s) = \frac{e^{-ikx_0}}{s + Fik + \frac{Dk^2}{2}}. \quad (1.22)$$

Utilizando as transformadas,

$$F(s) = \frac{1}{s+a} \longleftrightarrow f(t) = e^{-at}, \quad (1.23)$$

e

$$F(k) = e^{-iak-bk^2} \longleftrightarrow f(x) = \frac{e^{-(x-a)^2/(4b)}}{2\sqrt{\pi b}}. \quad (1.24)$$

Temos que,

$$P(x,t) = \frac{e^{-(x-(x_0+ Ft))^2/(2Dt)}}{\sqrt{2\pi Dt}}. \quad (1.25)$$

1.1.2 Difusividade

A equação canônica de Fokker-Planck possui uma característica importante: as soluções $P(x,t)$ acima são difusivas no sentido de que $\langle x^2(t) \rangle \sim t$, conforme esperado para um caminhante aleatório browniano.

Para demonstrar este fato, inicialmente multiplicamos a Eq. (1.17) por x^2 e em seguida integramos, temos que

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 \frac{\partial P}{\partial t} dx = -F \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \frac{\partial P}{\partial x} dx + \frac{D}{2} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} dx, \quad (1.26)$$

ou ainda,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle x^2(t) \rangle}{\partial t} = \frac{D}{2} \left\{ x^2 \frac{\partial P}{\partial x} \Big|_{-\infty}^{\infty} - 2xP \Big|_{-\infty}^{\infty} + 2 \int_{-\infty}^{\infty} dx P(x,t) \right\} \\ + F \left\{ x^2 P \Big|_{-\infty}^{\infty} + 2 \int_{-\infty}^{\infty} xP(x,t) dx \right\}. \end{aligned} \quad (1.27)$$

Admitindo que $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} x^2 P(x,t) = 0 = \lim_{x \rightarrow \pm\infty} x^2 \frac{\partial P}{\partial x}$, ou seja, que $\langle x \rangle$ e $\langle x^2 \rangle$ são bem definidos, então

$$\frac{\partial \langle x^2(t) \rangle}{\partial t} = D + 2F \langle x(t) \rangle. \quad (1.28)$$

Observamos que se a partícula se difunde num ambiente homogêneo, $P(x,t)$ é uma função par e $\langle x \rangle$ é zero. Logo,

$$\langle x^2(t) \rangle = Dt, \quad (1.29)$$

como esperado.

1.2 Teorema do Limite Central

A solução para a equação de Fokker-Planck dada pela Eq. (1.25) para o caso $F = 0$ é

$$P(x,t) = \frac{e^{-(x-x_0)^2/(2Dt)}}{\sqrt{2\pi Dt}}. \quad (1.30)$$

Esta é uma distribuição gaussiana (1), com uma variância $\sigma^2 = Dt$. Sabemos que a distribuição gaussiana ocorre em diversos fenômenos na natureza (7, 1). Esta ocorrência se deve principalmente ao Teorema do Limite Central. Este teorema garante que a soma de um grande número de variáveis aleatórias, com média e variância finitas, é distribuída de acordo com uma função gaussiana. Vamos a seguir deduzir este teorema seguindo a discussão apresentada em (1).

Seja x a soma de um conjunto de variáveis aleatórias s_i , regidas por uma distribuição de probabilidade $w(s)$. Estamos interessados em saber qual é a distribuição de probabilidade $P(x)$ que rege a variável x . Se cada uma das variáveis é estatisticamente independente das demais, a probabilidade de ocorrência de uma sequência de valores de N destas variáveis, com cada uma pertencente ao intervalo específico $[s_i, s_i + ds_i]$, é dada pelo produto da probabilidade de ocorrência de cada termo da sequência, isto é

$$w(s_1)ds_1 w(s_2)ds_2 \dots w(s_N)ds_N. \quad (1.31)$$

Para obter a probabilidade de que x esteja no intervalo $[x, x + dx]$, temos de somar sobre todos as sequências consistentes com esta condição, de modo que

$$P(x)dx = \iint_{x \in [x, x+dx]} \dots \int w(s_1)w(s_2) \dots w(s_N)ds_1 ds_2 \dots ds_N. \quad (1.32)$$

Surge então o problema de como realizar as integrais acima levando em conta os limites de integração e a restrição sobre a soma x . Vamos primeiramente remover essa dependência dos limites e colocá-la no integrando utilizando uma função delta de Dirac,

$$P(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} w(s_1)w(s_2) \dots w(s_N) \left[\delta \left(\sum_{i=1}^N s_i - x \right) dx \right] ds_1 ds_2 \dots ds_N. \quad (1.33)$$

Precisamos incluir o termo dx acima para manter correta a dimensionalidade da equação, visto que a delta de Dirac tem dimensão de dx^{-1} . Usando a representação integral da função delta,

$$\delta(x - a) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-a)} dk, \quad (1.34)$$

obtemos

$$P(x) = \iint \dots \int w(s_1)w(s_2)\dots w(s_N) \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(\sum_{i=1}^N s_i - x)} dk ds_1 ds_2 \dots ds_N \quad (1.35)$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dke^{-ikx} \int_{-\infty}^{\infty} w(s_1)e^{iks_1} ds_1 \int_{-\infty}^{\infty} w(s_2)e^{iks_2} ds_2 \dots \int_{-\infty}^{\infty} w(s_N)e^{iks_N} ds_N \quad (1.36)$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dke^{-ikx} \underbrace{\left(\int_{-\infty}^{\infty} w(s)e^{iks} ds \right)^N}_{\equiv \hat{Q}(k)} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dke^{-ikx} \hat{Q}^N(k). \quad (1.37)$$

A equação acima nos permite, portanto, encontrar $P(x)$ a partir de transformadas de Fourier de $w(s)$.

Vamos agora analisar o comportamento de $P(x)$ no limite $N \gg 1$,

$$\hat{Q}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} w(s)e^{iks} ds = \int_{-\infty}^{\infty} w(s) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(iks)^n}{n!} ds = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ik)^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} w(s)s^n ds \quad (1.38)$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ik)^n}{n!} \langle s^n \rangle = 1 + ik\langle s \rangle - \frac{1}{2}k^2\langle s^2 \rangle + \dots \quad (1.39)$$

Inicialmente, estudemos o comportamento da integral que define $\hat{Q}(k)$. Tomando um intervalo $[a, b]$ no qual w varia lentamente, ou seja, $\left| \frac{dw}{ds} \right| (b-a) \ll w$, mas que contém várias oscilações, de modo que $(b-a)k \gg 1$, então

$$\left| \int_a^b w(s)e^{iks} ds \right| = \left| w(s) \frac{e^{iks}}{ik} \Big|_a^b + \int_a^b \frac{e^{iks}}{ik} \left(-\frac{dw}{ds} \right) ds \right| \quad (1.40)$$

$$\leq \left| w(s) \frac{e^{iks}}{ik} \Big|_a^b \right| + \left| \int_a^b \frac{e^{iks}}{ik} \left(-\frac{dw}{ds} \right) ds \right| \leq \left| w(s) \frac{e^{iks}}{ik} \Big|_a^b \right| + \int_a^b \left| \frac{e^{iks}}{ik} \right| \left| \frac{dw}{ds} \right| ds \quad (1.41)$$

$$\ll \left| w(s) \frac{e^{iks}}{ik} \Big|_a^b \right| + \left| \frac{w(a)}{(b-a)} \right| \int_a^b \left| \frac{e^{iks}}{ik} \right| ds = \left| w(s) \frac{e^{iks}}{ik} \Big|_a^b \right| + \left| \frac{w(a)}{k} \right|. \quad (1.42)$$

Assim, se fizermos $k \gg 1$ podemos estender o intervalo $[a, b]$ para o intervalo $(-\infty, \infty)$ e, da equação acima, $\hat{Q}(k) \xrightarrow{k \gg 1} 0$. Por isso, vamos tomar o limite $k \ll 1$, de modo que, admitindo que $w(s)$ possui primeiros momentos finitos, então

$$\ln \hat{Q}^N(k) = N \ln \hat{Q}(k) = N \ln \left[1 + ik\langle s \rangle - \frac{1}{2}k^2\langle s^2 \rangle + \dots \right] \quad (1.43)$$

$$\simeq N \left[ik\langle s \rangle - \frac{1}{2}k^2\langle s^2 \rangle - \frac{1}{2}(ik\langle s \rangle)^2 \right] + N \left[ik\langle s \rangle - \frac{1}{2}k^2\langle (\Delta s)^2 \rangle \right]. \quad (1.44)$$

Aqui, usamos que

$$\ln(1+y) = y - \frac{1}{2}y^2 + \dots, \quad y \ll 1 \quad \langle (\Delta s)^2 \rangle = \langle s^2 \rangle - \langle s \rangle^2, \quad (1.45)$$

e assim

$$\hat{Q}^N(k) = e^{N[ik\langle s \rangle - \frac{1}{2}k^2\langle (\Delta s)^2 \rangle]}, \quad (1.46)$$

de modo que

$$P(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-ikx} \hat{Q}^N(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ik(-x+N\langle s \rangle) - \frac{1}{2} N k^2 \langle (\Delta s)^2 \rangle} \quad (1.47)$$

$$= \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{2\pi}{N\langle (\Delta s)^2 \rangle}} e^{\frac{-(N\langle s \rangle - x)^2}{2N\langle (\Delta s)^2 \rangle}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{\frac{-(m-x)^2}{2\sigma^2}}, \quad (1.48)$$

onde o primeiro e o segundo momentos de $P(x)$ são dados em função do primeiro e do segundo momentos de $w(s)$ através de

$$m = N\langle s \rangle \quad \sigma^2 = N\langle (\Delta s)^2 \rangle, \quad (1.49)$$

com o uso do resultado

$$\int_{-\infty}^{\infty} du e^{-au^2 + bu} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{b^2/4a}. \quad (1.50)$$

Temos, então, que a variável x é regida por uma distribuição de probabilidade gaussiana, $P(x)$, como visto acima. Note que não foram feitas restrições para a forma funcional de $w(s)$, exceto pelo fato desta possuir os dois primeiros momentos finitos. Se pensarmos em um caminhante aleatório executando uma sequência de passos $\{s_i\}$, então, se estes forem distribuídos por uma função de momentos bem definidos, a probabilidade de encontrar o caminhante em uma dada posição x será gaussiana. Contudo, existe uma versão mais geral desse teorema onde não requeremos a finitude dos primeiros momentos da distribuição. É o chamado Teorema do Limite Central Generalizado (18), que estudaremos a seguir.

1.3 Teorema do Limite Central Generalizado

Nos trabalhos de Paul Lévy (19), foi mostrado que a distribuição de probabilidade que rege a soma de variáveis aleatórias é, de forma geral, uma distribuição estável (18). De fato, uma distribuição é dita estável se, para uma sequência de variáveis aleatórias regidas por ela, a distribuição de um dos elementos é, a menos de um fator de escala, a mesma distribuição da soma dos elementos. Matematicamente, escrevemos que

$$x_1 + x_2 + x_3 + \dots + x_n \stackrel{d}{=} c_n x + d_n. \quad (1.51)$$

Acima, o símbolo $\stackrel{d}{=}$ significa que as duas expressões são regidas pela mesma função de probabilidade. Gaussianas obedecem esta propriedade, como pode ser visto a partir da Eq. (1.2):

$$w(s) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{\frac{-(m-s)^2}{2\sigma^2}} \Rightarrow Q(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{\frac{-(m-x)^2}{2\sigma^2}} e^{iks} ds, \quad (1.52)$$

de modo que

$$Q(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{m^2}{2\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\left(\frac{1}{2\sigma^2}\right)s^2 + s\left(ik + \frac{m}{2\sigma^2}\right)} ds = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{m^2}{2\sigma^2}} \sqrt{\frac{\pi}{1/2\sigma^2}} e^{(ik + \frac{m}{\sigma^2})^2 / 4 \cdot \frac{1}{2\sigma^2}} \quad (1.53)$$

$$= e^{-\frac{m^2}{2\sigma^2}} e^{\sigma^2 \left(ik + \frac{m}{\sigma^2}\right)^2 / 2} = e^{-\frac{\sigma^2 k^2}{2} + \frac{ikm}{2}}, \quad Q^N(k) = e^{\left(-\frac{\sigma^2 k^2}{2} + \frac{ikm}{2}\right)N}. \quad (1.54)$$

Assim,

$$P(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dke^{-ikx} e^{\left(-\frac{\sigma^2 k^2}{2} + \frac{ikm}{2}\right)N} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dke^{-k^2 \left(\frac{N\sigma^2}{2}\right) + k(im\frac{N}{2} - ix)} \quad (1.55)$$

$$= \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi}{N\sigma^2/2}} e^{(iNm - ix)^2 / 2N\sigma^2} = \sqrt{\frac{1}{2\pi N\sigma^2}} e^{-(Nm - x)^2 / 2N\sigma^2}. \quad (1.56)$$

A mudança de escala é realizada fazendo $\sigma^2 \rightarrow N\sigma^2$. Contudo, a gaussiana não é a única função que obedece essa propriedade. De forma geral, uma distribuição é estável se sua função característica $\phi(k)$ tiver a forma,

$$\hat{\phi}(k) = \langle e^{ikx} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} P(x) dx = \begin{cases} \exp(-|k|^\alpha [1 - i\beta \tan(\frac{\pi\alpha}{2}) \text{sgn}(k)]), & \alpha \neq 1; \\ \exp(-|k| [1 + i\beta \frac{2}{\pi} \text{sgn}(k) \log(|k|)]), & \alpha = 1. \end{cases} \quad (1.57)$$

Acima, $0 < \alpha \leq 2$, $-1 \leq \beta \leq 1$ e $\text{sgn}(k)$ é a função sinal. O parâmetro β controla a simetria de $\phi(k)$: para $\beta = 0$ temos uma função simétrica em k com respeito ao ponto $k = 0$, de modo que

$$\hat{\phi}(k) = e^{-|k|^\alpha}. \quad (1.58)$$

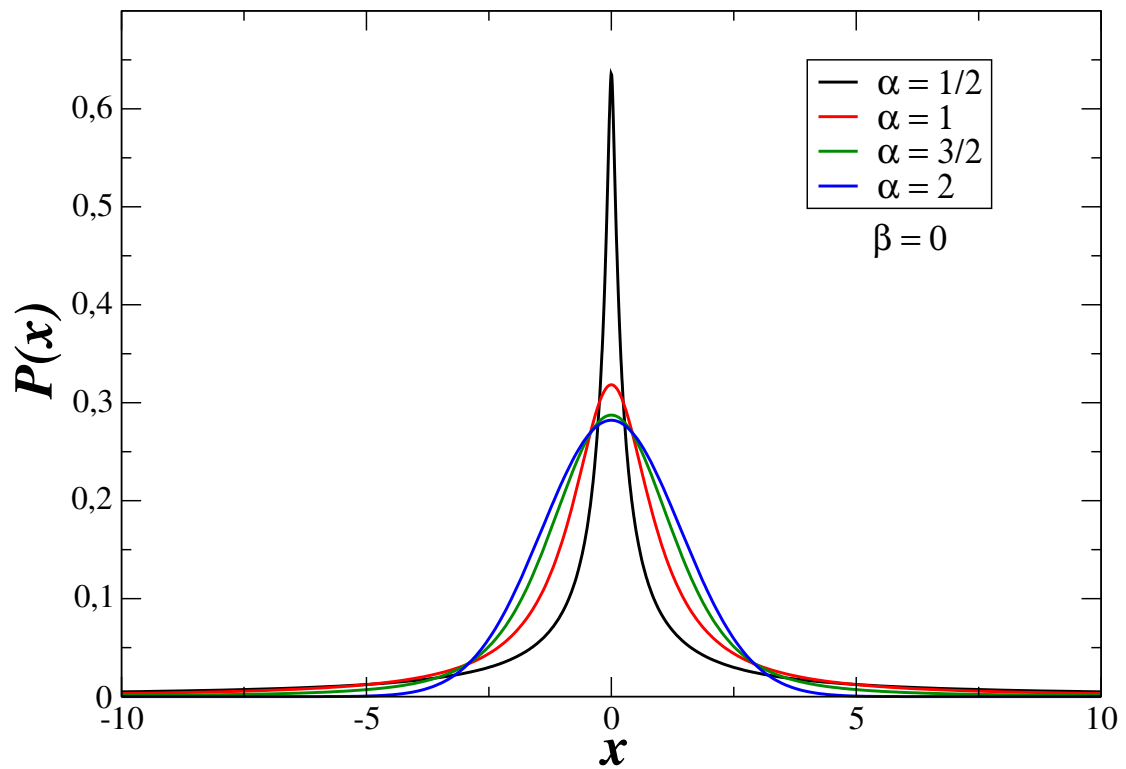
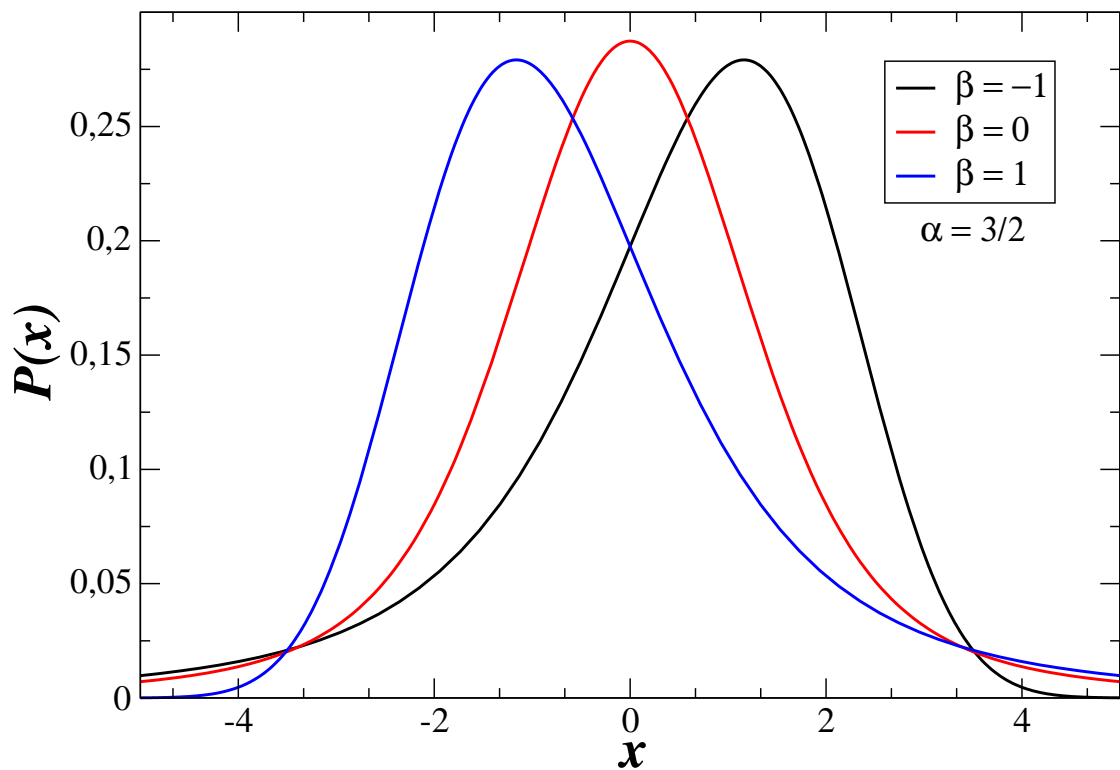
Exemplos da função característica acima são os limite $\alpha = 1$, que corresponde ao caso particular da distribuição de Cauchy, e $\alpha = 2$, que corresponde à distribuição gaussiana:

$$P(x) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{1 + x^2} \quad P(x) = \frac{e^{-\frac{x^2}{4}}}{2\sqrt{\pi}}. \quad (1.59)$$

O caso geral, expresso na Eq. (1.58), define a chamada distribuição de Lévy α -estável, ilustradas nos gráficos a seguir. Na Fig. 1 mostramos o comportamento da distribuição estável para $\beta = 0$ e diferentes valores de α . Já na Fig. 2 mostramos como o parâmetro β dá uma medida da assimetria (*skewness*) da distribuição.

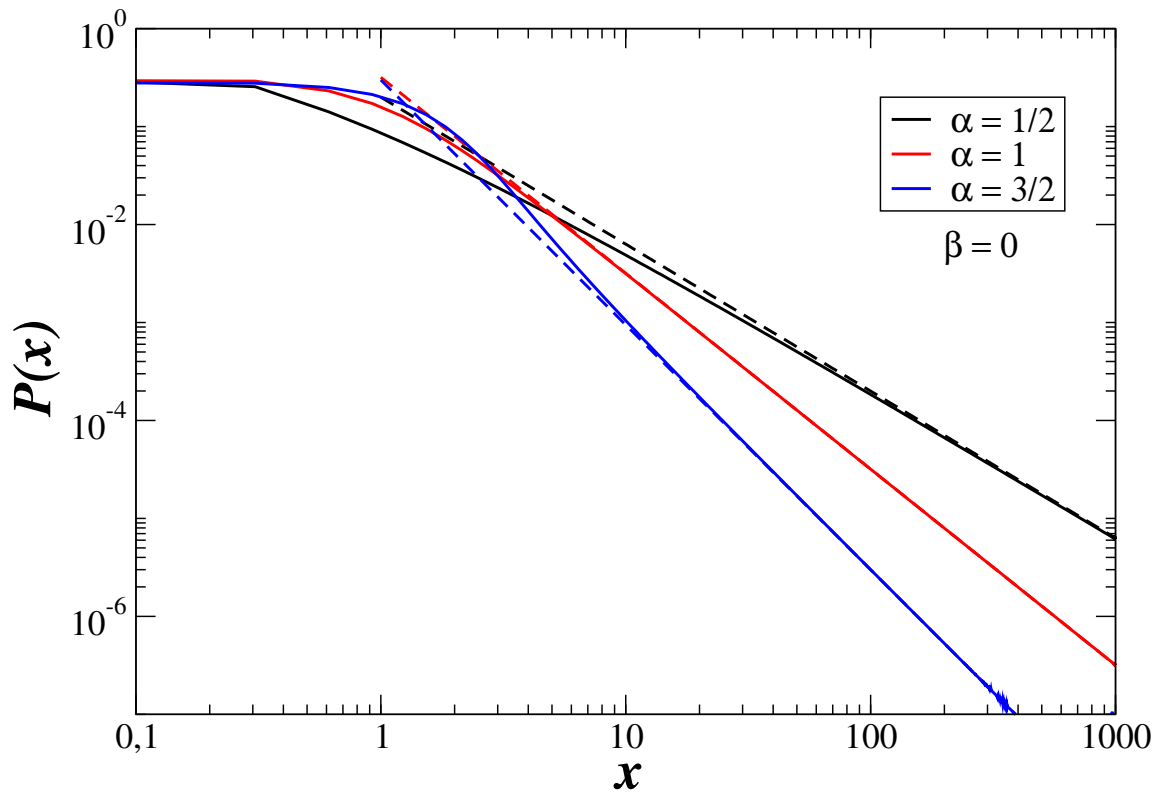
Uma característica das distribuições estáveis que é importante para o presente trabalho é o seu comportamento assintótico do tipo lei de potência, que também pode ser verificado na Fig. 3:

$$P(\pm x) \sim \alpha \frac{\Gamma(\alpha) \sin(\frac{\pi\alpha}{2})}{\pi} (1 \pm \beta) x^{-(\alpha+1)}, \quad x \rightarrow \infty. \quad (1.60)$$

Figura 1 – Gráficos da distribuição de Lévy para $\alpha = 1/2, 1, 3/2, 2$ e $\beta = 0$.Figura 2 – Gráficos da distribuição de Lévy para $\alpha = 3/2$ e $\beta = -1, 0, 1$.

Temos, em suma, o seguinte resultado: ao se retirar a exigência de convergência dos primeiros momentos presente no Teorema do Limite Central, a soma de variáveis aleatórias deixa de ter a sua probabilidade de ocorrência regida por uma função gaussiana

Figura 3 – Comparação da distribuição de Lévy, curva contínua, com o seu limite assintótico dado pela Eq. (1.60), curva tracejada, para $\alpha = 1/2, 1, 3/2$ e $\beta = 0$.



e passa a ser descrita mais geralmente pela distribuição de Lévy. Este fato é um dos motivos de nosso interesse por esse tipo de função. O seu comportamento assintótico do tipo lei de potência, comumente também chamado de “longa cauda”, permite atestar facilmente a divergência de alguns momentos da distribuição, dependendo do valor do expoente da lei de potência. Note também que com variação do parâmetro α é possível passar do regime difusivo para o superdifusivo, como veremos adiante.

Para estudar sistemas com difusão anômala, será necessário reformular a equação de Fokker-Planck, introduzindo ingredientes que não constam na formulação canônica apresentada acima. Uma tentativa nesse sentido (20, 4) se dá no contexto do cálculo envolvendo derivadas fracionárias (21, 22, 23), como veremos a seguir.

1.4 Cálculo Fracionário

O ramo da Matemática denominado Cálculo Fracionário surgiu em 1695 com uma pergunta feita por L'Hôpital a Leibniz quando este apresentava a notação $d^n y / dx^n$: "E se n for $1/2$?" (24). Desde então, grandes nomes da Matemática, além dos já citados, devotaram sua atenção para o assunto, como J. Bernoulli, J. L. Lagrange, P. S. de Laplace e J. B. J. Fourier. Uma das primeiras aplicações do conceito de derivada fracionária se deu com a solução de Abel para o problema da tautócrona, que consiste em determinar

a forma da trajetória que uma massa pontual sob a ação da gravidade deve descrever de forma que o seu tempo de queda seja independente do ponto inicial.

Posteriormente, com os trabalhos de Mandelbrot em 1982, onde surgem as dimensões fractais que podem assumir valores não inteiros, os físicos começaram a utilizar conceitos de cálculo fracionário para abordar problemas de difusão anômala, dada a relação das trajetórias dos caminhantes aleatórios com a geometria fractal apresentada por Mandelbrot. Podemos citar como aplicações mais recentes a equação de onda fracionária, a equação de Schrödinger fracionária e a teoria de campos fracionária (22, 25).

1.4.1 Derivadas Fracionárias

Como citado anteriormente, a derivada fracionária é uma extensão da definição usual de derivada, $d^\alpha y / dx^\alpha$, para valores de α não inteiros. Observamos que uma das principais dificuldades desta linha de pesquisa ainda em expansão é que a definição de derivada fracionária não é única. De fato, vários matemáticos desenvolveram sua própria definição de derivada. Destacamos a seguir as derivadas fracionárias de Caputo, Riemann-Liouville e Riesz (21, 22), que, dadas as suas propriedades, como veremos a seguir, possuem diversas aplicações na Física. Contudo, vejamos inicialmente algumas propriedades mais gerais das derivadas fracionárias (21, 26, 24):

- Linearidade: sejam β e γ duas constantes. Então,

$$\frac{d^\alpha}{dx^\alpha}(\beta f(x) + \gamma g(x)) = \beta \frac{d^\alpha f(x)}{dx^\alpha} + \gamma \frac{d^\alpha g(x)}{dx^\alpha}. \quad (1.61)$$

- Se α é um número inteiro n , a derivada usual é recuperada:

$$\frac{d^\alpha}{dx^\alpha} f(x) = \frac{d^n}{dx^n} f(x). \quad (1.62)$$

- No limite $\alpha = 0$, recuperamos a função:

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{d^\alpha}{dx^\alpha} f(x) = f(x). \quad (1.63)$$

- Regra de Leibniz: para derivadas inteiras, temos que

$$\frac{d^n}{dx^n} [fg] = \sum_{j=0}^n \binom{n}{j} \frac{d^{n-j} f}{dx^{n-j}} \frac{d^j g}{dx^j}. \quad (1.64)$$

A generalização desta última equação para derivadas fracionárias, ao contrário das propriedades citadas anteriormente, é que depende da definição de derivada que se utiliza. Por exemplo, para a derivada de Riemann-Liouville,

$$\frac{d^\alpha}{dx^\alpha} [fg] = \sum_{j=0}^{\infty} \binom{\alpha}{j} \frac{d^{\alpha-j} f}{dx^{\alpha-j}} \frac{d^j g}{dx^j}. \quad (1.65)$$

Já para a derivada de Caputo (27),

$$\frac{d^\alpha}{dx^\alpha}[fg] = \sum_{j=0}^{\infty} \binom{\alpha}{j} \frac{d^{\alpha-j}f}{dx^{\alpha-j}} \frac{d^jg}{dx^j} - \sum_{k=0}^{n-1} \frac{x^{k-\alpha}}{\Gamma(k+1-\alpha)} \frac{d^k}{dx^k}(fg)(a). \quad (1.66)$$

Vemos então que a Regra de Leibniz não pode ser expressa de forma única para as derivadas fracionárias, sendo necessário analisar cada definição para encontrar a sua forma específica.

- Comutatividade: Para derivadas usuais, temos que

$$\frac{d^n}{dx^n} \frac{d^m f}{dx^m} = \frac{d^m}{dx^m} \frac{d^n f}{dx^n} = \frac{d^{n+m} f}{dx^{n+m}}. \quad (1.67)$$

Poderíamos esperar que para as derivadas fracionárias,

$$\frac{d^\alpha}{dx^\alpha} \frac{d^n f}{dx^n} = \frac{d^n}{dx^n} \frac{d^\alpha f}{dx^\alpha} = \frac{d^{\alpha+n} f}{dx^{\alpha+n}}. \quad (1.68)$$

Contudo, esta propriedade não é válida para todas as definições de derivadas fracionárias. De fato, utilizando mais uma vez como exemplo as derivadas de Riemann-Liouville e de Caputo, temos

$$\frac{d^n}{dx^n} \frac{d^\alpha f}{dx^\alpha} = \frac{d^{\alpha+n} f}{dx^{\alpha+n}} \neq \frac{d^\alpha}{dx^\alpha} \frac{d^n f}{dx^n}, \quad \text{para Riemann-Liouville;} \quad (1.69)$$

$$\frac{d^\alpha}{dx^\alpha} \frac{d^n f}{dx^n} = \frac{d^{\alpha+n} f}{dx^{\alpha+n}} \neq \frac{d^n}{dx^n} \frac{d^\alpha f}{dx^\alpha}, \quad \text{para Caputo.} \quad (1.70)$$

Logo, deve ser necessário também analisar individualmente como a aditividade dos índices da derivada é realizada e se a comutação pode ou não ser verificada, embora uma análise detalhada destes aspectos fuja ao escopo desta tese.

Vamos a seguir discutir algumas das definições de derivada fracionárias mais empregadas na Física e suas propriedades mais relevantes. Esta lista está longe de ser completa ou abranger todas as propriedades de cada uma das derivadas. As referências (28, 29, 23, 24, 22, 21, 26, 30, 27) possuem uma extensa discussão acerca deste tema e nos basearemos nelas para as discussões a seguir. Ao final do presente capítulo, apresentaremos um resumo das principais expressões.

1.4.1.1 Derivada de Riemann-Liouville

Seja n um número inteiro e a um número real arbitrário. A derivada de Riemann-Liouville de ordem α é definida como

$$\left(\frac{d^\alpha f}{dt^\alpha} \right)_a = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \frac{d^n}{dt^n} \int_a^t (t-\tau)^{n-\alpha-1} f(\tau) d\tau \quad ; \quad (n-1 \leq \alpha < n). \quad (1.71)$$

Note que, no limite $\alpha = n - 1$,

$$\begin{aligned}
 \lim_{\alpha \rightarrow n-1} \left(\frac{d^\alpha f}{dt^\alpha} \right)_a &= \frac{1}{\Gamma(n - (n-1))} \frac{d^n}{dt^n} \int_a^t (t - \tau)^{n-(n-1)-1} f(\tau) d\tau \\
 &= \frac{1}{\Gamma(1)} \frac{d^n}{dt^n} \int_a^t (t - \tau)^0 f(\tau) d\tau \\
 &= \frac{d^n}{dt^n} \int_a^t f(\tau) d\tau \quad ; \text{ seja } f(\tau) = \frac{dg}{d\tau} \\
 &= \frac{d^n}{dt^n} g(\tau) \Big|_a^t = \frac{d^{n-1}}{dt^{n-1}} \left(\frac{dg(t)}{dt} - \frac{dg(a)}{dt} \right) \\
 &= \frac{d^{n-1}f}{dt^{n-1}}.
 \end{aligned} \tag{1.72}$$

Para analisar o limite $\alpha = n$, vamos voltar para a Eq. (1.71) e realizar a integração por partes,

$$\begin{aligned}
 \left(\frac{d^\alpha f}{dt^\alpha} \right)_a &= \frac{1}{\Gamma(n - \alpha)} \frac{d^n}{dt^n} \left\{ -\frac{f(\tau)(t - \tau)^{n-\alpha}}{n - \alpha} \Big|_a^t + \int_a^t \frac{(t - \tau)^{n-\alpha}}{n - \alpha} \frac{df}{d\tau} d\tau \right\} \\
 &= \frac{1}{\Gamma(n - \alpha)} \frac{d^n}{dt^n} \left\{ \frac{f(a)(t - a)^{n-\alpha}}{n - \alpha} + \int_a^t \frac{(t - \tau)^{n-\alpha}}{n - \alpha} \frac{df}{d\tau} d\tau \right\} \\
 &= \frac{1}{\Gamma(n + 1 - \alpha)} \frac{d^n}{dt^n} \left\{ f(a)(t - a)^{n-\alpha} + \int_a^t (t - \tau)^{n-\alpha} \frac{df}{d\tau} d\tau \right\}.
 \end{aligned} \tag{1.73}$$

Então, escrevemos

$$\begin{aligned}
 \lim_{\alpha \rightarrow n} \left(\frac{d^\alpha f}{dt^\alpha} \right)_a &= \frac{1}{\Gamma(1)} \frac{d^n}{dt^n} \int_a^t \frac{df}{d\tau} d\tau \\
 &= \frac{d^n}{dt^n} \{f(t) - f(a)\} = \frac{d^n f}{dt^n}.
 \end{aligned} \tag{1.74}$$

Logo, para um valor de α inteiro recuperamos as derivadas usuais. Vejamos a derivada de uma função específica (21, 26, 31):

$$\left(\frac{d^\alpha (t - c)^b}{dt^\alpha} \right)_a = \frac{(a - c)^b}{\Gamma(1 - \alpha)} (t - a)^{-\alpha} {}_2F_1 \left(1, -b, 1 - \alpha; \frac{a - t}{a - c} \right) \quad ; \quad a - c > 0 \tag{1.75}$$

No limite $b = 0$,

$$\left(\frac{d^\alpha 1}{dt^\alpha} \right)_a = \frac{\Gamma(1)}{\Gamma(1 - \alpha)} (t - a)^{-\alpha} = -\frac{(t - a)^{-\alpha}}{\alpha \Gamma(-\alpha)}. \tag{1.76}$$

Logo, para α inteiro obtemos que a derivada usual de uma constante é nula, pois $\Gamma(-\alpha) = \infty$. Note que a definição de derivada da Eq. (1.71) depende de um parâmetro a , e que este parâmetro se reflete na derivada de algumas funções, como visto na equação acima. Tal parâmetro representa um limite inferior de um intervalo no qual assumimos que a função $f(t)$ que estamos derivando é integrável (21, 30). Para a derivada de Riemann-Liouville e de Caputo, que discutiremos a seguir, temos que no limite $t \rightarrow a$ a derivada é nula, independentemente da função.

Fisicamente, este parâmetro pode ser interpretado, por exemplo, como a origem temporal do sistema. De fato, veremos neste trabalho que, ao tratar com derivadas no tempo, a escolha usual de $t \geq 0$, ou seja, $a = 0$, vai nos permitir obter uma relação para a transformada de Laplace de derivadas fracionárias. Da mesma forma, ao trabalhar com derivadas no espaço, faremos $a = -\infty$ para representar este “ponto” como a origem do sistema de coordenadas espaciais. Veremos ainda que esta escolha de parâmetros permitirá o uso do teorema da convolução para as transformadas de Laplace e Fourier, que analisamos abaixo.

Se fizermos $a = -\infty$, podemos expressar a transformada de Fourier na forma

$$\begin{aligned} \mathcal{F} \left\{ \left(\frac{d^\alpha f}{dt^\alpha} \right)_{-\infty} \right\} &= \mathcal{F} \left\{ \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \frac{d^n}{dt^n} \int_{-\infty}^t (t-\tau)^{n-\alpha-1} f(\tau) d\tau \right\} \\ &= \frac{(-i\omega)^n}{\Gamma(n-\alpha)} \mathcal{F} \left\{ \int_{-\infty}^t (t-\tau)^{n-\alpha-1} f(\tau) d\tau \right\}. \end{aligned} \quad (1.77)$$

Precisamos então calcular a transformada de Fourier acima. Se usarmos o fato de que

$$\int_0^\infty t^{n-\alpha-1} e^{-st} dt = \Gamma(n-\alpha) s^{\alpha-n}, \quad (1.78)$$

podemos definir uma função $h(t)$, tal que

$$h(t) = \begin{cases} 0, & t \leq 0; \\ \frac{t^{n-\alpha-1}}{\Gamma(n-\alpha)}, & t > 0. \end{cases}$$

Então, se fizermos $s = -i\omega$ temos

$$\int_{-\infty}^\infty h(t) e^{i\omega t} dt = \mathcal{F}\{h(t)\} = (-i\omega)^{\alpha-n}. \quad (1.79)$$

Logo, escrevendo a convolução

$$f(t) * h(t) = \int_{-\infty}^\infty f(\tau) h(t-\tau) d\tau = \int_{-\infty}^t \frac{(t-\tau)^{n-\alpha-1}}{\Gamma(n-\alpha)} f(\tau) d\tau, \quad (1.80)$$

$$\mathcal{F}\{f(t) * h(t)\} = \mathcal{F}\{f(t)\} \mathcal{F}\{h(t)\} = \mathcal{F}\{f(t)\} (-i\omega)^{\alpha-n}, \quad (1.81)$$

então

$$\mathcal{F} \left\{ \left(\frac{d^\alpha f}{dt^\alpha} \right)_{-\infty} \right\} = (-i\omega)^n \mathcal{F}\{f(t)\} (-i\omega)^{\alpha-n} = (-i\omega)^\alpha \mathcal{F}\{f(t)\}. \quad (1.82)$$

Para analisar a transformada de Laplace, vamos analisar o caso $a = 0$,

$$\begin{aligned} \mathcal{L} \left\{ \left(\frac{d^\alpha f}{dt^\alpha} \right)_0 \right\} &= \mathcal{L} \left\{ \frac{d^n}{dt^n} \left[\frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \int_0^t (t-\tau)^{n-\alpha-1} f(\tau) d\tau \right] \right\} \\ &= u^n \mathcal{L}\{g(t)\} - \sum_{k=1}^n u^{n-k} \frac{d^{k-1} g(t)}{dt^{k-1}} \Big|_0, \end{aligned} \quad (1.83)$$

onde definimos

$$g(t) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \int_0^t (t-\tau)^{n-\alpha-1} f(\tau) d\tau. \quad (1.84)$$

Logo,

$$\begin{aligned} \mathcal{L}\{g(t)\} &= \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \mathcal{L}\left\{\int_0^t (t-\tau)^{n-\alpha-1} f(\tau) d\tau\right\} = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \mathcal{L}\{f(t) * t^{n-\alpha-1}\} \\ &= \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \mathcal{L}\{f(t)\} \mathcal{L}\{t^{n-\alpha-1}\} = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \hat{f}(u) \frac{\Gamma(n-\alpha)}{u^{n-\alpha}} = \frac{\hat{f}(u)}{u^{n-\alpha}}, \end{aligned} \quad (1.85)$$

de modo que

$$\begin{aligned} \mathcal{L}\left\{\left(\frac{d^\alpha f}{dt^\alpha}\right)_0\right\} &= u^\alpha \hat{f}(u) - \sum_{k=1}^n u^{n-k} \frac{d^{k-1}}{dt^{k-1}} g(t) \Big|_{t=0} \\ &= u^\alpha \hat{f}(u) - \sum_{m=0}^{n-1} \frac{d^{n-m-1}}{dt^{n-m-1}} g(t) \Big|_{t=0} = u^\alpha \hat{f}(u) - \sum_{m=0}^{n-1} \frac{d^{\alpha-m-1}}{dt^{\alpha-m-1}} f(t) \Big|_{t=0}, \end{aligned} \quad (1.86)$$

lembrando ainda que, para derivadas usuais,

$$\mathcal{L}\left\{\frac{d^n f}{dt^n}\right\} = u^n \hat{f}(u) - \sum_{k=0}^{n-1} u^k \frac{d^{n-k-1}}{dt^{n-k-1}} f(t) \Big|_{t=0}. \quad (1.87)$$

Aqui, utilizamos a seguinte notação para a transformada de Laplace,

$$\mathcal{L}\{f(t)\} = \hat{f}(u) = \int_0^\infty e^{-ut} f(t) dt. \quad (1.88)$$

Note que a transformada de Laplace de uma derivada fracionária de Riemann-Liouville envolve um somatório de derivadas fracionárias, o que gera uma grande dificuldade no uso desta definição de derivada na solução de equações diferenciais fracionárias via transformadas de Laplace, um método comumente aplicado para esse tipo de problema. Surge, então, a necessidade de uma definição alternativa de derivada fracionária que na verdade envolva derivadas usuais para esta transformada: a derivada fracionária de Caputo.

1.4.1.2 Derivada de Caputo

A derivada fracionária de Caputo é definida como:

$$\left(\frac{d^\alpha f}{dt^\alpha}\right)_a = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \int_a^t (t-\tau)^{n-\alpha-1} f^{(n)}(\tau) d\tau \quad ; \quad (n-1 \leq \alpha < n). \quad (1.89)$$

Se realizarmos uma integração por partes na integral acima, podemos expressá-la na forma

$$\left(\frac{d^\alpha f}{dt^\alpha}\right)_a = \frac{1}{\Gamma(n+1-\alpha)} \left\{ \frac{d^n f(\tau)}{d\tau^n} \Big|_a (t-a)^{n-\alpha} + \int_a^t (t-\tau)^{n-\alpha} f^{(n+1)}(\tau) d\tau \right\}. \quad (1.90)$$

Vamos verificar agora os limites para valores de α inteiros:

$$\begin{aligned}
 \lim_{\alpha \rightarrow n} \left(\frac{d^\alpha f}{dt^\alpha} \right)_a &= \underbrace{\frac{1}{\Gamma(1)}}_{=1} \left\{ \frac{d^n f(\tau)}{d\tau^n} \Big|_a (t-a)^{n-n} + \int_a^t (t-\tau)^{n-n} f^{(n+1)}(\tau) d\tau \right\} \\
 &= \frac{d^n f(\tau)}{d\tau^n} \Big|_a + \int_a^t f^{(n+1)}(\tau) d\tau = \frac{d^n f(\tau)}{d\tau^n} \Big|_a + \frac{d^n f(\tau)}{d\tau^n} \Big|_t - \frac{d^n f(\tau)}{d\tau^n} \Big|_a \\
 &= \frac{d^n f}{dt^n}.
 \end{aligned} \tag{1.91}$$

Similarmente,

$$\begin{aligned}
 \lim_{\alpha \rightarrow n-1} \left(\frac{d^\alpha f}{dt^\alpha} \right)_a &= \underbrace{\frac{1}{\Gamma(2)}}_{=1} \left\{ \frac{d^n f(\tau)}{d\tau^n} \Big|_a (t-a)^{n-n+1} + \int_a^t (t-\tau)^{n-n+1} f^{(n+1)}(\tau) d\tau \right\} \\
 &= \frac{d^n f(\tau)}{d\tau^n} \Big|_a (t-a) + \int_a^t f^{(n+1)}(\tau) (t-\tau) d\tau \\
 &= \frac{d^n f(\tau)}{d\tau^n} \Big|_a (t-a) + t \frac{d^n f(\tau)}{d\tau^n} \Big|_t - t \frac{d^n f(\tau)}{d\tau^n} \Big|_a - \int_a^t \tau f^{(n+1)}(\tau) d\tau \\
 &= -a \frac{d^n f(\tau)}{d\tau^n} \Big|_a + t \frac{d^n f(\tau)}{d\tau^n} \Big|_t - t \frac{d^n f(\tau)}{d\tau^n} \Big|_t + a \frac{d^n f(\tau)}{d\tau^n} \Big|_a + \int_a^t f^{(n)}(\tau) d\tau \\
 &= \int_a^t f^{(n)}(\tau) d\tau = \frac{d^{n-1} f(\tau)}{d\tau^{n-1}} \Big|_a^t = \frac{d^{n-1} f(\tau)}{d\tau^{n-1}} \Big|_t - \frac{d^{n-1} f(\tau)}{d\tau^{n-1}} \Big|_a.
 \end{aligned} \tag{1.92}$$

Calculando a derivada de algumas funções específicas, temos que

$$\left(\frac{d^\alpha t^p}{dt^\alpha} \right)_a = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \int_a^t (t-\tau)^{n-\alpha-1} \frac{d^n \tau^p}{d\tau^n} d\tau \quad ; \quad (p > n-1). \tag{1.93}$$

Entretanto, notamos que

$$\frac{d^n \tau^p}{d\tau^n} = p(p-1) \dots (p-(n-1)) \tau^{p-n} = \frac{\Gamma(p+1)}{\Gamma(p-n+1)} \tau^{p-n}, \tag{1.94}$$

de modo que

$$\left(\frac{d^\alpha t^p}{dt^\alpha} \right)_a = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \frac{\Gamma(p+1)}{\Gamma(p-n+1)} \int_a^t \tau^{p-n} (t-\tau)^{n-\alpha-1} d\tau. \tag{1.95}$$

Notamos o seguinte resultado

$$\int_a^t \tau^{p-n} (t-\tau)^{n-\alpha-1} d\tau = t^{p-\alpha} \left\{ -B_{a/t}(p-n+1, n-\alpha) + \frac{\Gamma(p-n+1)\Gamma(n-\alpha)}{\Gamma(p-\alpha+1)} \right\},$$

onde $B_z(a,b)$ é a função beta incompleta (32). Para o caso $a = 0$, a função beta se anula e temos então

$$\begin{aligned} \left(\frac{d^\alpha t^p}{dt^\alpha} \right)_0 &= \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \frac{\Gamma(p+1)}{\Gamma(p-n+1)} t^{p-\alpha} \frac{\Gamma(p-n+1)\Gamma(n-\alpha)}{\Gamma(p-\alpha+1)} \\ &= \frac{\Gamma(p+1)}{\Gamma(p-\alpha+1)} t^{p-\alpha}. \end{aligned} \quad (1.96)$$

Observe que pela definição da derivada de Caputo, Eq. (1.89), a derivada fracionária de uma constante é sempre nula, ao contrário da derivada de Riemann-Liouville.

Vejamos agora como esta definição de derivada se comporta sob as transformadas de Laplace e Fourier. Mais uma vez, para o caso $a = 0$ temos

$$\begin{aligned} \mathcal{L} \left\{ \left(\frac{d^\alpha t^p}{dt^\alpha} \right)_0 \right\} &= \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \mathcal{L} \left\{ \int_0^t (t-\tau)^{n-\alpha-1} f^{(n)}(\tau) d\tau \right\} \\ &= \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \mathcal{L} \left\{ f^{(n)} * t^{n-\alpha-1} \right\} = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \mathcal{L} \left\{ f^{(n)} \right\} \mathcal{L} \left\{ t^{n-\alpha-1} \right\} \\ &= \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \frac{\Gamma(n-\alpha)}{u^{n-\alpha}} \left[u^n \hat{f}(u) - \sum_{k=0}^{n-1} u^k \frac{d^{n-k-1}}{dt^{n-1-k}} f(t) \Big|_{t=0} \right] \\ &= u^\alpha \hat{f}(u) - \sum_{k=0}^{n-1} u^{\alpha+k-n} \frac{d^{n-k-1}}{dt^{n-1-k}} f(t) \Big|_{t=0} \\ &= u^\alpha \hat{f}(u) - \sum_{m=0}^{n-1} u^{\alpha-m-1} \frac{d^m}{dt^m} f(t) \Big|_{t=0}. \end{aligned} \quad (1.97)$$

Note que a relação acima envolve derivadas usuais, diferentemente da Eq. (1.86), justificando o uso desta definição de derivada para aplicações em problemas físicos, onde, em muitos casos, como nos problemas de difusão, têm-se valores iniciais para a distribuição de probabilidades e para suas derivadas como condições de contorno.

Analisando agora a transformada de Fourier, vamos novamente escolher $a = -\infty$. Escrevemos, então,

$$\begin{aligned} \mathcal{F} \left\{ \left(\frac{d^\alpha f}{dt^\alpha} \right)_{-\infty} \right\} &= \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \mathcal{F} \left\{ \int_{-\infty}^t (t-\tau)^{n-\alpha-1} f^{(n)}(\tau) d\tau \right\} \\ &= \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \mathcal{F} \left\{ f^{(n)}(t) * t^{n-\alpha-1} \right\} = \frac{\mathcal{F} \left\{ f^{(n)}(t) \right\} \mathcal{F} \left\{ t^{n-\alpha-1} \right\}}{\Gamma(n-\alpha)} \\ &= \frac{(-i\omega)^n \mathcal{F} \{ f(t) \} \Gamma(n-\alpha) (-i\omega)^{\alpha-n}}{\Gamma(n-\alpha)} = (-i\omega)^\alpha \mathcal{F} \{ f(t) \}. \end{aligned} \quad (1.98)$$

As derivadas de Riemann-Liouville e Caputo são normalmente definidas para um parâmetro α tal que $\alpha \in (0,1)$, podendo ser estendidas para $\alpha \in (n, n+1)$ (22), abordagem que utilizamos neste trabalho. Estas definições de derivadas são normalmente utilizadas para derivadas no tempo (28). Isto se deve ao seu comportamento sob transformadas de Laplace para $a = 0$, que como dito anteriormente, representa a origem da coordenada

temporal. Veremos no próximo capítulo que as derivadas de Riemann-Liouville serão utilizadas para tratar processos subdifusivos, que será modelado por equações de Fokker-Planck com derivadas fracionárias no tempo. Para derivadas espaciais, são normalmente utilizadas para aplicações em física a derivada de Riesz, por ter o limite $\alpha \rightarrow 2$ garantido. Esta derivada é definida para toda a reta real, sem a necessidade de uma mudança de origem, como feito anteriormente. Esta derivada também se comporta bem sobre transformadas de Fourier, como veremos a seguir.

1.4.1.3 Derivada de Riesz

A derivada de Riesz de ordem α pode ser definida como (23, 28, 29)

$$\frac{d^\alpha}{dx^\alpha} f(x) = \frac{1}{d(\ell, \alpha)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(\Delta_t^\ell f)(x)}{|t|^{1+\alpha}} dt, \quad (\ell \in \mathbb{Z} \text{ e } \ell > \alpha), \quad (1.99)$$

onde

$$d(\ell, \alpha) = \frac{2^{-\alpha} \pi^{3/2}}{\Gamma(1 + \alpha/2) \Gamma((1 + \alpha)/2) \sin(\alpha\pi/2)} \sum_{k=0}^{\ell} (-1)^{k-1} \binom{\ell}{k} k^\alpha \quad (1.100)$$

e

$$(\Delta_t^\ell f)(x) = \sum_{k=0}^{\ell} (-1)^k \binom{\ell}{k} f(x - kt). \quad (1.101)$$

Utilizando a definição acima, obtemos para $0 < \alpha < 1$ (33)

$$\frac{d^\alpha}{dx^\alpha} f(x) = \frac{\Gamma(1 + \alpha) \sin(\alpha\pi/2)}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} [f(x) - f(x - t)] \frac{dt}{|t|^{1+\alpha}}; \quad (1.102)$$

e para $1 < \alpha < 2$,

$$\frac{d^\alpha}{dx^\alpha} f(x) = \frac{\Gamma(1 + \alpha) \sin(\alpha\pi/2)}{\pi(2 - 2^\alpha)} \int_{-\infty}^{\infty} [f(x) - 2f(x - t) + f(x - 2t)] \frac{dt}{|t|^{1+\alpha}}. \quad (1.103)$$

Vejamos agora como esta derivada se comporta sob a transformada de Fourier.

Temos que, para o caso geral $\alpha > 0$,

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}\left\{\frac{d^\alpha}{dx^\alpha}f(x)\right\} &= \frac{1}{d(\ell, \alpha)} \mathcal{F}\left\{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{(\Delta_t^\ell f)(x)}{|t|^{1+\alpha}} dt\right\} \\
&= \frac{1}{d(\ell, \alpha)} \sum_{k=0}^{\ell} (-1)^k \binom{\ell}{k} \mathcal{F}\left\{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(x-kt)}{|t|^{1+\alpha}} dt\right\} \\
&= \frac{1}{d(\ell, \alpha)} \sum_{k=0}^{\ell} (-1)^k \binom{\ell}{k} k^\alpha \underbrace{\mathcal{F}\left\{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(x-z)}{|z|^{1+\alpha}} dz\right\}}_{\mathcal{F}\left\{\frac{1}{|z|^{1+\alpha}} * f(x)\right\}} \\
&= \frac{1}{d(\ell, \alpha)} \sum_{k=0}^{\ell} (-1)^k \binom{\ell}{k} k^\alpha \mathcal{F}\{f(x)\} \mathcal{F}\left\{\frac{1}{|z|^{1+\alpha}}\right\} \tag{1.104} \\
&= \frac{1}{d(\ell, \alpha)} \sum_{k=0}^{\ell} (-1)^k \binom{\ell}{k} k^\alpha \mathcal{F}\{f(x)\} \frac{-2 \sin(-\pi(1+\alpha)/2) \Gamma(-\alpha)}{|\omega|^{-\alpha}} \\
&= |\omega|^\alpha \mathcal{F}\{f(x)\} \frac{\Gamma(-\alpha) \Gamma(1+\alpha/2) \Gamma(\frac{1+\alpha}{2}) (-2) \sin(\frac{\alpha\pi}{2}) \cos(\frac{\alpha\pi}{2})}{2^{-\alpha} \pi^{3/2}} \\
&= |\omega|^\alpha \mathcal{F}\{f(x)\} \underbrace{\frac{\Gamma(-\alpha) 2^{-\alpha} \sqrt{\pi} \Gamma(1+\alpha) (-2) \sin(\frac{\alpha\pi}{2}) \cos(\frac{\alpha\pi}{2})}{2^{-\alpha} \pi^{3/2}}}_{=1} \\
&= |\omega|^\alpha \mathcal{F}\{f(x)\}.
\end{aligned}$$

Note que, no limite $\alpha = 2$, temos uma diferença de sinal para a transformada de Fourier da derivada segunda,

$$\mathcal{F}\left\{\frac{d^2}{dx^2}f(x)\right\} = -\omega^2 \mathcal{F}\{f(x)\}. \tag{1.105}$$

Isto faz com que, em alguns artigos publicados por físicos (4, 34), a derivada de Riesz seja definida com um sinal de menos extra para recuperar o limite acima. Utilizaremos esta definição com o sinal de menos adicional para escrever a equação de Fokker-Planck com derivadas fracionárias no espaço que modelarão processos superdifusivos, como veremos no capítulo seguinte. Destacamos que até onde vai o nosso conhecimento, não conseguimos encontrar informações sobre a transformada de Laplace da derivada de Riesz. Esta é construída de modo a obedecer a equação (1.105). Gostaríamos também de destacar o uso da derivada de Riesz na solução de equações de Schrödinger fracionárias devido à sua hermiticidade (25).

Listamos abaixo as derivadas fracionárias de Riesz de algumas funções (22):

$$\frac{d^\alpha}{dx^\alpha} e^{ikx} = -|k|^\alpha e^{ikx}, \tag{1.106}$$

$$\frac{d^\alpha}{dx^\alpha} \sin(kx) = -|k|^\alpha \sin(kx), \tag{1.107}$$

$$\frac{d^\alpha}{dx^\alpha} e^{-kx^2} = \frac{k^{\alpha/2}}{\pi} \sin\left(\frac{\pi\alpha}{2}\right) \Gamma(-\alpha/2) \Gamma(1+\alpha) {}_1F_1\left(\frac{1+\alpha}{2}, \frac{1}{2}, -kx^2\right). \tag{1.108}$$

Com esta introdução ao conceito de derivadas fracionárias, vamos no próximo capítulo aplicar estas ferramentas para resolver a equação de difusão fracionária. Mas, antes disso, vamos finalizar o presente capítulo resumizando as definições de derivada fracionária estudadas acima, bem como o seu comportamento sob as transformadas de Laplace e Fourier.

1.5 Sumário das Definições de Derivada Fracionária

- Derivada de Riemann-Liouville:

$$\left(\frac{d^\alpha f}{dt^\alpha}\right)_a = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \frac{d^n}{dt^n} \int_a^t (t-\tau)^{n-\alpha-1} f(\tau) d\tau \quad ; \quad (n-1 \leq \alpha < n);$$

$$\mathcal{F} \left\{ \left(\frac{d^\alpha f}{dt^\alpha}\right)_{-\infty} \right\} = (-i\omega)^\alpha \mathcal{F}\{f(t)\};$$

$$\mathcal{L} \left\{ \left(\frac{d^\alpha f}{dt^\alpha}\right)_0 \right\} = u^\alpha \hat{f}(u) - \sum_{m=0}^{n-1} \frac{d^{\alpha-m-1}}{dt^{\alpha-m-1}} f(t) \Big|_{t=0}.$$

- Derivada de Caputo:

$$\left(\frac{d^\alpha f}{dt^\alpha}\right)_a = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \int_a^t (t-\tau)^{n-\alpha-1} f^{(n)}(\tau) d\tau \quad ; \quad (n-1 \leq \alpha < n);$$

$$\mathcal{L} \left\{ \left(\frac{d^\alpha t^p}{dt^\alpha}\right)_0 \right\} = u^\alpha \hat{f}(u) - \sum_{m=0}^{n-1} u^{\alpha-m-1} \frac{d^m}{dt^m} f(t) \Big|_{t=0};$$

$$\mathcal{F} \left\{ \left(\frac{d^\alpha f}{dt^\alpha}\right)_{-\infty} \right\} = (-i\omega)^\alpha \mathcal{F}\{f(t)\}.$$

- Derivada de Riesz:

$$\frac{d^\alpha}{dx^\alpha} f(x) = \frac{1}{d(\ell, \alpha)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(\Delta_t^\ell f)(x)}{|t|^{1+\alpha}} dt, \quad (\ell \in \mathbb{Z} \text{ e } \ell > \alpha),$$

onde

$$d(\ell, \alpha) = \frac{2^{-\alpha} \pi^{3/2}}{\Gamma(1+\alpha/2) \Gamma((1+\alpha)/2) \sin(\alpha\pi/2)} \sum_{k=0}^{\ell} (-1)^{k-1} \binom{\ell}{k} k^\alpha$$

e

$$(\Delta_t^\ell f)(x) = \sum_{k=0}^{\ell} (-1)^k \binom{\ell}{k} y(x-kt);$$

$$\mathcal{F} \left\{ \frac{d^\alpha}{dx^\alpha} f(x) \right\} = |\omega|^\alpha \mathcal{F}\{f(x)\};$$

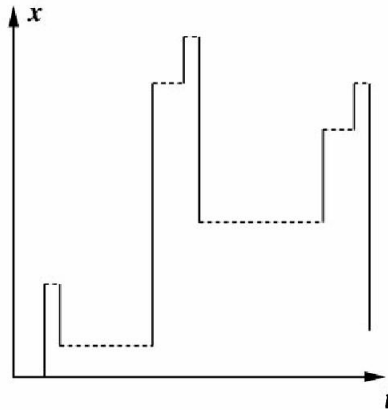
2 Equação de Difusão Fracionária

Este capítulo faz uma revisão da equação de difusão utilizando derivadas fracionárias. Como veremos a seguir, tais equações levam naturalmente a processos de difusão anômala (super e subdifusão), bem como ao limite de difusão usual, que é recuperado sob condições apropriadas.

2.1 Da CTRW à Equação de Difusão Fracionária

Como o título desta seção sugere, vamos deduzir em seguida a equação de difusão fracionária partindo de uma generalização (4) do modelo de caminhadas aleatórias conhecido como caminhada aleatória de tempo contínuo (*continuous-time random walk - CTRW*) (35). Este modelo é caracterizado pela introdução de um tempo generalizado de espera entre os passos do caminhante, não sendo, portanto, mais possível o mapeamento perfeito entre o número de passos e o tempo. Como veremos a seguir, esta característica confere a possibilidade de dinâmicas anômalas (isto é, sub ou superdifusivas) à caminhada aleatória.

Figura 4 – Gráfico esquemático de uma CTRW: as linhas contínuas representam os deslocamentos espaciais do caminhante aleatório, enquanto as linhas tracejadas ilustram o tempo de espera (4).



Vamos iniciar a formulação do problema da CTRW a partir da definição de duas distribuições de probabilidade, $\psi(t)$ e $P(r)$, que vão reger respectivamente o tempo de espera entre os passos consecutivos do caminhante e o tamanho dos passos. Como deduziremos a seguir, será a partir destas duas distribuições que surgirá a difusão anômala do caminhante aleatório. De fato, em processos subdifusivos o tempo médio entre passos, T , diverge, enquanto que processos superdifusivos são caracterizados pela variância no tamanho dos passos, σ , divergente (4).

O nosso objetivo primeiro é achar uma forma de representar a função $P(r, t)$, que dá probabilidade de encontrar o caminhante na posição r no instante de tempo t . Podemos escrever que

$$P(r, t) = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(r) \int_0^t \psi_n(\tau) \Psi(t - \tau) d\tau. \quad (2.1)$$

A equação acima pode ser entendida da seguinte forma. Inicialmente, notamos que $P_n(r)$ é a probabilidade do caminhante estar na posição r no n -ésimo passo. Por outro lado, $\psi_n(\tau)$ é a probabilidade de que o n -ésimo passo seja executado no tempo τ e $\Psi(t - \tau)$ é a probabilidade do caminhante permanecer parado durante um tempo maior que $t - \tau$. Ou seja, estamos somando todos os deslocamentos que levam a r em um tempo τ , fazendo o caminhante esperar $t - \tau$.

Em seguida, vamos transformar a Eq. (2.1) para o espaço de Fourier-Laplace, onde ela possui uma forma mais tratável:

$$\hat{P}(r, u) = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(r) \mathcal{L} \left\{ \int_0^t \psi_n(\tau) \Psi(t - \tau) d\tau \right\}. \quad (2.2)$$

Pelo teorema da convolução,

$$\hat{P}(r, u) = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(r) \mathcal{L} \{ \psi_n(t) \} \mathcal{L} \{ \Psi(t) \} \quad (2.3)$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} P_n(r) \hat{\psi}_n(u) \hat{\Psi}(u). \quad (2.4)$$

Calculando $\hat{\psi}_n(u)$ e $\hat{\Psi}(u)$,

$$\Psi(t) = \int_t^{\infty} \psi(\tau) d\tau \Rightarrow \hat{\Psi}(u) = \int_0^{\infty} dt e^{-ut} \int_t^{\infty} \psi(\tau) d\tau. \quad (2.5)$$

Logo,

$$\hat{\Psi}(u) = \frac{e^{-ut}}{(-u)} \int_t^{\infty} \psi(\tau) d\tau \Big|_0^{\infty} - \int_0^{\infty} \frac{e^{-ut}}{(-u)} (-\psi(t)) dt \quad (2.6)$$

$$= \frac{1}{u} \int_0^{\infty} \psi(\tau) d\tau - \int_0^{\infty} \frac{e^{-ut}}{u} \psi(t) dt = \frac{1}{u} \{1 - \hat{\psi}(u)\}. \quad (2.7)$$

Note, entretanto, que da mesma forma que ψ rege o tempo entre passos, $\psi_n(t)$ pode ser interpretado como a distribuição da soma dos tempos de espera de todos os passos, desde o primeiro até o n -ésimo. Além disso, é possível escrever ainda que

$$\hat{\psi}(u) = \int_0^{\infty} \psi(t) e^{-ut} dt = \langle e^{-ut} \rangle \Rightarrow \hat{\psi}_n(u) = \langle e^{-uT} \rangle = \langle e^{-u(t_1+t_2+\dots+t_n)} \rangle \quad (2.8)$$

$$= \prod_{j=1}^n \langle e^{-ut_j} \rangle = \hat{\psi}^n(u). \quad (2.9)$$

Acima usamos o fato de que os passos são estatisticamente independentes e por isso a média do produto é igual ao produto das médias, assim como a média também é independente da ordem numérica do passo.

Usando o Teorema do Limite Central, podemos expressar $P_n(r)$ na forma

$$P_n(r) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega r} \hat{P}^n(\omega) d\omega, \quad (2.10)$$

onde a posição do caminhante é expressa como a soma dos passos, $r = r_1 + r_2 + \dots + r_n$. Assim, voltando à Eq. (2.1) escrevemos

$$\hat{P}(r, u) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega r} \hat{P}^n(\omega) d\omega \hat{\psi}^n(u) \frac{1}{u} \{1 - \hat{\psi}(u)\} \quad (2.11)$$

$$= \frac{1}{2\pi} \frac{1 - \hat{\psi}(u)}{u} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega r} \sum_{n=0}^{\infty} (\hat{P}(\omega) \hat{\psi}(u))^n d\omega. \quad (2.12)$$

Usando o fato de que $|\hat{P}(\omega)| \leq 1$ e $|\hat{\psi}(u)| \leq 1$ são as transformadas de Laplace e Fourier das distribuições de probabilidade,

$$\begin{aligned} |\hat{P}(\omega)| &= \left| \int_{-\infty}^{\infty} P(x) e^{i\omega x} dx \right| \leq \int_{-\infty}^{\infty} |P(x) e^{i\omega x}| dx \\ &\leq \int_{-\infty}^{\infty} |P(x)| |e^{i\omega x}| dx = \int_{-\infty}^{\infty} |P(x)| dx = 1 \end{aligned} \quad (2.13)$$

e

$$\begin{aligned} |\hat{\psi}(u)| &= \left| \int_0^{\infty} \psi(t) e^{-ut} dt \right| \leq \int_0^{\infty} |\psi(t) e^{-ut}| dt \\ &\leq \int_0^{\infty} |\psi(t)| |e^{-ut}| dt = \int_0^{\infty} |\psi(t)| dt = 1, \end{aligned} \quad (2.14)$$

então temos

$$\hat{P}(r, u) = \frac{1 - \hat{\psi}(u)}{u} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega r} \frac{d\omega}{1 - \hat{P}(\omega) \hat{\psi}(u)}, \quad (2.15)$$

o que leva a

$$\hat{P}(\omega, u) = \frac{1 - \hat{\psi}(u)}{u} \frac{1}{1 - \hat{P}(\omega) \hat{\psi}(u)}. \quad (2.16)$$

A Eq. (2.16) é conhecida como equação de Montroll-Weiss (36) e será o ponto de partida para deduzirmos a equação de difusão fracionária. O que faremos a seguir é partir das equações para $\psi(t)$ e $P(x)$, que admitiremos conhecidas, para calcularmos as transformadas $\hat{\psi}(s)$ e $\hat{P}(\omega)$, e em seguida substituírmos na Eq. (2.16). Finalmente, transformando de volta para o espaço (x, t) obteremos uma equação diferencial fracionária para $P(x, t)$.

2.1.1 Caso Difusivo

Vamos inicialmente resolver um exemplo conhecido para demonstrar o método geral. Seja um caminhante aleatório que tenha $P(x)$ e $\psi(t)$ com momentos bem definidos. Por

exemplo, sejam uma distribuição gaussiana de passos e uma distribuição exponencial para os tempos de espera,

$$P(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-x^2/2\sigma^2}, \quad \psi(t) = \frac{1}{\tau} e^{-t/\tau}. \quad (2.17)$$

Note que a nossa escolha para a distribuição de passos é, de certa forma, bastante geral. De fato, impondo uma distribuição de passos com momentos bem definidos, esta converge para uma distribuição gaussiana, conforme o Teorema do Limite Central discutido no capítulo anterior.

Tomando as transformadas de Laplace e Fourier das distribuições acima,

$$\hat{P}(\omega) = e^{-\frac{1}{2}(\omega\sigma)^2}, \quad \psi(u) = \frac{1}{1 + \tau u}, \quad (2.18)$$

estamos interessados no limite em que $u \rightarrow 0$ e $\omega \rightarrow 0$, pois estes correspondem aos limites $t \rightarrow \infty$ e $x \rightarrow \infty$ quando qualquer tipo de transiente já foi superado. Temos, então,

$$\hat{P}(\omega, u) = \frac{1 - \hat{\psi}(u)}{u} \frac{1}{1 - \hat{P}(\omega)\hat{\psi}(u)} = \frac{1 - (1 - \tau u)}{u} \frac{1}{1 - (1 - \tau u) \left(1 - \frac{\omega^2\sigma^2}{2}\right)} \quad (2.19)$$

$$\simeq \frac{\tau}{\tau u + \omega^2\sigma^2/2} = \frac{1}{u + \frac{\omega^2\sigma^2}{2\tau}}. \quad (2.20)$$

Desse modo,

$$u\hat{P}(\omega, u) + \frac{\omega^2\sigma^2}{2\tau}\hat{P}(\omega, u) = 1. \quad (2.21)$$

Tirando, agora, a transformada inversa de Fourier e Laplace da expressão acima e usando as propriedades

$$\mathcal{F}^{-1}\{(i\omega)^n \hat{f}(\omega)\} = \frac{\partial^n f(x)}{\partial x^n}, \quad \mathcal{F}^{-1}\{1\} = \delta(x),$$

e

$$\mathcal{L}^{-1}\{u\hat{f}(u) - f(0)\} = f'(t), \quad \mathcal{L}^{-1}\{1\} = \delta(t),$$

de modo que obtemos

$$\mathcal{F}^{-1}\left\{u\hat{P}(\omega, u) + \frac{\omega^2\sigma^2}{2\tau}\hat{P}(\omega, u)\right\} = \mathcal{F}^{-1}\{1\}, \quad (2.22)$$

$$u\hat{P}(x, u) - \frac{\omega^2}{2\tau} \frac{\partial^2 \hat{P}(x, u)}{\partial x^2} = \delta(x). \quad (2.23)$$

Aplicamos a transformada inversa de Laplace,

$$\mathcal{L}^{-1}\left\{u\hat{P}(x, u) - \frac{\omega^2}{2\tau} \frac{\partial^2 \hat{P}(x, u)}{\partial x^2}\right\} = \mathcal{L}^{-1}\{\delta(x)\}, \quad (2.24)$$

tal que

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} + \mathcal{L}^{-1}\{P(x,0)\} - \frac{\omega^2}{2\tau} \frac{\partial^2 \hat{P}(x,t)}{\partial x^2} = \delta(x)\delta(t). \quad (2.25)$$

Usando agora a condição inicial $P(x,0) = \delta(x)$, encontramos

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} + \delta(x)\delta(t) - \frac{\omega^2}{2\tau} \frac{\partial^2 \hat{P}(x,t)}{\partial x^2} = \delta(x)\delta(t), \quad (2.26)$$

de modo que

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \frac{\omega^2}{2\tau} \frac{\partial^2 \hat{P}(x,t)}{\partial x^2}. \quad (2.27)$$

Chegamos, então, à famosa equação de difusão (1.16), já discutida no capítulo anterior, com $D/2 = \omega^2/2\tau$, correspondendo ao caso particular da equação de Fokker-Planck e que está associada a um CTRW cujas distribuições têm momentos finitos.

Nas próximas subseções vamos mostrar que se considerarmos distribuições com momentos divergentes obteremos equações envolvendo derivadas fracionárias associadas a processos de difusão anômala.

2.1.2 Caso Subdifusivo

Vamos partir agora da mesma distribuição de passos do caso anterior, porém agora com uma distribuição de tempos de espera $\psi(t)$ com momentos divergentes. Vamos usar o limite assintótico da distribuição de Lévy α -estável para $\psi(t)$, discutida no capítulo anterior. Note que, como distribuições de momentos divergentes convergem para a distribuição de Lévy, conforme estabelecido pelo Teorema do Limite Central generalizado, esta escolha é bem geral.

Temos, então,

$$P(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-x^2/2\sigma^2}, \quad \psi(t) \sim \left(\frac{\tau}{t}\right)^{\alpha+1}, \quad (2.28)$$

ou ainda,

$$\hat{P}(\omega) = e^{-\omega^2\sigma^2/2} \sim 1 - \frac{\omega^2\sigma^2}{2}, \quad \hat{\psi}(u) = e^{-(u\tau)^\alpha} \sim 1 - (u\tau)^\alpha. \quad (2.29)$$

Novamente, tomamos os limites $u \rightarrow 0$ e $\omega \rightarrow 0$, e substituindo na Eq. (2.16), ficamos com,

$$\begin{aligned} \hat{P}(\omega, u) &= \frac{1 - \hat{\psi}(u)}{u} \frac{1}{1 - \hat{P}(\omega)\hat{\psi}(u)} = \frac{1 - (1 - (u\tau)^\alpha)}{u} \frac{1}{1 - (1 - \omega^2\sigma^2/2)(1 - (u\tau)^\alpha)} \\ &= \frac{(u\tau)^\alpha}{u} \frac{1}{(u\tau)^\alpha + \omega^2\sigma^2/2} = \frac{1}{u + \omega^2 u^{1-\alpha} K_\alpha}. \quad K_\alpha \equiv \frac{\sigma^2}{2\tau^\alpha}, \end{aligned} \quad (2.30)$$

de onde obtemos

$$\hat{P}(\omega, u) + K_\alpha \hat{P}(\omega, u) \omega^2 u^{-\alpha} = \frac{1}{u}. \quad (2.31)$$

Tirando as transformadas inversas de Laplace e Fourier e usando a seguinte propriedade

$$\mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{1}{u}\right\} = \Theta(t) = \begin{cases} 1, & t > 0; \\ 0, & t < 0, \end{cases} \quad (2.32)$$

obtemos

$$\mathcal{F}^{-1}\{\hat{P}(\omega, u) + K_\alpha \omega^2 u^{-\alpha} \hat{P}(\omega, u)\} = \mathcal{F}^{-1}\left\{\frac{1}{u}\right\}, \quad (2.33)$$

de onde podemos escrever

$$\hat{P}(x, u) - K_\alpha u^{-\alpha} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \hat{P}(x, u) = \frac{1}{u} \delta(x). \quad (2.34)$$

Aplicando agora a transformada inversa de Laplace,

$$\mathcal{L}^{-1}\left\{\hat{P}(x, u) - K_\alpha u^{-\alpha} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \hat{P}(x, u)\right\} = \mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{1}{u}\right\} \delta(x), \quad (2.35)$$

então

$$P(x, t) - K_\alpha \frac{\partial^2}{\partial x^2} \mathcal{L}^{-1}\{u^{-\alpha} \hat{P}(x, u)\} = \Theta(t) \delta(x). \quad (2.36)$$

Acima, $\Theta(t)$ é a função teta de Heaviside. Entretanto, como usualmente $t \geq 0$, então $\Theta(t) = 1$.

Neste ponto, se utilizamos a definição de derivada fracionária de Riemann-Liouville, podemos escrever

$$\left(\frac{d^\beta f}{dt^\beta}\right)_0 = \frac{1}{\Gamma(n-\beta)} \frac{d^n}{dt^n} \int_0^t (t-\tau)^{n-\beta-1} f(\tau) d\tau = \frac{d^n}{dt^n} \left(\frac{d^{\beta-n} f}{dt^{\beta-n}}\right)_0, \quad (2.37)$$

onde

$$\left(\frac{d^{\beta-n} f}{dt^{\beta-n}}\right)_0 = \frac{1}{\Gamma(n-\beta)} \int_0^t (t-\tau)^{n-\beta-1} f(\tau) d\tau. \quad (2.38)$$

Utilizando o resultado da Eq. (1.85),

$$\mathcal{L}\left\{\left(\frac{d^{\beta-n} f}{dt^{\beta-n}}\right)_0\right\} = u^{\beta-n} \mathcal{L}\{f(t)\}, \quad (2.39)$$

de modo que

$$\mathcal{L}^{-1}\{u^{-\alpha} \hat{P}(x, u)\} = \left(\frac{d^{-\alpha} P(x, t)}{dt^{-\alpha}}\right)_0. \quad (2.40)$$

Mostramos o resultado acima apenas para o caso $0 < \alpha < 1$. Contudo, em (21) este resultado é generalizado para todo α real. Temos, portanto,

$$P(x, t) - K_\alpha \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\frac{d^{-\alpha} P(x, t)}{dt^{-\alpha}}\right)_0 = \Theta(t) \delta(x), \quad (2.41)$$

ou ainda,

$$\left(\frac{d^\alpha P(x, t)}{dt^\alpha}\right)_0 - K_\alpha \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\frac{d^\alpha}{dt^\alpha}\right)_0 \left(\frac{d^{-\alpha} P(x, t)}{dt^{-\alpha}}\right)_0 = \delta(x) \left(\frac{d^\alpha \Theta(t)}{dt^\alpha}\right)_0. \quad (2.42)$$

Note que, como estamos assumindo $t \geq 0$, a derivada da função teta pode ser expressa como a derivada da unidade, calculada na Eq. (1.76). Se usarmos a seguinte propriedade (21, 28),

$$\left(\frac{d^\alpha}{dt^\alpha}\right)_0 \left(\frac{d^{-\alpha}f(t)}{dt^{-\alpha}}\right)_0 = f(t), \quad (2.43)$$

Temos,

$$\left(\frac{d^\alpha P(x,t)}{dt^\alpha}\right)_0 - K_\alpha \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x,t) = \frac{\delta(x)}{\Gamma(1-\alpha)} t^{-\alpha}. \quad (2.44)$$

Para o caso $x \neq 0$,

$$\left(\frac{d^\alpha P(x,t)}{dt^\alpha}\right)_0 = K_\alpha \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x,t) \quad (2.45)$$

A equação acima representa a equação de difusão com derivada fracionária no tempo e derivada espacial canônica. Note que, se compararmos com a Eq. (1.16), observamos que K_α está relacionado com a constante de difusão via $K_\alpha = D/2$. Podemos citar como exemplos de fenômenos subdifusivos o movimento de células em meios biológicos (37) que pode ser modelada pela (2.45). Podemos citar como exemplo de processos subdifusivos o transporte de cargas em semicondutores (38).

2.1.3 Caso Superdifusivo

Vamos agora considerar um exemplo diverso do caso estudado na subseção anterior, isto é, uma caminhada aleatória com distribuição de passos superdifusiva, novamente a de Lévy α -estável, e uma distribuição de tempos de espera poissoniana, governada pelo Teorema do Limite Central. Teremos então

$$\psi(t) = \frac{1}{\tau} e^{-t/\tau}, \quad P(x) \sim \left(\frac{\sigma}{x}\right)^{\alpha+1}, \quad (2.46)$$

com

$$\hat{\psi}(u) = \frac{1}{1+u\tau} \simeq 1 - u\tau, \quad \hat{P}(\omega) = e^{-(|\omega|\sigma)^\alpha} \simeq 1 - (|\omega|\sigma)^\alpha. \quad (2.47)$$

Substituindo na Eq. (2.16),

$$\begin{aligned} \hat{P}(\omega, u) &= \frac{1 - \hat{\psi}(u)}{u} \frac{1}{1 - \hat{P}(\omega)\hat{\psi}(u)} = \frac{1 - (1 - u\tau)}{u} \frac{1}{1 - (1 - u\tau)(1 - (|\omega|\sigma)^\alpha)} \\ &= \frac{u\tau}{u} \frac{1}{u\tau + (|\omega|\sigma)^\alpha} = \frac{1}{u + \frac{(|\omega|\sigma)^\alpha}{\tau}} = \frac{1}{u + K_\alpha |\omega|^\alpha}, \quad K_\alpha \equiv \frac{\sigma^\alpha}{\tau}, \end{aligned} \quad (2.48)$$

de onde obtemos

$$1 = \hat{P}(\omega, u)u + \hat{P}(\omega, u)K_\alpha |\omega|^\alpha. \quad (2.49)$$

Aplicando novamente as transformadas inversas de Laplace e Fourier e utilizando as mesmas propriedades dos casos anteriores,

$$\mathcal{L}^{-1}\{1\} = \mathcal{L}^{-1}\{\hat{P}(\omega, u)u + \hat{P}(\omega, u)K_\alpha |\omega|^\alpha\}, \quad (2.50)$$

então

$$\delta(t) = \frac{\partial}{\partial t} \hat{P}(\omega, t) + \hat{P}(\omega, t) K_\alpha |\omega|^\alpha. \quad (2.51)$$

Aplicando agora a transformada de Fourier,

$$\mathcal{F}^{-1}\{\delta(t)\} = \mathcal{F}^{-1}\left\{\frac{\partial}{\partial t} \hat{P}(\omega, t) + \hat{P}(\omega, t) K_\alpha |\omega|^\alpha\right\}, \quad (2.52)$$

obtemos

$$\delta(t)\delta(x) = \frac{\partial}{\partial t} P(x, t) + \mathcal{F}^{-1}\{\hat{P}(\omega, t) K_\alpha |\omega|^\alpha\}. \quad (2.53)$$

Utilizando a derivada de Riesz, comumente definida em problemas em física, como discutido no capítulo anterior,

$$\delta(t)\delta(x) = \frac{\partial}{\partial t} P(x, t) - \frac{d^\alpha}{dx^\alpha} (P(x, t) K_\alpha). \quad (2.54)$$

Para $t \neq 0$ e $x \neq 0$, escrevemos

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = \frac{d^\alpha}{dx^\alpha} (P(x, t) K_\alpha). \quad (2.55)$$

A equação acima representa a equação de difusão com derivada fracionária no espaço e derivada temporal canônica. Mais uma vez, ressaltamos a relação entre o parâmetro K_α e a constante de difusão $D/2$ presente na Eq. (1.16). Vamos, em seguida, resolver as equações diferenciais fracionárias para os casos subdifusivo e superdifusivo.

2.2 Solução dos Casos Subdifusivo e Superdifusivo

2.2.1 Caso Subdifusivo

A partir da Eq. (2.30), escrevemos

$$\hat{P}(\omega, u) = \frac{1}{u + \omega^2 u^{1-\alpha} K_\alpha} = \frac{1}{u^{1-\alpha} K_\alpha} \frac{1}{(\omega^2 + u^\alpha / K_\alpha)}. \quad (2.56)$$

Voltando para o “espaço real”,

$$\hat{P}(x, u) = \frac{1}{u^{1-\alpha} K_\alpha} \mathcal{F}^{-1}\left\{\frac{1}{(\omega^2 + u^\alpha / K_\alpha)}\right\}. \quad (2.57)$$

Utilizando

$$\mathcal{F}^{-1}\left\{\frac{1}{(\omega^2 + u^\alpha / K_\alpha)}\right\} = \frac{e^{-\sqrt{u^\alpha / K_\alpha} |x|}}{2\sqrt{u^\alpha / K_\alpha}}, \quad (2.58)$$

logo

$$\hat{P}(x, u) = \frac{e^{-\sqrt{u^\alpha / K_\alpha} |x|}}{2u^{1-\alpha/2} \sqrt{K_\alpha}}. \quad (2.59)$$

Aplicando agora a transformada inversa de Laplace, obtemos

$$P(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{K_\alpha}} \mathcal{L}^{-1}\left\{u^{\alpha/2-1} e^{-s^{\alpha/2} \sqrt{1/K_\alpha} |x|}\right\}. \quad (2.60)$$

A equação acima pode ser expressa na forma (39)

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ u^{-\rho} e^{-au^\sigma} \right\} = t^{\rho-1} H_{1,1}^{1,0} \left[at^{-\sigma} \left| \begin{matrix} \{\rho, \sigma\} \\ \{0, 1\} \end{matrix} \right. \right], \quad (2.61)$$

onde $H_{p,q}^{m,n} \left[z \left| \begin{matrix} \{a_p, A_p\} \\ \{b_q, B_q\} \end{matrix} \right. \right]$ é a função de Fox (39, 40, 4). Discutiremos algumas propriedades da função de Fox no Apêndice desta tese, de onde podemos deduzir que

$$\begin{aligned} P(x, t) &= \frac{1}{2\sqrt{K_\alpha}} t^{-\alpha/2} H_{1,1}^{1,0} \left[\frac{|x|}{\sqrt{K_\alpha}} t^{-\alpha/2} \left| \begin{matrix} \{1 - \alpha/2, \alpha/2\} \\ \{0, 1\} \end{matrix} \right. \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{4K_\alpha} t^\alpha} H_{1,1}^{1,0} \left[\frac{|x|}{\sqrt{K_\alpha} t^\alpha} \left| \begin{matrix} \{1 - \alpha/2, \alpha/2\} \\ \{0, 1\} \end{matrix} \right. \right]. \end{aligned} \quad (2.62)$$

A solução acima pode ser expressa na forma computável como (4, 39, 40)

$$P(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4t^\alpha}} \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-1)^\nu |x|^\nu \left(t^{-\frac{\alpha}{2}} \right)^\nu K_\alpha^{-(\nu+1)/2}}{\nu! \Gamma \left(-\frac{\nu\alpha}{2} - \frac{\alpha}{2} + 1 \right)}. \quad (2.63)$$

a partir da qual fazemos o gráfico da solução no caso subdifusivo, Fig. 5.

No limite $\alpha = 1$, a Eq. (2.45) se torna a equação de difusão normal e, consistentemente, a partir da Eq. (2.63) temos que

$$P(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi K_\alpha t}} e^{-x^2/4K_\alpha t}. \quad (2.64)$$

Recuperamos, então, a solução gaussiana apresentada na Eq. (1.30). Na Fig. 6, apresentamos uma comparação entre as soluções da equação de difusão para diferentes valores de α e mesmo t . Note que quanto maior o valor de α , mais a partícula se difunde. Isto pode ser entendido pela forma de $\psi(t)$. De fato, como $\psi(t) \sim t^{-(\alpha+1)}$, então quanto maior o valor de α , menor a probabilidade de que o caminhante fique um longo tempo parado sem executar passos e, portanto, se difunde mais.

O comportamento subdifusivo também pode ser verificado se observarmos que

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle(u) &= \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \hat{P}(x, u) dx = \lim_{\omega \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \hat{P}(x, u) e^{i\omega x} dx \\ &= \lim_{\omega \rightarrow 0} \mathcal{F} \left\{ x^2 \hat{P}(x, u) \right\} = \lim_{\omega \rightarrow 0} (-1) \frac{d^2}{d\omega^2} \hat{P}(\omega, u). \end{aligned} \quad (2.65)$$

Como

$$\hat{P}(\omega, u) = \frac{1}{u^{1-\alpha} K_\alpha} \frac{1}{(\omega^2 + u^\alpha / K_\alpha)}, \quad (2.66)$$

então

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{d^2}{d\omega^2} P(\omega, u) = \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{-2}{u^{1-\alpha} K_\alpha} \frac{(u^\alpha / K_\alpha - 3\omega^2)^2}{(\omega^2 + u^\alpha / K_\alpha)^3} = \frac{-2K_\alpha}{u^{1+\alpha}}, \quad (2.67)$$

Figura 5 – Gráfico da probabilidade $P(x,t)$, dada pela Eq. (2.63), em função do tempo para $\alpha = 1$, que representa o limite da equação de difusão normal, para $t = 0.05, 0.2, 1$, e $\alpha = 1/2$ para $t = 0.1, 1, 10$, ambos utilizando $K_\alpha = 1$.

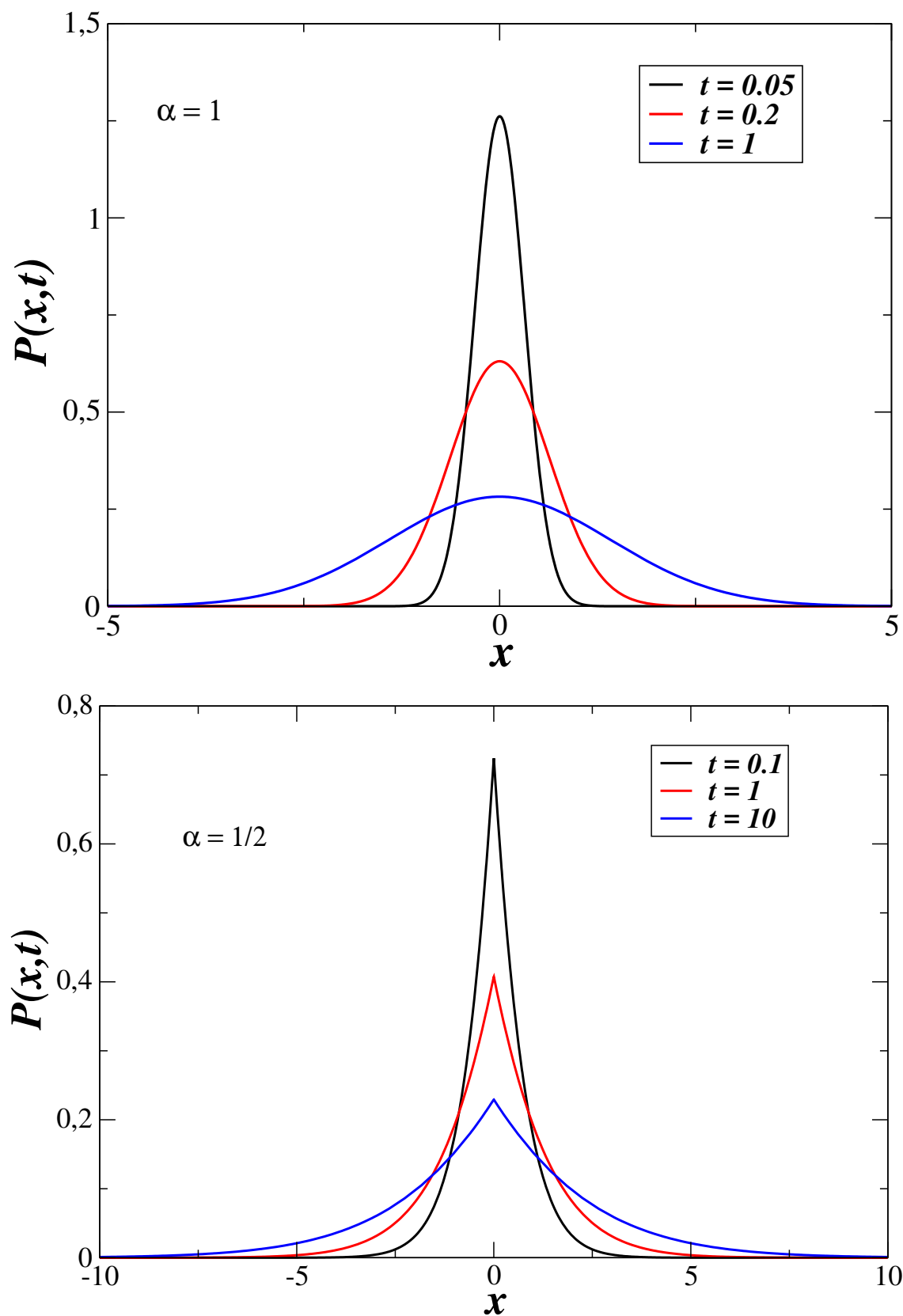
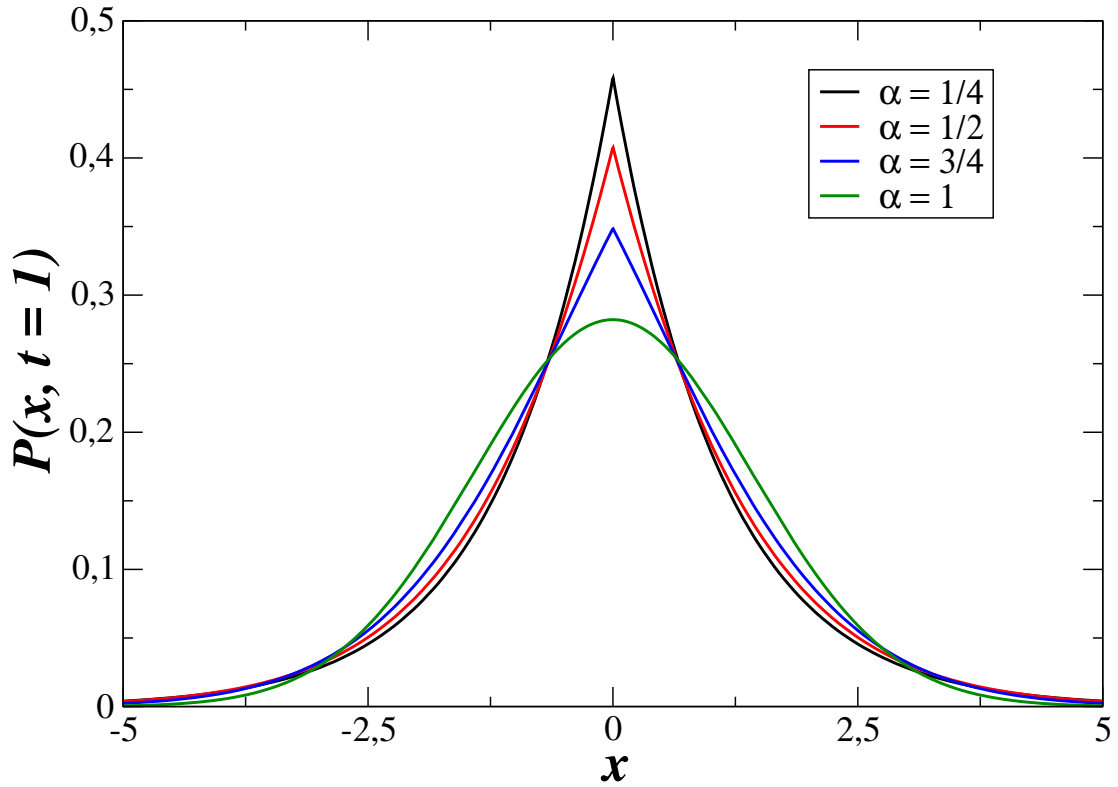


Figura 6 – Comparação da probabilidade $P(x,t)$ dada pela Eq. (2.63) para diversos valores de α em $t = 1$ com $K_\alpha = 1$.



de modo que, finalmente,

$$\langle x^2 \rangle(u) \frac{2K_\alpha}{u^{1+\alpha}} \implies \langle x^2 \rangle(t) = \frac{2K_\alpha t^\alpha}{\Gamma(1+\alpha)}. \quad (2.68)$$

Vemos, então, que o comportamento subdifusivo apresentado na Fig. 6 é verificado no regime $0 < \alpha < 1$, onde temos um caminhante aleatório cujos tamanhos dos passos são sorteados segundo uma distribuição gaussiana e os tempos de espera segundo a distribuição de Lévy, gerando tipicamente longos tempos de espera.

2.2.2 Caso Superdifusivo

Vamos agora analisar o caso superdifusivo. A partir da Eq. (2.48), temos que

$$\hat{P}(\omega, u) = \frac{1}{u + K_\alpha |\omega|^\alpha}. \quad (2.69)$$

Invertendo as transformadas de Fourier e Laplace,

$$\hat{P}(\omega, t) = \mathcal{L}^{-1} \{P(\omega, u)\} = \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{1}{u + K_\alpha |\omega|^\alpha} \right\} = e^{-K_\alpha |\omega|^\alpha t}, \quad (2.70)$$

de modo que

$$\begin{aligned}
 P(x,t) &= \mathcal{F}^{-1} \{P(\omega,t)\} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega x} e^{-K_\alpha |\omega|^\alpha t} d\omega \\
 &= \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \cos(\omega x) e^{-K_\alpha \omega^\alpha t} d\omega \\
 &= \frac{1}{\alpha\pi} \int_0^{\infty} \cos(\omega x) H_{0,1}^{1,0} \left[\omega (K_\alpha t)^{1/\alpha} \middle| \frac{\overline{}}{\{0,1/\alpha\}} \right] d\omega,
 \end{aligned} \tag{2.71}$$

onde usamos a propriedade (4, 39, 40)

$$H_{0,1}^{1,0} \left[z \middle| \frac{\overline{}}{\{b,B\}} \right] = B^{-1} z^{b/B} \exp \left(z^{1/B} \right). \tag{2.72}$$

Ao usarmos o seguinte resultado (41),

$$\begin{aligned}
 \int_0^{\infty} dt \, t^{\rho-1} \cos(kt) H_{p,q}^{m,n} \left[at^\mu \middle| \frac{\{a_p, A_p\}}{\{b_q, B_q\}} \right] \\
 = \frac{\pi}{k^\rho} H_{q+1,p+2}^{n+1,m} \left[\frac{k^\mu}{a} \middle| \frac{\{1-b_q, B_q\} \{ \frac{1+\rho}{2}, \frac{\mu}{2} \}}{\{\rho, \mu\} \{1-a_p, A_p\} \{ \frac{1+\rho}{2}, \frac{\mu}{2} \}} \right] \quad ; \quad k^\mu > 0,
 \end{aligned} \tag{2.73}$$

podemos escrever (4)

$$P(x,t) = \frac{1}{\alpha x} H_{2,2}^{1,1} \left[\frac{|x|}{(K_\alpha t)^{1/\alpha}} \middle| \frac{\{1,1/\alpha\} \{1,1/2\}}{\{1,1\} \{1,1/2\}} \right], \tag{2.74}$$

ou ainda, na forma computável,

$$P(x,t) = \frac{1}{\alpha} \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-x)^\nu \cos \left(\frac{\pi\nu}{2} \right) \Gamma \left(\frac{\nu+1}{\alpha} \right)}{\nu! \pi (K_\alpha t)^{(\nu+1)/\alpha}}. \tag{2.75}$$

Como casos particulares temos, para $\alpha = 1$,

$$P(x,t) = \frac{1}{\pi} \frac{K_\alpha t}{(K_\alpha t)^2 + x^2}, \tag{2.76}$$

e para o caso $\alpha = 2$,

$$P(x,t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}\sqrt{K_\alpha t}} e^{-x^2/4K_\alpha t}. \tag{2.77}$$

Note que no limite $\alpha = 2$ temos uma distribuição gaussiana, como esperado. Este resultado é consistente com o fato de que nesse limite a Eq. (2.55) se torna a equação de difusão normal, que, como vimos anteriormente, tem, de fato, a gaussiana como solução. Além disso, a partir da Eq. (2.70) vemos que $P(\omega,t)$ também pode ser relacionada com a função característica da distribuição de Lévy α -estável, de modo que $P(x,t)$ é identificada, portanto, com a própria distribuição de Lévy α -estável (4). Este resultado

também é consistente com o Teorema do Limite Central generalizado. De fato, se um caminhante aleatório possui os tamanhos de passos regidos pela distribuição de Lévy α -estável, então a probabilidade de encontrar o caminhante em uma posição x , após um grande número de passos, é dada por uma distribuição de Lévy α -estável. No limite $\alpha = 2$, a distribuição gaussiana é recuperada, como esperado.

A solução do caso superdifusivo encontra-se ilustrada na Fig. 7. Por outro lado, a Fig. 8 mostra uma comparação entre as soluções da equação de difusão fracionária para diferentes valores de α . Note que quanto menor o valor de α , maior a probabilidade de encontrar o caminhante em pontos distantes da origem da caminhada, se comparada com o caso gaussiano, demonstrando assim a superdifusividade para $\alpha < 2$.

O comportamento superdifusivo também pode ser verificado calculando os momentos da distribuição. O momento de ordem q é dado por

$$\begin{aligned} \langle x^q \rangle(t) &= \int_{-\infty}^{\infty} x^q P(x,t) dx = 2 \int_0^{\infty} x^q P(x,t) dx \\ &= \frac{2}{\alpha} \int_0^{\infty} x^{q-1} H_{2,2}^{1,1} \left[\frac{|x|}{(K_\alpha t)^{1/\alpha}} \middle| \begin{matrix} \{1, \frac{1}{\alpha}\} \{1, \frac{1}{2}\} \\ \{1, 1\} \{1, \frac{1}{2}\} \end{matrix} \right] dx. \end{aligned} \quad (2.78)$$

Temos, acima, uma transformada de Mellin (4, 39), definida por

$$\mathcal{M}\{f(t)\} = \int_0^{\infty} t^{s-1} f(t) dt. \quad (2.79)$$

As funções H se transformam segundo Mellin da seguinte forma (4, 39):

$$\mathcal{M} \left\{ H_{p,q}^{m,n} \left[at \middle| \begin{matrix} \{a_p, A_p\} \\ \{b_q, B_q\} \end{matrix} \right] \right\} = a^{-s} \frac{\prod_{j=1}^m \Gamma(b_j + B_j s) \prod_{j=1}^n \Gamma(1 - a_j - A_j s)}{\prod_{j=m+1}^q \Gamma(1 - b_j - B_j s) \prod_{j=n+1}^p \Gamma(a_j + A_j s)}. \quad (2.80)$$

Logo, escrevemos

$$\langle x^q \rangle(t) = \frac{2}{\alpha} (K_\alpha t)^{q/\alpha} \frac{\Gamma(1+q) \Gamma(-q/\alpha)}{\Gamma(-q/2) \Gamma(1+q/2)} = \frac{2}{\pi} \Gamma(q) \Gamma\left(1 - \frac{q}{\alpha}\right) \sin\left(\frac{q\pi}{2}\right) (K_\alpha t)^{q/\alpha}. \quad (2.81)$$

Para o caso $q \rightarrow 2^-$, temos que $\langle x^2 \rangle(t) \sim t^{2/\alpha}$, o que implica em superdifusão para o caso $\alpha < 2$. Temos, portanto, uma verificação do comportamento superdifusivo da solução acima da equação de difusão fracionária (2.55). Como exemplo de processo superdifusivo, temos o movimento de elétrons em semicondutores que foi verificado experimentalmente em (42). Além disso, pequenas modificações da (2.55) permitem escrever a uma equação de Schrödinger fracionária (25).

Neste capítulo, vimos como as derivadas fracionárias podem ser usadas para modelar a difusão anômala no espaço livre. No próximo capítulo, vamos discutir o uso do Método das Imagens para a obtenção de soluções em espaços finitos, e analisaremos os casos em que esta solução é de fato válida.

Figura 7 – Gráfico da probabilidade $P(x,t)$ dada pela Eq. (2.75), em função do tempo para $\alpha = 1$ e $\alpha = 3/2$, para $t = 1, 5, 10$, ambos utilizando $K_\alpha = 1$.

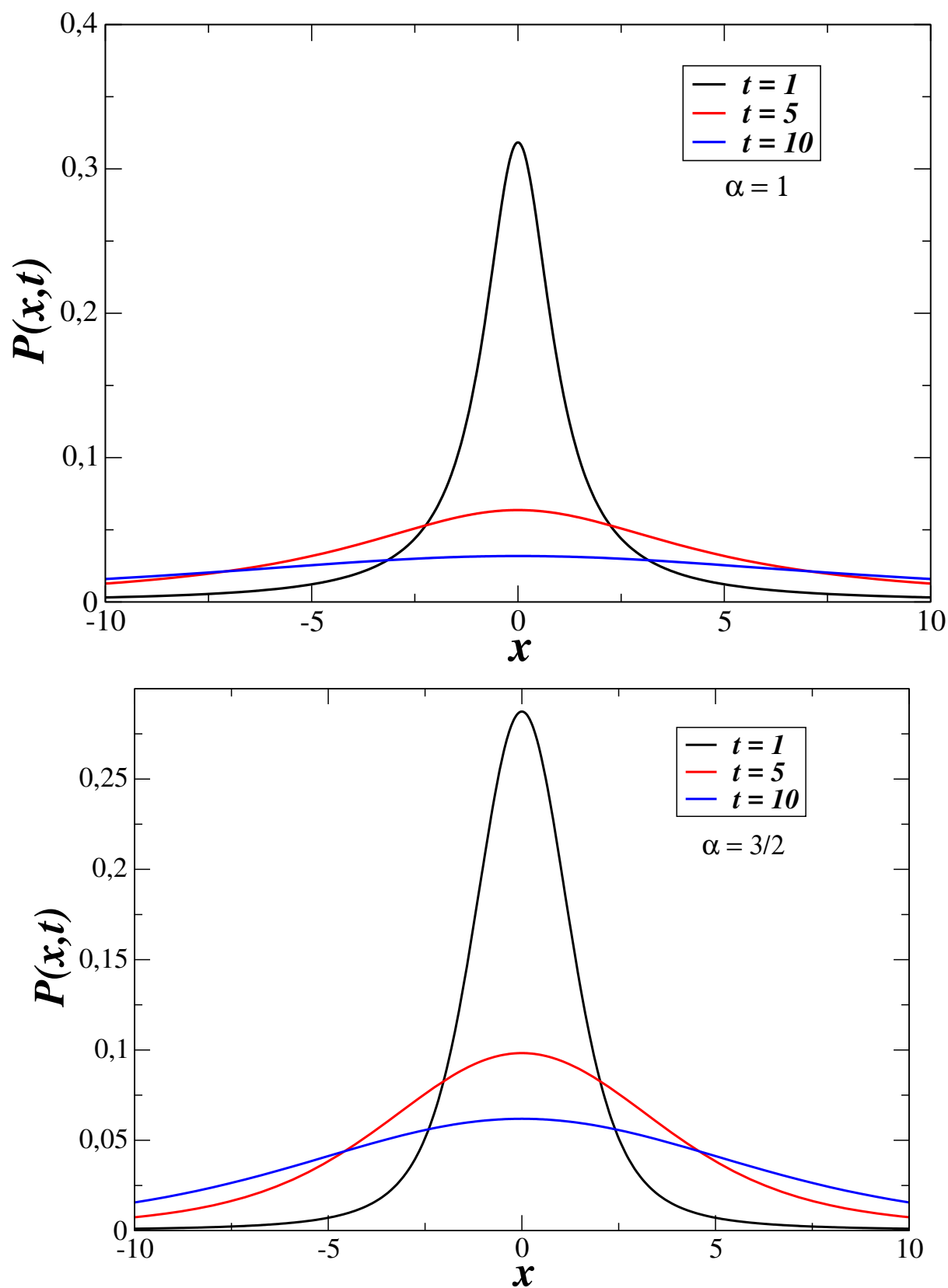
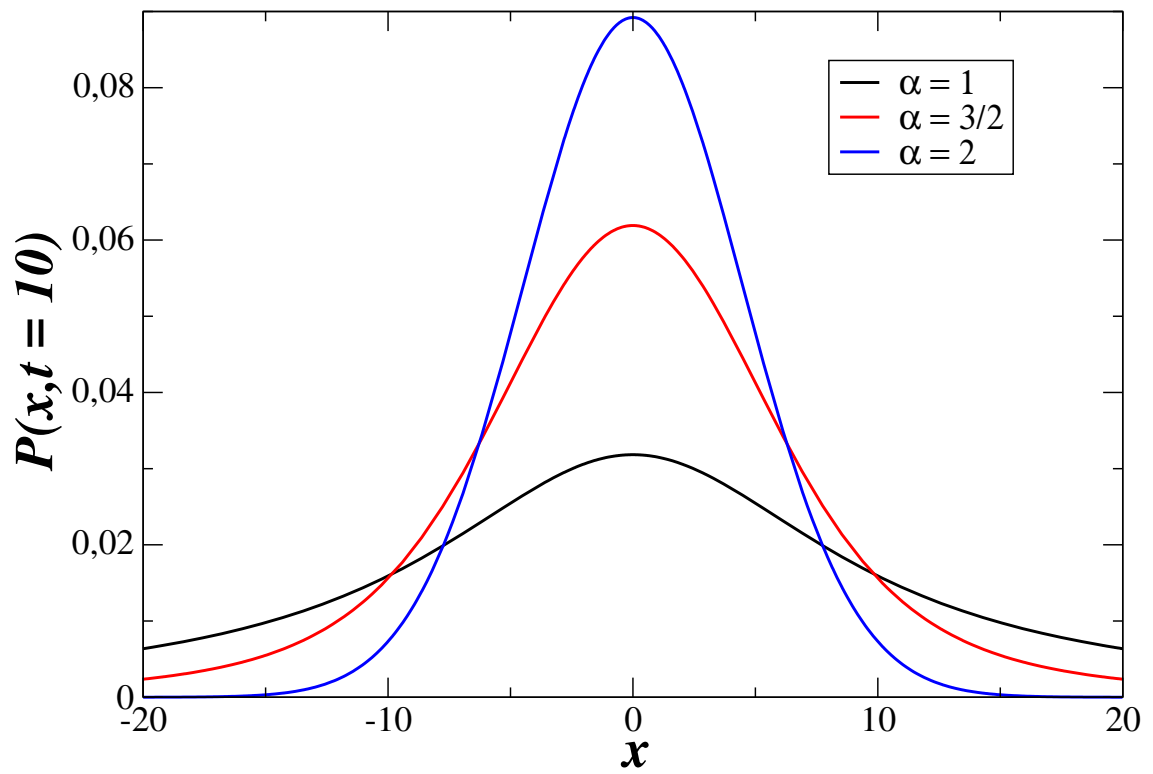


Figura 8 – Comparação das probabilidade $P(x,t)$ para $t = 10$ dadas pela Eq. (2.75) para diversos valores de α utilizando $K_\alpha = 1$.



3 Difusão com Condições de Contorno

Neste capítulo, vamos discutir como relacionar a difusão em espaços finitos e semi-infinitos, onde precisamos introduzir condições de contorno, com a solução para o caso livre, discutida no capítulo anterior. A validade destas soluções será analisada à luz do teorema de Sparre-Andersen.

3.1 Funções de Green e Método das Imagens

Vamos, inicialmente, obter a função de Green (43, 44) da equação de difusão normal para o caso livre e relacioná-la com a função de Green do espaço finito (45). Seja a equação de difusão normal com a condição inicial $P(x, t = 0) = f(x)$,

$$\frac{\partial P}{\partial t} = A \frac{\partial^2 P}{\partial x^2}. \quad (3.1)$$

Tirando a transformada de Laplace,

$$\begin{aligned} \mathcal{L} \left\{ \frac{\partial P}{\partial t} \right\} &= A \frac{\partial^2}{\partial x^2} \mathcal{L} \{P(x, t)\} \\ u\hat{P}(x, u) - P(x, 0) &= A \frac{\partial^2}{\partial x^2} \hat{P}(x, u) \\ u\hat{P}(x, u) - A \frac{\partial^2}{\partial x^2} \hat{P}(x, u) &= f(x), \end{aligned} \quad (3.2)$$

podemos então escrever,

$$\hat{P}(x, u) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} G(x, y; u) f(y) dy, \quad (3.3)$$

onde $G(x, y; s)$ é a função de Green. Observamos (43) que, para uma equação da forma

$$D_x P(x) = f(x) \quad D_x \equiv \sum_{n=0}^m a_n \frac{d^n}{dx^n}, \quad (3.4)$$

a solução pode ser expressa como

$$P(x) = \int_{-\infty}^{\infty} G(x, y) f(y) dy, \quad (3.5)$$

onde

$$D_x G(x, y) = \delta(x - y). \quad (3.6)$$

Ao mesmo tempo, podemos definir uma probabilidade de transição $T(x, y; t)$, que determina a probabilidade de que o caminhante saia da posição y e chegue na posição x , percorrendo esta distância num tempo t . Temos, então, que

$$P(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} T(x, y; t) f(y) dy. \quad (3.7)$$

Podemos relacionar a probabilidade de transição com a função de Green pela relação,

$$\begin{aligned}\hat{P}(x,u) &= \mathcal{L}\{P(x,t)\} = \mathcal{L}\left\{\int_{-\infty}^{\infty} T(x,y;t)f(y)dy\right\} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dy f(y) \mathcal{L}\{T(x,y;t)\} = \int_{-\infty}^{\infty} G(x,y;u)f(y)dy,\end{aligned}\quad (3.8)$$

de modo que

$$G(x,y;u) = \mathcal{L}\{T(x,y;t)\}. \quad (3.9)$$

Observe, ainda, que podemos escrever a probabilidade de transição como

$$T(x,y;t) = \int_0^t T(x,z;t-\tau)F(z,y;\tau)d\tau,, \quad (3.10)$$

onde $F(z,y;\tau)$ é a probabilidade de atingir a posição z pela primeira vez no tempo τ , partindo de y . Note, portanto, que estamos somando, para diferentes valores de τ , as probabilidades do caminhante estar em uma posição z em um tempo τ e de ir para x , demorando um tempo $t - \tau$.

Tirando a transformada de Laplace da Eq. (3.10), obtemos

$$G(x,y;u) = G(x,z;u)\hat{F}(z,y;u). \quad (3.11)$$

Note, contudo, que, dada a simetria do problema, $T(x,y;t) = T(y,x;t)$, pois estamos admitindo uma distribuição simétrica de passos para a direita e para a esquerda. Isto também implica que $G(x,y;u) = G(y,x;u)$. Então, podemos escrever

$$G(y,x;u) = G(z,x;u)\hat{F}(z,y;u). \quad (3.12)$$

Multiplicando a equação $f(x)$ e integrando,

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} G(y,x;u)f(x)dx &= \int_{-\infty}^{\infty} G(z,x;u)\hat{F}(z,y;u)f(x)dx \\ \hat{P}(y,u) &= \hat{P}(z,u)\hat{F}(z,y;u).\end{aligned}\quad (3.13)$$

Voltando, agora, para a Eq. (3.2), escrevemos

$$\begin{aligned}u\hat{P}(x,u) - A\frac{\partial^2}{\partial x^2}\hat{P}(x,u) &= f(x) \\ u\left[\hat{P}(y,u)\hat{F}(y,x;u)\right] - A\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[\hat{P}(y,u)\hat{F}(y,x;u)\right] &= f(x).\end{aligned}\quad (3.14)$$

Vamos supor que x esteja concentrado no intervalo (y,∞) , de modo que, para um valor de x fora desse intervalo, assumimos $f(x) = 0$. Em outras palavras, escrevemos

$$0 = \hat{P}(y,u)\left[u\hat{F}(y,x;u) - A\frac{\partial^2}{\partial x^2}\hat{F}(y,x;u)\right]. \quad (3.15)$$

Temos de ter, então,

$$u\hat{F}(y,x;u) = A\frac{\partial^2}{\partial x^2}\hat{F}(y,x;u), \quad (3.16)$$

de modo que

$$\hat{F}(y, x; u) = C(y; u) \exp \left(-\sqrt{\frac{u}{A}} x \right). \quad (3.17)$$

Aqui, $C(y; u)$ é uma função que depende apenas de y e u , que serão determinados a seguir.

A partir da Eq. (3.13), escrevemos

$$\hat{P}(x, u) = \hat{P}(y, u) \hat{F}(y, x; u). \quad (3.18)$$

Se tomarmos o limite $x \rightarrow y$, temos de ter $\hat{F}(y, y; u) = 1$. Portanto,

$$\begin{aligned} 1 = \hat{F}(y, y; u) &= C(y; u) \exp \left(-\sqrt{\frac{u}{A}} y \right) \\ C(y; u) &= \exp \left(\sqrt{\frac{u}{A}} y \right). \end{aligned} \quad (3.19)$$

Obtemos, então,

$$\hat{F}(y, x; u) = \exp \left(-\sqrt{\frac{u}{A}} (x - y) \right). \quad (3.20)$$

Contudo, mais uma vez, dada a simetria do problema, $\hat{F}(y, x; u) = \hat{F}(x, y; u)$, pois a distribuição de passos é simétrica. Logo, podemos escrever

$$\hat{F}(y, x; u) = \exp \left(-\sqrt{\frac{u}{A}} |x - y| \right). \quad (3.21)$$

Vamos agora determinar $G(x, y; u)$. A partir da Eq. (3.11),

$$G(x, y; u) = G(x, z; u) \hat{F}(z, y; u). \quad (3.22)$$

Para $z = x$, ficamos com

$$G(x, y; u) = G(x, x; u) \hat{F}(x, y; u). \quad (3.23)$$

Dada a já citada simetria de $G(x, y; u)$, observamos que $G(x, x; u)$ tem de ser uma função que depende apenas de u . Da Eq. (3.3), obtemos

$$\hat{P}(x, u) = \int_{-\infty}^{\infty} G(x, y; u) f(y) dy = \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{G(x, x; u)}_{C(u)} \hat{F}(x, y; u) f(y) dy \quad (3.24)$$

$$= C(u) \int_{-\infty}^{\infty} \hat{F}(x, y; u) f(y) dy. \quad (3.25)$$

O resultado acima vale para todo $f(x)$. Vamos, portanto, determinar $C(u)$ usando $f(x) = 1$ e com isso determinar $G(x, y; u)$:

$$\hat{P}(x, u) = C(u) \int_{-\infty}^{\infty} \hat{F}(x, y; u) f(y) dy \quad (3.26)$$

$$= C(u) \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(-\sqrt{\frac{u}{A}} |x - y| \right) dy = 2C(u) \sqrt{\frac{A}{u}}. \quad (3.27)$$

Substituindo de volta na Eq. (3.2),

$$\begin{aligned} 1 &= u\hat{P}(x,u) - A \frac{\partial^2}{\partial x^2} \hat{P}(x,u) = 2C(u)\sqrt{Au}, \\ C(u) &= \frac{1}{2\sqrt{Au}}. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Então, podemos escrever $\hat{G}(x,y;u)$ tal que

$$\hat{G}(x,y;u) = \frac{1}{2\sqrt{Au}} \exp\left(-\sqrt{\frac{u}{A}}|x-y|\right). \quad (3.29)$$

Com isso, podemos resolver a equação de difusão para um $f(x)$ arbitrário. Se, por exemplo, fizermos $f(x) = \delta(x - x_0)$, recuperamos a solução obtida no começo desta tese. Vamos verificar esse resultado a seguir. Escrevendo

$$\hat{P}(x,u) = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{G}(x,y;u) f(y) dy = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\sqrt{Au}} \exp\left(-\sqrt{\frac{u}{A}}|x-y|\right) \delta(y - x_0) dy \quad (3.30)$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{Au}} \exp\left(-\sqrt{\frac{u}{A}}|x - x_0|\right), \quad (3.31)$$

e, em seguida, invertendo a transformada de Laplace, obtemos

$$P(x,t) = \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{1}{2\sqrt{Au}} \exp\left(-\sqrt{\frac{u}{A}}|x - x_0|\right) \right\} \quad (3.32)$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{A\pi t}} \exp\left[-\left(\frac{|x - x_0|}{\sqrt{A}}\right)^2 \frac{1}{4t}\right] = \frac{e^{-(x-x_0)^2/4At}}{\sqrt{4A\pi t}}. \quad (3.33)$$

Esta é a mesma solução obtida na Eq. (1.25), identificando $A = D/2$. Podemos utilizar o método discutido nesta seção para obter também a solução da equação de difusão para espaços semi-infinitos e finitos (45). Com isso, precisaremos também introduzir as condições de contorno apropriadas ao problema. Vamos tratar, em seguida, as condições de contorno absorventes. Nesse caso, assumimos que, ao atingir a barreira, o caminhante é retirado do sistema e a caminhada se encerra, de modo que a probabilidade de encontrar o caminhante na barreira é nula (17).

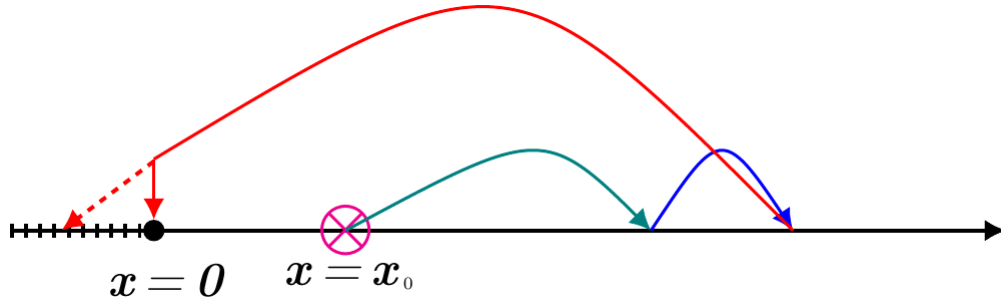
3.1.1 Uma Barreira Absorvente

Vamos tratar nesta seção o caso de uma barreira absorvente localizada em $x = 0$. Nessa situação, o movimento do caminhante está restrito ao semi-eixo positivo, já que, ao atingir a barreira, a caminhada termina, como mostrado na Fig. 9.

Podemos escrever a taxa de transição do caso semi-infinito, $T^{(1)}(x,y;t)$, em função da taxa do caso livre, $T(x,y;t)$, pela relação,

$$T^{(1)}(x,y;t) = T(x,y;t) - \int_0^t T(x,0;t-\tau)F(0,y;\tau)d\tau. \quad (3.34)$$

Figura 9 – Esquema da movimentação de um caminhante aleatório em um espaço semi-infinito com barreira absorvente. A caminhada inicia em $x = x_0$ e o caminhante é absorvido pela barreira se passa para o semi-eixo negativo.



Note que estamos subtraindo da taxa de transição do caso livre a probabilidade de que o caminhante, iniciando em y , atinja a origem e volte para x . Com isso, estamos garantindo que a transição de y para x só ocorre via trajetórias contidas no semi-eixo positivo.

Tirando a transformada de Laplace da equação acima, obtemos

$$\widehat{G}^{(1)}(x, y; u) = \widehat{G}(x, y; u) - \widehat{G}(x, 0; u) \widehat{F}(0, y; u). \quad (3.35)$$

Utilizando os resultados da seção anterior,

$$\begin{aligned} \widehat{G}^{(1)}(x, y; u) &= \frac{1}{2\sqrt{Au}} \left\{ \exp\left(-\sqrt{\frac{u}{A}}|x-y|\right) - \exp\left(-\sqrt{\frac{u}{A}}|x|\right) \exp\left(-\sqrt{\frac{u}{A}}|-y|\right) \right\} \\ &= \frac{1}{2\sqrt{Au}} \left\{ \exp\left(-\sqrt{\frac{u}{A}}|x-y|\right) - \exp\left(-\sqrt{\frac{u}{A}}(x+y)\right) \right\} \\ &= \widehat{G}(x, y; u) - \widehat{G}(-x, y; u). \end{aligned} \quad (3.36)$$

Podemos, então, inverter a transformada de Laplace e obter

$$T^{(1)}(x, y; t) = T(x, y; t) - T(-x, y; t). \quad (3.37)$$

Se utilizarmos $P(x, 0) = f(x) = \delta(x - x_0)$, logo

$$\begin{aligned} P^{(1)}(x, t) &= \int_0^\infty T^{(1)}(x, y; t) f(y) dy = \int_0^\infty [T(x, y; t) - T(-x, y; t)] \delta(y - x_0) dy \\ &= P(x, x_0, t) - P(-x, x_0, t). \end{aligned} \quad (3.38)$$

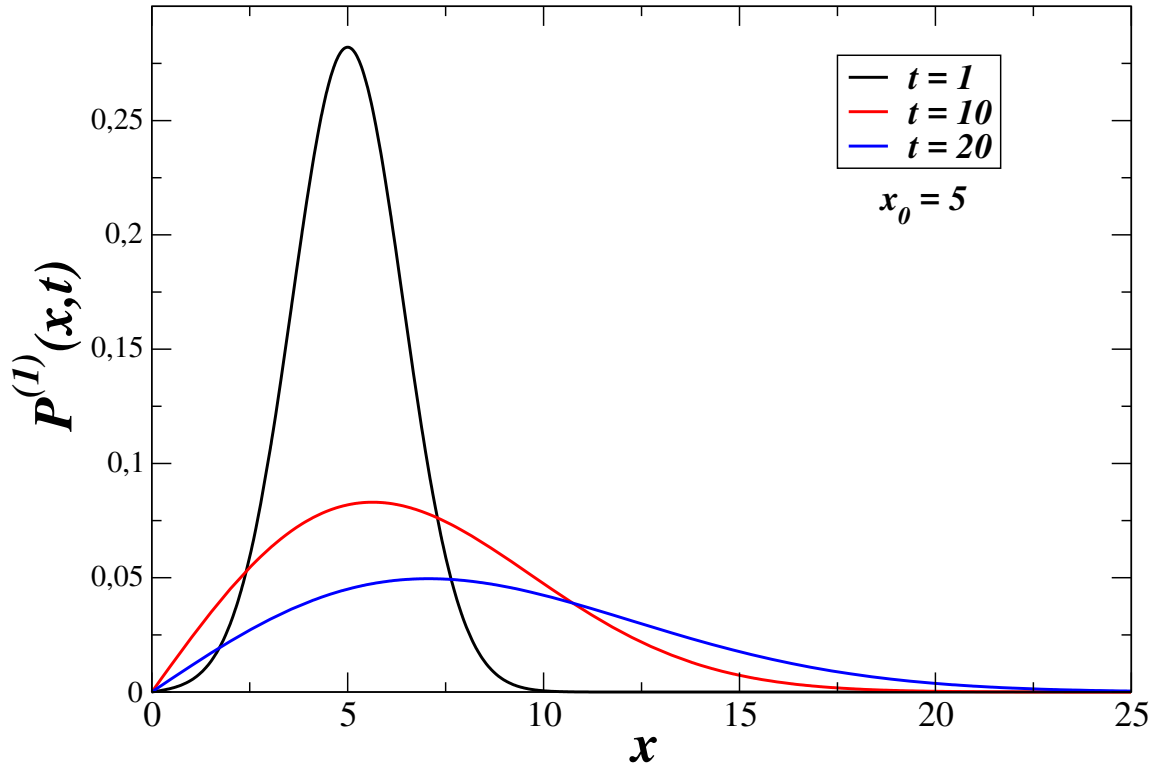
O resultado acima lembra em muito a solução via método das imagens para o potencial eletrostático (44). Podemos imaginar que estamos colocando um “caminhante imagem” no eixo negativo, de modo que a condição de contorno é satisfeita ao notar que $P^{(1)}(x = 0, t) = 0$.

Utilizando o resultado da Eq. (3.33), temos

$$P^{(1)}(x, t) = \frac{e^{-(x-x_0)^2/4At}}{\sqrt{4A\pi t}} - \frac{e^{-(x+x_0)^2/4At}}{\sqrt{4A\pi t}}. \quad (3.39)$$

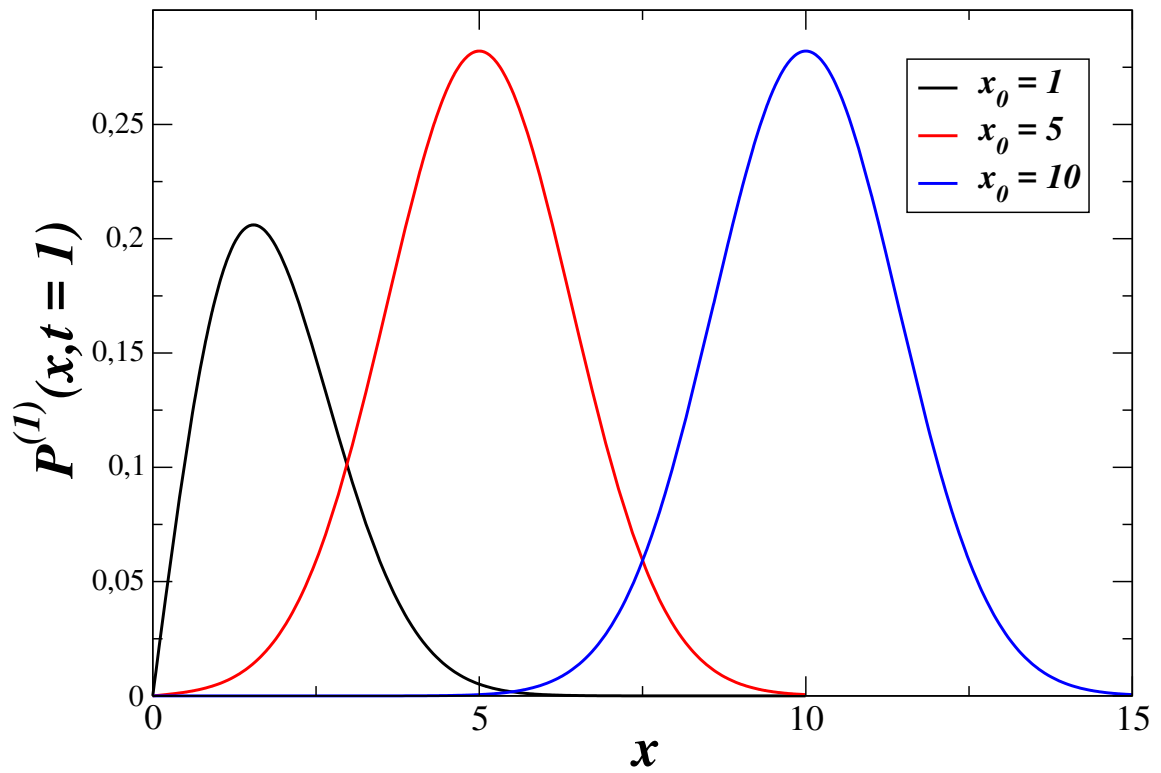
Na Fig. 10, mostramos um gráfico da equação acima para vários valores de t e um x_0 fixo. Note que, assim como no caso livre, a partícula que estava localizada em x_0 se difunde. Observe também que a probabilidade de encontrar o caminhante na origem é sempre nula.

Figura 10 – Gráfico da probabilidade $P^{(1)}(x,t)$ para o caso difusivo, dada pela Eq. (3.39), para $t = 1, 10, 20$ e $x_0 = 5$. A barreira absorvente está localizada em $x = 0$.



Na Fig. 11, mostramos o gráfico de $P^{(1)}(x,t)$ para diferentes valores de x_0 . Observe que, para um x_0 próximo da barreira, a probabilidade de que o caminhante seja absorvido é maior. De fato, quanto maior o valor de x_0 , menor o efeito da barreira à medida que o tempo passa.

Figura 11 – Gráfico da probabilidade $P^{(1)}(x,t)$ para o caso difusivo, dada pela Eq. (3.39) $t = 1$ e $x_0 = 1, 5, 10$. A barreira absorvente está localizada em $x = 0$.

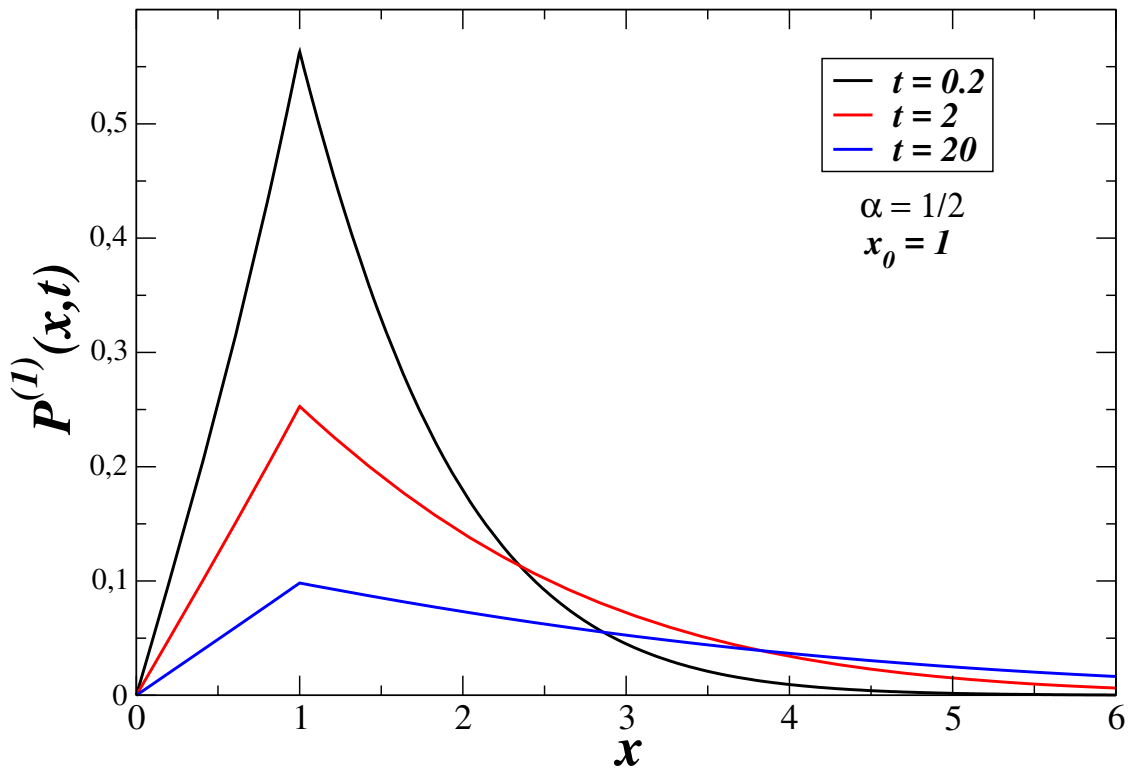


Podemos utilizar o mesmo formalismo para o caso da caminhada subdifusiva. Substituindo a solução do caso livre, expresso pela Eq. (2.62), na Eq. (3.38), temos que

$$P^{(1)}(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4K_\alpha t^\alpha}} H_{1,1}^{1,0} \left[\frac{|x-x_0|}{\sqrt{K_\alpha t^\alpha}} \middle| \begin{matrix} \{1-\alpha/2, \alpha/2\} \\ \{0,1\} \end{matrix} \right] - \frac{1}{\sqrt{4K_\alpha t^\alpha}} H_{1,1}^{1,0} \left[\frac{|x+x_0|}{\sqrt{K_\alpha t^\alpha}} \middle| \begin{matrix} \{1-\alpha/2, \alpha/2\} \\ \{0,1\} \end{matrix} \right]. \quad (3.40)$$

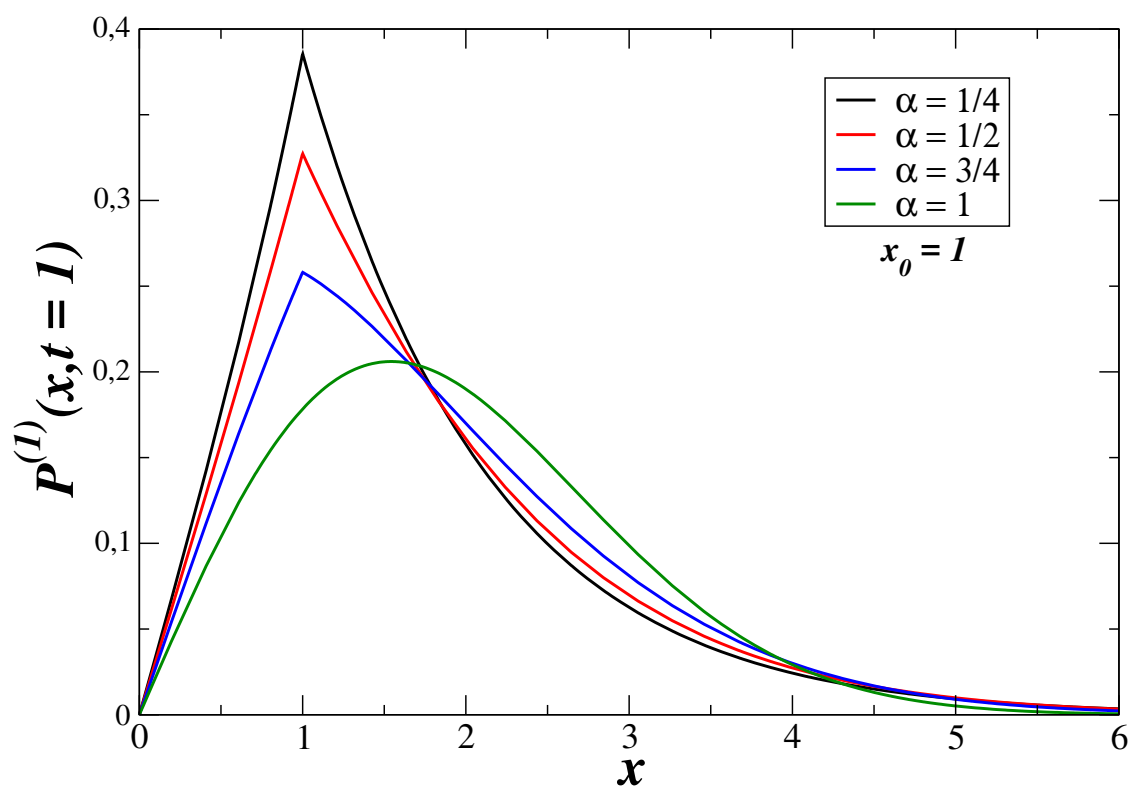
Na Fig. 12, observamos o gráfico da equação acima para $\alpha = 1/2$. Note que, mais uma vez, o comportamento esperado para a barreira é observado, e que à medida que o tempo passa a partícula vai sendo absorvida pela barreira. Se compararmos a Fig. 12 com a Fig. 10, que representa o caso gaussiano, vemos que a absorção do caso subdifusivo é mais lenta, já que o tempo que o caminhante difusivo leva para chegar à barreira é em média maior.

Figura 12 – Gráfico da probabilidade $P^{(1)}(x,t)$ para o caso subdifusivo dado pela Eq. (3.40) para $\alpha = 1/2$ e $x_0 = 1$, para vários $t = 0.2, 2, 20$. A barreira absorvente está localizada em $x = 0$.



Na Fig. 13, observamos o gráfico da Eq. (3.40) para vários valores de α . Note que quanto menor o valor de α , o que implica em uma maior subdifusão do caminhante, maior a probabilidade de o caminhante não ter sido absorvido pela barreira.

Figura 13 – Gráfico da probabilidade $P^{(1)}(x,t)$ para o caso subdifusivo dado pela Eq. (3.40) para $\alpha = 1/4, 1/2, 3/4, 1$, $x_0 = 1$ e $t = 1$. A barreira absorvente está localizada em $x = 0$.



Passemos agora para o caso do caminhante superdifusivo. Utilizamos a solução do caso livre, Eq. (2.74), em conjunto com a Eq. (3.38), para expressar a solução do caso superdifusivo com uma barreira absorvente na forma

$$P^{(1)}(x,t) = \frac{1}{\alpha(x-x_0)} H_{2,2}^{1,1} \left[\frac{|x-x_0|}{(K_\alpha t)^{1/\alpha}} \left| \begin{matrix} \{1,1/\alpha\}\{1,1/2\} \\ \{1,1\}\{1,1/2\} \end{matrix} \right. \right] + \frac{1}{\alpha(x+x_0)} H_{2,2}^{1,1} \left[\frac{x+x_0}{(K_\alpha t)^{1/\alpha}} \left| \begin{matrix} \{1,1/\alpha\}\{1,1/2\} \\ \{1,1\}\{1,1/2\} \end{matrix} \right. \right]. \quad (3.41)$$

A partir das Figs. (14) e (15), vemos que o efeito da barreira é maior se comparado aos casos difusivo e subdifusivo, justamente pelo fato de que o caminhante atinge a barreira em média mais rapidamente quanto menor for o valor de α .

Figura 14 – Gráfico da probabilidade $P^{(1)}(x,t)$ para o caso superdifusivo dado pela Eq. (3.41) para $\alpha = 3/2$, $x_0 = 1$ e $t = 1, 2, 5$. A barreira absorvente está localizada em $x = 0$.

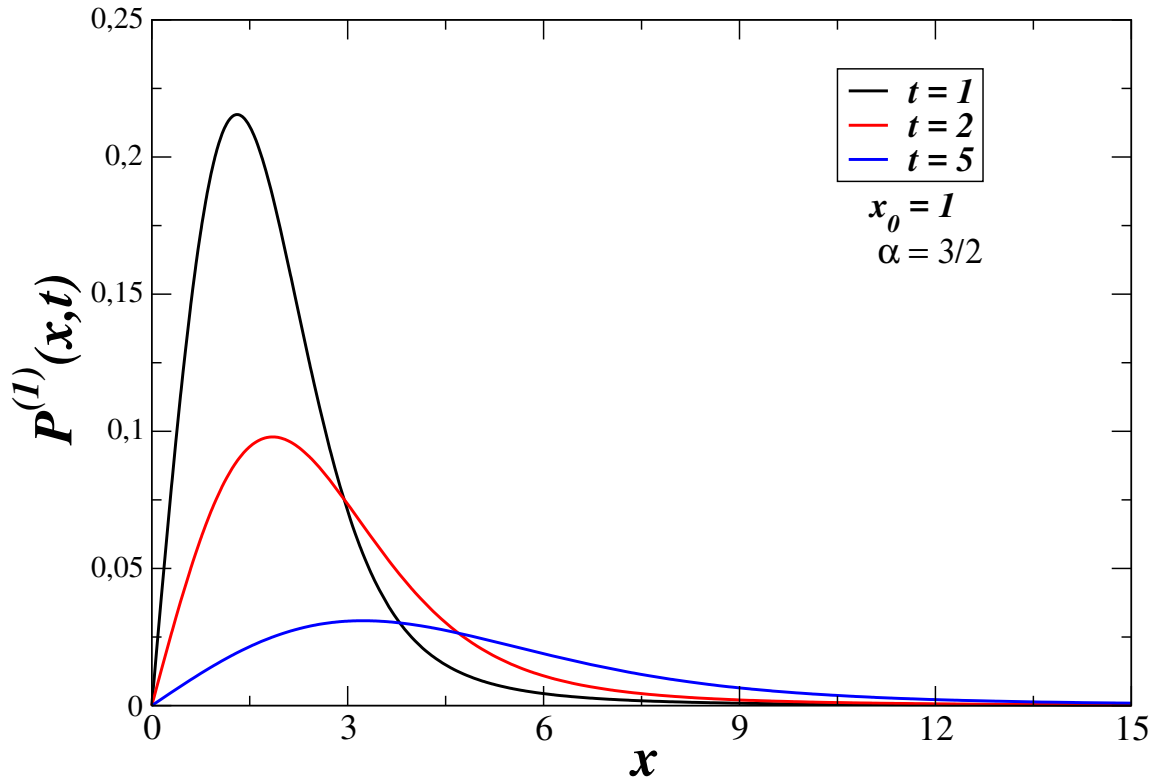
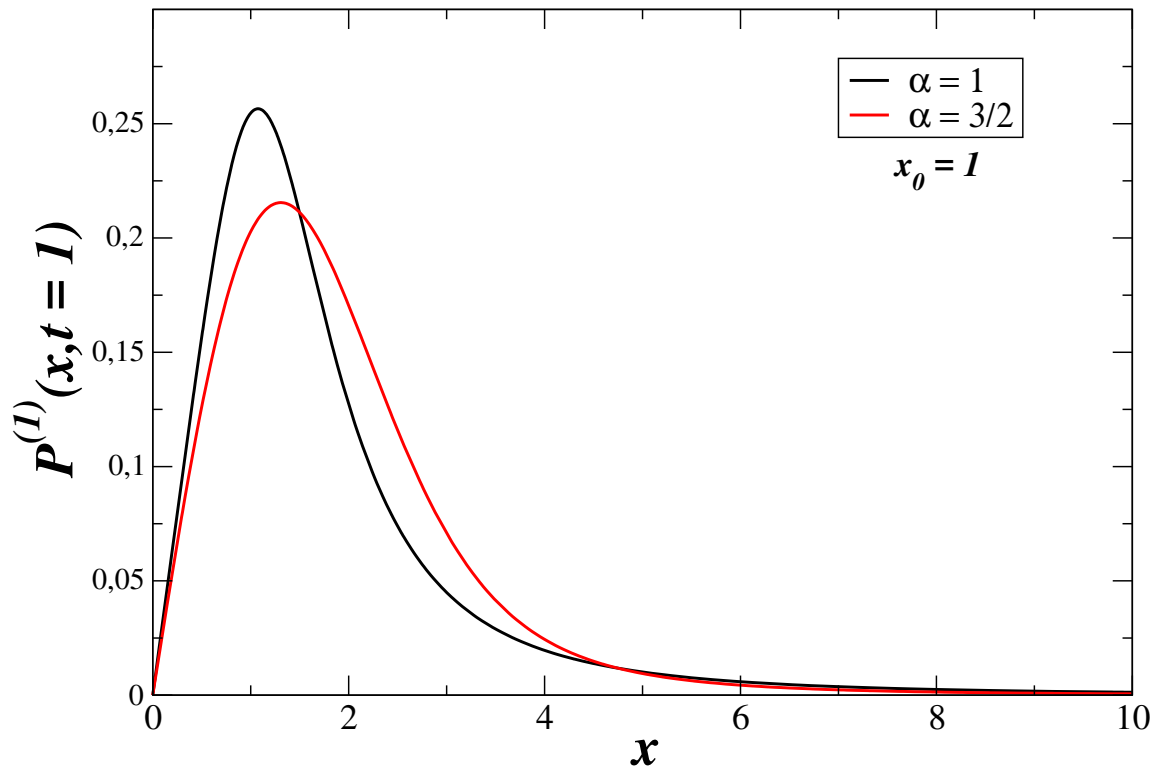


Figura 15 – a probabilidade $P^{(1)}(x,t)$ para o caso superdifusivo dado pela Eq. (3.41) para $x_0 = 1$, $t = 1$ e $\alpha = 1, 3/2$. A barreira absorvente está localizada em $x = 0$.

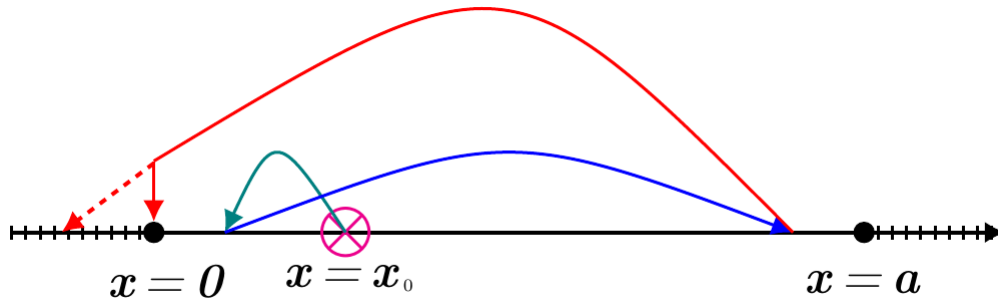


Vamos a seguir mostrar como tratar, via o método de funções de Green que discutimos anteriormente, o caso de *duas* barreiras absorventes, situação associada à difusão do caminhante em um espaço finito.

3.1.2 Duas Barreiras Absorventes

Vamos analisar o caso de um caminhante limitado ao intervalo $[0, a]$, com as barreiras absorventes localizadas nos extremos deste intervalo conforme mostrado na Fig.16.

Figura 16 – Esquema da movimentação de um caminhante aleatório em um espaço finito com barreira absorvente. A caminhada inicia em $x = x_0$ e o caminhante é absorvido pela barreira em $x = 0$ se passa para o semi-eixo negativo e pela barreira em $x = a$ se um passo o leva a uma posição $x > a$.



Utilizando o resultado da seção anterior, podemos escrever a taxa de transição na forma

$$T^{(2)}(x, y; t) = T^{(1)}(x, y; t) - \int_0^t T^{(1)}(x, a; t - \tau) F(a, y; \tau) d\tau. \quad (3.42)$$

Note que o termo $T^{(1)}(x, y; t)$ garante que o caminhante não vai estar em um x negativo, à esquerda da barreira localizada em $x = 0$. Já o segundo termo acima garante que o caminhante não passa para a região em que $x > a$, à direita da barreira localizada em $x = a$. Em outras palavras, subtraímos da taxa de transição do caso de uma barreira a probabilidade de que o caminhante, iniciando em y , atinja a e volte para x . Com isso, garantimos que a transição de y para x só ocorra com por trajetórias contidas no intervalo $[0, a]$.

Tirando a transformada de Laplace da equação acima,

$$\hat{G}^{(2)}(x, y; u) = \hat{G}^{(1)}(x, y; u) - \hat{G}^{(1)}(x, a; u) \cdot \hat{F}(a, y; u) \quad (3.43)$$

Mas, a partir da Eq. (3.23), escrevemos

$$\hat{F}(a, y; u) = \frac{\hat{G}^{(1)}(a, y; u)}{\hat{G}^{(1)}(a, a; u)}. \quad (3.44)$$

Então,

$$\begin{aligned}
 \widehat{G}^{(2)}(x,y;u) &= \widehat{G}^{(1)}(x,y;u) - \frac{\widehat{G}^{(1)}(x,a;u)\widehat{G}^{(1)}(a,y;u)}{\widehat{G}^{(1)}(a,a;u)} \\
 &= \widehat{G}(x,y;u) - \widehat{G}(-x,y;u) \\
 &\quad - \frac{\left[\widehat{G}(x,a;u) - \widehat{G}(-x,a;u)\right]\left[\widehat{G}(a,y;u) - \widehat{G}(-a,y;u)\right]}{\left[\widehat{G}(a,a;u) - \widehat{G}(-a,a;u)\right]} \\
 &= \frac{1}{2\sqrt{Au}\left[1 - \exp\left(-\sqrt{\frac{u}{A}}2a\right)\right]} \left\{ \exp\left(-\sqrt{\frac{u}{A}}|x-y|\right) \right. \\
 &\quad - \exp\left(-\sqrt{\frac{u}{A}}(2a-x-y)\right) - \exp\left(-\sqrt{\frac{u}{A}}(x+y)\right) \\
 &\quad \left. + \exp\left(-\sqrt{\frac{u}{A}}(2a-|x-y|)\right) \right\}.
 \end{aligned} \tag{3.45}$$

Usando, agora, que

$$\left(1 - \exp\left(-\sqrt{\frac{u}{A}}2a\right)\right)^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\sqrt{\frac{u}{A}}2an\right), \tag{3.46}$$

obtemos

$$\begin{aligned}
 \widehat{G}^{(2)}(x,y;u) &= \frac{1}{2\sqrt{Au}} \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ \exp\left[-\sqrt{\frac{u}{A}}(|x-y| + 2an)\right] \right. \\
 &\quad - \exp\left[-\sqrt{\frac{u}{A}}(-x-y + 2a(n+1))\right] \\
 &\quad - \exp\left[-\sqrt{\frac{u}{A}}(x+y + 2an)\right] \\
 &\quad \left. + \exp\left[-\sqrt{\frac{u}{A}}(2a(n+1) - |x-y|)\right] \right\}.
 \end{aligned} \tag{3.47}$$

Se fizermos a mudança $n \rightarrow -n - 1$ nos segundo e quarto termo, podemos escrever

$$\begin{aligned}
 \widehat{G}^{(2)}(x,y;u) &= \frac{1}{2\sqrt{Au}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp\left[-\sqrt{\frac{u}{A}}|2an + |x-y||\right] \\
 &\quad - \exp\left[-\sqrt{\frac{u}{A}}|2an + x + y|\right] \\
 &= \frac{1}{2\sqrt{Au}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp\left[-\sqrt{\frac{u}{A}}(2an + |x-y|)\right] \\
 &\quad - \exp\left[-\sqrt{\frac{u}{A}}(2an + x + y)\right].
 \end{aligned} \tag{3.48}$$

Podemos, então, obter $\widehat{P}^{(2)}(x,u)$,

$$\widehat{P}(x,u) = \int_{-\infty}^{\infty} \widehat{G}^{(2)}(x,y;u) f(y) dy. \tag{3.49}$$

Para o caso do caminhante iniciando na posição x_0 , $f(x) = \delta(x - x_0)$, temos que

$$\begin{aligned} \hat{P}^{(2)}(x, u) = \frac{1}{2\sqrt{Au}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp \left[-\sqrt{\frac{u}{A}}(2an + |x - x_0|) \right] \\ - \exp \left[-\sqrt{\frac{u}{A}}(2an + x + x_0) \right]. \end{aligned} \quad (3.50)$$

Invertendo a transformada de Laplace,

$$\begin{aligned} P^{(2)}(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{A\pi t}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp \left[-\frac{1}{4At}(2an + |x - x_0|)^2 \right] \\ - \exp \left[-\frac{1}{4At}(2an + x + x_0)^2 \right] \\ = \sum_{n=-\infty}^{\infty} P(|x - x_0| + 2an, t) - P(x + x_0 + 2an, t). \end{aligned} \quad (3.51)$$

A Eq. (3.51) representa a solução da equação de difusão normal no intervalo $[0, a]$. Note, mais uma vez, a relação com o método das imagens no contexto do eletromagnetismo. Temos agora infinitos “caminhantes imagem”, que garantem que as condições de contorno $P^{(2)}(x = 0, t) = 0 = P^{(2)}(x = a, t)$. Podemos verificar este fato nas Figs. 17 e 18.

A Fig. 17 representa o gráfico da Eq. (3.51) para um tempo fixo e diferentes valores de x_0 . Note que a proximidade de qualquer uma das barreiras altera a forma da distribuição $P^{(2)}(x, t)$. Já na Fig. 18, temos o gráfico da Eq. (3.51) para um valor de x_0 fixo e diferentes valores de tempo. Observe que as condições de contorno continuam válidas, independente do tempo, e que à medida que o tempo passa a partícula é absorvida pelas barreiras.

Figura 17 – Gráfico da probabilidade $P^{(2)}(x,t)$ para o caso difusivo dada pela Eq. (3.51) para $t = 1$, $a = 10$ e $x_0 = 2, 5$ e 8 . As barreiras absorventes estão localizadas em $x = 0$ e $x = a$.

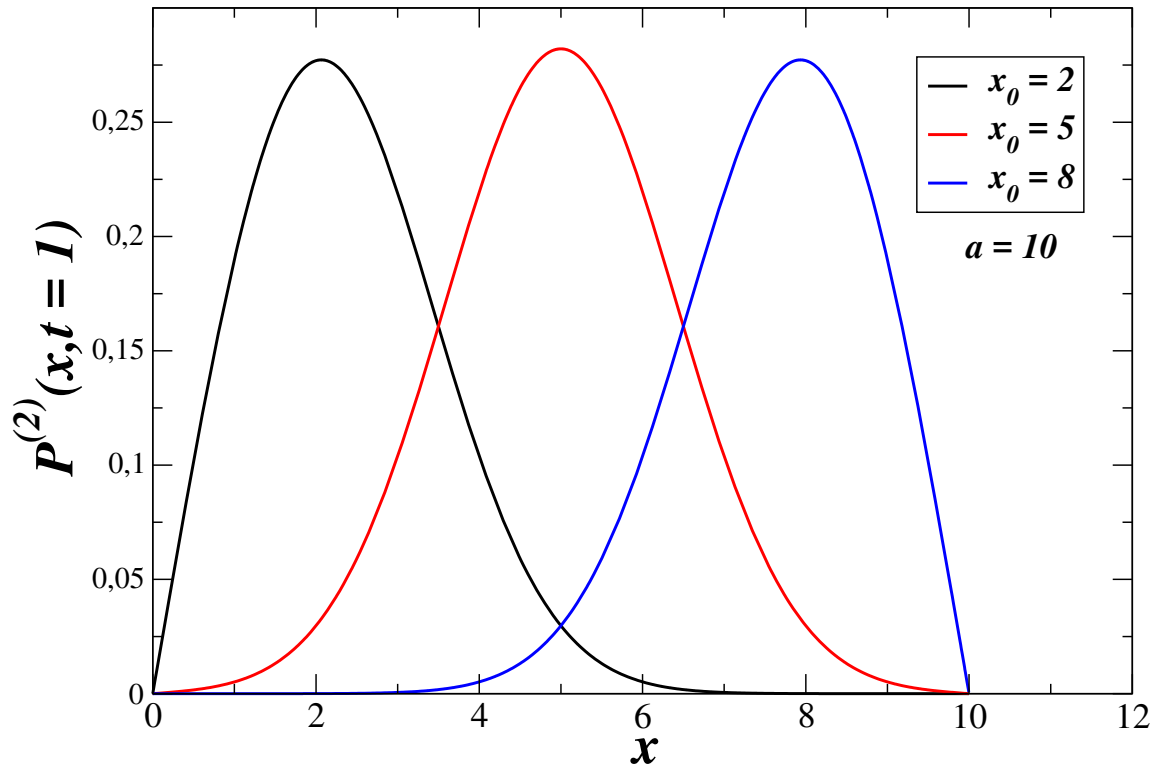
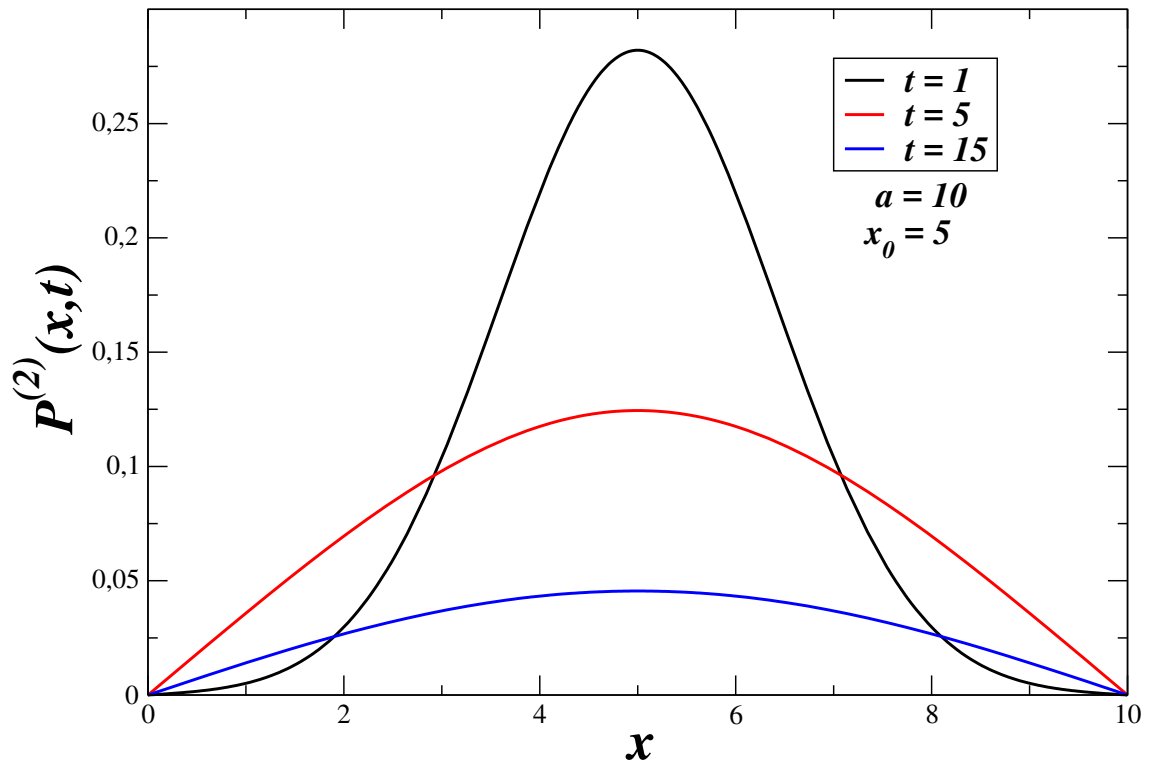


Figura 18 – Gráfico da probabilidade $P^{(2)}(x,t)$ para o caso difusivo dada pela Eq. (3.51) para $a = 10$, $x_0 = 5$ e $t = 1, 5$ e 15 . As barreiras absorventes estão localizadas em $x = 0$ e $x = a$.



Podemos utilizar as Eqs. (3.51) e (2.62) no caso do caminhante subdifusivo no espaço finito:

$$P^{(2)}(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4K_\alpha t^\alpha}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} H_{1,1}^{1,0} \left[\frac{|x - x_0 + 2an|}{\sqrt{K_\alpha t^\alpha}} \middle| \begin{matrix} \{1 - \alpha/2, \alpha/2\} \\ \{0,1\} \end{matrix} \right] - H_{1,1}^{1,0} \left[\frac{|x + x_0 + 2an|}{\sqrt{K_\alpha t^\alpha}} \middle| \begin{matrix} \{1 - \alpha/2, \alpha/2\} \\ \{0,1\} \end{matrix} \right]. \quad (3.52)$$

Na Fig. 19, vemos o gráfico da Eq. (3.52) para um valor de t fixo e diferentes valores de x_0 . As curvas mostradas correspondem à soma de apenas três termos na Eq. (3.52). De fato, diferentemente dos casos anteriores, à medida que maiores valores de n são considerados, surgem problemas de convergência numérica das funções de Fox. Apesar disso, note que as condições de contorno são satisfeitas e que o comportamento qualitativo da curva é idêntico ao das referências (4, 46). Destacamos também que nestes trabalhos a distribuição $P^{(2)}(x,t)$ é calculada apenas para $x_0 = 0$, em um intervalo finito $[-a,a]$. Por outro lado, a nossa solução dada na Eq. (3.51) é válida para um x_0 qualquer no intervalo $[0,a]$.

Na Fig. 20, temos o gráfico da Eq. (3.52) para um valor de x_0 fixo e diferentes valores de t . Note que, apesar da dificuldade computacional mencionada, as condições de contorno são mantidas para os diferentes valores de t , e que o comportamento qualitativo de absorção do caminhante pelas barreiras à medida que o tempo passa é identificado.

Figura 19 – Gráfico da probabilidade $P^{(2)}(x,t)$ para o caso subdifusivo dada pela Eq. (3.52) para $a = 10$, $\alpha = 1/2$, $t = 1$ e $x_0 = 2, 5$ e 8 . As barreiras absorventes estão localizadas em $x = 0$ e $x = a$.

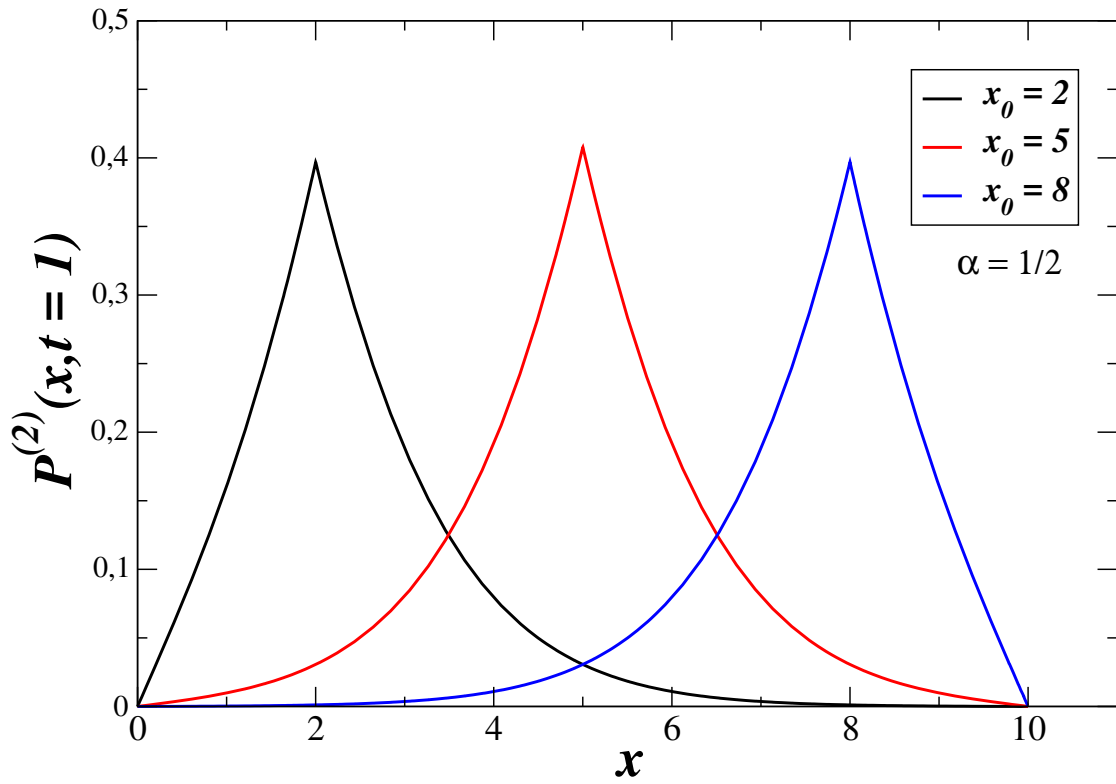
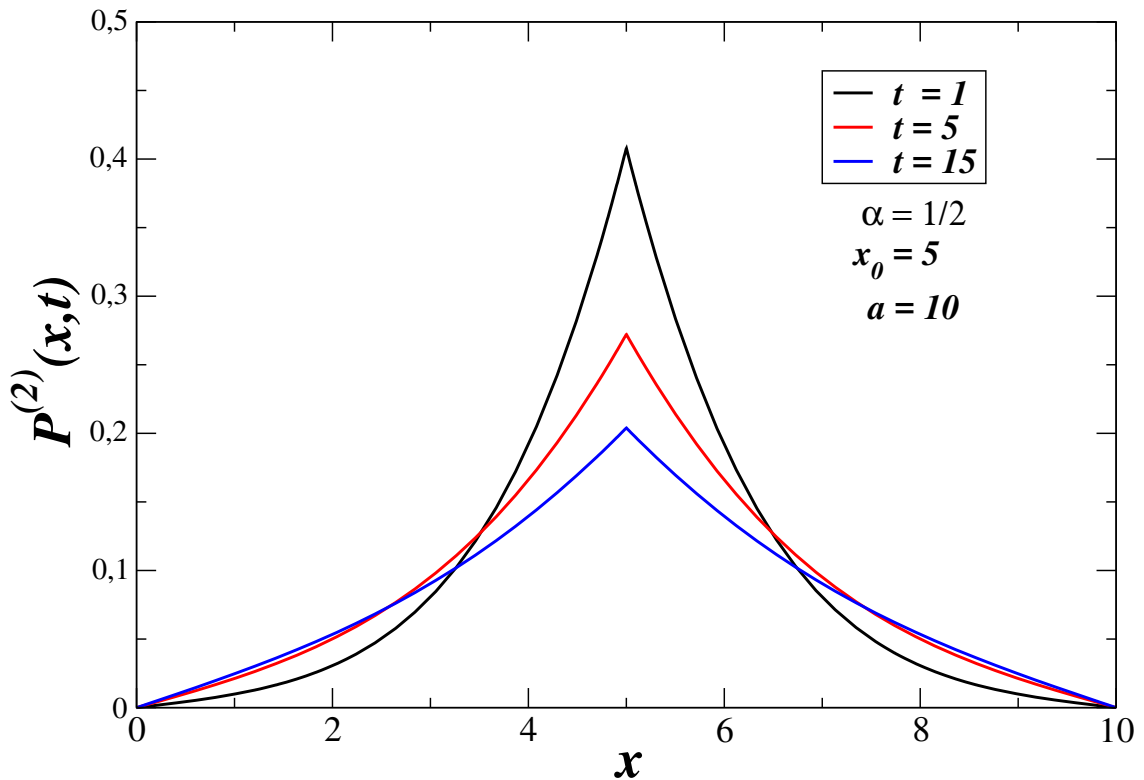


Figura 20 – Gráfico da probabilidade $P^{(2)}(x,t)$ para o caso subdifusivo dada pela Eq. (3.52) para $a = 10$, $\alpha = 1/2$, $x_0 = 5$ e $t = 1, 5$ e 15 . As barreiras absorventes estão localizadas em $x = 0$ e $x = a$.



Passando, agora, para o caso superdifusivo com duas barreiras, podemos utilizar as Eqs. (3.51) e (2.74) para escrever $P^{(2)}(x,t)$ na forma

$$P^{(2)}(x,t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{\alpha(|x-x_0|+2an)} H_{2,2}^{1,1} \left[\frac{|x-x_0|+2an}{(K_\alpha t)^{1/\alpha}} \middle| \begin{matrix} \{1,1/\alpha\}\{1,1/2\} \\ \{1,1\}\{1,1/2\} \end{matrix} \right] - \frac{1}{\alpha(x+x_0+2an)} H_{2,2}^{1,1} \left[\frac{x+x_0+2an}{(K_\alpha t)^{1/\alpha}} \middle| \begin{matrix} \{1,1/\alpha\}\{1,1/2\} \\ \{1,1\}\{1,1/2\} \end{matrix} \right]. \quad (3.53)$$

Na Fig. 21, temos o gráfico da Eq. (3.53) para um valor de t fixo e diferentes valores de x_0 . Uma vez mais, note que a proximidade da barreira altera a forma da distribuição e que as condições de contorno são satisfeitas.

Por outro lado, na Fig. 22 observamos o gráfico da Eq. (3.53) para um valor de x_0 fixo e diferentes valores de t . Observe que as condições de contorno são satisfeitas para os diferentes valores de t , e que o caminhante vai sendo absorvido à medida que o tempo passa.

Figura 21 – Gráfico da probabilidade $P^{(2)}(x,t)$ para o caso superdifusivo dada pela Eq. (3.53) para $a = 10$, $\alpha = 1$, $t = 1$ e $x_0 = 2, 5$ e 8 . As barreiras absorventes estão localizadas em $x = 0$ e $x = a$.

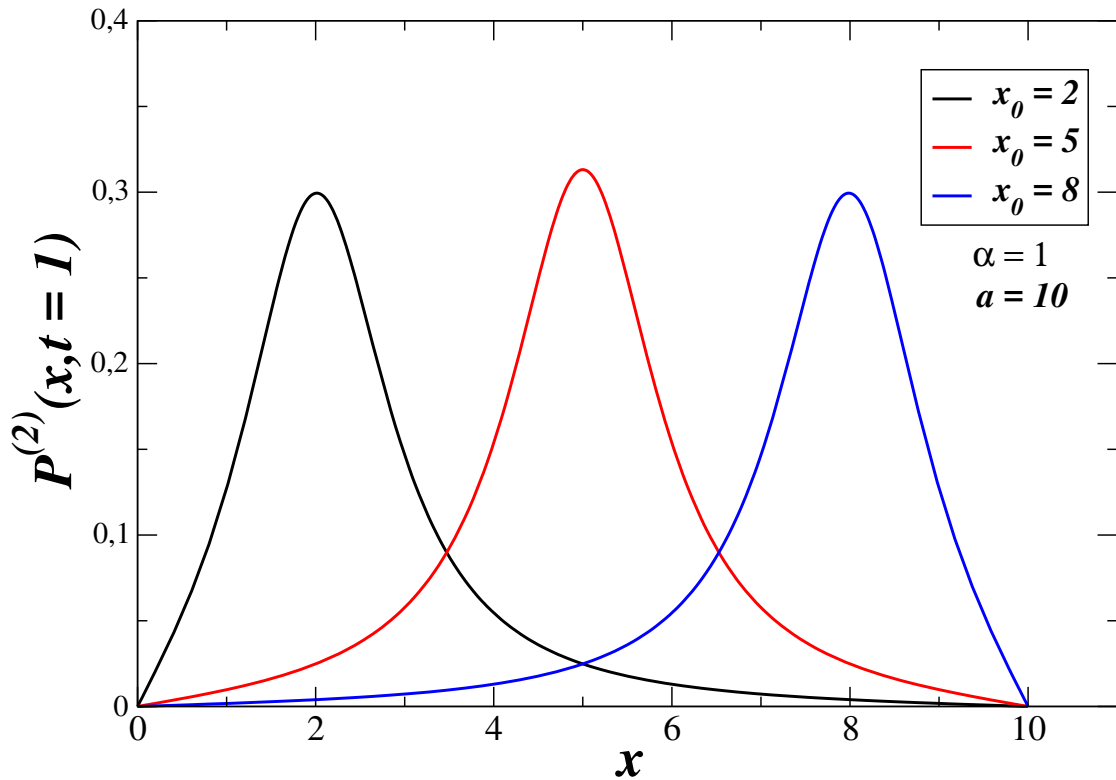
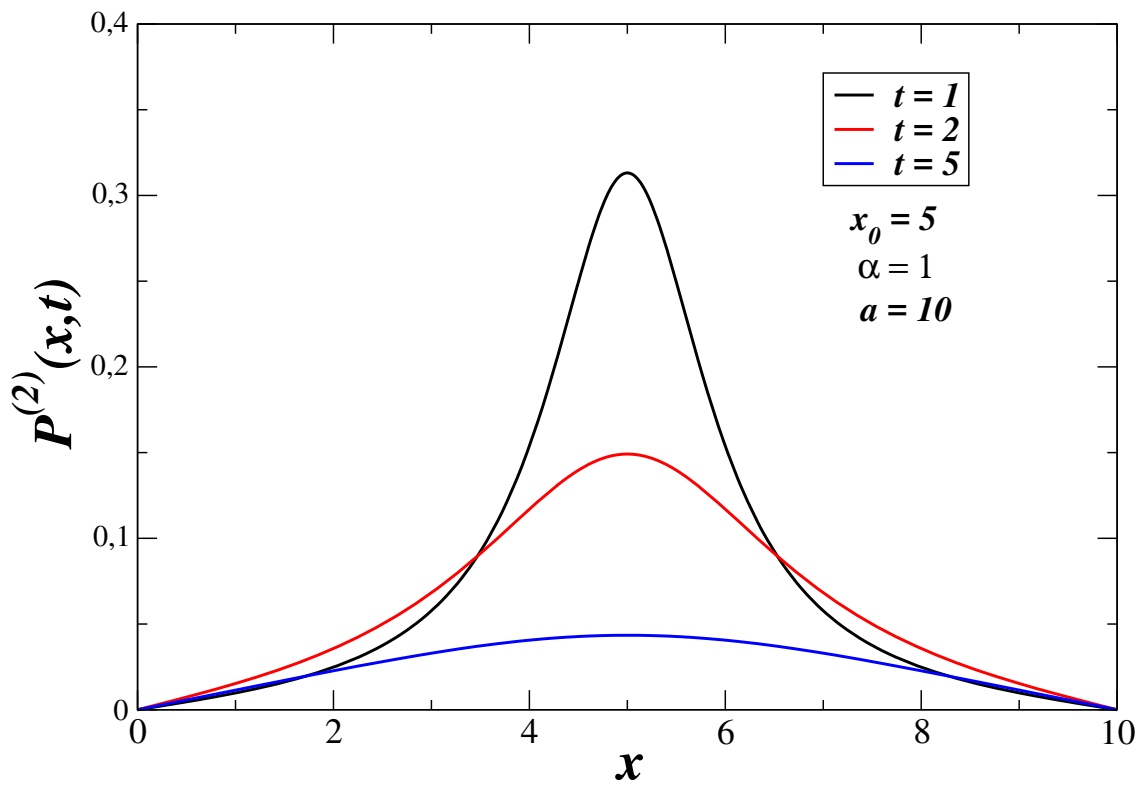


Figura 22 – Gráfico da probabilidade $P^{(2)}(x,t)$ para o caso superdifusivo dada pela Eq. (3.53) para $a = 10$, $\alpha = 1$, $x_0 = 5$ e $t = 1, 2$ e 5 . As barreiras absorventes estão localizadas em $x = 0$ e $x = a$.



3.2 Taxa de Sobrevivência

Na seção anterior, apontamos que para um caminhante em espaços semi-infinito e finito, o caminhante é absorvido pelas barreiras. Podemos calcular a chamada taxa de sobrevivência, $S(t)$, que é a probabilidade em função do tempo de que o caminhante se mantenha “ativo”, ou ainda, que ele não cruze as barreiras.

Para o caso semi-infinito, podemos escrever (46)

$$S(t) = \int_0^\infty P^{(1)}(x,t)dx. \quad (3.54)$$

Por outro lado, a seguir vamos analisar separadamente os casos subdifusivo e superdifusivo.

3.2.1 Caso Subdifusivo

Podemos tirar a transformada de Laplace da Eq. (3.54) e escrever

$$\hat{S}(u) = \int_0^\infty \hat{P}^{(1)}(x,u)dx. \quad (3.55)$$

Mas, da Eq. (2.59),

$$\hat{P}(x,u) = \frac{u^{\alpha/2-1}}{\sqrt{4K_\alpha}} e^{-\sqrt{\frac{u^\alpha}{K_\alpha}}|x|}. \quad (3.56)$$

Logo, podemos escrever $\hat{P}^{(1)}(x,u)$ como

$$\begin{aligned} \hat{P}^{(1)}(x,u) &= \hat{P}(x-x_0,u) - \hat{P}(-x-x_0,u) \\ &= \frac{u^{\alpha/2-1}}{\sqrt{4K_\alpha}} \left\{ e^{-\sqrt{\frac{u^\alpha}{K_\alpha}}|x-x_0|} - e^{-\sqrt{\frac{u^\alpha}{K_\alpha}}(x+x_0)} \right\}. \end{aligned} \quad (3.57)$$

Desse modo, ficamos com

$$\begin{aligned} \hat{S}(u) &= \frac{u^{\alpha/2-1}}{\sqrt{4K_\alpha}} \int_0^\infty e^{-\sqrt{\frac{u^\alpha}{K_\alpha}}|x-x_0|} - e^{-\sqrt{\frac{u^\alpha}{K_\alpha}}(x+x_0)} dx \\ &= \frac{1}{u} \left\{ 1 - e^{-\sqrt{\frac{u^\alpha}{K_\alpha}}x_0} \right\}. \end{aligned} \quad (3.58)$$

Podemos, então, calcular a taxa de sobrevivência do caso subdifusivo,

$$S(t) = \mathcal{L}^{-1} \left\{ \hat{S}(u) \right\} = \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{1}{u} \right\} - \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{1}{u} e^{-\frac{x_0}{\sqrt{K_\alpha}} u^{\alpha/2}} \right\} \quad (3.59)$$

$$= \Theta(t) - H_{1,1}^{1,0} \left[\frac{x_0}{\sqrt{K_\alpha}} t^{-\alpha/2} \middle| \begin{matrix} \{1, \alpha/2\} \\ \{0, 1\} \end{matrix} \right]. \quad (3.60)$$

Acima, usamos a transformada de Laplace da Eq. (A.12). Usando a forma computável da função de Fox, Eq. (2.63), e o fato de que estamos admitindo apenas $t > 0$, podemos escrever $S(t)$ como

$$S(t) = 1 - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n! \Gamma(1 - \frac{\alpha n}{2})} \left(\frac{x_0}{\sqrt{K_\alpha} t^{\alpha/2}} \right)^n. \quad (3.61)$$

No limite $t \gg (x_0^2/K_\alpha)^{1/\alpha}$, podemos usar apenas os primeiros termos do somatório, e então (10, 46)

$$S(t) \simeq 1 - 1 + \frac{x_0}{\Gamma(1 - \alpha/2)\sqrt{K_\alpha}} t^{-\alpha/2} \quad (3.62)$$

$$= \frac{x_0}{\Gamma(1 - \alpha/2)\sqrt{K_\alpha}} t^{-\alpha/2}. \quad (3.63)$$

3.2.2 Caso Superdifusivo

Para o caso superdifusivo, temos que (13)

$$\begin{aligned} S(t) &= \int_0^\infty P^{(1)}(x,t) dx = \int_0^\infty dx \mathcal{F}^{-1} \left\{ \widehat{P}^{(1)}(\omega,t) \right\} \\ &= \int_0^\infty dx \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty d\omega e^{-i\omega x} \widehat{P}^{(1)}(\omega,t), \end{aligned} \quad (3.64)$$

onde

$$\begin{aligned} \widehat{P}^{(1)}(\omega,t) &= \mathcal{F} \{ P(x - x_0, t) \} - \mathcal{F} \{ P(-x - x_0, t) \} \\ &= \mathcal{F} \{ P(x - x_0, t) \} - \mathcal{F} \{ P(x + x_0, t) \}. \end{aligned} \quad (3.65)$$

Acima, usamos que $P(x,t) = P(-x,t)$. Logo, obtemos

$$\begin{aligned} \widehat{P}^{(1)}(\omega,t) &= e^{i\omega x_0} \mathcal{F} \{ P(x,t) \} - e^{-i\omega x_0} \mathcal{F} \{ P(x,t) \} \\ &= e^{i\omega x_0} \widehat{P}(\omega,t) - e^{-i\omega x_0} \widehat{P}(\omega,t) \\ &= 2i \sin(\omega x_0) \widehat{P}(\omega,t). \end{aligned} \quad (3.66)$$

Tirando a transformada de Laplace da Eq. (3.64),

$$\begin{aligned} \widehat{S}(u) &= \int_0^\infty dx \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty d\omega e^{-i\omega x} \widehat{P}^{(1)}(\omega,u) \\ &= \int_0^\infty dx \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty d\omega e^{-i\omega x} 2i \sin(\omega x_0) \widehat{P}(\omega,u). \end{aligned} \quad (3.67)$$

A partir da Eq. (2.48), escrevemos

$$\begin{aligned} \widehat{S}(u) &= \frac{i}{\pi} \int_0^\infty dx \int_{-\infty}^\infty d\omega e^{-i\omega x} \frac{\sin(\omega x_0)}{u + K_\alpha |\omega|^\alpha} \\ &= \frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^\infty d\omega \frac{\sin(\omega x_0)}{u + K_\alpha |\omega|^\alpha} \int_0^\infty e^{-i\omega x} dx. \end{aligned} \quad (3.68)$$

Contudo, note que

$$\begin{aligned} \int_0^\infty e^{-i\omega x} dx &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^\infty e^{-ix(\omega - i\epsilon)} dx \quad ; \quad \epsilon > 0 \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^\infty e^{x(-i\omega - \epsilon)} dx = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{-1}{(-i\omega - \epsilon)} = \frac{-i}{\omega}, \end{aligned} \quad (3.69)$$

de modo que

$$\begin{aligned}\widehat{S}(u) &= \frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\sin(\omega x_0)}{u + K_\alpha |\omega|^\alpha} \left(\frac{-i}{\omega} \right) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega \frac{\sin(\omega x_0)}{\omega (u + K_\alpha \omega^\alpha)} \\ &= \frac{2}{\pi u} \int_0^{\infty} d\omega \frac{\sin(\omega x_0)}{\omega (1 + K_\alpha \omega^\alpha / u)} = \frac{2}{\pi u} \int_0^{\infty} dz \frac{\sin(z x_0 (u K_\alpha)^{1/\alpha})}{z (1 + z^\alpha)}.\end{aligned}\quad (3.70)$$

Tomando, agora, o limite $u \ll 1$, que corresponde ao limite $t \gg 1$, temos que

$$\widehat{S}(u) \simeq \frac{2}{\pi u} \int_0^{\infty} dz \frac{z x_0 (u K_\alpha)^{1/\alpha}}{z (1 + z^\alpha)} = \frac{2 x_0 u^{\frac{1}{\alpha}-1}}{\pi K_\alpha^{1/\alpha}} \int_0^{\infty} dz \frac{1}{1 + z^\alpha} \quad (3.71)$$

$$= \frac{2 x_0 u^{\frac{1}{\alpha}-1}}{\pi K_\alpha^{1/\alpha}} \frac{\pi}{\alpha \sin(\pi/\alpha)} = \frac{2 x_0 u^{\frac{1}{\alpha}-1}}{K_\alpha^{1/\alpha} \alpha \sin(\pi/\alpha)}. \quad (3.72)$$

Invertendo a transformação, obtemos (13, 10)

$$S(t) = \mathcal{L}^{-1} \left\{ \widehat{S}(u) \right\} = \frac{2 x_0 t^{-1/\alpha}}{\alpha K_\alpha^{1/\alpha} \sin(\pi/\alpha) \Gamma(1 - 1/\alpha)}. \quad (3.73)$$

Vemos, portanto, que o índice α da distribuição de Lévy α -estável está diretamente ligado com a absorção pela barreira. Para o caso superdifusivo, quanto menor o α , mais rápido o caminhante é absorvido, o que está de acordo com o fato de que valores de α menores estão associados à maior difusão do caminhante.

Já para o caso subdifusivo ocorre o inverso. Quanto maior o valor de α , menor a chance de caminhante ser absorvido, visto que a difusão dele é menor. Apesar de bastante intuitivos, precisamos analisar esses resultados à luz do teorema de Sparre-Andersen.

3.3 Teorema de Sparre-Andersen e Validade das Soluções

O teorema de Sparre-Andersen (10, 47, 48, 49) estabelece que, para um processo estocástico markoviano regido por uma distribuição de passos simétrica e contínua, a taxa de sobrevivência S para uma caminhada no espaço semi-infinito escala assintoticamente com o número de passos como $n^{-1/2}$.

Em um processo markoviano, o estado futuro do sistema depende apenas do estado atual (50). Nesse caso, podemos fazer a correlação $n \leftrightarrow t$, e o teorema de Sparre-Andersen continua válido também para processos realizados no tempo contínuo, de modo que $S(t) \sim t^{-1/2}$ (10).

Note, entretanto, que esta correlação é quebrada (e, portanto, o teorema de Sparre-Andersen não vale) para as caminhadas subdifusivas e para as caminhadas de Lévy, pois estas apresentam grande correlação espaço-temporal que torna o processo não-markoviano. Por outro lado, como discutido na Introdução da tese, os voos de Lévy não

apresentam estas correlações espaço-temporais, de modo que a eles se aplica de fato o teorema de Sparre-Andersen.

Podemos então dizer que a solução do caso superdifusivo no espaço semi-infinito, apresentada na seção anterior, não é válida para voos de Lévy, uma vez que a forma assintótica de $S(t)$ depende do expoente α , violando, desse modo, o teorema de Sparre-Andersen. Neste contexto, diversas análises numéricas foram realizadas e provaram tanto que a solução do caso subdifusivo obedece $S(t) \sim t^{-\alpha/2}$, quanto que o caso superdifusivo dos voos de Lévy obedece o comportamento $S(t) \sim t^{-1/2}$, de acordo com o teorema de Sparre-Andersen (10).

Chegamos, portanto, à conclusão de que é necessário estabelecer um novo formalismo para obter a solução da equação de difusão fracionária para voos de Lévy superdifusivos em espaços finitos ou semi-infinitos. Faremos isso no próximo capítulo.

4 Taxa de Sobrevivência para Espaços Finitos

Os resultados apresentados neste capítulo encontram-se publicados em (51). Vamos aqui tentar obter uma forma de expressar a distribuição $P(x, t)$ para o caso de um caminhante de Lévy superdifusivo em um espaço finito. Neste contexto, a falha, discutida no capítulo anterior, do Método das Imagens, ou de funções de Green, para resolver esse problema é oriunda do fato de que a derivada fracionária é não-local, ou seja, a derivada da função em um dado ponto depende de uma integral da função sobre um intervalo, como visto na Introdução desta tese. Isto faz com que definir a condição de contorno em um ou mais pontos específicos em que a função seja nula não seja mais suficiente (13, 51). Por isso, vamos tentar resolver esse problema usando o método de equações mestras (12, 45).

As equações mestras são equações que descrevem a evolução do estado de um sistema a partir das chamadas matrizes de transição (17). Esse tipo de equação é muito utilizado para modelar reações químicas. Nesse caso, o estado do sistema é a concentração de cada um dos seus componentes e este estado em um tempo t depende do estado em um tempo anterior. Poderíamos então, descrevê-lo através da equação $\partial P / \partial t = AP$, onde A é a matriz de transição. Contudo, esta evolução não precisa ser necessariamente para um tempo contínuo. Podemos descrever, por exemplo, a probabilidade de encontrar um caminhante aleatório em uma dada posição x no n -ésimo passo na forma $P_n(x) = \int A(y)P_{n-1}(y)$ (17, 50). Utilizaremos esse formalismo para estudar a difusão anômala em espaços finitos, como veremos agora.

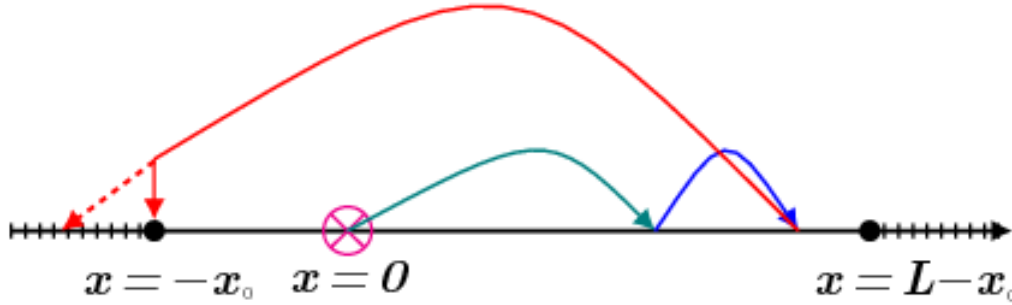
4.1 Difusão para Espaços Finitos

Vamos admitir um caminhante aleatório executando voos de Lévy, cujos passos têm tamanhos ℓ regidos por uma distribuição de Lévy α -estável que denotaremos por $p_\alpha(\ell)$. O caminhante se difunde a partir da origem, em um intervalo $[-x_0, L - x_0]$, com barreiras absorventes nos extremos, como ilustra a Fig. 23.

Vamos considerar no presente cálculo que:

- $Q_n(x)$ é a distribuição de probabilidades de que o caminhante não tenha sido absorvido até o n -ésimo passo e esteja na posição x após n passos, com $-x_0 < x < L - x_0$;
- $R_n^{(L)}(x)$ é a distribuição de probabilidades de que o caminhante não tenha sido absorvido até o $(n - 1)$ -ésimo passo e seja absorvido pela barreira em $L - x_0$ no

Figura 23 – Representação da movimentação de um caminhante aleatório em um espaço finito com barreiras absorventes. No exemplo mostrado, o caminhante inicia o seu percurso na origem e é absorvido pela barreira da esquerda, uma vez que o seu terceiro passo o levaria para uma posição $x < -x_0$.



n -ésimo passo, já que este o levaria para $x > L - x_0$;

- $R_n^{(x_0)}(x)$ é a distribuição de probabilidades de que o caminhante não tenha sido absorvido até o $(n - 1)$ -ésimo passo e seja absorvido pela barreira em $-x_0$ no n -ésimo passo, já que este o levaria para $x < -x_0$.

Com base nestas definições, podemos escrever a equação mestra,

$$R_{n+1}^{(x_0)}(x) + R_{n+1}^{(L)}(x) + Q_{n+1}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} Q_n(y) p_\alpha(x - y) dy. \quad (4.1)$$

Do lado direito, temos a soma das probabilidades de que o caminhante esteja em uma posição $-x_0 < y < L - x_0$ no passo n , e que execute um passo que o leve à posição x . Como este passo pode levá-lo, ou não, para fora do intervalo finito, igualamos a soma do lado direito com a soma da probabilidade de que ele seja absorvido, $R_{n+1}^{(x_0)}(x) + R_{n+1}^{(L)}(x)$, e não absorvido, $Q_{n+1}(x)$. Com $R_0^{(x_0)}(x) = R_0^{(L)}(x) = 0$ e $Q_0(x) = \delta(x)$, a equação acima está definida para todo n .

Tirando a transformada de Fourier da equação acima, temos

$$\hat{R}_{n+1}^{(x_0)}(\omega) + \hat{R}_{n+1}^{(L)}(\omega) + \hat{Q}_{n+1}(\omega) = \hat{Q}_n(\omega) \hat{p}_\alpha(\omega). \quad (4.2)$$

Multiplicamos a equação por z^{n+1} e somamos em n , onde z é um parâmetro com $|z| < 1$. Estas operações nos permitem utilizar o formalismo de função geratriz (45). De fato, escrevendo

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} z^{n+1} \left[\hat{R}_{n+1}^{(x_0)}(\omega) + \hat{R}_{n+1}^{(L)}(\omega) + \hat{Q}_{n+1}(\omega) \right] &= \sum_{n=0}^{\infty} z^{n+1} \hat{Q}_n(\omega) \hat{p}_\alpha(\omega) \\ &= z \hat{p}_\alpha(\omega) \underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} z^n \hat{Q}_n(\omega)}_{= \hat{Q}(\omega, z)}, \end{aligned} \quad (4.3)$$

obtemos

$$\begin{aligned}
 z\hat{p}_\alpha(\omega)\hat{Q}(\omega,z) &= \sum_{n=0}^{\infty} z^{n+1} \left[\hat{R}_{n+1}^{(x_0)}(\omega) + \hat{R}_{n+1}^{(L)}(\omega) + \hat{Q}_{n+1}(\omega) \right] \\
 &= \sum_{m=1}^{\infty} z^m \left[\hat{R}_m^{(x_0)}(\omega) + \hat{R}_m^{(L)}(\omega) + \hat{Q}_m(\omega) \right] \\
 &= \sum_{m=1}^{\infty} z^m \left[\hat{R}_m^{(x_0)}(\omega) + \hat{R}_m^{(L)}(\omega) + \hat{Q}_m(\omega) \right] \\
 &\quad + z^0 \left[\hat{R}_0^{(x_0)}(\omega) + \hat{R}_0^{(L)}(\omega) + \hat{Q}_0(\omega) \right] \\
 &\quad - z^0 \left[\hat{R}_0^{(x_0)}(\omega) + \hat{R}_0^{(L)}(\omega) + \hat{Q}_0(\omega) \right],
 \end{aligned} \tag{4.4}$$

tal que

$$\begin{aligned}
 z\hat{p}_\alpha(\omega)\hat{Q}(\omega,z) &= \hat{R}^{(x_0)}(\omega,z) + \hat{R}^{(L)}(\omega,z) + \hat{Q}(\omega,z) - 1 \\
 \hat{Q}(\omega,z) [z\hat{p}_\alpha(\omega) - 1] &= \hat{R}^{(x_0)}(\omega,z) + \hat{R}^{(L)}(\omega,z) - 1.
 \end{aligned} \tag{4.5}$$

Tirando o logaritmo de ambos os lados da equação acima,

$$\begin{aligned}
 \ln \left[1 - \hat{R}^{(x_0)}(\omega,z) - \hat{R}^{(L)}(\omega,z) \right] &= \ln \left[\hat{Q}(\omega,z) (1 - z\hat{p}_\alpha(\omega)) \right] \\
 &= \ln \left[\hat{Q}(\omega,z) \right] + \ln [1 - z\hat{p}_\alpha(\omega)].
 \end{aligned} \tag{4.6}$$

Logo,

$$\ln \left[\frac{1}{1 - z\hat{p}_\alpha(\omega)} \right] = \ln \left[\hat{Q}(\omega,z) \right] + \ln \left[\frac{1}{1 - \hat{R}^{(x_0)}(\omega,z) - \hat{R}^{(L)}(\omega,z)} \right]. \tag{4.7}$$

Estamos interessados em calcular $\hat{Q}(\omega,z)$ para, a partir desta quantidade, obter informações sobre $Q(x,t)$. Como $Q(x,t)$ está definida para $-x_0 < x < L - x_0$, vamos aqui desprezar os termos envolvendo $\hat{R}^{(x_0)}(\omega,z)$ e $\hat{R}^{(L)}(\omega,z)$, pois no espaço real estas funções estão definidas fora do intervalo citado. Na verdade, esta operação constitui uma aproximação, que mostraremos ao final deste capítulo ser de fato bastante boa. Portanto, ficamos com

$$\ln \left[\hat{Q}(\omega,z) \right] \simeq \ln \left[\frac{1}{1 - z\hat{p}_\alpha(\omega)} \right] = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n} \hat{p}_\alpha^n(\omega). \tag{4.8}$$

Vamos, agora, fazer a seguinte análise. Seja $P_n(x)$ a densidade de probabilidades de que o caminhante esteja na posição x no passo n para o caso sem barreiras. Nesse caso, podemos escrever

$$P_{n+1}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} p_\alpha(x-y)P_n(y)dy \quad ; \quad P_0(x) = \delta(x). \tag{4.9}$$

Logo,

$$\begin{aligned}\hat{P}_{n+1}(\omega) &= \hat{p}_\alpha(\omega) \hat{P}_n(\omega) \\ \hat{P}_1(\omega) &= \hat{p}_\alpha(k) \hat{P}_0(\omega) = \hat{p}_\alpha(\omega) \\ \hat{P}_2(\omega) &= \hat{p}_\alpha(k) \hat{P}_1(\omega) = \hat{p}_\alpha^2(\omega) \\ \hat{P}_n(\omega) &= \hat{p}_\alpha^n(\omega).\end{aligned}\tag{4.10}$$

Voltando, agora, para a Eq. (4.7), escrevemos

$$\ln [\hat{Q}(\omega, z)] = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n} \hat{P}_n(\omega) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n} \int_{-x_0}^{L-x_0} P_n(x) e^{i\omega x} dx. \tag{4.11}$$

Note que estamos integrando apenas no intervalo em que $Q(x, t)$ está definida. Desse modo,

$$\begin{aligned}\ln [\hat{Q}(\omega, z)] &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n} \int_{-x_0}^{L-x_0} dx e^{i\omega x} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} \hat{P}_n(k) dk \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \hat{P}_n(k) \int_{-x_0}^{L-x_0} dx e^{i(\omega-k)x} \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \hat{P}_n(k) \frac{e^{i(\omega-k)(L-x_0)} - e^{-i(\omega-k)x_0}}{i(\omega-k)}.\end{aligned}\tag{4.12}$$

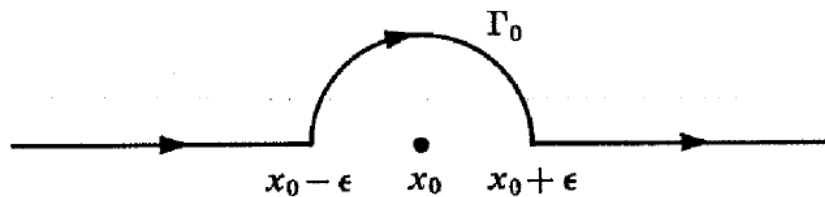
Vamos agora fazer uma pequena digressão sobre o valor principal de Cauchy para uma integral (43). Estimulados pela equação acima, queremos calcular uma integral real com a forma

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{f(x)}{x - x_0}. \tag{4.13}$$

Para isso, vamos passar para o plano complexo e integrar no contorno esquematizado abaixo, que denotaremos Γ :

$$\int_{\Gamma} dz \frac{f(z)}{z - x_0} = \int_{-\infty}^{x_0-\epsilon} dx \frac{f(x)}{x - x_0} + \int_{x_0+\epsilon}^{\infty} dx \frac{f(x)}{x - x_0} + \int_{\Gamma_0} dz \frac{f(z)}{z - x_0}. \tag{4.14}$$

Figura 24 – Representação do contorno Γ , utilizado para a integração no plano complexo definida na Eq. (4.13). Imagem retirada de (43)



Temos que (43)

$$\int_{\Gamma_0} dz \frac{f(z)}{z - x_0} = \int_{\pi}^0 \frac{f(x_0 + \epsilon e^{i\theta})}{\epsilon e^{i\theta}} i\epsilon e^{i\theta} d\theta = i \int_{\pi}^0 f(x_0 + \epsilon e^{i\theta}) d\theta = -i\pi f(x_0). \tag{4.15}$$

Se definirmos o valor principal da integral como

$$P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(x)}{x - x_0} dx = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ \int_{-\infty}^{x_0 - \epsilon} dx \frac{f(x)}{x - x_0} + \int_{x_0 + \epsilon}^{\infty} dx \frac{f(x)}{x - x_0} \right\}, \quad (4.16)$$

podemos, finalmente, escrever

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{f(x)}{x - x_0} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\Gamma} dz \frac{f(z)}{z - z_0} = P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(x)}{x - x_0} dx - i\pi f(x_0). \quad (4.17)$$

Terminada essa digressão, podemos voltar à Eq. (4.12) e fazer

$$\begin{aligned} \ln [\hat{Q}(\omega, z)] &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n} \frac{1}{2\pi} \left\{ \frac{-i\pi \hat{P}_n(\omega)}{i(k - \omega)} [e^{i(0)x_0} - e^{-i(0)(L-x_0)}] \right. \\ &\quad \left. + P \int_{-\infty}^{\infty} dk \hat{P}_n(k) \frac{e^{i(\omega-k)(L-x_0)} - e^{-i(\omega-k)x_0}}{i(\omega - k)} \right\} \\ &= i \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n} \frac{1}{2\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} dk \hat{P}_n(k) \frac{e^{i(\omega-k)(L-x_0)} - e^{-i(\omega-k)x_0}}{(k - \omega)}. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Logo,

$$\hat{Q}(\omega, z) = \exp(i\hat{\phi}(\omega, z)), \quad (4.19)$$

onde

$$\begin{aligned} \hat{\phi}(\omega, z) &= \frac{1}{2\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n} P \int_{-\infty}^{\infty} dk \hat{P}_n(k) \frac{e^{i(\omega-k)(L-x_0)} - e^{-i(\omega-k)x_0}}{(k - \omega)} \\ &= \frac{1}{2\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n} P \int_{-\infty}^{\infty} dk \hat{p}_\alpha^n(k) \frac{e^{i(\omega-k)(L-x_0)} - e^{-i(\omega-k)x_0}}{(k - \omega)}; \quad \hat{p}_\alpha(k) = e^{-b|k|^\alpha}. \end{aligned} \quad (4.20)$$

Temos, portanto, uma forma de calcular $\hat{Q}(\omega, z)$. Contudo, precisamos agora relacionar esta função geratriz com a distribuição $Q(x, t)$. Para isso, vamos usar novamente o modelo de CTRW (11, 12), discutido na Introdução.

Seja $\psi_n(t)$ a distribuição de probabilidades de que o n -ésimo passo ocorra no tempo t . Esta distribuição obedece à seguinte relação de recorrência,

$$\psi_n(t) = \int_0^t \psi(\tau) \psi_{n-1}(t - \tau) d\tau, \quad (4.21)$$

onde $\psi(t)$ é a distribuição que rege o tempo de espera entre dois passos. Se definirmos $J(x, t)$ como a probabilidade de o caminhante chegar em uma posição x , dentro do espaço entre as barreiras, no tempo t , esta pode ser expressa como

$$J(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} Q_n(x) \psi_n(t), \quad \psi_0(t) = \delta(t), \quad (4.22)$$

que é a da probabilidade de o caminhante estar em x no passo n e que o passo n ocorra no instante de tempo t . Podemos usar esta expressão para representar $Q(x, t)$ como

$$Q(x, t) = \int_0^t J(x, \tau) \Psi(t - \tau) d\tau, \quad (4.23)$$

onde $\Psi(t)$ é a distribuição que rege a probabilidade de o caminhante ficar parado um tempo t . Tirando a transformada de Laplace,

$$\widehat{Q}(x,u) = \widehat{J}(x,u)\widehat{\Psi}(u) = \widehat{\Psi}(u) \sum_{n=0}^{\infty} Q_n(x)\widehat{\psi}_n(u). \quad (4.24)$$

Note, contudo, que, a partir da Eq. (4.21),

$$\psi_{n+1}(u) = \widehat{\Psi}(u)\widehat{\psi}_n(u) \Rightarrow \widehat{\psi}_n(u) = \widehat{\psi}^n(u). \quad (4.25)$$

Assim, temos que

$$\widehat{Q}(x,u) = \widehat{\Psi}(u) \sum_{n=0}^{\infty} Q_n(x)\widehat{\psi}^n(u) = \widehat{\Psi}(u)\widehat{Q}(x,z = \widehat{\psi}(u)), \quad (4.26)$$

ou ainda, tirando a transformada de Fourier,

$$\widehat{Q}(\omega,u) = \widehat{\Psi}(u)Q(\omega,z = \widehat{\psi}(u)). \quad (4.27)$$

Com isso, dada uma distribuição $\psi(t)$ de tempos de espera, podemos calcular $\widehat{\Psi}(u)$ e, com a função geratriz $\widehat{Q}(\omega,z)$, dada pela Eq. (4.19), podemos obter a representação de $Q(x,t)$ no espaço de Laplace-Fourier. Podemos, também, calcular a taxa de sobrevivência, discutida no capítulo anterior, ao notarmos que

$$\widehat{S}(u) = \int_{-\infty}^{\infty} \widehat{Q}(x,u)dx = Q(\omega = 0, u) \quad (4.28)$$

Usamos, em seguida, uma exponencial como distribuição de tempos de espera, que, como vimos na seção 2.1.3, é consistente com a equação de difusão fracionária para superdifusão. Com isso, escrevemos

$$\Psi(t) = \int_t^{\infty} \psi(y)dy = \int_t^{\infty} \frac{1}{\tau} e^{-y/\tau} dy = e^{-t/\tau} \Rightarrow \widehat{\Psi}(u) = \mathcal{L}\{\Psi(t)\} = \frac{1}{u + 1/\tau}, \quad (4.29)$$

de modo que

$$\widehat{\Psi}(u) = \mathcal{L}\{\Psi(t)\} = \frac{\tau}{1 + \tau u}. \quad (4.30)$$

Estamos agora prontos para utilizar este formalismo para alguns casos concretos. Dada a dificuldade de calcular as integrais na Eq. (4.19) devido a sua grande complexidade, vamos focar a seguir no cálculo da dependência temporal da taxa de sobrevivência.

4.1.1 Distribuição de Cauchy: $\alpha = 1$

Se fizermos $\alpha = 1$ na distribuição de Lévy α -estável, $\widehat{p}_\alpha(k)$, recuperamos a distribuição de Cauchy, como discutido anteriormente:

$$\widehat{p}_\alpha(k) = e^{-b|k|} \rightarrow p_\alpha(x) = \frac{b}{\pi(b^2 + x^2)}. \quad (4.31)$$

A partir da Eq. (4.20), escrevemos

$$\hat{\phi}(\omega, z) = \frac{1}{2\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n} P \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-nb|k|} \frac{e^{i(\omega-k)(L-x_0)} - e^{-i(\omega-k)x_0}}{(k-\omega)}. \quad (4.32)$$

Para o caso $\omega = 0$, temos

$$\begin{aligned} \hat{\phi}(\omega = 0, z) &= \frac{1}{2\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n} \{ \ln[nb - i(L - x_0)] - \ln[nb + i(L - x_0)] \\ &\quad + \ln[nb - ix_0] - \ln[nb + ix_0] \} \\ &= \frac{-i}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n} \left\{ \arctan\left(\frac{x_0}{nb}\right) + \arctan\left(\frac{L - x_0}{nb}\right) \right\} \\ &= \frac{-i}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n} \left\{ \arctan\left(\frac{L}{nb - x_0(L - x_0)/nb}\right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\pi}{2} \left[1 + \operatorname{sgn}\left(\frac{x_0(L - x_0)}{nb} - 1\right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.33)$$

Acima, usamos as seguintes relações (52):

$$\arctan(x) + \arctan(y) = \arctan\left(\frac{x+y}{1-xy}\right) + \frac{\pi}{2} \operatorname{sgn}(x) [1 + \operatorname{sgn}(xy - 1)] \quad (4.34)$$

e

$$2i \arctan(x) = \ln(1 + ix) - \ln(1 - ix). \quad (4.35)$$

Logo, da Eq. (4.19) temos que

$$\begin{aligned} \hat{Q}(\omega = 0, z) &= \exp \left(\frac{1}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n} \left\{ \arctan\left(\frac{L}{nb - x_0(L - x_0)/nb}\right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{\pi}{2} \left[1 + \operatorname{sgn}\left(\frac{x_0(L - x_0)}{nb} - 1\right) \right] \right\} \right). \end{aligned} \quad (4.36)$$

Substituindo, agora, na Eq. (4.28),

$$\begin{aligned} \hat{S}(u) &= \frac{\tau}{(1 + \tau u)} \exp \left(\frac{1}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1 + \tau u)^{-n}}{n} \left\{ \arctan\left(\frac{L}{nb - x_0(L - x_0)/nb}\right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{\pi}{2} \left[1 + \operatorname{sgn}\left(\frac{x_0(L - x_0)}{nb} - 1\right) \right] \right\} \right). \end{aligned} \quad (4.37)$$

Tomando o limite de $u \ll 1$,

$$\begin{aligned} \hat{S}(u) &\simeq \frac{\tau}{(1 + \tau u)} \exp \left(\frac{1}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1 - n\tau u)}{n} \left\{ \arctan\left(\frac{L}{nb - x_0(L - x_0)/nb}\right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{\pi}{2} \left[1 + \operatorname{sgn}\left(\frac{x_0(L - x_0)}{nb} - 1\right) \right] \right\} \right) \\ &= \frac{\tau}{(1 + \tau u)} e^A e^{-\tau u B}, \end{aligned} \quad (4.38)$$

onde

$$A = \frac{1}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \left\{ \arctan \left(\frac{L}{nb - x_0(L - x_0)/nb} \right) + \frac{\pi}{2} \left[1 + \operatorname{sgn} \left(\frac{x_0(L - x_0)}{nb} - 1 \right) \right] \right\} \quad (4.39)$$

e

$$B = \frac{1}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \arctan \left(\frac{L}{nb - x_0(L - x_0)/nb} \right) + \frac{\pi}{2} \left[1 + \operatorname{sgn} \left(\frac{x_0(L - x_0)}{nb} - 1 \right) \right] \right\}. \quad (4.40)$$

Tirando, finalmente, a transformada de Laplace,

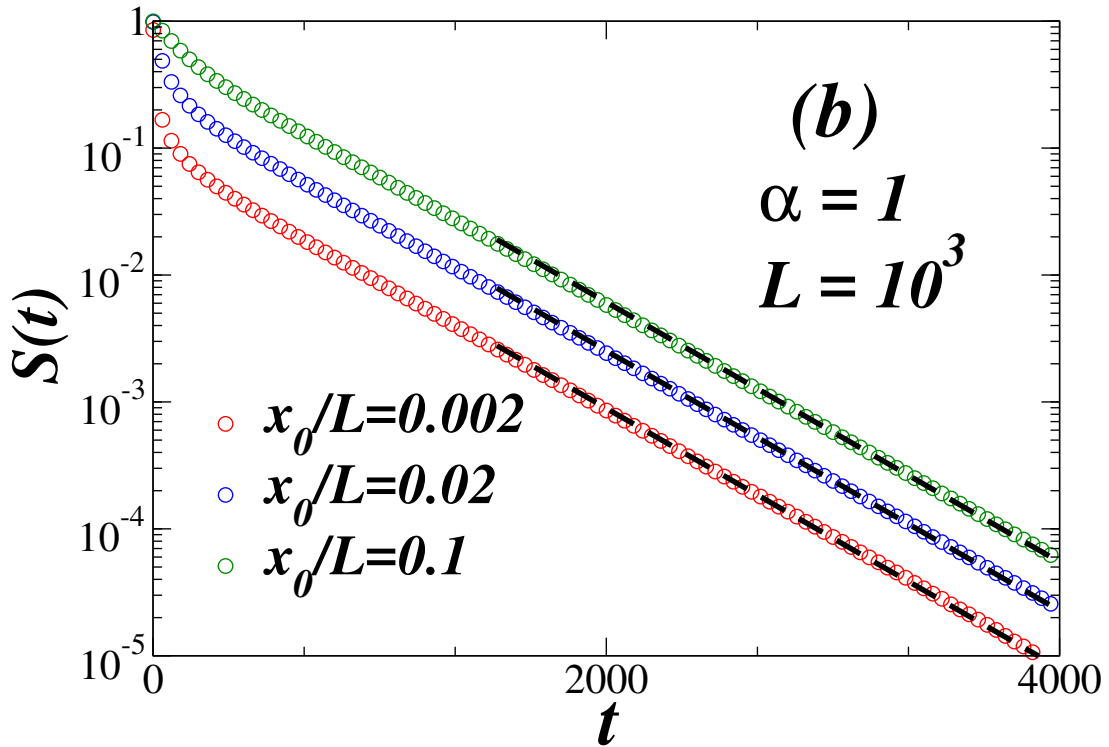
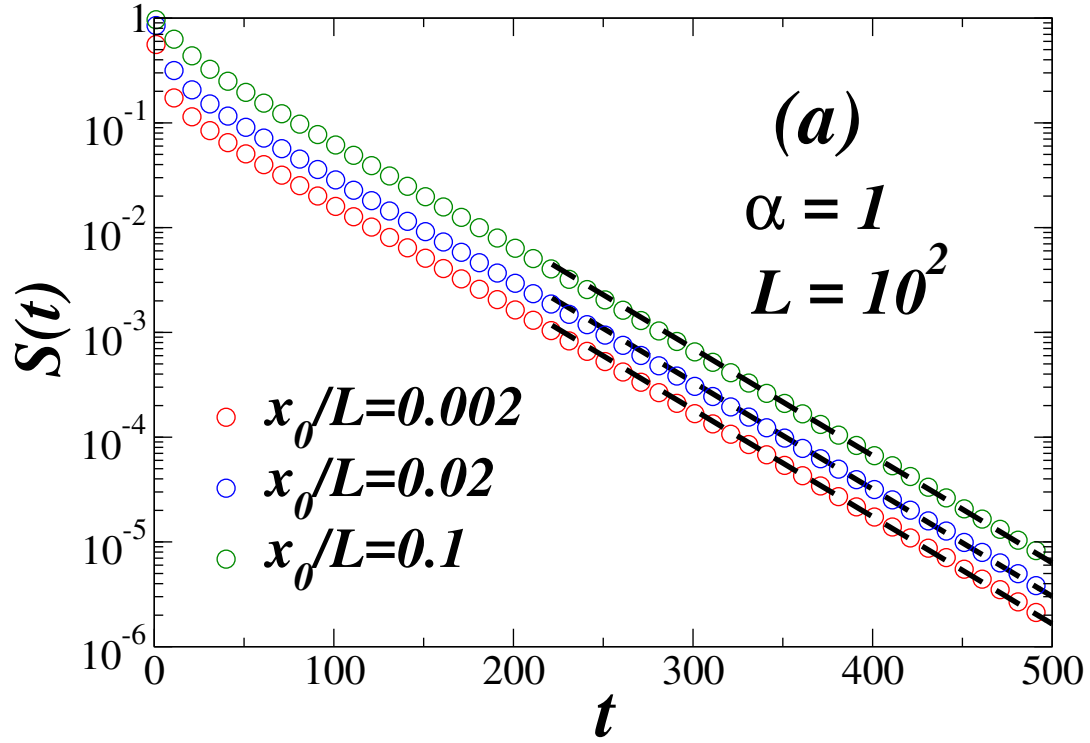
$$S(t) = \mathcal{L}^{-1} \left\{ \widehat{S}(u) \right\} = e^{A+B} e^{-t/\tau}. \quad (4.41)$$

Vemos pela equação acima que a taxa de sobrevivência possui um decaimento exponencial no caso do caminhante de Cauchy. Note que na Eq. (4.33) temos a simetria $x_0 \leftrightarrow L - x_0$, dada a dependência em $x_0(L - x_0)$, o que é natural, já que a absorção do caminhante deve depender das distâncias iniciais até as barreiras.

O comportamento exponencial é confirmado via simulação numérica. Estas constituem em simular um caminhante aleatório com distribuição de Cauchy para os tamanhos dos passos, de modo que a caminhada é encerrada se um passo o levar a uma posição $x < -x_0$ ou $x > L - x_0$. As médias foram tomadas com 10^8 realizações de caminhadas.

Verificamos o comportamento exponencial da taxa de sobrevivência pelo comportamento linear observado no gráfico log-linear da Fig. 25. Ressaltamos a ótima concordância do parâmetro do ajuste de nossos gráficos, $1/\tau = 2,31/L$, com o obtido em (53), onde a equação de difusão fracionária é resolvida via uma discretização das integrais envolvidas na definição dos operadores diferenciais. Nesse trabalho, a solução da equação é então obtida como uma série autofunções e autovalores (53). O nosso parâmetro τ pode ser relacionado com o menor, e mais relevante, autovalor encontrado, $1/\tau = -\lambda = 3\pi/(4L) \approx 2,36/L$ (53).

Figura 25 – Taxa de sobrevivência para o caso Cauchy, $\alpha = 1$, para $L = 10^2$ (a) e $L = 10^3$ (b), posição inicial $x_0/L = 0,002, 0,02, 0,1$ e $b = 1$. O ajuste é realizado com $1/\tau = 2,31/L$.



4.1.2 Distribuição Gaussiana: $\alpha = 2$

Vamos agora considerar o caso $\alpha = 2$, que corresponde ao limite gaussiano da distribuição de tamanhos de passos do caminhante, como vimos anteriormente:

$$\hat{p}_\alpha(k) = e^{-b|k|^2} \rightarrow p_\alpha(x) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}\sqrt{b}} \exp\left(-\frac{x^2}{4b}\right). \quad (4.42)$$

Note que, se compararmos com a definição usual da distribuição gaussiana (1), identificamos $b = \sigma^2/2$, onde σ^2 denota a variância da distribuição. Como sabemos, as distribuições gaussianas possuem segundos momentos finitos e introduzimos uma escala no problema, que é o parâmetro b . Vamos analisar o caso $x_0 \ll L$, ou seja, o caminhante inicia a caminhada próximo da barreira da esquerda, como esquematizado na Fig. 23. Note que se tivermos $L \gg b$, o sítio da esquerda se torna praticamente inalcançável, e obtemos, desse modo, o limite de uma barreira, calculado no capítulo anterior. No entanto, é certamente possível considerar valores de b suficientemente grandes, de modo que o sítio da esquerda ainda pode ser acessado. Calculando $\phi(\omega = 0, z)$ através da Eq. (4.20), obtemos

$$\begin{aligned} \hat{\phi}(\omega = 0, z) &= \frac{1}{2\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n} P \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-nbk^2} \frac{e^{-ik(L-x_0)} - e^{ikx_0}}{k} \\ &= \frac{-i}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n} \left[\text{Erf}\left(\frac{L-x_0}{2\sqrt{nb}}\right) + \text{Erf}\left(\frac{x_0}{2\sqrt{nb}}\right) \right] \\ &= \frac{-i}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n} \left[\text{Erf}\left(\frac{L-x_0}{\sigma\sqrt{2n}}\right) + \text{Erf}\left(\frac{x_0}{\sigma\sqrt{2n}}\right) \right]. \end{aligned} \quad (4.43)$$

Podemos, então, analisar os seguintes casos.

4.1.2.1 Duas barreiras acessíveis: $x_0 \ll \sigma, L > \sigma, L \gg x_0$.

Nesta situação, temos que

$$\begin{aligned} \hat{\phi}(\omega = 0, z) &= \frac{-i}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n} \left[\text{Erf}\left(\frac{L-x_0}{2\sqrt{nb}}\right) + \text{Erf}\left(\frac{x_0}{2\sqrt{nb}}\right) \right] \\ &\simeq \frac{-i}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n} \left[\frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{L}{2\sqrt{nb}}\right) + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{x_0}{2\sqrt{nb}}\right) \right] \\ &= \frac{-i(L+x_0)}{2\sqrt{\pi b}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n^3/2}. \end{aligned} \quad (4.44)$$

Aqui, usamos o primeiro termo da expansão (52)

$$\text{Erf}(x) = \frac{2x}{\sqrt{\pi}} - \frac{2x^3}{3\sqrt{\pi}} + \frac{x^5}{5\sqrt{\pi}} + O(x^7). \quad (4.45)$$

Substituindo na Eq. (4.28),

$$\hat{S}(u) = \frac{\tau}{1+\tau u} \exp\left(\frac{(L+x_0)}{2\sqrt{\pi b}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1+\tau u)^{-n}}{n^3/2}\right). \quad (4.46)$$

Tomando, agora, o limite $u \ll 1$,

$$\begin{aligned}\widehat{S}(u) &\simeq \frac{\tau}{1+\tau u} \exp \left(\frac{(L+x_0)}{2\sqrt{\pi b}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1-n\tau u)}{n^{3/2}} \right) \\ &= \frac{\tau}{1+\tau u} \exp \left(\frac{(L+x_0)}{2\sqrt{\pi b}} \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{3/2}} - \tau u \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{1/2}} \right\} \right) \\ &= \frac{\tau}{1+\tau u} A e^{-Bu},\end{aligned}\tag{4.47}$$

onde

$$A = \exp \left(\frac{(L+x_0)}{2\sqrt{\pi b}} \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{3/2}} \right\} \right) = \exp \left(\frac{(L+x_0)}{2\sqrt{\pi b}} \zeta \left(\frac{3}{2} \right) \right)\tag{4.48}$$

e

$$B = \frac{(L+x_0)}{2\sqrt{\pi b}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{1/2}}.\tag{4.49}$$

Logo, obtemos a taxa de sobrevivência

$$S(t) = \mathcal{L}^{-1} \left\{ \widehat{S}(u) \right\} = A e^{B/\tau} e^{-t/\tau}\tag{4.50}$$

Este comportamento assintótico exponencial pode ser verificado no gráfico log-linear da Fig. 26(a), onde mostramos também os resultados de simulação numérica com médias sobre 10^8 realizações e parâmetros $L = 10^2$, $x_0/L = 0.01, 0.1, 0.2$, e $\sigma = 1$. Neste regime, as duas barreiras podem ser atingidas pelo caminhante. Nosso parâmetro de ajuste, $\tau^{-1} = 9.55/L^2$ é bem próximo do autovalor mais relevante, $1/\tau = -\lambda = \pi^2/L^2 \approx 9.87/L^2$, obtido em (53).

4.1.2.2 Uma barreira acessível: $x_0 \ll \sigma \ll L$.

Neste caso, escrevemos

$$\begin{aligned}\widehat{\phi}(\omega=0, z) &= \frac{-i}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n} \left[\text{Erf} \left(\frac{L-x_0}{2\sqrt{\pi b}} \right) + \text{Erf} \left(\frac{x_0}{2\sqrt{\pi b}} \right) \right] \\ &\simeq \frac{-i}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n} \left[1 + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{x_0}{2\sqrt{\pi b}} \right) \right] \\ &= \frac{-i}{2} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n} + \left(\frac{x_0}{\sqrt{\pi b}} \right) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n^{3/2}} \right] \\ &= \frac{-i}{2} \left[-\ln(1-z) + \left(\frac{x_0}{\sqrt{\pi b}} \right) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n^{3/2}} \right]\end{aligned}\tag{4.51}$$

Logo,

$$\begin{aligned}\widehat{Q}(\omega=0, z) &= \exp(i\widehat{\phi}(\omega=0, z)) = \frac{1}{\sqrt{1-z}} \exp \left(\frac{x_0}{2\sqrt{\pi b}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n^{3/2}} \right) \\ &\simeq \frac{1}{\sqrt{1-z}} \left\{ 1 + \frac{x_0}{2\sqrt{\pi b}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n^{3/2}} \right\},\end{aligned}\tag{4.52}$$

de modo que

$$\begin{aligned}\hat{S}(u) &= \hat{Q}(\omega = 0, u) = \frac{\tau}{1 + \tau u} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{\tau}{1 + \tau u}}} \left\{ 1 + \frac{x_0}{2\sqrt{\pi b}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1 + \tau u)^{-n}}{n^{3/2}} \right\} \\ &= \frac{\sqrt{\tau}}{\sqrt{u(1 + \tau u)}} \left\{ 1 + \frac{x_0}{2\sqrt{\pi b}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1 + \tau u)^{-n}}{n^{3/2}} \right\}.\end{aligned}\quad (4.53)$$

Invertendo, agora, a transformação,

$$S(t) = I_0(t/2\tau) \exp(-t/2\tau) + \frac{x_0}{\sqrt{2\pi\sigma}} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{t}{\tau} \right)^n \frac{{}_1F_1(n + 1/2; n + 1; -t/\tau)}{n^{3/2}\Gamma(n + 1)}, \quad (4.54)$$

onde $I_0(x)$ e ${}_1F_1(a; b; x)$ denotam, respectivamente, a função de Bessel modificada de ordem 0 e a função hipergeométrica. Note que o resultado acima é válido para várias escalas de tempo, como pode ser visto na Fig. 26(b). Para $t \gg \tau$, o primeiro termo domina e podemos escrever,

$$S(t) \approx I_0(t/2\tau) \exp(-t/2\tau) \quad , \quad t \gg \tau. \quad (4.55)$$

Utilizando o limite assintótico da função de Bessel (44),

$$I_0(x) \rightarrow \exp(x) / \sqrt{2\pi x} \quad , \quad x \gg 1, \quad (4.56)$$

temos que

$$S(t) \sim \left(\frac{\tau}{\pi t} \right)^{1/2}. \quad (4.57)$$

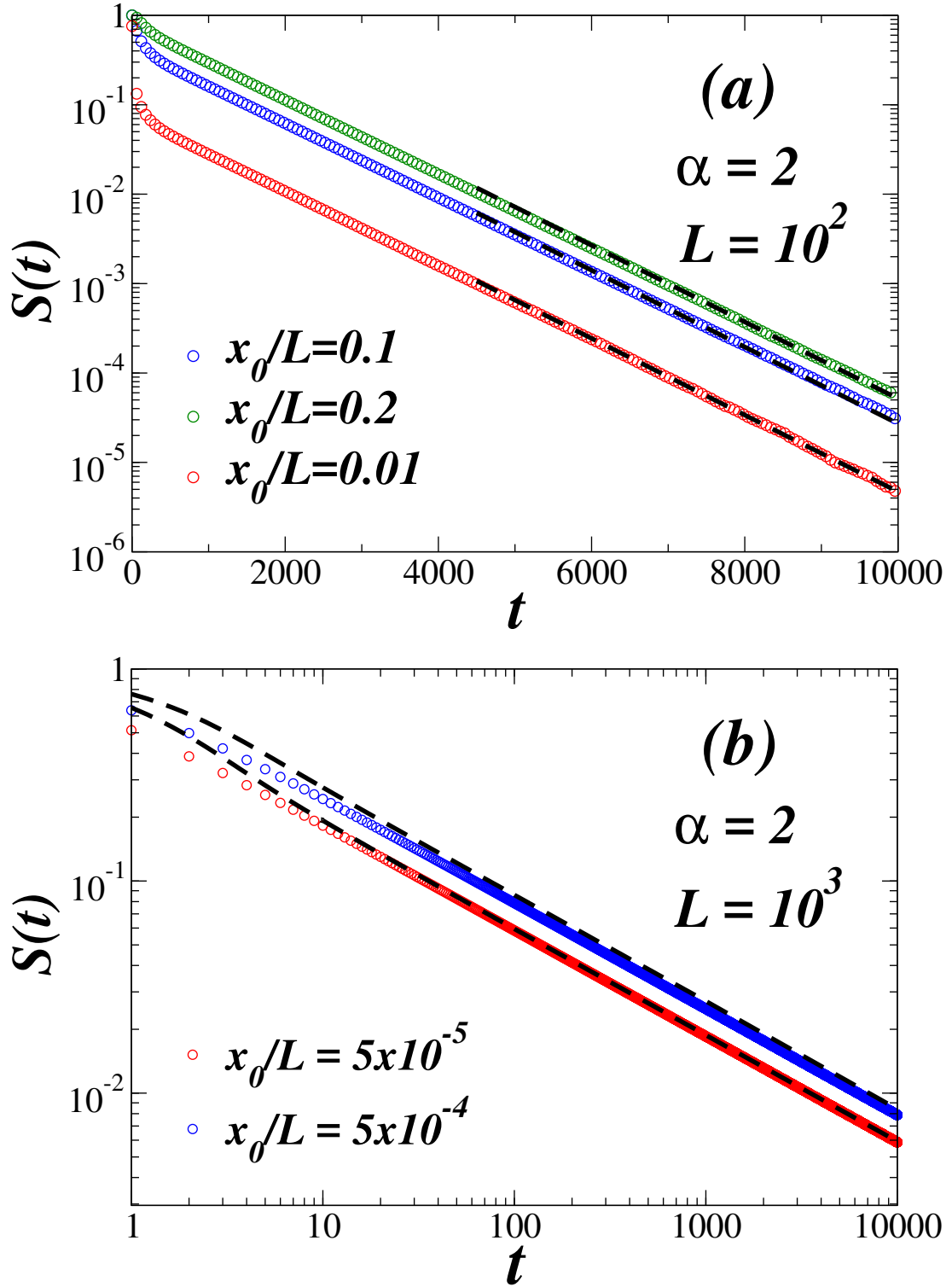
O contraste entre o caso acima e o comportamento do caso com uma barreira evidencia uma grande mudança no comportamento da taxa de sobrevivência para tempos longos. De fato, observamos uma mudança do comportamento exponencial para o de lei de potência, dependendo apenas se a barreira mais distante está ou não acessível para o caminhante.

Mais precisamente, à medida que a razão entre as probabilidades de ser absorvido pela barreira mais distante e pela mais próxima vai a zero com $L/\sigma \rightarrow \infty$, a forma funcional de $S(t)$ para tempos longos muda progressivamente de $S \sim e^{-t}$ para $S \sim 1/\sqrt{t}$.

Mostraremos a seguir que essa mudança é válida não apenas para o caso gaussiano, mas também se aplica para um caminhante aleatório de Lévy generalizado entre barreiras absorventes.

O comportamento do tipo lei de potência, $S(t) \sim t^{-1/2}$, pode ser verificado na Fig. 26(b), quando a barreira mais distante se torna inacessível com os parâmetros $L = 10^3 \gg \sigma \gg x_0$ e $x_0 = 0.05, 0.5$. Nestes casos, utilizamos 10^3 termos na Eq. (4.54) e $\tau = 1$ (observamos em alguns casos que os resultados permanecem inalterados para 5×10^3 termos). Com os parâmetros acima, verificamos numericamente que o número de caminhantes absorvidos pela barreira localizada em $L - x_0$ é nula.

Figura 26 – Taxa de sobrevivência para o caso gaussiano $\alpha = 2$. Os resultados em (a) são obtidos para $L = 10^2$, posição inicial $x_0/L = 0.01, 0.1, 0.2$ e $\sigma = 1$. O comportamento exponencial é verificado com o parâmetro de ajuste $\tau^{-1} = 9.55/L^2$. Os resultados em (b) são obtidos para $L = 10^3$, $x_0/L = 5 \times 10^{-5}, 5 \times 10^{-4}$ e $\sigma = 1$. A Eq. (4.54) é representada em linhas tracejadas.



4.1.3 Caso geral: $0 < \alpha < 2$.

Vamos aqui generalizar a análise anterior para o caso de um caminhante executando voos de Lévy com $0 < \alpha < 2$.

Calculando inicialmente a fase pela Eq. (4.20), temos

$$\begin{aligned}
 \hat{\phi}(\omega = 0, z) &= \frac{1}{2\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n} P \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{e^{-nb|k|^\alpha}}{k} \left\{ e^{-ik(L-x_0)} - e^{ikx_0} \right\} \\
 &= \frac{-i}{2\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n} P \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{e^{-nb|k|^\alpha}}{k} \{ \sin(k(L-x_0)) + \sin(kx_0) \} \\
 &= \frac{-i}{2\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n} \left\{ P \int_{-\infty}^{\infty} dy \frac{e^{-nb|y/(L-x_0)|^\alpha}}{y} \sin(y) \right. \\
 &\quad \left. + P \int_{-\infty}^{\infty} dy \frac{e^{-nb|y/x_0|^\alpha}}{y} \sin(y) \right\} \\
 &= \frac{-i}{2\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n} \{ I_{n,\alpha}(L-x_0) + I_{n,\alpha}(x_0) \},
 \end{aligned} \tag{4.58}$$

onde definimos

$$I_{n,\alpha}(a) = P \int_{-\infty}^{\infty} dy \frac{e^{-nb|y/a|^\alpha}}{y} \sin(y). \tag{4.59}$$

Logo,

$$\begin{aligned}
 \hat{Q}(\omega = 0, z) &= \exp(i\hat{\phi}(\omega = 0, z)) \\
 &= \exp\left(\frac{1}{2\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n} [I_{n,\alpha}(L-x_0) + I_{n,\alpha}(x_0)]\right).
 \end{aligned} \tag{4.60}$$

Escrevemos, então,

$$\hat{S}(u) = \frac{\tau}{(1+\tau u)} \exp\left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1+\tau u)^{-n}}{2\pi n} [I_{n,\alpha}(L-x_0) + I_{n,\alpha}(x_0)] \right\}. \tag{4.61}$$

Podemos agora analisar o comportamento assintótico da equação acima para $u \ll 1$, e verificar o comportamento exponencial da taxa de sobrevivência para tempos longos e o comportamento do tipo lei de potência no limite de uma barreira, $L \rightarrow \infty$.

4.1.3.1 Limite assintótico para duas barreiras

Consideramos neste caso,

$$\begin{aligned}
 \hat{S}(u) &\simeq \frac{\tau}{(1 + \tau u)} \exp \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1 - n\tau u)}{2\pi n} [I_{n,\alpha}(L - x_0) + I_{n,\alpha}(x_0)] \right\} \\
 &= \frac{\tau}{(1 + \tau u)} \exp \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2\pi n} [I_{n,\alpha}(L - x_0) + I_{n,\alpha}(x_0)] \right\} \times \\
 &\quad \exp \left\{ \frac{-u\tau}{2\pi} \sum_{n=1}^{\infty} [I_{n,\alpha}(L - x_0) + I_{n,\alpha}(x_0)] \right\} \\
 &= \frac{\tau}{(1 + \tau u)} A e^{-B\tau u}
 \end{aligned} \tag{4.62}$$

onde definimos

$$A = \exp \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2\pi n} [I_{n,\alpha}(L - x_0) + I_{n,\alpha}(x_0)] \right\} \tag{4.63}$$

e

$$B = \frac{1}{2\pi} \sum_{n=1}^{\infty} [I_{n,\alpha}(L - x_0) + I_{n,\alpha}(x_0)]. \tag{4.64}$$

Invertendo a transformação, obtemos

$$S(t) = \mathcal{L}^{-1}\{\hat{S}(u)\} = A e^{B/\tau} e^{-t/\tau}. \tag{4.65}$$

Verificamos, então, que o comportamento exponencial é uma característica geral da taxa de sobrevivência, dependendo apenas do fato de o caminhante poder acessar a barreira mais distante. Na Fig. 27, podemos observar o decaimento de $I_{n,\alpha}$ com n para diversos valores de α , garantindo assim a convergência das somas acima e a validade do resultado encontrado.

4.1.3.2 Limite de uma barreira

Para analisar este caso, vamos considerar o limite $L \rightarrow \infty$ na Eq. (4.61), de modo que

$$\hat{S}(u) = \frac{\tau}{(1 + \tau u)} \exp \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1 + \tau u)^{-n}}{2\pi n} [I_{n,\alpha}(\infty) + I_{n,\alpha}(x_0)] \right\}. \tag{4.66}$$

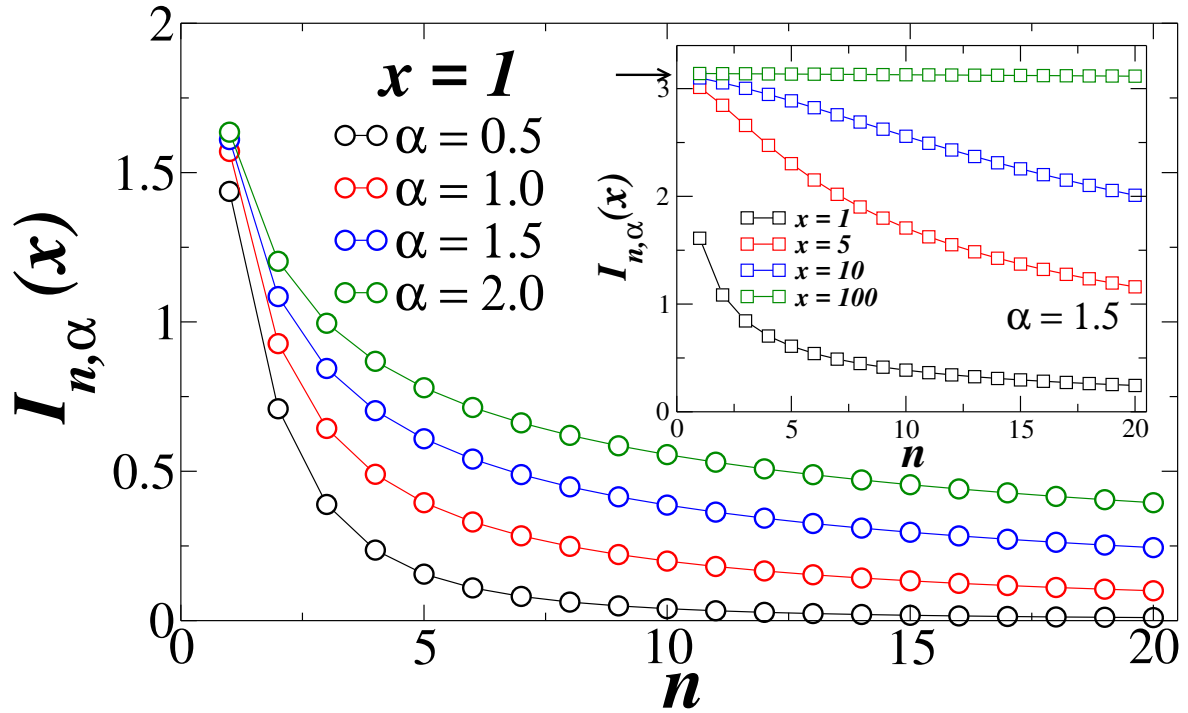
A partir da definição de $I_{n,\alpha}(x)$, temos

$$I_{n,\alpha}(\infty) = \lim_{a \rightarrow \infty} P \int_{-\infty}^{\infty} dy \frac{e^{-nb|y/a|^\alpha}}{y} \sin(y) = P \int_{-\infty}^{\infty} dy \frac{\sin(y)}{y} = \pi. \tag{4.67}$$

O mesmo resultado pode ser verificado numericamente, como visto no detalhe da Fig. 27. Portanto,

$$\begin{aligned}
 \widehat{S}(u) &= \frac{\tau}{(1+\tau u)} \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1+\tau u)^{-n}}{n} \right\} \exp \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1+\tau u)^{-n}}{2\pi n} I_{n,\alpha}(x_0) \right\} \\
 &= \frac{\tau}{(1+\tau u)} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \ln \left[\frac{\tau u}{1+\tau u} \right] \right\} \exp \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1+\tau u)^{-n}}{2\pi n} I_{n,\alpha}(x_0) \right\} \\
 &= \sqrt{\frac{\tau}{u(1+\tau u)}} \exp \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1+\tau u)^{-n}}{2\pi n} I_{n,\alpha}(x_0) \right\}.
 \end{aligned} \tag{4.68}$$

Figura 27 – Integrais $I_{n,\alpha}(x)$ em função de n . Note o decaimento monotônico com n , representado para $\alpha = 0.5, 1.0, 1.5, 2.0$, e $x = 1$. No detalhe, vemos o limite $I_{n,\alpha}(x \rightarrow \infty) = \pi$.



Tomando o limite $u \ll 1$ acima,

$$\begin{aligned}
 \widehat{S}(u) &\simeq \sqrt{\frac{\tau}{u(1+\tau u)}} \exp \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1-n\tau u)}{2\pi n} I_{n,\alpha}(x_0) \right\} \\
 &= \sqrt{\frac{\tau}{u(1+\tau u)}} \exp \left\{ \frac{1}{2\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} I_{n,\alpha}(x_0) \right\} \exp \left\{ \frac{-\tau u}{2\pi} \sum_{n=1}^{\infty} I_{n,\alpha}(x_0) \right\} \\
 &= \sqrt{\frac{\tau}{u(1+\tau u)}} A e^{-Bu},
 \end{aligned} \tag{4.69}$$

onde definimos

$$A = \exp \left\{ \frac{1}{2\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} I_{n,\alpha}(x_0) \right\} \tag{4.70}$$

e

$$B = \frac{\tau}{2\pi} \sum_{n=1}^{\infty} I_{n,\alpha}(x_0). \quad (4.71)$$

Invertendo a transformação,

$$S(t) = \mathcal{L}^{-1} \left\{ \widehat{S}(u) \right\} = A \exp \left(\frac{B-t}{2\tau} \right) I_0 \left(\frac{-B+t}{2\tau} \right). \quad (4.72)$$

Para $t \gg \tau$, podemos novamente usar o limite da função de Bessel, expresso na Eq. (4.56), e finalmente obter

$$S(t) \sim t^{-1/2}. \quad (4.73)$$

Este resultado é consistente com o teorema de Sparre-Andersen, discutido no final do capítulo anterior. Vemos, novamente, que o comportamento assintótico da taxa de sobrevivência depende do número de barreiras acessíveis para o caminhante aleatório. Se apenas uma delas estiver acessível, recuperamos o comportamento previsto pelo teorema de Sparre-Andersen, e para o caso de duas barreiras acessíveis temos um decaimento exponencial.

Em (12), o comportamento do tipo lei de potência foi obtido para o caso semi-infinito com $x_0 \rightarrow 0$. Se fizermos $L \rightarrow \infty$ na Eq. (4.12), obtemos uma generalização para um $x_0 \neq 0$ do resultado apresentado em (12).

Procedendo de maneira análoga à aqui apresentada, obtemos para o caminhante de Cauchy,

$$S(t) \simeq I_0(t/2\tau) \exp(-t/2\tau) + \frac{x_0}{b} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{t}{\tau} \right)^n \frac{{}_1F_1(n+1/2; n+1; -t/\tau)}{\pi n^2 \Gamma(n+1)}. \quad (4.74)$$

Este resultado é válido para $x_0 \ll b$ e para um valor de t qualquer. O comportamento assintótico para $t \gg \tau$ é, então,

$$S(t) \sim \left(\frac{\tau}{\pi t} \right)^{1/2} \left(1 + \frac{\pi x_0}{6b} \right), \quad (4.75)$$

que é mais uma vez consistente com o teorema de Sparre-Andersen. Para o caso gaussiano, recuperamos exatamente a taxa de sobrevivência expressa na Eq. (4.54), que, como vimos, também possui um comportamento do tipo lei de potência. Vemos então que as soluções via equações mestras são de fato consistentes com o teorema de Sparre-Andersen. Dada a dificuldade de realizar as integrais em $\widehat{\phi}(\omega, z)$ para $\omega \neq 0$, apesar de não termos obtido uma forma explícita para $Q(x, t)$, que é a função análoga a $P^{(2)}(x, t)$ na solução via método das imagens, obtivemos o comportamento assintótico da taxa de sobrevivência e a mudança da lei de potência para a exponencial à medida que a barreira mais distante se torna acessível.

4.2 Validade da Solução via Equações Mestras

Na seção 4.1, argumentamos que realizamos uma aproximação ao desprezar os termos $\widehat{R}^{(x_0)}(\omega, z)$ e $\widehat{R}^{(L)}(\omega, z)$ na Eq. (4.7). Vamos, em seguida, verificar a qualidade desta aproximação ao compararmos o nosso resultado com os de um problema modelo que admite solução exata.

Em (45), somos apresentados ao problema de um caminhante aleatório com distribuição de tamanhos de passos exponencial, $p(\ell) = e^{-|\ell|/d}/2d$, em um intervalo $[-a, b]$. Utilizando um método também baseado em equações mestras (45), que não discutiremos nesta tese, obtemos a seguinte relação,

$$\widehat{Q}(\omega, z) = \frac{1 - \left(\widehat{R}^{(a)}(\omega, z) + \widehat{R}^{(b)}(\omega, z) \right)}{1 - zp(\omega)}, \quad (4.76)$$

e a expressão exata,

$$\begin{aligned} \widehat{R}^{(a)}(\omega, z) + \widehat{R}^{(b)}(\omega, z) &= \frac{z}{[e^{L\sqrt{1-z}/d}(1 + \sqrt{1-z})^2 - e^{-L\sqrt{1-z}/d}(1 - \sqrt{1-z})^2]} \\ &\times \left\{ \frac{e^{-i\omega a}}{(1 + i\omega d)} \left[e^{b\sqrt{1-z}/d}(1 + \sqrt{1-z}) - e^{-b\sqrt{1-z}/d}(1 - \sqrt{1-z}) \right] \right. \\ &\quad \left. + \frac{e^{i\omega b}}{(1 - i\omega d)} \left[e^{a\sqrt{1-z}/d}(1 + \sqrt{1-z}) - e^{-a\sqrt{1-z}/d}(1 - \sqrt{1-z}) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.77)$$

Vamos utilizar o resultado acima para verificar a validade da aproximação utilizada neste capítulo. De fato, a partir da Eq. (4.6) temos

$$\ln \left[1 - \widehat{R}^{(x_0)}(\omega, z) - \widehat{R}^{(L)}(\omega, z) \right] - \ln \left[\widehat{Q}(\omega, z) \right] = \ln [1 - zp(\omega)]. \quad (4.78)$$

Por simplicidade, vamos tratar o caso $x_0 \rightarrow 0$ de modo que garantimos que uma das barreiras será sempre acessada pelo caminhante e o limite de uma barreira pode ser tomado fazendo $L \rightarrow \infty$. Portanto,

$$\ln \left[1 - \widehat{R}^{(0)}(\omega, z) - \widehat{R}^{(L)}(\omega, z) \right] - \ln \left[\widehat{Q}(\omega, z) \right] = \ln [1 - zp(\omega)]. \quad (4.79)$$

Podemos expandir o termo da direita em série de Taylor e utilizar a relação $\widehat{p}^m(\omega) = \widehat{P}_m(\omega)$, como visto na Eq. (4.10), de modo que

$$\begin{aligned} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{z^m}{m} \int_{-\infty}^0 P_m(x) e^{i\omega x} dx + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{z^m}{m} \int_0^L P_m(x) e^{i\omega x} dx + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{z^m}{m} \int_L^{\infty} P_m(x) e^{i\omega x} dx \\ = -\ln \left[1 - \widehat{R}^{(0)}(\omega, z) - \widehat{R}^{(L)}(\omega, z) \right] + \ln \left[\widehat{Q}(\omega, z) \right]. \end{aligned} \quad (4.80)$$

No caso $L \rightarrow \infty$, obtemos

$$\begin{aligned} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{z^m}{m} \int_{-\infty}^0 P_m(x) e^{i\omega x} dx + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{z^m}{m} \int_0^{\infty} P_m(x) e^{i\omega x} dx = \\ -\ln \left[1 - \widehat{R}^{(0)}(\omega, z) - \widehat{R}^{(\infty)}(\omega, z) \right] + \ln \left[\widehat{Q}(\omega, z) \right]. \end{aligned} \quad (4.81)$$

Podemos utilizar acima a fatorização de Wiener-Hopf (45) e separar uma função f definida em todo plano complexo em duas funções, uma definida no semiplano superior, f_+ , e a outra definida no semiplano inferior, f_- . No espaço real, f_+ está definida para $x > 0$ e f_- para $x < 0$. Logo, podemos separar as duas contribuições,

$$-\ln \left[1 - \widehat{R}^{(0)}(\omega, z) - \widehat{R}^{(\infty)}(\omega, z) \right] = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{z^m}{m} \int_{-\infty}^0 P_m(x) e^{i\omega x} dx \quad (4.82)$$

e

$$\ln \left[\widehat{Q}(\omega, z) \right] = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{z^m}{m} \int_0^{\infty} P_m(x) e^{i\omega x} dx. \quad (4.83)$$

Substituindo a Eq. (4.82) na Eq. (4.80), obtemos

$$\begin{aligned} -\ln \left[1 - \widehat{R}^{(0)}(\omega, z) - \widehat{R}^{(\infty)}(\omega, z) \right] + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{z^m}{m} \int_0^L P_m(x) e^{i\omega x} dx + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{z^m}{m} \int_L^{\infty} P_m(x) e^{i\omega x} dx \\ = -\ln \left[1 - \widehat{R}^{(0)}(\omega, z) - \widehat{R}^{(L)}(\omega, z) \right] + \ln \left[\widehat{Q}(\omega, z) \right]. \end{aligned}$$

Logo,

$$\begin{aligned} \ln \left[\widehat{Q}(\omega, z) \right] = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{z^m}{m} \int_0^L P_m(x) e^{i\omega x} dx + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{z^m}{m} \int_L^{\infty} P_m(x) e^{i\omega x} dx \\ + \ln \left[\frac{1 - \widehat{R}^{(0)}(\omega, z) - \widehat{R}^{(L)}(\omega, z)}{1 - \widehat{R}^{(0)}(\omega, z) - \widehat{R}^{(\infty)}(\omega, z)} \right]. \end{aligned} \quad (4.84)$$

Observamos, então, que neste capítulo desprezamos os dois últimos termos do lado direito da equação acima.

Vamos utilizar o resultado do problema do caminhante exponencial, dado na Eq. (4.77), para verificar a relevância destes termos. Vamos analisar aqui o caso $\omega = 0$, relevante para o cálculo da taxa de sobrevivência. Temos, então, que

$$P_m(x) = \mathcal{F}^{-1} \{ p^m(\omega) \} = \mathcal{F}^{-1} \left\{ \left(\frac{1}{1 + (\omega d)^2} \right)^m \right\} = \frac{(|x|/2d)^{m-\frac{1}{2}} K_{m-\frac{1}{2}} \left(\frac{|x|}{d} \right)}{d\sqrt{\pi}\Gamma(m)}. \quad (4.85)$$

Aqui, utilizamos a integral de Basset,

$$K_\nu(xy) = \frac{\Gamma(\nu + 1/2)(2y)^\nu}{\sqrt{\pi}x^\nu} \int_0^\infty \frac{\cos(xt)dt}{(t^2 + y^2)^{\nu+1/2}}; \quad \text{Re}\{\nu\} > -1/2, x > 0, \text{Arg}\{y\} < \pi/2, \quad (4.86)$$

onde $K_\nu(x)$ é a função de Bessel modificada do segundo tipo. Logo,

$$\sum_{m=1}^{\infty} \frac{z^m}{m} \int_L^{\infty} P_m(x) e^{i\omega x} dx = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{z^m}{m} \int_L^{\infty} \frac{(|x|/2d)^{m-\frac{1}{2}} K_{m-\frac{1}{2}} \left(\frac{|x|}{d} \right)}{d\sqrt{\pi}\Gamma(m)} e^{i\omega x} dx. \quad (4.87)$$

Tomando o limite $\omega = 0$, obtemos

$$\sum_{m=1}^{\infty} \frac{z^m}{m} \int_L^{\infty} P_m(x) e^{i\omega x} dx \simeq \frac{de^{-L/d}}{L} \left\{ e^{zL/2d} - 1 \right\} \quad ; \quad L \gg d \quad \omega \rightarrow 0. \quad (4.88)$$

Representamos aqui o limite $L \gg d$, pois estamos interessados em espaços finitos de tamanhos bem maiores que a variância da distribuição de passos. Em particular, no caso específico da distribuição exponencial, temos $\langle x^2 \rangle = 2d^2$. Portanto, utilizando o resultado da Eq. (4.77), obtemos

$$\ln \left[\frac{1 - \hat{R}^{(0)}(\omega = 0, z) - \hat{R}^{(L)}(\omega = 0, z)}{1 - \hat{R}^{(0)}(\omega = 0, z) - \hat{R}^{(\infty)}(\omega = 0, z)} \right] = \ln \left[1 + \frac{2}{e^{Ld\sqrt{1-z}}(1 + \sqrt{1-z})^2} \right]. \quad (4.89)$$

No limite $L \gg d$, o resultado acima leva a

$$\ln \left[\frac{1 - \hat{R}^{(0)}(\omega = 0, z) - \hat{R}^{(L)}(\omega = 0, z)}{1 - \hat{R}^{(0)}(\omega = 0, z) - \hat{R}^{(\infty)}(\omega = 0, z)} \right] \simeq \frac{2e^{-Ld\sqrt{1-z}}}{(1 + \sqrt{1-z})^2}, \quad (4.90)$$

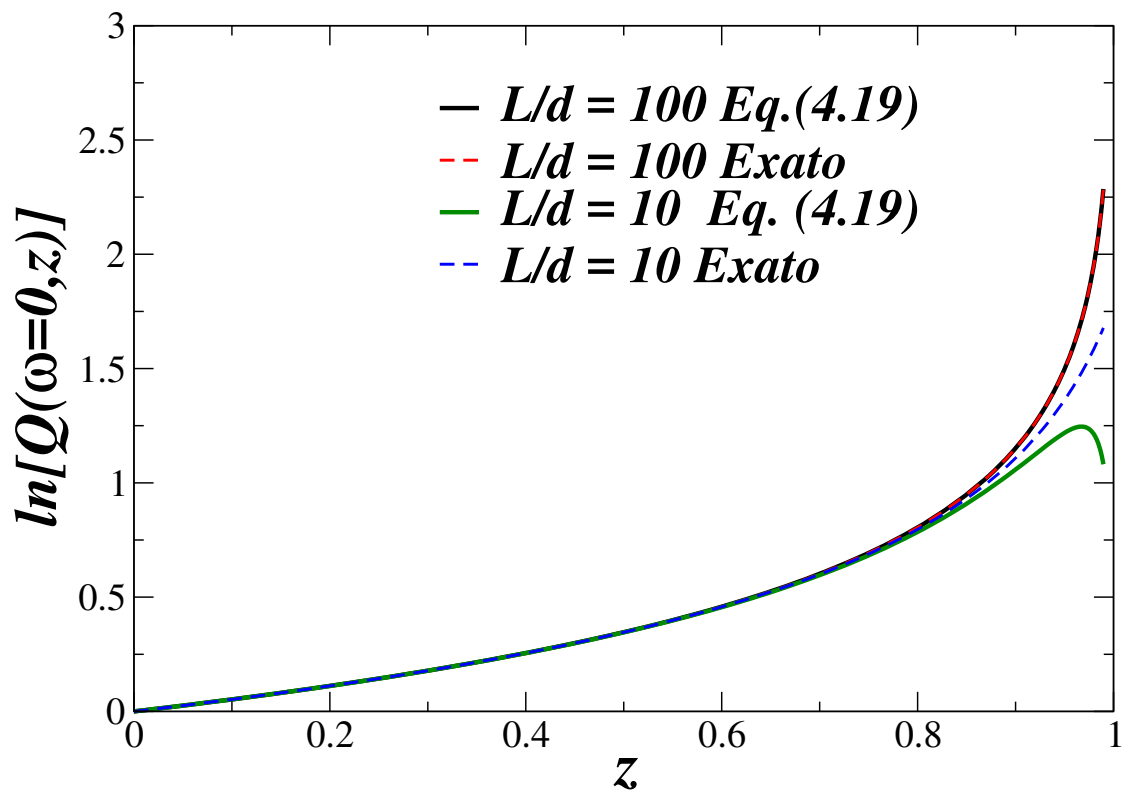
de modo que, no limite $\omega = 0$,

$$\begin{aligned} \ln \left[\hat{Q}(\omega = 0, z) \right] &= \lim_{\omega \rightarrow 0} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{z^m}{m} \int_0^L P_m(x) e^{i\omega x} dx + \frac{2e^{-L/d\sqrt{1-z}}}{(1 + \sqrt{1-z})^2} \\ &\quad + \frac{d}{L} \left\{ e^{-L/d(1-z/2d)} - e^{-L/d} \right\} \quad ; \quad L \gg d. \end{aligned} \quad (4.91)$$

Observamos, portanto, que o erro cometido ao utilizar a aproximação mencionada decai com $\exp(-L/d)$, de modo que os resultados apresentados para a taxa de sobrevivência são confiáveis. De fato, na Fig. 28 mostramos uma comparação da solução exata do caso exponencial, dada pela Eq. (4.76), e o resultado aproximado obtido pela Eq. (4.19).

Verificamos, então, que apesar de ser uma aproximação, a utilização da Eq. (4.19) para o cálculo da taxa de sobrevivência leva a erros bastante pequenos e consegue capturar a dinâmica do sistema. Podemos então afirmar que os resultados aqui apresentados para a taxa de sobrevivência são válidos. Em outras palavras, de fato ocorre uma mudança do comportamento do tipo lei de potência, obedecendo o teorema de Sparre-Andersen, para exponencial à medida que o caminhante que realiza voos de Lévy consegue acessar a barreira mais distante.

Figura 28 – Comparação dos resultados para $\ln[Q(\omega = 0, z)]$ dado pela equação exata, Eq. (4.76), e pela aproximação que usamos nesta tese, Eq. (4.19).



5 Conclusões e Perspectivas

Neste trabalho discutimos como a equação de difusão falha para modelar sistemas que apresentam difusão anômala. Mostramos como o modelo de caminhante aleatório de tempo contínuo (CTRW) pode dar origem a uma equação de difusão com a introdução de derivadas fracionárias. Processos subdifusivos tem uma derivada fracionária no tempo e estão associados a caminhanteres cuja distribuição de tempo de espera possui momentos divergentes. Já os processos superdifusivos, possuem uma derivada fracionária no espaço e estão associados a caminhanteres com uma distribuição de tamanho de passos com momentos divergentes.

Resolvemos as equações de difusão, para subdifusão e superdifusão, no espaço livre expressando a solução em termos das funções de Fox. Calculando os segundos momentos da distribuição de probabilidade associada, vimos que eles eram consistentes com processos de difusão anômala. Após isso, discutimos um método baseado em funções de Green para relacionar a solução para o problema com uma ou duas barreiras absorventes, gerando espaços de busca semi-infinitos e finitos. Este método pode ser diretamente relacionado com o Método das Imagens.

As soluções obtidas com a presença das barreiras absorventes, obedecem as condições de contorno para os casos subdifusivo e superdifusivo. Entretanto, o caso superdifusivo viola um teorema fundamental da Estatística, o teorema de Sparre-Andersen. Este teorema nos dá a forma assintótica da taxa de sobrevivência para os espaços semi-infinitos, $S(t) \sim t^{-1/2}$.

Discutimos então um método para a solução da difusão com barreiras absorventes via equações mestras. Esta solução nos permite obter o comportamento assintótico da taxa de sobrevivência para o caso superdifusivo para uma e duas barreiras absorventes. Verificamos o comportamento assintótico do tipo lei de potência para a taxa de sobrevivência no caso de uma barreira absorvente e obtivemos um decaimento exponencial para a taxa de sobrevivência no caso de duas barreiras. Verificamos que se o tamanho L do intervalo de busca for feito infinito, recuperamos consistentemente o limite de uma barreira. A validade do método apresentado nesta tese foi verificada pela comparação com a solução exata da difusão para um caminhante com distribuição de passos exponencial.

Como perspectivas para este trabalho, temos a obtenção da solução da equação de difusão na presença de barreiras absorventes via o método de equações mestras, impossibilitado no momento pela dificuldade na inversão das transformadas de Laplace e Fourier que definem $Q(x,t)$. Além disso, pretendemos obter uma solução da equação de difusão fracionária para casos finitos, via o uso de uma definição de derivada fracionária que permita derivadas para espaços finitos ou via métodos numéricos. Além

disso, para o espaço livre, pretendemos analisar a competição entre o comportamento subdifusivo e superdifusivo ao solucionar uma equação de difusão com derivadas fracionárias no tempo e no espaço.

Referências

- [1] REIF, F. *Fundamentals of statistical and thermal physics*. Boston: McGraw-Hill, 1965.
- [2] MONTROLL, E. W.; WEST, B. J. *On an enriched collection of stochastic processes In: Fluctuation phenomena*. New York: Elsevier, 1979.
- [3] PEKALSKI, A.; SZNAJD-WERON, K. *Anomalous diffusion: From basics to applications*. 1. ed. Berlin: Springer, 1999.
- [4] METZLER, R.; KLAFTER, J. The random walk's guide to anomalous diffusion: A fractional dynamics approach. *Physics Reports*, v. 339, p. 1–77, 2000.
- [5] SHLESING, M. F.; ZASLAVSKY, G. M.; FRISCH, U. *Lévy flights and related topics in physics*. Berlin: Springer, 1995.
- [6] HUGHES, B. D. *Random walks and environments. vol. 1: Random walks*. Oxford: Clarendon Press, 1995.
- [7] VISWANATHAN, G. M.; DA LUZ, M. G. E.; RAPOSO, E. P.; STANLEY, H. E. *The physics of foraging: An introduction to random searches and biological encounters*. Cambridge: Cambridge University Press, 2011.
- [8] ZABURDAEV, V.; DENISOV, S.; KLAFTER, J. Lévy walks. *Reviews of Modern Physics*, Woodbury, v. 87, n. 2, p. 483–530, 2015.
- [9] RAPOSO, E. P.; BULDYREV, S. V.; DA LUZ, M. G. E.; VISWANATHAN, G. M.; STANLEY, H. E. Lévy flights and random searches. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, v. 42, n. 43, p. 434003–434029, 2009.
- [10] METZLER, R.; KLAFTER, J. The restaurant at the end of the random walk: recent developments in the description of anomalous transport by fractional dynamics. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 37, n. 31, p. R161–R208, 2004.
- [11] REDNER, S. *A guide to first-passage processes*. 1. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2007.
- [12] ZUMOFEN, G.; KLAFTER, J. Absorbing boundary in one-dimensional anomalous transport. *Physical Review E*, v. 51, n. 4, p. 2805–2814, 1995.
- [13] CHECHKIN, A.; METZLER, R. et al. First passage and arrival time densities for Lévy flights and the failure of the method of images. *Journal of Physics A: Mathematical and General Physics*, v. 36, n. 41, p. L537–L544, 2003.

- [14] HUMPHRIES, N. E.; QUEIROZ, NUNO; DYER, J. R. M.; PADE, NICOLAS G. AND MUSYL, M. K.; SCHAEFER, K. M.; FULLER, DANIEL W. AND BRUNNSCHWEILER, J. M.; DOYLE, T. K.; HOUGHTON, J. D. R. Environmental context explains lévy and brownian movement patterns of marine predators. *Nature*, London, v. 465, n. 7301, p. 1066–1069, 2010.
- [15] D.W.SIMS; E.J.SOUTHALL; N.E.HUMPHRIES et al. Scaling laws of marine predator search behavior. *Nature*, London, v. 451, p. 1098–1102, 2008.
- [16] SESHADRI, V.; B. J. WEST JOURNAL = Proceedings of the National Academy of Sciences, YEAR = 1982, V. . . N. . . P. . . Fractal dimensionality of levy processes.
- [17] GARDINER, C. W. *Handbook of stochastic methods for physics, chemistry and mathematical sciences*. 2nd. ed. Berlin: Springer, 1997.
- [18] NOLAN, J. P. *Stable distributions - models for heavy tailed data*. Boston: Birkhauser, 2015. Em progresso, Capítulo 1 disponível online em academic2.american.edu/~jpnolan.
- [19] KLAFTER, J.; SHLESINGER, M. F.; ZUMOFEN, G. Beyond brownian motion. *Physics Today*, v. 49, n. 2, p. 33–39, 1996.
- [20] BARKAI, E.; R.METZLER; J.KLAFTER. From continuous time random walks to the fractional Fokker-Planck equation, journal = Physical Review E, year = 2000, pages = 132-138, volume = 61, number = 1,.
- [21] PODLUBNY, I. *Fractional differential equations*. 1. ed. San Diego: Academic Press, 1999.
- [22] HERRMANN, R. *Fractional calculus: An introduction for physicists*. 2. ed. Singapore: World Scientific, 2014.
- [23] OLDHAM, K. B.; SPANIER, J. *The fractional calculus : Theory and applications of differentiation and integration to arbitrary order*. San Diego: Academic Press, 1974. v. 111 of *Mathematics in Science and Engineering*.
- [24] MILLER, K. S.; ROSS, B. *An introduction to the fractional calculus and fractional differential equations*. 1st. ed. New York: John Willey & Sons, 1993.
- [25] LASKIN, N. Fractional Schrödinger equation. *Physical Review E*, v. 66, n. 5, p. 056108–056115, 2002.
- [26] HILFER, R. *Applications of fractional calculus in physics*. 1. ed. Singapore: World Scientific, 2000.

- [27] M. ISHTEVA, R. S.; BOYADJIEV, L. On the Caputo operator of fractional calculus and c-laguerre functions. *Math. Sci. Res.*, v. 9, n. 6, p. 161–170, 2005.
- [28] KILBAS, A. A.; SRIVASTAVA, H. M.; TRUJILLO, J. *Theory and applications of fractional differential equations*. Amsterdam: Elsevier, 2006.
- [29] HILFER, R. (Ed.). *Applications of fractional calculus in physics*. Singapore: World Scientific, 2006.
- [30] DIETHELM, K. *The analysis of fractional differential equations: An application-oriented exposition using differential operators of Caputo type*. 1. ed. Berlin: Springer, 2004.
- [31] VALÉRIO, D.; TRUJILLO, J. J.; RIVERO, M.; MACHADO, J. A. T.; BALEANU, D. Fractional calculus: A survey of useful formulas. *The European Physical Journal Special Topics*, v. 222, n. 8, p. 1827–1846, 2013.
- [32] MATHAI, A. M.; HAUBOLD, H. J. *Special functions for applied scientists*. 1st. ed. New York: Springer, 2008.
- [33] GRIGOLETTO, E. C.; OLIVEIRA, E. C. Fractional versions of the fundamental theorem of calculus. *Applied Mathematics*, v. 04, n. 07, p. 23–33, 2013.
- [34] LENZI, E. K.; MENDES, R. S.; TSALLIS, C. Crossover in diffusion equation: Anomalous and normal behaviors. *Physical Review E*, v. 67, n. 3, p. 031104–031112, 2003.
- [35] WEISS, G. H. *Aspects and applications of the random walk*. Random Materials and Processes. Amsterdam: North-Holland, 1994.
- [36] MONTROLL, E. W.; WEISS, G. H. Random walks on lattices. ii. *Journal of Mathematical Physics*, New York, v. 6, p. 167–181, 1965.
- [37] HÖFLING, F.; FRANOSCH, T. Anomalous transport in the crowded world of biological cells. *Reports on Progress in Physics*, v. 76, n. 4, p. 046602–046652, 2013.
- [38] SCHER, H.; MONTROLL, E. W. Anomalous transit-time dispersion in amorphous solids. *Physical Review B*, v. 12, n. 6, p. 2455–2477, 1975.
- [39] MATHAI, A. M.; SAXENA, R. K.; HAUBOLD, H. J. *The h-function: Theory and applications*. 1. ed. New York: Springer, 2010.
- [40] MATHAI, A. M.; SAXENA, R. K. *The h-function with applications in statistics and other disciplines*. 1. ed. New York: John Wiley & Sons, 1978.
- [41] L. BOYADJIEV, B. A.-S. Fractional fourier transform and fractional diffusion-wave equations. *Journal of Applied Electromagnetism*, v. 14, n. 2, p. 16–32, 2012.

- [42] MONTE, A.; DA SILVA, S.; CRUZ, J.; MORAIS, P.; CHAVES, A.; COX, H. Symmetric and asymmetric fractal diffusion of electron–hole plasmas in semiconductor quantum wells. *Physics Letters A*, Amsterdam, v. 268, n. 4-6, p. 430–435, 2000.
- [43] DENNERY, P.; KRZYWICKI, A. *Mathematics for physicists*. New York: Dover Publications, 1996.
- [44] JACKSON, J. D. *Classical electrodynamics*. 3. ed. New York: Wiley, 1998.
- [45] FELLER, W. *An introduction to probability theory and its applications*. New York: John Willey & Sons, 1971. v. II.
- [46] METZLER, R.; KLAFTER, J. Boundary value problems for fractional diffusion equations. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 278, n. 1–2, p. 107 – 125, 2000.
- [47] SPARRE-ANDERSEN, E. On the fluctuations of sums of random variables. *Mathematica Scandinavica*, v. 1, p. 263–285, 1953.
- [48] SPARRE-ANDERSEN, E. On the fluctuations of sums of random variables ii. *Mathematica Scandinavica*, v. 2, p. 194–222, 1954.
- [49] DYBIEC, B.; GUDOWSKA-NOWAK, E. Anomalous diffusion and generalized Sparre-Andersen scaling. *EPL (Europhysics Letters)*, v. 88, n. 1, p. 10003–10007, 2009.
- [50] FELLER, W. *An introduction to probability theory and its applications*. New York: John Willey & Sons, 1971. v. I.
- [51] ARAÚJO, H. A.; RAPOSO, E. P. Lévy flights between absorbing boundaries: Revisiting the survival probability and the shift from the exponential to the Sparre-Andersen limit behavior. *Phys. Rev. E*, v. 94, n. 3, p. 032113–032120, 2016.
- [52] SPANIER, J.; OLDHAM, K. B. *An atlas of functions*. Washignton: Hemisphere Publishing Corporation, 1987.
- [53] ZOIA, A.; ROSSO, A.; KARDAR, M. Fractional laplacian in bounded domains. *Phys. Rev. E*, v. 76, n. 2, p. 021116–021127, 2007.

APÊNDICE A – Função H de Fox

Neste apêndice enumeraremos algumas propriedades da Função H de Fox, utilizada nesta tese para expressar a solução das equações diferenciais fracionárias. As propriedades aqui listadas estão presentes em (4, 39, 40).

1. Definição: A função de Fox pode ser definida pela integral,

$$H_{p,q}^{m,n} \left[z \left| \begin{matrix} \{a_p, A_p\} \\ \{b_q, B_q\} \end{matrix} \right. \right] = \frac{1}{2\pi i} \int_L \frac{\prod_{j=1}^m \Gamma(b_j - B_j s) \prod_{j=1}^n \Gamma(1 - a_j + A_j s)}{\prod_{j=m+1}^q \Gamma(1 - b_j + B_j s) \prod_{j=n+1}^p \Gamma(a_j - A_j s)} z^s ds, \quad (\text{A.1})$$

onde L é um contorno que separa os pólos de $\Gamma(b_j - B_j s)$ dos pólos de $\Gamma(1 - a_j + A_j s)$, ou seja, precisamos ter,

$$A_j(b_h + \nu) \neq B_h(a_j - \lambda - 1) \quad ; \quad \nu, \lambda = 0, 1, 2, \dots \quad h = 1, \dots, m \quad j = 1, \dots, n \quad (\text{A.2})$$

2. Para $k > 0$,

$$H_{p,q}^{m,n} \left[z \left| \begin{matrix} \{a_p, A_p\} \\ \{b_q, B_q\} \end{matrix} \right. \right] = k H_{p,q}^{m,n} \left[z^k \left| \begin{matrix} \{a_p, kA_p\} \\ \{b_q, kB_q\} \end{matrix} \right. \right] \quad (\text{A.3})$$

3. Para um $\sigma \in \mathbb{R}$,

$$x^\sigma H_{p,q}^{m,n} \left[z \left| \begin{matrix} \{a_p, A_p\} \\ \{b_q, B_q\} \end{matrix} \right. \right] = H_{p,q}^{m,n} \left[z \left| \begin{matrix} \{a_p + \sigma A_p, A_p\} \\ \{b_q + \sigma B_q, B_q\} \end{matrix} \right. \right] \quad (\text{A.4})$$

4. Forma computável da Função H,

$$H_{p,q}^{m,n} \left[z \left| \begin{matrix} \{a_p, A_p\} \\ \{b_q, B_q\} \end{matrix} \right. \right] = \sum_{h=1}^m \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{\prod_{j=1, j \neq h}^m \Gamma(b_j - B_j(b_h + \nu)/B_h)}{\prod_{j=m+1}^q \Gamma(1 - b_j + B_j(b_h + \nu)/B_h)} \times \frac{\prod_{j=1}^n \Gamma(1 - a_j + A_j(b_h + \nu)/B_h)}{\prod_{j=n+1}^p \Gamma(a_j - A_j(b_h + \nu)/B_h)} \frac{(-1)^\nu z^{(b_h + \nu)/B_h}}{\nu! B_h} \quad (\text{A.5})$$

5. Casos especiais da função H,

$$B^{-1} z^{b/B} e^{-z^{1/B}} = H_{0,1}^{1,0} \left[z \left| \begin{matrix} \\ \{b, B\} \end{matrix} \right. \right] \quad (\text{A.6})$$

$$\frac{1}{(1+z)^r} = H_{1,1}^{1,1} \left[z \left| \begin{matrix} \{1-r, 1\} \\ \{0, 1\} \end{matrix} \right. \right] \quad (\text{A.7})$$

$$\frac{z^\beta}{1 + az^\alpha} = a^{-\beta/\alpha} H_{p,q}^{m,n} \left[az^\alpha \left| \begin{matrix} \{\beta/\alpha, 1\} \\ \{\beta/\alpha, 1\} \end{matrix} \right. \right] \quad (\text{A.8})$$

6. A seguinte é integral é válida para

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dt \, t^{\rho-1} \cos(kt) H_{p,q}^{m,n} \left[at^\mu \left| \begin{matrix} \{a_p, A_p\} \\ \{b_q, B_q\} \end{matrix} \right. \right] \\ = \frac{\pi}{k^\rho} H_{q+1,p+2}^{n+1,m} \left[\frac{k^\mu}{a} \left| \begin{matrix} \{1-b_q, B_q\} \{\frac{1+\rho}{2}, \frac{\mu}{2}\} \\ \{\rho, \mu\} \{1-a_p, A_p\} \{\frac{1+\rho}{2}, \frac{\mu}{2}\} \end{matrix} \right. \right] \quad ; \quad k^\mu > 0, \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

7. A transformada de Mellin da Função H é expressa como,

$$\mathcal{M} \left\{ H_{p,q}^{m,n} \left[at \left| \begin{matrix} \{a_p, A_p\} \\ \{b_q, B_q\} \end{matrix} \right. \right] \right\} = \frac{a^{-s} \prod_{j=1}^m \Gamma(b_j + B_j s) \prod_{j=1}^n \Gamma(1 - a_j - A_j s)}{\prod_{j=m+1}^q \Gamma(1 - b_j - B_j s) \prod_{j=n+1}^p \Gamma(a_j + A_j s)}, \quad (\text{A.10})$$

onde,

$$\mathcal{M} \{f(t)\} = \int_0^\infty t^{s-1} f(t) dt. \quad (\text{A.11})$$

8. Podemos expressar transformadas de Laplace da Função H como,

$$\mathcal{L} \left\{ t^{\rho-1} H_{p,q}^{m,n} \left[at^\sigma \left| \begin{matrix} \{\rho, \sigma\} \\ \{0, 1\} \end{matrix} \right. \right] \right\} = u^{-\rho} H_{p+1,q}^{m,n+1} \left[au^{-\sigma} \left| \begin{matrix} \{1-\rho, \sigma\} \{a_p, A_p\} \\ \{b_q, B_q\} \end{matrix} \right. \right], \quad (\text{A.12})$$

Desta forma, podemos expressar,

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ u^{-\rho} e^{-au^\sigma} \right\} = t^{\rho-1} H_{1,1}^{1,0} \left[at^{-\sigma} \left| \begin{matrix} \{\rho, \sigma\} \\ \{0, 1\} \end{matrix} \right. \right], \quad (\text{A.13})$$