

Trabalho de Conclusão de Curso

Curso de Graduação em Física

**CÁLCULO FRACIONÁRIO APLICADO AO MOVIMENTO
BROWNIANO**

ALEXANDRE MANENTI BRITTO PEREIRA DOS SANTOS

Prof.Dr. ROBERTO E. LAGOS MONACO

Rio Claro (SP)
2011

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA
Instituto de Geociências e Ciências Exatas
Campus de Rio Claro

ALEXANDRE MANENTI BRITTO PEREIRA DOS SANTOS

**CÁLCULO FRACIONÁRIO
APLICADO AO MOVIMENTO BROWNIANO**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado
ao Instituto de Geociências e Ciências Exatas -
Campus de Rio Claro, da Universidade
Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho, para
obtenção do grau de Bacharel em Física.

Rio Claro - SP
2011

ALEXANDRE MANENTI BRITTO PEREIRA DOS SANTOS

CÁLCULO FRACIONÁRIO
APLICADO AO MOVIMENTO BROWNIANO

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado
ao Instituto de Geociências e Ciências Exatas -
Campus de Rio Claro, da Universidade
Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho, para
obtenção do grau de Bacharel Física.

Comissão Examinadora

Prof. Dr. Roberto E. Lagos Mônaco (orientador)

Prof. Dr. Ricardo Paulpitz B. dos Santos

Prof. Dr. Makoto Yoshida

Rio Claro, 08 de Novembro de 2011.

Assinatura do aluno

assinatura do orientador

RESUMO

Este trabalho visa o estudo dos diversos regimes difusivos, em particular o movimento Browniano. Tratamos de problemas envolvendo difusão anômala nos quais cabe-se a utilização do método de derivadas e integrais fracionarias. Introduzimos conceitos do cálculo fracional e o aplicamos na equação de Langevin generalizada. Através da transformada de Laplace fracionaria calculamos os valores dos coeficientes de difusão para dois casos superdifusivos verificando assim a validade do método.

Palavras Chave: *Difusão; movimento Browniano; Difusão Anômala; Cálculo Fracional; Equação de Langevin Generalizada;*

ABSTRACT

This work aims to study several diffusive regimes, especially Brownian motion. We deal with problems involving anomalous diffusion using the method of fractional derivatives and fractional integrals. We introduce concepts of fractional calculus and apply it to the generalized Langevin equation. Through the fractional Laplace transform we calculate the values of diffusion coefficients for two super diffusive cases, verifying the validity of the method.

Keywords: *Diffusion, Brownian motion, Anomalous Diffusion, Fractional Calculus, Generalized Langevin Equation;*

LISTA DE SIMBOLOS

$\mathfrak{D}^n$ - Derivada enésima

$\Gamma(n)$ - Função Gamma

$\psi(n)$ - Função complementar

$B(n)$ - Função Beta

$\gamma^*(n,t)$ - Função Gamma Incompleta

$\Psi(n)$ - Função Diggama

γ - Constante de Euler

$\mathcal{L}\{f(s)\}$ - Transformada de Laplace

J - Densidade de corrente

D - Coeficiente de difusão

ρ - Densidade de partículas

x - Posição da partícula

t - tempo

$\mathcal{P}(x,t)$ - Densidade de probabilidade

$M(t)$ - Função Memória

$A(t)$ - Força Randômica

$\delta(n)$ - Função Delta de Dirac

R - Constante universal dos gases

N_a - Número de Avogadro

η - Coeficiente de viscosidade do meio

T - Temperatura

μ - Coeficiente de mobilidade

m - Massa da partícula

N - Número de partículas

k_B - Constante de Boltzmann

$\dot{x}$ - Derivada primeira de x no tempo

$\ddot{x}$ - Derivada segunda de x no tempo

$\vec{v}(t)$ - Velocidade da partícula

$\vec{v}_0$ - velocidade da partícula no tempo inicial

d - Dimensão

σ - Variância

$\vec{x}_0$ - Posição da partícula no instante inicial

$C_v(t)$ - Correlação das velocidades

$Erf[t]$ - Função Erro

$Erfc[t]$ - Função Erro Complementar

ÍNDICE

1. INTRODUÇÃO	8
2. CÁLCULO FRACIONÁRIO	10
2.1 Introdução	10
2.2 Integrais fracionárias	15
2.3 Derivadas fracionárias	18
2.4 A transformada de Laplace fracionária	22
3. REGIME DIFUSIVO	25
3.1 Difusão Normal	25
3.2 Difusão anômala	26
3.3 Função memória	27
4. MOVIMENTO BROWNIANO	29
4.1 Introdução	29
4.2 Movimento Browniano normal	33
4.3 Equação e Langevin generalizada	37
5. MOVIMENTO BROWNIANO FRACIONÁRIO	38
5.1 Movimento Browniano anômalo	38
5.2 Caso normal	41
5.3 Casos anômalos	42
6. CONCLUSÃO	45
REFERÊNCIAS	47

1. INTRODUÇÃO

Desde que a resolução de problemas para mais de dois corpos exigiu um tratamento estatístico devido à complexibilidade das equações e da impossibilidade de se computar todos os cálculos mesmo com a ajuda de supercomputadores, a física estatística tem ganhado força entre as áreas de pesquisa. Ainda mais depois de que a mecânica quântica mostrou que o mundo não era determinista mas sim probabilístico.

No meio desse frenesi de novas idéias eis que surge um problema de caráter estocástico muito interessante. O movimento Browniano apareceu em uma época onde o conhecimento sobre processos randômicos era escasso e, portanto, só pode ser descrito bem depois de muito tempo da sua primeira observação. Isso criou uma áurea de mistério sobre o problema e muitas foram as tentativas de explicar o fenômeno, porém sem sucesso.

Após quase duzentos anos das descobertas de Brown e mais de cem da teoria de Einstein sobre o movimento Browniano, que vieram a consagrar a teoria atômica como verdadeira, o movimento Browniano já foi abordado de varias maneiras, porém, com a ajuda do cálculo fracionário, uma ferramenta relativamente nova para físicos, tentamos dar novo fôlego ao assunto e abordá-lo de uma maneira nova.

Deste modo, no segundo capítulo desse trabalho são abordados os conceitos mais básicos do cálculo fracionário. Mostramos uma breve historia por trás das descobertas dos operadores difero-integrais fracionários. Com o desenrolar do capítulo uma apresentação mais formal das integrais de derivadas fracionarias e introduzida seguida de exemplos de suas aplicações. Introduzimos então a Transformada de Laplace fracionária, ferramenta essencial para o desenvolvimento do trabalho.

No capítulo três são apresentadas as particularidades dos regimes difusivos, evidenciando principalmente a diferença entre uma difusão normal e uma difusão anômala, sendo a última de maior interesse para nosso trabalho. Além disso, mencionamos as características peculiares de regimes difusivos, como é o caso da função memória, que é crucial para o desenvolvimento do trabalho.

A abordagem do movimento Browniano como é tratado comumente está descrita no capítulo quatro, sendo essa abordagem mais focada no desenvolvimento da equação de Langevin para que possamos apresentar uma equação de Langevin generalizada, que é à base do trabalho apresentado. Além disso, os fatos históricos que acompanharam o desenvolvimento do fenômeno também são abordados, colocando assim um pano de fundo para o desenvolvimento da tese.

No quinto capítulo nos utilizamos de todo o conhecimento acumulado através dos outros capítulos para podermos formular um método de solução para o problema da partícula Browniana no regime difusivo anômalo. Descrevemos esse problema, apresentamos uma solução e por fim testamos as equações obtidas para o caso normal e para mais dois casos anômalos.

Por fim, o sexto e último capítulo conclui o trabalho discutindo os resultados obtidos e mostrando a validade do método utilizado para a descrição do movimento Browniano.

2. CÁLCULO FRACIONÁRIO

2.1 Introdução

O *cálculo fracionário* consiste em um conjunto de técnicas utilizadas para se obter derivadas ou integrais de ordens não inteiras. Denota-se o operador diferencial $\mathcal{D} = d/dx$ para descrever a derivada primeira de uma função $f(x)$ em relação a uma variável x , e também que $\mathcal{D}^n f(x) = d^n f(x)/dx^n$ para descrever a derivada de ordem n da função em relação à variável. Segundo Miller (1993), em 1695 o matemático L'Hospital perguntou a Leibniz o que aconteceria se n fosse um número não inteiro, e então nasceu o *cálculo fracionário*. Mais tarde, porém, se notou que o número n poderia de fato ser tanto inteiro como fracionário, irracional ou complexo, o que transformou o nome *cálculo fracionário* em *integrais e derivadas a ordens arbitrárias*.

De acordo com Miller (1993), as derivadas fracionárias apareceram pela primeira vez em 1819. S. F. Lacroix faz uma simples generalização para a n -ésima derivada de um polinômio. Considerando $y = x^m$, com m sendo um número inteiro, Lacroix escreveu:

$$\frac{d^n y}{dx^n} = \frac{m!}{(m-n)!} x^{m-n}, m \geq n \quad (2.1)$$

e utilizando a função Gamma obteve:

$$\frac{d^n y}{dx^n} = \frac{\Gamma(m+1)}{\Gamma(m-n+1)} x^{m-n} \quad (2.2)$$

Após algum tempo, Liouville, interessado em uma fórmula para integrais de ordens arbitrárias criada por Fourier e pela solução de Abel para um problema de *cálculo fracionário*, começou um estudo aprofundado sobre o assunto.

Segundo Miller (1993), primeiramente ele supôs que se a enésima derivada inteira de uma exponencial é dada por

$$\mathfrak{D}^n e^{ax} = a^n e^{ax}, \quad (2.3)$$

a enésima derivada fracionária deve ter a mesma expressão. Portanto podemos escrever qualquer derivada fracionária de qualquer função que possa ser escrita como

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{a_n x} \quad (2.4)$$

$$\mathfrak{D}^\nu f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n a_n^\nu e^{a_n x}. \quad (2.5)$$

Porém o método abrangia muitas poucas funções, e então Liouville definiu um segundo método para se obter uma derivada fracionária.

Partindo da integral que define a função Gamma

$$I = \int_0^{\infty} u^{a-1} e^{-xu} du,$$

efetuamos uma troca de variáveis, $xu = t$, obtendo

$$I = x^{-a} \int_0^{\infty} t^{a-1} e^{-t} dt,$$

$$I = x^{-a} \Gamma(a),$$

e, por fim,

$$x^{-a} = \frac{I}{\Gamma(a)}.$$

Aplicando o operador diferencial $\mathfrak{D}^\nu$ dos dois lados da equação, ficamos com

$$\mathfrak{D}^\nu x^{-a} = \frac{(-1)^\nu}{\Gamma(a)} \int_0^{\infty} u^{a+\nu-1} e^{-ux} du$$

$$\mathfrak{D}^\nu x^{-a} = \frac{(-1)^\nu \Gamma(a+\nu)}{\Gamma(a)} x^{-(a+\nu)}, \quad a > 0 \quad (2.6)$$

Porém, a segunda forma para derivadas fracionaria de Liouville só podem ser aplicadas em funções polinomiais.

Diz Miller (1993) que, foi Willian Center a perceber, no entanto, que a equação de Lacroix e a equação de Lioville não respondiam da mesma maneira para certos casos, como no caso $\mathfrak{D}^{1/2} x^0$, mesmo sabendo que isso violava algumas condições dadas pelos autores das equações. E, portanto uma, ou ambas, estavam incorretas.

Riemann, partindo de uma generalização da serie de Taylor, escreveu que:

$$\mathfrak{D}^{-\nu} f(x) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_c^x (x-t)^{\nu-1} f(t) dt + \psi(x), \quad (2.7)$$

onde $\psi(x)$ é uma função complementar que tentava fornecer uma medida da lei dos expoentes. Porem ela não foi bem aceita pela comunidade matemática por conter constantes arbitrárias ou infinitas.

Foi N. Ya. Sonin, seguido por A.V. Letnikov, que, Segundo Miller (1993), descobriu o caminho certo a seguir. Partindo da definição da enésima integral de Cauchy

$$\mathfrak{D}^n f(z) = \frac{n!}{2\pi i} \oint_c \frac{f(\zeta)}{(\zeta - z)^{n+1}} d\zeta, \quad (2.8)$$

e generalizando $n!$ para $\Gamma(n+1)$. Porém, se n já não é mais um inteiro, então o pólo no integrando se torna um ponto de ramificação, que exige um contorno que não foi tratado no trabalho de Sonin e Letnikov.

De acordo com Miller (1993), H. Laurent, após publicar seu artigo sobre a teoria dos operadores generalizados, partindo da mesma integral generalizada de Cauchy, conseguiu resultados utilizando um contorno aberto em uma superfície de Riemann. Conseguindo assim a seguinte formula:

$${}_c\mathfrak{D}_x^{-\nu} f(x) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_c^x (x-t)^{\nu-1} f(t) dt, \quad \operatorname{Re} \nu > 0 \quad (2.9)$$

onde $x > c$. Quando $c = 0$ a formula acima fica dada por

$${}_0\mathfrak{D}_x^{-\nu} f(x) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^x (x-t)^{\nu-1} f(t) dt, \quad \operatorname{Re} \nu > 0 \quad (2.10)$$

que é conhecida como a *Integral Fracionária de Riemann-Liouville*.

Essa forma integral também pode ser deduzida a partir do seguinte cálculo, visando uma apresentação didática. Consideremos o operador integral:

$${}_0\mathfrak{D}_x^{-1} f(x) = \int_0^x f(t) dt \quad (2.11)$$

Logo, ao aplicarmos o operador mais outra vez sobre a função, temos:

$${}_0\mathfrak{D}_x^{-2} f(x) = {}_0\mathfrak{D}_x^{-1} \left\{ {}_0\mathfrak{D}_x^{-1} f(x) \right\} = \int_0^x ds \int_0^s f(t) dt, \quad (2.12)$$

que pode ser integrada por partes. Chamemos $v' = 1$ e $u = \int_0^t f(s) ds$, temos, portanto, que

$v = s$ e $u' = f(s)$. Deste modo a equação (2.12) será dada por:

$${}_0\mathfrak{D}_x^{-2} f(x) = x \int_0^x f(s) ds - \int_0^x s f(s) ds = \int_0^x f(s) (x-s) ds \quad (2.13)$$

A generalização desta equação para n integrais torna-se então, facilmente demonstrável por indução,

$${}_0\mathfrak{D}_x^{-n} f(x) = \frac{1}{(n-1)!} \int_0^x (x-s)^{n-1} f(s) ds. \quad (2.14)$$

Considerando um número fracionário $n = \nu$ obtemos a equação (2.10), bastando para isso que generalizemos o fatorial $(\nu - 1)! = \Gamma(\nu)$.

É também interessante ressaltar uma forma muito usada ultimamente, a integral fracionária de Weyl, que, Segundo Miller (1993), é somente uma troca de variáveis para a integral fracionária representada como

$${}_{-\infty}\mathfrak{D}_x^{-\nu} f(x) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_{-\infty}^x (x-t)^{\nu-1} f(t) dt, \quad \operatorname{Re} \nu > 0. \quad (2.14)$$

Se fizermos à troca $t = -\tau$ na equação (2.11), teremos

$${}_{-\infty}\mathfrak{D}_x^{-\nu} f(x) = -\frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_{\infty}^{-x} (x+\tau)^{\nu-1} f(-\tau) d\tau.$$

Logo, fazendo $x = -\xi$,

$${}_{-\infty}\mathfrak{D}_{-\xi}^{-\nu} f(-\xi) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_{\xi}^{\infty} (\tau - \xi)^{\nu-1} f(-\tau) d\tau$$

podendo ser escrita como

$${}_x W_{\infty}^{-\nu} f(x) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_x^{\infty} (t-x)^{\nu-1} f(t) dt, \quad \operatorname{Re} \nu > 0 \quad (2.16)$$

que é a formula de Weyl.

2.2 Integraís fracionárias

Agora que sabemos que no geral as integraís fracionárias podem ser resolvidas aplicando-se a formula (2.10) podemos olhar alguns exemplos de integraís para algumas funções. No entanto é importante notar que nem todos os tipos de funções podem se valer da formula de Riemann-Lioville para que se obtenha sua integral fracionária.

As função que podem ser tratadas pela equação (2.10) devem apresentar algumas propriedades particulares, segundo Miller (1993):

Propriedades de funções fracionariamente integráveis: Sendo $\text{Re } \nu > 0$, a função f deve ser contínua por partes no intervalo $(0; \infty)$ e integrável em qualquer intervalo finito pertencente a $[0; \infty)$.

Deste modo, o número de equações que podem ser tratadas com a equação (2.10), é reduzido, o que nos obriga a agir com cautela ao integrar fracionariamente uma equação.

Contudo ainda podemos integrar muitas funções. A seguir veremos alguns exemplos.

Exemplo 2.1: Tomemos $f(x) = x^\mu$, com $\mu > -1$. Logo,

$$\begin{aligned} {}_0\mathfrak{D}_x^{-\nu} x^\mu &= \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^x (x-t)^{\nu-1} t^\mu dt = \frac{B(\mu+1, \nu)}{\Gamma(\nu)} x^{\mu+\nu} \\ &= \frac{\Gamma(\mu+1)}{\Gamma(\mu+\nu+1)} x^{\mu+\nu}, \end{aligned} \quad (2.13)$$

onde $B(\mu+1, \nu)$ é a função Beta dada por

$$B(x, y) = \int_0^1 t^{x-1} (1-t)^{y-1} dt = \frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{\Gamma(x+y)}.$$

Caso $\mu = 0$, a integral fracionária de uma constante C fica sendo igual a

$${}_0\mathfrak{D}_x^{-\nu}C = \frac{C}{\Gamma(\nu+1)}x^\nu. \quad (2.14)$$

Exemplo 2.2: Tomemos $f(x) = e^{ax}$. Assim

$${}_0\mathfrak{D}_x^{-\nu}e^{ax} = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^x (x-t)^{\nu-1} e^{at} dt.$$

Operando a troca de variável $\xi = x - t$, temos

$${}_0\mathfrak{D}_x^{-\nu}e^{ax} = \frac{e^{ax}}{\Gamma(\nu)} \int_0^x \xi^{\nu-1} e^{-a\xi} d\xi. \quad (2.15)$$

Podemos notar semelhanças entre a função (2.15) e a função Gamma incompleta $\gamma^*(\nu, t)$. Sendo a última, dada em sua forma integral por

$$\gamma^*(\nu, t) = \frac{1}{\Gamma(\nu)t^\nu} \int_0^x \xi^{\nu-1} e^{-\xi} d\xi. \quad (2.16)$$

Desse modo,

$${}_0\mathfrak{D}_x^{-\nu}e^{ax} = e^{ax} x^\nu \gamma^*(\nu, ax). \quad (2.17)$$

Exemplo 2.3: Tomemos $f(x) = \ln x$. Isto leva-nos a:

$${}_0\mathfrak{D}_x^{-\nu} \ln x = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^x (x-t)^{\nu-1} \ln t dt.$$

Operando a troca de variável $t = x\xi$, obtemos

$${}_0\mathfrak{D}_x^{-\nu} \ln x = \frac{x^\nu}{\Gamma(\nu+1)} \ln x + \frac{x^\nu}{\Gamma(\nu)} \int_0^1 (1-\xi)^{\nu-1} \ln \xi d\xi.$$

Porém, a saber,

$$\int_0^1 x^{\mu-1} (1-x)^{\nu-1} \ln x dx = B(\mu, \nu) [\Psi(\mu) - \Psi(\mu + \nu)], \quad \operatorname{Re} \mu > 0, \operatorname{Re} \nu > 0 \quad (2.18)$$

onde $\Psi(\mu)$ é a função Digamma, definida como a derivada do logaritmo da função Gamma, dada por

$$\Psi(x) = \mathfrak{D} \ln \Gamma(x) = \frac{\mathfrak{D} \Gamma(x)}{\Gamma(x)}.$$

Desse modo, substituindo $\mu = 1$ na equação (2.18), obtemos que

$${}_0\mathfrak{D}_x^{-\nu} \ln x = \frac{x^\nu}{\Gamma(\nu+1)} [\ln x - \gamma - \Psi(\nu+1)], \quad (2.19)$$

onde γ é a constante de Euler, dada por

$$\gamma = -\Psi(1).$$

No caso de ser necessário fazer mais de uma integral fracionária consecutivamente, existe um teorema que pode simplificar as contas substancialmente.

Teorema 1: Sendo f continua e os coeficientes $\nu, \mu > 0$. Então para todo x :

$$\mathfrak{D}^{-\mu} [\mathfrak{D}^{-\nu} f(x)] = \mathfrak{D}^{-(\mu+\nu)} f(x) = \mathfrak{D}^{-\nu} [\mathfrak{D}^{-\mu} f(x)] \quad (2.20)$$

Isso reduz uma serie de integrais consecutivas a uma única integral fracionária, conforme Miller (1993).

2.3 Derivadas fracionárias

Vimos pelo teorema 1 que múltiplas integrais podem ser consideradas como uma única integral da soma dos seus expoentes fracionários e que a ordem entre as integrais não altera o resultado. Isso nos leva a pensar se o mesmo não poderia ser feito para se derivar fracionariamente uma função.

De fato o método usado para se obter uma derivada fracionária é este, porém deve-se atentar a pequenos detalhes. Para isso o melhor é introduzirmos um teorema.

Teorema 2: Sendo f continua e $\nu > 0$, então:

a) Se $\mathfrak{D}f$ pertencer à classe de funções descrita pela definição 1, logo

$$\mathfrak{D}^{-1-\nu}[\mathfrak{D}f(x)] = \mathfrak{D}^{-\nu}f(x) - \frac{f(0)}{\Gamma(\nu+1)}x^{\nu}. \quad (2.21)$$

b) Se $\mathfrak{D}f$ é continua, para $t > 0$ temos que

$$\mathfrak{D}[\mathfrak{D}^{-\nu}f(x)] = \mathfrak{D}^{-\nu}[\mathfrak{D}f(x)] + \frac{f(0)}{\Gamma(\nu)}x^{\nu-1}. \quad (2.22)$$

De acordo com Miller (1993).

Aplicando o teorema na função exponencial obtemos:

Por (a)

$$\begin{aligned} \mathfrak{D}^{-1-\nu}[ae^{ax}] &= \mathfrak{D}^{-\nu}[e^{ax}] - \frac{x^{\nu}}{\Gamma(\nu+1)} \\ ae^{ax}x^{\nu+1}\gamma^*(\nu+1, ax) &= e^{ax}x^{\nu}\gamma^*(\nu, ax) - \frac{x^{\nu}}{\Gamma(\nu+1)}. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Por (b)

$$\mathfrak{D}[e^{ax}x^{\nu}\gamma^*(\nu, ax)] = ae^{ax}x^{\nu}\gamma^*(\nu, ax) + \frac{x^{\nu+1}}{\Gamma(\nu)}.$$

Utilizando a equação (2.23) obtemos a relação

$$\mathfrak{D}[e^{ax} x^\nu \gamma^*(\nu, ax)] = e^{ax} x^{\nu-1} \gamma^*(\nu-1, ax), \quad (2.24)$$

o que torna possível a generalização do teorema 2.

Teorema 3: Sendo b um inteiro positivo, e $\mathfrak{D}^{b-1} f$ contínuo. Se $\nu > 0$ então:

a) Se $\mathfrak{D}^b f$ pertencer à classe de funções definidas pela definição 1, então

$$\mathfrak{D}^{-\nu} f(x) = \mathfrak{D}^{-\nu-b}[\mathfrak{D}^b f(x)] + Q_b(x; \nu).$$

b) Se $\mathfrak{D}^b f$ é continua, então, para $x > 0$ temos

$$\mathfrak{D}^b[\mathfrak{D}^{-\nu} f(x)] = \mathfrak{D}^{-\nu}[\mathfrak{D}^b f(x)] + Q_b(x; \nu - b).$$

onde

$$Q_b(x; \nu) = \sum_{k=0}^{b-1} \frac{t^{\nu+k}}{\Gamma(\nu+k+1)} \mathfrak{D}^k f(0).$$

Segundo Miller (1993).

Também podemos escrever a função Q_b como uma integral fracionária

$$Q_b(x; \nu) = \mathfrak{D}^{-\nu}[R_b(x)],$$

onde

$$R_b(x) = \sum_{k=0}^{b-1} \frac{[\mathfrak{D}^k f(x)]_0}{k!} x^k. \quad (2.25)$$

Assim, se $[\mathfrak{D}^k f(x)]_0 = 0$, temos, pela equação (2.14) $\mathfrak{D}^{-\nu}[0] = 0$, e deste modo, a parte (a) do teorema três pode ser escrita da seguinte forma:

$$\mathfrak{D}^{-\nu}[f(x) - R_b(x)] = \mathfrak{D}^{-\nu-b}[\mathfrak{D}^b f(x)]. \quad (2.26)$$

Também as equações do teorema três podem ser reescritas da maneira a seguir:

$$\mathfrak{D}^{-\nu}[f(x)] = \mathfrak{D}^{-\nu-b}[\mathfrak{D}^b f(x)] \quad (2.27)$$

e

$$\mathfrak{D}^b[\mathfrak{D}^{-\nu} f(x)] = \mathfrak{D}^{-\nu}[\mathfrak{D}^b f(x)]. \quad (2.28)$$

Porém existem casos onde a regra acima não se aplica. Se, por exemplo, pegarmos a função $f(x) = e^{ax}$, teremos

$$Q_b(x; \nu) = \sum_{k=0}^{b-1} a^k \frac{x^{\nu+k}}{\Gamma(\nu+k+1)}.$$

Pela parte (a) do teorema 3 vem

$$e^{ax} x^{\nu} \gamma^*(\nu, ax) = a^b e^{ax} x^{\nu+b} \gamma^*(\nu+b, ax) + \sum_{k=0}^{b-1} a^k \frac{x^{\nu+k}}{\Gamma(\nu+k+1)}. \quad (2.29)$$

Pela parte (b) do teorema 3 vem

$$\mathfrak{D}^b[e^{ax} x^{\nu} \gamma^*(\nu, ax)] = a^b e^{ax} x^{\nu} \gamma^*(\nu, ax) + \sum_{k=0}^{b-1} a^k \frac{x^{\nu+k-b}}{\Gamma(\nu+k+1-b)}. \quad (2.30)$$

Efetuada a mudança $\nu = \nu - b$ na equação (2.29) e então substituindo o resultado na equação (2.30) obtemos

$$\mathfrak{D}^b[e^{ax} x^{\nu} \gamma^*(\nu, ax)] = e^{ax} x^{\nu-b} \gamma^*(\nu-b, ax). \quad (2.31)$$

Escrevemos então.

Teorema 4: se $\mathfrak{D}^k f$ é contínua e se b é um inteiro positivo tal que $\nu > b$, então para todo x temos

$$\mathfrak{D}^b[\mathfrak{D}^{-\nu} f(x)] = \mathfrak{D}^{-(\nu-b)} f(x). \quad (2.32)$$

Conforme Miller (1993).

Se por acaso $b - \nu = u - \mu$, com u um inteiro positivo de modo que $\mu > u$, então podemos escrever

$$\mathfrak{D}^b[\mathfrak{D}^{-\nu} f(x)] = \mathfrak{D}^u[\mathfrak{D}^{-\mu} f(x)], \quad (2.33)$$

que, segundo Miller (1993), é valido mesmo se $b > \nu$ e $u > \mu$.

De forma explicita, considerando um número fracionário ν e um número natural n , obtemos:

$${}_{-\infty}\mathfrak{D}_x^{\nu} f(x) = \mathfrak{D}^n \frac{1}{\Gamma(n-\nu)} \int_{-\infty}^x (x-t)^{n-\nu-1} f(t) dt$$

Deste modo, encontramos um meio para derivar fracionariamente uma função, sendo necessário para isso apenas utilizar derivadas ordinárias e integrais fracionárias, já apresentadas na última seção.

A nível de ilustração, apresentamos a seguir uma tabela para derivadas e integrais fracionárias de expoente $|\nu| = \frac{1}{2}$ conforme a figura(2.1).

Semi-integral	Function	Semi-derivative
${}_0D_x^{-1/2} f(x) = \frac{d^{-1/2}}{dx^{-1/2}} f(x)$	$f(x)$	${}_0D_x^{1/2} f(x) = \frac{d^{1/2}}{dx^{1/2}} f(x)$
$2C\sqrt{x/\pi}$	C , any constant	$C/\sqrt{\pi x}$
$\sqrt{\pi}$	$1/\sqrt{x}$	0
$x\sqrt{\pi}/2$	$\sqrt{x}$	$\sqrt{\pi}/2$
$4x^{3/2}/3\sqrt{\pi}$	x	$2\sqrt{x/\pi}$
$\frac{\Gamma(\mu+1)}{\Gamma(\mu+3/2)} x^{\mu+1/2}$	x^{μ} , $\mu > -1$	$\frac{\Gamma(\mu+1)}{\Gamma(\mu+1/2)} x^{\mu-1/2}$
$\exp(x) \operatorname{erf}(\sqrt{x})$	$\exp(x)$	$1/\sqrt{\pi x} + \exp(x) \operatorname{erf}(\sqrt{x})$
$2\sqrt{\pi/x} [\ln(4x) - 2]$	$\ln x$	$\ln(4x)/\sqrt{\pi x}$

Figura(2.1): Tabela de integrais de derivadas fracionárias com expoente meio.

2.4 A transformada de Laplace fracionária

Uma das ferramentas indispensáveis para se tratar equações diferenciais são as chamadas Transformadas de Laplace. Por levar as funções em outro espaço, muitas vezes as transformadas simplificam as contas que devem ser feitas no espaço de origem das funções. Sendo essas definidas por

$$\mathcal{L}\{f(t)\} = \int_0^{\infty} e^{-st} f(t) dt$$

Uma propriedade importante das transformadas de Laplace é o teorema da convolução. Nele, transformamos uma integral de duas funções na multiplicação de suas respectivas transformadas, isto é,

$$\mathcal{L}\left\{\int_0^t f(t-\xi)g(\xi)d\xi\right\} = \mathcal{L}\{f(t)\}\mathcal{L}\{g(t)\}, \quad (2.34)$$

onde $\mathcal{L}\{f(t)\}$ e $\mathcal{L}\{g(t)\}$ são as transformadas de Laplace de $f(t)$ e $g(t)$, respectivamente.

Porém, pela definição de integral fracionaria, temos

$$\mathfrak{D}^{-\nu}[f(t)] = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^t (t-\xi)^{\nu-1} f(\xi) d\xi,$$

que é uma integral de convolução. Deste modo, podemos operar da seguinte maneira:

$$\mathcal{L}\{\mathfrak{D}^{-\nu} f(t)\} = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \mathcal{L}\{t^{\nu-1}\} \mathcal{L}\{f(t)\} \quad (2.35a)$$

$$= s^{-\nu} \mathcal{L}\{f(t)\}, \quad \nu > 0. \quad (2.35b)$$

Assim, podemos escrever alguns exemplos de transformadas de Laplace de algumas funções, para $\nu > 0$:

$$\mathcal{L}\{\mathfrak{D}^{-\nu} t^{\mu}\} = \frac{\Gamma(\mu+1)}{s^{\mu+\nu+1}}, \quad \mu > -1 \quad (2.36a)$$

$$\mathcal{L}\{\mathfrak{D}^{-\nu} e^{at}\} = \frac{1}{s^{\nu}(s-a)}, \quad (2.36b)$$

$$\mathcal{L}\{\mathfrak{D}^{-\nu} t^{\nu-1} e^{at}\} = \frac{\Gamma(\mu)}{s^{\nu}(s-a)^{\mu}}, \quad \mu > 0 \quad (2.36c)$$

$$\mathcal{L}\{\mathfrak{D}^{-\nu} \cos at\} = \frac{1}{s^{\nu-1}(s^2+a^2)}, \quad (2.36d)$$

$$\mathcal{L}\{\mathfrak{D}^{-\nu} \sin at\} = \frac{a}{s^{\nu}(s^2+a^2)}. \quad (2.36e)$$

Caso seja necessário fazer a transformada de uma integral fracionária de uma derivada, devemos proceder lembrando que a transformada de uma derivada é dada por

$$\mathcal{L}\{\mathfrak{D}f(t)\} = s\mathcal{L}\{f(s)\} - f(0) \quad (2.37)$$

Deste modo,

$$\begin{aligned} \mathcal{L}\{\mathfrak{D}^{-\nu}[\mathfrak{D}f(t)]\} &= s^{-\nu}\mathcal{L}\{\mathfrak{D}f(t)\} \\ &= s^{-\nu}[s\mathcal{L}\{f(s)\} - f(0)], \quad \nu > 0. \end{aligned} \quad (2.38)$$

Porém, para se fazer uma transformada da derivada de uma integral fracionária devemos atentar para o fato descrito pela parte (b) do teorema 2. Neste caso, devemos proceder da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}\{\mathfrak{D}[\mathfrak{D}^{-\nu} f(t)]\} &= \mathcal{L}\{\mathfrak{D}^{-\nu}[\mathfrak{D}f(t)]\} + f(0)\mathcal{L}\left\{\frac{t^{\nu-1}}{\Gamma(\nu)}\right\} \\ &= s^{-\nu}[s\mathcal{L}\{f(t)\} - f(0)] + s^{-\nu}f(0) \\ &= s^{1-\nu}\mathcal{L}\{f(t)\}, \quad \nu > 0. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Atentemos ao fato de que para $\nu = 0$, a equação (2.38) deve ser igual à equação (2.36). Porém nota-se que não é o que acontece. Isso ocorre, pois devemos aplicar o limite de $\nu \rightarrow 0$ antes de fazermos a transformada, pois

$$\lim_{\nu \rightarrow 0} \mathcal{L} \left\{ \frac{t^{\nu-1}}{\Gamma(\nu)} \right\} = 1 \quad (2.40)$$

enquanto que

$$\lim_{\nu \rightarrow 0} \left\{ \frac{t^{\nu-1}}{\Gamma(\nu)} \right\} = 0. \quad (2.41)$$

3. REGIME DIFUSIVO

3.1 Difusão normal

A difusão é um processo comumente descrito pela equação de Fick, que a derivou em 1855 a fim de estudar o espalhamento de moléculas em um fluido.

Sendo J a densidade de corrente, i.e., a quantidade de substância que atravessa certa área, normal ao fluxo, por unidade de tempo, a lei de Fick, segundo Pedron (2003), é dada por:

$$J = -D\nabla\rho, \quad (3.1)$$

onde D é o coeficiente de difusão.

Sabemos que a equação de continuidade é escrita como

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla \cdot J = \delta, \quad (3.2)$$

onde δ é a densidade da fonte, que indica quantas moléculas estão sendo criadas ou destruídas.

Combinando as equações (3.21) e (3.22) temos

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = D\nabla^2\rho + \delta, \quad (3.3)$$

que é, para $\delta = 0$, a equação que Einstein usou em seu trabalho sobre o movimento Browniano.

Se o sistema estiver sobre ação de uma força externa, deve-se acrescentar um termo a densidade de corrente, que deixara a equação de difusão da seguinte forma:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \nabla^2 \rho + \delta - \frac{1}{\xi} \nabla \cdot [F \rho]. \quad (3.4)$$

3.2 Difusão anômala

Partículas em regimes difusivos nem sempre tem um comportamento linear no tempo. Quando isso ocorre dizemos que a partícula sofre uma difusão anômala, o que pode ser causada por uma série de fatores. Segundo Metzler (2000), em regime difusivo anômalo, o desvio quadrático médio de uma partícula passa de uma relação linear no tempo

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle x^2 \rangle \propto t$$

para uma relação não linear

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle x^2 \rangle \propto t^\nu. \quad (3.5)$$

O expoente ν pode adquirir muitos valores, porém os casos mais comuns são:

$$\begin{aligned} 0 \leq \nu < 1, & \text{ Caso Subdifusivo,} \\ \nu = 1, & \text{ Difusão Comum,} \\ \nu > 1, & \text{ Caso Superdifusivo.} \end{aligned}$$

Para o caso de difusão comum, a teoria de Einstein funciona plenamente, porém para os casos subdifusivos e superdifusivos é necessário um tratamento especial, já que a equação de difusão usual não tem mais aplicabilidade.

De acordo com Pedron (2005), existem vários métodos para a resolução de equações difusivas anômalas, tanto para as equações que apresentam dependência no tempo como dependência no espaço.

Podemos citar alguns métodos como a equação de difusão em meios porosos

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \nabla^2 \rho^\nu, \quad (3.6)$$

que descreve a difusão em meios não comuns, como, segundo Pedron (2005), em meios porosos e plasma. A solução para essa equação é dada pela gaussiana generalizada

$$\rho(r;t) = \frac{1}{Z(t)} \left[1 - (1-q)\beta(t)r^2 \right]^{\frac{1}{1-q}}, \quad (3.7)$$

onde $q = 2 - \nu$ e

$$\begin{aligned} Z(t) &\propto t^{\frac{d}{2+d(1-q)}} \\ \beta(t) &\propto t^{-\frac{2}{2+d(1-q)}} \end{aligned}$$

com d representando a dimensão espacial.

Também podemos citar algumas equações que se valem das propriedades do cálculo fracionário para tratar difusões anômalas, como

$$\frac{\partial \rho(x;t)}{\partial t} = {}_0\mathcal{D}_t^{1-\nu} \left[D \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x;t) \right] \quad (3.8)$$

e

$$\frac{\partial \mathcal{P}(x,t)}{\partial t} = {}_0\mathcal{D}_t^{1-\nu} \left[D \frac{\partial^\mu}{\partial |x|^\mu} \mathcal{P}(x,t) \right] - {}_0\mathcal{D}_t^{1-\nu} \left[\frac{\partial}{\partial x} (F(x,t) \mathcal{P}(x,t)) \right] \quad (3.9)$$

que são, respectivamente, a equação fracionaria de difusão e a equação de Fokker-Planck fracionária, de acordo com Gonçalves (2005).

3.3 Função memória

Em muitos regimes difusivos, a força randômica que o fluido aplica a uma partícula devido ao tamanho de suas moléculas em relação ao tamanho da partícula, pode vir a gerar uma diferença na movimentação futura da partícula. Em outras palavras, eventos passados podem afetar eventos futuros. Este efeito, também conhecido como memória do sistema, tem propriedades específicas como o fato de no instante inicial a memória tem efeito maximo e decresce conforme o tempo for passando, i.e. $M(0) = \langle A^2(t) \rangle$ e $M(t_a) > M(t_b), t_a < t_b$,

segundo Lagos (2008), onde $M(t)$ é a função memória, $A(t)$ é uma força randômica que o fluido aplica na partícula e $\langle A^2(t) \rangle = \langle A(t)A(t) \rangle$ é a função de auto correlação de $A(t)$ para um mesmo instante.

Tomemos a definição da função memória como sendo

$$\langle A(t)A(t') \rangle = M(|t - t'|). \quad (3.10)$$

Sua transformada de Fourier, também conhecida como densidade espectral do processo, segundo Lagos (2008), é definida como

$$S(w) = \int M(t)e^{iwt} dt \quad (3.11)$$

Se a densidade espectral for constante, denominada ruído branco, então a função memória assume sua forma mais simples, sendo proporcional a uma função delta de Dirac, segundo Lagos (2008). Temos assim

$$M(t) = 2\Gamma\delta(t)$$

e

$$S(w) = 2\Gamma \int \delta(t)e^{iwt} = 2\Gamma,$$

onde Γ é uma constante.

4. MOVIMENTO BROWNIANO

4.1 Introdução

O primeiro a notar o movimento errático de uma partícula foi Robert Brown em 1827, quando, segundo Costa (2006), ao estudar plantas, notou que uma partícula de pólen fazia movimentos erráticos quando suspensa em um líquido. Sendo botânico, Brown atribuiu o movimento a origem da vida, porém, ao reproduzir o experimento com partículas inorgânicas, e obter os mesmos resultados, ficando assim sujeito a admitir que o fenômeno fosse devido à movimentação da própria matéria. Isso fez com que o movimento errático recebesse o nome de movimento Browniano.

Por décadas o movimento Browniano ficou sem solução. Muitos especulavam sobre a origem do movimento e suas propriedades, sem, contudo, chegar a um resultado satisfatório. Segundo Costa (2006), Louis Bachelier tentou aplicar os conceitos do movimento Browniano voltado ao mercado financeiro. Porém o problema da difusão de partículas só foi devidamente tratado em 1904 por Sutherland que, usando métodos hidrodinâmicos, calculou a seguinte fórmula para o coeficiente de difusão D para uma partícula de raio a :

$$D = \frac{RT}{6\pi N_a a \eta} \frac{1 + \frac{3\eta}{\mu a}}{1 + \frac{2\eta}{\mu a}}. \quad (4.1)$$

Nesta expressão R é a constante universal dos gases, N_a é o número de Avogadro, η é o coeficiente de viscosidade do meio, T a temperatura e μ é o coeficiente de mobilidade, dado por

$$\mu = \frac{1}{m\xi} = \frac{1}{6\pi\eta a}.$$

Foi Einstein que, em 1905 resolveu o problema. Utilizando, segundo Silva (2006), a equação de difusão:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} \quad (4.2)$$

onde é ρ o número de partículas por unidade de comprimento.

Partindo deste ponto, Einstein conseguiu provar que a concentração de partículas ρ se distribuía, de acordo com Silva (2006), de forma gaussiana com o tempo, seguindo a equação

$$\rho(x;t) = \frac{N}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}, \quad (4.3)$$

onde N é o número de partículas.

Trabalhando com probabilidades, Einstein calculou uma relação para o coeficiente D . Sendo necessário o conhecimento do raio a da partícula, da temperatura T e do coeficiente de viscosidade do meio. A relação é descrita por

$$D = \frac{k_B T}{m \xi} = \frac{k_B T}{m 6 \pi a \eta}, \quad (4.4)$$

sendo k_B a constante de Boltzmann.

E assim, segundo Silva (2006), pode-se calcular o deslocamento quadrático médio obtendo

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle x^2 \rangle = 2Dt \quad (4.5)$$

ou

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle x^2 \rangle = \frac{RT}{3\pi N_a a \eta m} t. \quad (4.6)$$

Deste modo, Einstein não só deu a oportunidade para que o número de Avogadro pudesse ser obtido experimentalmente, como mais tarde fez Jean Perrin, de acordo com Silva

(2006), mas também fez com que a teoria atômica ganhasse estruturação para a explicação da matéria.

Em 1908, a questão do movimento de difusão para uma partícula ainda estava em aberto, pois os físicos não sabiam se a formulação correta era a de Einstein ou a de Sutherland. Foi então que, de acordo com Coffey (2004), Paul Langevin abordou o problema utilizando a equação de movimento de Newton

$$m\dot{v}(t) = -m\xi v(t) + A(t), \quad (4.7)$$

onde a força randômica $A(t)$ possui as seguintes propriedades:

$$\langle A(t) \rangle = 0, \quad (4.8)$$

$$\langle A(t)v(0) \rangle = 0. \quad (4.9)$$

Além disso, a função autocorrelação da força é dada por

$$\langle A(t)A(t') \rangle = 2\xi \frac{k_B T}{m} \delta(t - t'), \quad (4.10)$$

onde $\delta(t)$ é a função delta de Dirac.

Para tratar a equação (4.7) é necessário que façamos algumas modificações, como

$$m\ddot{x}(t)x(t) = -m\xi \dot{x}(t)x(t) + A(t)x(t). \quad (4.11)$$

E, a saber:

$$\dot{x}x = \frac{1}{2} \frac{dx^2}{dt}$$

e

$$\ddot{x}x = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \left(\frac{dx^2}{dt} \right) - \dot{x}^2.$$

Deste modo podemos transformar (4.7) em

$$\frac{m}{2} \left[\frac{d}{dt} \left(\frac{dx^2(t)}{dt} \right) - 2\dot{x}^2(t) \right] = -\frac{m\xi}{2} \frac{dx^2(t)}{dt} + A(t)x(t). \quad (4.12)$$

Devemos notar que a equação (4.12) trata apenas do problema de uma partícula. Se for necessário tratar um sistema inteiro devemos tomar a media de alguns valores, a fim de obter a equação do seguinte modo:

$$\frac{m}{2} \frac{d}{dt} \left(\left\langle \frac{dx^2(t)}{dt} \right\rangle \right) - m \langle \dot{x}^2(t) \rangle = -\frac{m\xi}{2} \left\langle \frac{dx^2(t)}{dt} \right\rangle + \langle A(t)x(t) \rangle. \quad (4.13)$$

Segundo Coffey (2004), a força randômica e a posição da partícula são totalmente descorrelacionadas, sendo assim

$$\langle A(t)x(t) \rangle = 0. \quad (4.14)$$

Logo à equação (4.13) se transforma em

$$\frac{m}{2} \frac{du}{dt} + \frac{m\xi}{2} u = k_B T, \quad (4.15)$$

onde foi usado $\left\langle \frac{dx^2}{dt} \right\rangle = u$, e o teorema da equipartição da energia

$$\frac{1}{2} m \langle \dot{x}^2 \rangle = \frac{1}{2} k_B T \quad (4.16)$$

A solução para (4.15) é dada por

$$u = e^{-\xi t} + \frac{2k_B T}{m\xi} \quad (4.17)$$

onde, se o tempo é muito longo, então

$$\lim_{t \rightarrow \infty} u = \frac{2k_B T}{\xi m}. \quad (4.18)$$

Se integrarmos u de zero a t e considerarmos $\langle x^2(0) \rangle = 0$, obtemos

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2k_B T}{\xi m} t, \quad (4.19)$$

que é exatamente a equação de Einstein.

Foi deste modo então que, segundo Costa (2006), a teoria de Einstein foi aceita como a que descrevia corretamente o movimento Browniano.

Mais tarde, um novo tipo de equação mestra foi apresentada, essa que hoje, segundo Silva (2006), é muito utilizada para descrever processos markovianos mais gerais, ficando conhecida como a equação de Fokker-Planck.

Essa nova equação é a equação de Langevin generalizada, e chegando assim aos mesmos resultados obtidos pela última para distribuições de velocidade e posição. Ela é comumente escrita como

$$\frac{\partial \mathcal{P}(x;t)}{\partial t} = \frac{\Gamma}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{P}(x;t)}{\partial x^2} - \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{f(x;t)}{\xi} \mathcal{P}(x;t) \right], \quad (4.20)$$

onde $\mathcal{P}(x;t)$ é uma distribuição de probabilidade e Γ é uma constante.

4.2 Movimento Browniano normal

Tomemos como base de nosso estudo, a equação de Langevin descrita em (4.7) com as seguintes alterações:

$$\frac{d\vec{v}}{dt} + \xi \vec{v} = \vec{A}(t). \quad (4.21)$$

A solução para a equação (4.1) é dada, segundo Lagos (2008), por:

$$\vec{v}(t) = \vec{v}_0 e^{-\xi t} + \int_0^t \vec{A}(t') e^{\xi(t'-t)} dt', \quad (4.22)$$

onde $\vec{v}_0$ é o vetor velocidade no tempo inicial.

Nota-se, como esperado, que, quando a partícula atinge o equilíbrio termodinâmico, temos

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle \vec{v}(t) \rangle = \frac{d k_B T}{m}, \quad (4.23)$$

onde d é a dimensão em que o problema se encontra.

Sabemos que a densidade de probabilidade de encontrar a partícula browniana em qualquer parte do espaço deve obedecer à relação

$$\int \mathcal{P}(\vec{v}, t, \vec{v}_0) d^3 \vec{v} = 1, \quad (4.24)$$

onde $\mathcal{P}(\vec{v}, t, \vec{v}_0)$ é a densidade de probabilidade de se encontrar a partícula com velocidade inicial $\vec{v}_0$ no tempo t com velocidade $\vec{v}$, e $d^3 \vec{v} = dv_x dv_y dv_z$, é uma notação simplificada.

A densidade de probabilidade deve obedecer também a certas condições de contorno pertinentes. Essas, segundo Lagos (2008), são:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \mathcal{P}(\vec{v}, t, \vec{v}_0) = \sqrt{\left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^d} e^{-\frac{m \vec{v}^2}{2k_B T}}, \quad (4.25)$$

$$\lim_{t \rightarrow 0} \mathcal{P}(\vec{v}, t, \vec{v}_0) = \sqrt{\left(\frac{1}{2\pi \sigma^2} \right)^d} e^{-\frac{(\vec{v} - \vec{v}_0)^2}{2\sigma^2}}, \quad \sigma \rightarrow 0 \quad (4.26)$$

que representam respectivamente o equilíbrio termodinâmico e a condição inicial. Sendo $\sigma = \langle u^2 \rangle - \langle u \rangle^2$ a variância.

Deste modo, a densidade de probabilidade para qualquer tempo deve, segundo Lagos (2008), obedecer a uma distribuição Gaussiana

$$\mathcal{P}(\vec{v}, t, \vec{v}_0) = \sqrt{\left(\frac{1}{2\pi\sigma^2(t)}\right)^d} e^{\left(-\frac{(\vec{v}-\langle\vec{v}(t)\rangle)^2}{2\sigma^2(t)}\right)}. \quad (4.27)$$

Como a media do ruído é nula temos que

$$\langle\vec{v}(t)\rangle = \vec{v}_0 e^{-\xi t}, \quad (4.28)$$

o que nos fornece as seguintes informações:

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow 0} \langle\vec{v}(t)\rangle &= \vec{v}_0, \\ \lim_{t \rightarrow \infty} \langle\vec{v}(t)\rangle &= 0, \end{aligned}$$

que são as condições de contorno exigidas a media do desvio padrão, segundo Lagos (2008).

Quadrando a equação da velocidade obtemos

$$\vec{v}^2(t) = \vec{v}_0^2 e^{-2\xi t} + 2\vec{v}_0 \int_0^t \vec{A}(t') e^{\xi(t'-2t)} dt' + \int_0^t \int_0^t \vec{A}(t') \vec{A}(t'') e^{\xi(t'+t''-2t)} dt' dt'' \quad (4.29)$$

cuja média é dada por

$$\begin{aligned} \langle\vec{v}^2(t)\rangle &= \vec{v}_0^2 e^{-2\xi t} + 2d\Gamma \int_0^t \int_0^t \delta(t' - t'') e^{\xi(t'+t''-2t)} dt' dt'' \\ &= \langle\vec{v}(t)\rangle^2 + 2d\Gamma \int_0^t e^{\xi(2t'-2t)} dt'. \end{aligned} \quad (4.30)$$

Deste modo temos

$$\begin{aligned} \sigma^2(t) &= \frac{1}{d} \left(\langle\vec{v}^2(t)\rangle - \langle\vec{v}(t)\rangle^2 \right) = 2\Gamma \int_0^t e^{\xi(2t'-2t)} dt' \\ &= \frac{\Gamma}{\xi} (1 - e^{-2\xi t}) \end{aligned} \quad (4.31)$$

o que satisfaz as condições de contorno exigidas pela variância, que são:

$$\begin{aligned}\lim_{t \rightarrow 0} \langle \sigma^2(t) \rangle &= 0, \\ \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \sigma^2(t) \rangle &= \frac{1}{d} \langle \vec{v}^2(t) \rangle = \frac{k_B T}{m},\end{aligned}$$

contanto que Γ obedeça a relação

$$\frac{\Gamma}{\xi} = \frac{k_B T}{m}, \quad (4.32)$$

conhecida, segundo Lagos (2008), como o Teorema da Flutuação Dissipação (FDT), que relaciona a flutuação do ruído Γ e a constante ξ .

Sabemos também que

$$\frac{d\vec{x}(t)}{dt} = \vec{v}(t).$$

Assim podemos integrar a velocidade, obtendo uma expressão para o deslocamento, dado por

$$\begin{aligned}\vec{x}(t) &= \vec{x}_0 + \int_0^t \left[\vec{v}_0 e^{-\xi t'} + \int_0^{t'} \vec{A}(t'') e^{\xi(t''-t')} dt'' \right] dt' \\ &= \vec{x}_0 + \frac{\vec{v}_0}{\xi} (1 - e^{-\xi t}) + \frac{1}{\xi} \int_0^t \vec{A}(t') (1 - e^{\xi(t'-t)}) dt',\end{aligned} \quad (4.33)$$

onde $x_0 = x(0)$ é a posição inicial da partícula.

Como feito para a velocidade, podemos calcular os momentos pertinentes, obtendo

$$\langle \vec{X}(t) \rangle = \frac{\vec{v}_0}{\xi} (1 - e^{-\xi t}) \quad (4.34)$$

e

$$\langle \vec{X}^2(t) \rangle = \langle \vec{X}(t) \rangle^2 + d \left\{ 2Dt \left[1 + \frac{1}{2\xi t} (4e^{-\xi t} - e^{-2\xi t} - 3) \right] \right\}, \quad (4.35)$$

onde $\langle \vec{X}(t) \rangle = \vec{x}(t) - \vec{x}_0$.

4.3 Equação de Langevin generalizada

Quando se é necessário trabalhar com difusões que também apresentem efeitos de memória, ou seja, que eventos passados influenciam nos eventos futuros, como visto no capítulo três, a equação de Langevin normal não é útil. Visando uma generalização para todos os problemas difusivos, em 1964, segundo Costa (2006), Mori tratou a equação de Langevin original de modo que os efeitos de memória fossem englobados, conseguindo assim uma nova equação, a qual é conhecida como equação de Langevin generalizada (GLE) e é descrita por:

$$\dot{v}(t) = -\int_0^t M(t-t')v(t')dt' + A(t). \quad (4.36)$$

Esta equação, além de ser útil para a resolução de problemas que envolvem uma função memória, é muito utilizada para se obter relações de difusão anômala, como uma equação de Langevin fracionárias.

5. MOVIMENTO BROWNIANO FRACIONÁRIO

5.1 Movimento Browniano anômalo

Agora que já conhecemos as equações que descrevem o movimento browniano normal, com e sem memória, podemos estender este conhecimento para uma generalização do movimento browniano, passando, com a ajuda das derivadas fracionárias, de um regime difusivo comum a um regime difusivo anômalo.

Tomemos a formula generalizada de Langevin, dada pela equação (4.36), e multipliquemo-la pela velocidade inicial da partícula browniana resultando em

$$\dot{v}(t)v(0) = -\int_0^t M(t-t')v(t')v(0)dt' + A(t)v(0). \quad (5.1)$$

Tirando a média de (5.1) e notando que

$$\langle A(t)v(0) \rangle = 0 \quad (5.2)$$

e

$$\langle v(t)v(0) \rangle = C_v(t), \quad (5.3)$$

onde $C_v(t)$ é a correlação das velocidades, temos que

$$\dot{C}_v(t) + \int_0^t M(t-t')C_v(t')dt' = 0. \quad (5.4)$$

Nota-se que o segundo termo da equação (5.4) pode ser escrito como uma derivada fracionária caso a função memória seja de um tipo específico.

Forçamos a memória a ter a seguinte forma:

$$M(t-t') = \frac{(t-t')^{-\nu-1}}{\Gamma(-\nu)}, \quad -1 < \nu. \quad (5.5)$$

Donde, se ν for não inteiro, a função obedece aos requisitos para ser uma função memória, i.e.:

$$\begin{aligned} \lim_{(t-t') \rightarrow \infty} M(t-t') &= 0, \\ \lim_{(t-t') \rightarrow 0} M(t-t') &= \infty. \end{aligned} \quad (5.6)$$

Deste modo, a equação (5.4) pode ser reescrita sem perda de generalidade como

$$\dot{C}_\nu(t) + {}_0\mathcal{D}_t^\nu [C_\nu(t)] = 0. \quad (5.7)$$

O modo mais simples de se tratar a equação (5.7) são as transformadas de Laplace. Assim, aplicando a transformada de Laplace na equação acima, obtemos

$$s\mathcal{L}[C_\nu(t)] - C_\nu(0) + s^\nu \mathcal{L}[C_\nu(t)] = 0, \quad (5.8)$$

onde foi utilizada a transformada de Laplace fracionária, dada pela equação (2.35b).

Isolando a transformada da função correlação da velocidade, podemos, ao aplicar uma anti-transformada, obter uma relação de como a velocidade se comporta no tempo. Deste modo temos que

$$\mathcal{L}[C_\nu(t)] = \frac{C_\nu(0)}{s + s^\nu}. \quad (5.9)$$

A equação (5.9) pode ser tratada pelo método de frações parciais para que, ao se tomar sua anti-transformada de Laplace, as contas sejam mais simples, porem só podemos fazer isso para valores específicos de ν o que será feito mais adiante.

Para obtermos a constante de difusão, devemos calcular o deslocamento da partícula, no entanto, segundo Kubo (1991, apud COSTA, 2006), podemos obter a constante de difusão fazendo a análise a seguir.

$$x(t) = \int_0^t v(t') dt'. \quad (5.10)$$

Ao multiplicarmos toda a equação por $v(t)$ e calcular sua média em seguida, vem

$$\langle \dot{x}(t)x(t) \rangle = \int_0^t \langle v(t)v(t') \rangle dt', \quad (5.11)$$

que pode ser escrito como

$$\frac{1}{2} \frac{d \langle x^2(t) \rangle}{dt} = \int_0^t C_v(t'), \quad (5.12)$$

e, no limite $t \rightarrow \infty$, obtemos a relação para a constante de difusão

$$D = \int_0^\infty C_v(t) dt. \quad (5.13)$$

Porem, segundo Costa (2006), caso a integral não venha a convergir, ou a mesma seja nula, é razoável escrever a constante de difusão da seguinte forma:

$$D = \int_0^t C_v(t') dt'. \quad (5.14)$$

Deste modo, segundo a equação (5.9), podemos escrever a constante de difusão como

$$D = \int_0^t \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{C_v(0)}{s + s'} \right] dt'. \quad (5.15)$$

5.2 Caso normal

Antes de aplicar a equação (5.15) para os casos fracionários é de nosso interesse verificar o caso de difusão normal para assim termos a certeza de que o método é válido para o estudo do movimento browniano.

Para o caso de difusão normal, temos de tomar um valor de ν para o qual $s^\nu = \xi$, onde ξ é uma constante. Obtemos então

$$D = \int_0^t \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{C_\nu(0)}{s + \xi} \right] dt'. \quad (5.16)$$

Resolvendo a transformada de Laplace, vem

$$D = \int_0^\infty C_\nu(0) e^{-\xi t'} dt', \quad (5.17)$$

donde, para o caso normal, podemos fazer $t = \infty$, já que a integral converge.

Calculando a integral obtemos

$$D = \frac{C_\nu(0)}{\xi}, \quad (5.18)$$

onde, se $\xi = 6\pi\eta a$, e tomando a definição de $C_\nu(0)$ dada, segundo Costa (2006), por

$$C_\nu(0) = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle v^2(t) \rangle = \frac{k_B T}{m}, \quad (5.19)$$

recuperamos a equação de Einstein para a constante de difusão e o deslocamento:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle x^2(t) \rangle = 2Dt = \frac{2C_\nu(0)t}{\xi}. \quad (5.20)$$

5.3 Casos anômalos

Tendo conferido a validade do método na ultima seção tratemos dois casos anômalos.

Primeiro caso: Tomemos $\nu = 1/2$, assim

$$D = \int_0^t \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{C_v(0)}{s + \sqrt{s}} \right] dt'. \quad (5.21)$$

Para facilitar os cálculos da anti-transformada de Laplace, vamos abrir a equação em frações parciais. Deste modo temos

$$D = \int_0^t \mathcal{L}^{-1} \left[-\frac{C_v(0)}{1 + \sqrt{s}} + \frac{C_v(0)}{\sqrt{s}} \right] dt', \quad (5.22)$$

e calculando a anti-transformada da nova equação, vem

$$D = \int_0^t C_v(0) e^{t'} \operatorname{Erfc}[\sqrt{t'}] dt', \quad (5.23)$$

onde $\operatorname{Erfc}[t]$ é a função erro complementar, dada por

$$\operatorname{Erfc}[t] = 1 - \operatorname{Erf}[t] = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^t e^{-t'^2} dt' \quad (5.24)$$

sendo $\operatorname{Erf}[t]$ a função erro.

E, resolvendo a integral, ficamos com

$$D = C_v(0) \left\{ \frac{2\sqrt{t}}{\sqrt{\pi}} - 1 + e^t \operatorname{Erfc}[\sqrt{t}] \right\}. \quad (5.25)$$

Para valores de t muito grandes a função tem o seguinte comportamento:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} e^t \operatorname{Erfc}[\sqrt{t}] = 0. \quad (5.26)$$

E podemos escrever

$$D = \frac{2C_v(0)\sqrt{t}}{\sqrt{\pi}}. \quad (5.27)$$

Sendo assim nosso deslocamento quadrático médio fica dado por

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle x^2(t) \rangle = \frac{4C_v(0)t^{3/2}}{\sqrt{\pi}}, \quad (5.28)$$

onde fica clara a dependência não linear no tempo, caracterizando assim uma difusão anômala.

Segundo caso: tomemos $\nu = 3/2$, assim

$$D = \int_0^t \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{C_v(0)}{s + s^{3/2}} \right] dt'. \quad (5.29)$$

Do mesmo modo feito no primeiro caso, vamos abrir a expressão usando frações parciais, ficando com

$$D = \int_0^t \mathcal{L}^{-1} \left[C_v(0) \left\{ \frac{1}{1 + \sqrt{s}} + \frac{1}{s} - \frac{1}{\sqrt{s}} \right\} \right] dt'. \quad (5.30)$$

Resolvendo a anti-transformada de Laplace, obtemos

$$D = \int_0^t C_v(0) \left\{ 1 - e^{t'} \operatorname{Erfc}[\sqrt{t'}] \right\} dt', \quad (5.31)$$

e calculando a integral vem

$$D = C_v(0) \left\{ 1 - \frac{2\sqrt{t}}{\sqrt{\pi}} + t - e^t \operatorname{Erfc}[\sqrt{t}] \right\}, \quad (5.32)$$

que, para valores muito grandes de t , fica dada por

$$D = C_v(0)t. \quad (5.33)$$

O desvio fica sendo então

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle x^2(t) \rangle = 2C_v(0)t^2, \quad (5.34)$$

que é conhecido como o caso balístico, i.e., caso onde o sistema nunca ira alcançar o equilíbrio, violando assim o FDT. Logo os resultados finais dependeram das condições iniciais do sistema.

6. CONCLUSÃO

Neste trabalho foi estudada a utilização do cálculo fracionário para a resolução de problemas do movimento Browniano anômalo com memória.

Após a breve apresentação do cálculo fracionário e da explicação dos fenômenos descrito pelo movimento Browniano, foi apresentada uma idéia para a resolução da equação generalizada de Langevin, a qual se valeu de derivadas e integrais fracionárias para modelar uma função memória inerente ao sistema. Essa deveria satisfazer as condições impostas pela mesma e, ao mesmo tempo, ser de alguma valia para a resolução do problema proposto.

Após tratarmos as equações com uma generalização das transformadas de Laplace para equações de caráter fracionário, observamos o comportamento da solução para problemas específicos, mais precisamente para expoentes $\frac{1}{2}$ e $\frac{3}{2}$.

Com os resultados obtidos podemos fazer uma verificação do comportamento do desvio quadrático médio mediante ao comportamento do coeficiente de difusão. Notamos que para um dado valor do expoente ν , o qual se apresenta nas seguintes equações para um movimento difusivo:

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} D(t) &\propto t^\nu, & \nu &\leq 1 \\ \lim_{t \rightarrow \infty} D(t) &\propto t, & \nu &\geq 1 \end{aligned}$$

existe um valor de μ , que se apresenta na seguinte equação do desvio quadrático médio

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle x^2(t) \rangle \propto t^\mu$$

que define se o movimento Browniano é subdifusivo, normal ou superdifusivo. E se relaciona à ν pela expressão

$$\mu = 1 + \nu$$

para $\nu \leq 1$. Caso contrário $\mu = 2$.

Essas relações, comumente encontradas na literatura, mostram, portanto, que o método é válido, podendo ser utilizado no estudo do movimento Browniano anômalo.

REFERENCIAS

- [1] K. S. Miller, B. Ross, “*A Introduction to Fractional Calculus and Fractional Equations I*”, Nova York: John Wiley & Sons (1993).
- [2] W. T. Coffey, Yu. P. Kalmykov, J. T. Waldron, “*The Langevin Equation: with Applications to Stochastic Problems in Physics, Chemistry and Electric Engineering*”, World Scientific Series in Contemporary Chemical Physics, 2 ed (2005).
- [3] I. T. Pedron, “*Estudos em Difusão Anômala*”, Dissertação (Doutorado em Física) Departamento de Física – Universidade Estadual do Maringá, PA (2003).
- [4] I. V. L. Costa, “*Processos Estocásticos: produção e crescimento*”, Dissertação (Doutorado em Física) Instituto de Física – Universidade Estadual de Brasília (2006).
- [5] R. E. Lagos, “*Introdução Informal à Teoria dos Processos Estocásticos*”, Apostila – Departamento de Física, IGCE, UNESP, Rio Claro (2008).
- [6] A. D. Viñales, M. A. Despósito, “*Anomalous Diffusion: exact solution of the generalized Langevin equation for harmonically bounded particle*”, Phys. Rev. E **73** (2006) 016111.
- [7] A. I. Saichev, G. M. Zaslavsky, “*Fractional Kinetic Equations: solutions and applications*”, Chaos **7** (1997) 753.
- [8] A. V. Mokshin, R. M. Yulmetyev, P. Hänggi, “*Simple Measure of Memory for Dynamical Processes Described by Generalized Langevin Equation*”, Phys. Rev. Lett. **95** (2005) 200601.
- [9] C. H. Eab, S. C. Lim, “*Fractional Langevin Equation of Distributed Order*”, Phys. Rev. E **83** (2011) 031136.
- [10] D.O. Soares-Pinto, W. A. M. Morgado, “*Brownian Dynamics, Time-Averaging and Colored Noise*”, Physica A **365** (2006) 289.

- [11] E. Lutz, “*Fractional Langevin Equation*”, Phys. Rev. E **64** (2001) 051106.
- [12] F. Mainardi, A. Mura, F. Tampieri, “*Brownian Motion and Anomalous Diffusion Revisited via a Fractional Langevin Equation*”, Modern Problems of Statistical Physics **8** (2009) 3.
- [13] I. M. Sokolov, J. Klafter, A. Blumen, “*Fractional Kinetics*”, Phys.Today **55** (2002) 48.
- [14] I. T. Pedron, R. S. Mendes, “*Difusão Anômala e Equações Generalizadas de Difusão*”, Rev. Brás. Ens. Fís. **27** (2005) 251.
- [15] J. M. Porrà, K. Wang, J. Masoliver, “*Generalized Langevin Equations: anomalous diffusion and probability distributions*”, Phys. Rev. E **53** (1996) 5872.
- [16] J. M. Silva, J. A. S. Lima, “*Quatro Abordagens para o Movimento Browniano*”, Rev. Brás. Ens. Fís. **29** (2007) 25.
- [17] J. Tóthová, G. Vasziová, L. Glod, “*Langevin Theory of Anomalous Brownian Motion Made Simple*”, Eur. J. Phys. **32** (2011) 645.
- [18] J. W. Dufty, “*Gaussian Model for Fluctuation of Brownian Particle*”, The Physics of Fluids **17** (1974) 328.
- [19] K. S. Fa, “*Anomalous Diffusion in a Generalized Langevin Equation*”, J. Math. Phys. **50** (2009) 083301.
- [20] K. S. Fa, “*Generalized Langevin Equation With Fractional Derivative and Long-Time Correlation Function*”, Phys. Rev. E **73** (2006) 061104.
- [21] L. Debnath, “*A Brief Historical Introduction to Fractional Calculus*”, Int. J. Math. Educ. Sci. Technol. **35** (2004) 487.
- [22] M. A. Despósito, A. D. Viñales, “*Memory Effects on the Asymptotic Diffusive Behavior of a Classical Oscillator Described by a Generalized Langevin Equation*”, Phys. Rev. E **77** (2008) 031123.

- [23] M. F. Shlesinger, J. Klafter, G. Zumofen, “*Above, Below and Beyond Brownian Motion*”, A. J. P. **67** (1999) 1253.
- [24] R. Metzler, J. Klafter, “*The Random Walk’s Guide to Anomalous Diffusion: a fractional dynamics approach*”, Phys. Rep. **339** (2000) 1.
- [25] R. Morgado et al, “*Relation Between Anomalous and Normal Diffusion in Systems With Memory*”, Phys. Rev. Lett. **89** (2002) 100601.
- [26] Wikipedia, Cauchy formula for repeated integration, Disponível em http://en.wikipedia.org/wiki/Cauchy_formula_for_repeated_integration.
- [27] Wikipedia, Fractional Calculus, Disponível em http://en.wikipedia.org/wiki/Fractional_calculus.