



CENTRO FEDERAL DE EDUCAÇÃO TECNOLÓGICA DE MINAS GERAIS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL

ANA PAULA DE PAIVA PEREIRA

**CALIBRAÇÃO DE PARÂMETROS ENTRE AS
ESCALAS DE VOOS DIFUSIVOS ANÔMALOS:
PRESCRIÇÃO PARA CORRESPONDER
SIMULAÇÃO E MODELOS**

Orientador: José Luiz Acebal Fernandes

Coorientador: Allbens Atman Picardi Faria

BELO HORIZONTE
4 DE ABRIL DE 2018

ANA PAULA DE PAIVA PEREIRA

**CALIBRAÇÃO DE PARÂMETROS ENTRE AS ESCALAS
DE VOOS DIFUSIVOS ANÔMALOS: PRESCRIÇÃO PARA
CORRESPONDER SIMULAÇÃO E MODELOS**

Tese apresentada ao Programa de Pós-graduação em Modelagem Matemática e Computacional do Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais, como requisito parcial para a obtenção do título de Doutora em Modelagem Matemática e Computacional.

Área de concentração: Modelagem Matemática e Computacional

Linha de pesquisa: Métodos Matemáticos Aplicados

Orientador: José Luiz Acebal Fernandes

Coorientador: Allbens Atman Picardi Faria

P436c Pereira, Ana Paula de Paiva
Calibração de parâmetros entre as escalas de voos difusivos anômalos: prescrição para corresponder simulação e modelos. / Ana Paula de Paiva Pereira. -- Belo Horizonte, 2018.
xv, 84 f. : il.

Tese (doutorado) – Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais, Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional, 2018.

Orientador: Prof. Dr. José Luiz Acebal Fernandes
Coorientador: Prof. Dr. Allbens Atman Picardi Faria

Bibliografia

1. Equações Diferenciais Parciais. 2. Difusão. 3. Modelos Matemáticos. I. Fernandes, José Luiz Acebal. II. Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais. III. Título

CDD 515.353



SERVIÇO PÚBLICO FEDERAL
MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
CENTRO FEDERAL DE EDUCAÇÃO TECNOLÓGICA DE MINAS GERAIS
COORDENAÇÃO DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL
**“CALIBRAÇÃO DE PARÂMETROS E MÉTODOS ENTRE SIMULAÇÕES DE VOOS
DIFUSIVOS ANÔMALOS E MODELOS DIFUSIVOS GENERALIZADOS”**

Tese de Doutorado apresentada por **Ana Paula de Paiva Pereira**, em 23 de março de 2018, ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional do CEFET-MG, e aprovada pela banca examinadora constituída pelos professores:

Prof. Dr. José Luiz Acebal Fernandes
Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais

Prof. Dr. Allbens Atman Picardi Faria
Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais

Prof. Dr. Remo dos Santos Mendes
Universidade Estadual de Maringá

Prof. Dr. Silvío da Costa Ferreira Júnior
Universidade Federal de Viçosa

Prof. Dr. Arthur Rodrigo Bosco de Magalhães
Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais

Prof. Dr. José Geraldo Peixoto de Faria
Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais

Visto e permitida à impressão,

Prof. Dr. José Geraldo Peixoto de Faria
Coordenador do Programa de Pós-Graduação em
Modelagem Matemática e Computacional

À minha mãe Vaninha, ao meu pai Roberto e
ao meu irmão Ju.

Agradecimentos

Em 2013 cheguei nesta Escola, com um projeto cuja proposta central era modelar a dinâmica de um sistema utilizando equações diferenciais generalizadas por derivadas fracionárias. Sem que ninguém me conhecesse procurei, primeiramente, meu coorientador Prof. Allbens A. P. Faria que, com um número excedido de alunos, encaminhou-me para meu orientador Prof. José Luiz Acebal Fernandes. Agradeço ambos pela credibilidade.

Obrigada pelos ensinamentos e discussões enriquecedoras Prof. Acebal. Agradeço, ainda, pela gentileza constante nestes quatro anos de convivência... aprendi muito!!! Adicionalmente, ao meu coorientador Allbens Atman P. Faria, obrigada pelas valiosas sugestões e correções.

Os quatro anos e cinco meses desta pesquisa foram uma árdua jornada com idas e voltas pela 381. A gente conhece tanta gente pelo caminho! Agradeço ao João P. O. Fernandes pela ajuda imensa com o Python e contribuição incrível em toda discussão. Agradeço, ainda, meu grupo no CEFET-MG, em especial à minha companheira de congressos Flávia Cordeiro. Obrigada por sua amizade e por ouvir sempre meus desabafos! E foram muitos, né?! rs.

Agradeço ao meu amigo João P. R. Romanelli pelo amor e carinho sempre presentes. À Marina pelo companheirismo, pela cumplicidade e pelos atenuantes diários.

Minha gratidão ao CEFET-MG por estes anos, pelos congressos financiados e à minha instituição, UNIFEI, pelas 10 horas iniciais que viraram 16 de liberação para cumprir este doutorado.

Ao Senhor das providências, obrigada pela proteção e sustento.

*“O real não está no início nem no fim, ele se mostra pra gente é no meio da travessia.”
(Riobaldo - Grande Serão Veredas)*

Resumo

A difusão anômala é um fenômeno onipresente que tem sido estudado por meio de diferentes abordagens, incluindo simulações, análise de métodos e experimentos. Tanto a equação de difusão fracionária quanto a equação de difusão não linear foram capazes de descrever tal fenômeno, em particular, os casos onde aparecem funções densidade de probabilidade com caudas pesadas. Observa-se, no entanto, uma falta de um controle sistemático nas simulações de processos de difusão anômala. Consequentemente, a relação de quais os modelos mais adequados para a descrição destes processos fica prejudicada. Neste trabalho, exploramos as relações os parâmetros coeficientes de difusão e entre os expoentes de difusão, ordem da derivada fracionária e o parâmetro q -gaussiano, através de um procedimento de ajuste sistemático dos dados das simulações usando abordagens lineares e não lineares. Os dados simulados são gerados por um *random walk* de tempo contínuo com média do tempo de espera entre os saltos e variância do comprimento dos saltos controlados para gerar casos de subdifusão, superdifusão e difusão normal. Os modelos teóricos são expressos por meio de equações de difusão generalizadas ora por derivadas fracionárias no tempo ou espaço, ora pela não linearidade da equação de meios porosos. A avaliação dos parâmetros coeficientes de difusão e dos expoentes de difusão obtidos a partir das simulações é feita utilizando duas diferentes abordagens: (1) estudando a evolução temporal da variância amostral dos deslocamentos e, (2) otimizando as soluções dos modelos teóricos aos histogramas de soluções. A precisão dos modelos também é estudada para cada regime de difusão anômala. São analisadas as relações entre os parâmetros obtidos por meio das simulações e os parâmetros teóricos. Dentre os quais, a relação de Tsallis-Buckman é verificada. Faz-se, ainda, uma discussão sobre os métodos para relacionar os parâmetros das simulações com os parâmetros dos modelos.

Palavras-chave: Difusão anômala. Equação de difusão fracionária. q -gaussiana. Calibração.

Abstract

Anomalous diffusion is an ubiquitous phenomenon which have been studied by several approaches, including simulation, analytical methods and by experiments. Either fractional partial differential as non-linear partial differential equations were able to describe the phenomenon, in particular, the heavy tails observed in the PDFs. Besides, one can observe some lack in controlling anomalous diffusion in many attempts of simulation. Consequently, the relationship to adequate models becomes somewhat impaired. To perform a systematic calibration between simulations and models, in this work, we explore the relationship among the diffusion coefficients and diffusion exponents with the order of fractional derivatives, the q -Gaussian parameter and model diffusion constant by means of a systematic fitting procedure of the simulation data using linear and non-linear approaches. Using CTRW with a criterion to control mean waiting time and step length variance, a full range of well controlled cases from subdiffusion to superdiffusion were generated. Theoretical models are expressed by means of generalised diffusion equations with fractional derivatives in space, in time and by the non-linearity of the porous medium equation. To decide how to assess the diffusion constant, the order of fractional derivatives and the q -Gaussian parameter from the simulation data in each case of anomalous diffusion, we compare the accuracy of two methods: (1) by analysis of the dispersion of the variance over time and, (2) by the optimisation of the solutions of the theoretical models to the histogram of positions. The relative accuracies of the models are also analysed for each regimen of anomalous diffusion. We highlight relations between the simulation parameters and model parameters. Among those, Tsallis-Buckman scaling law identity is verified. The study discusses methods to link model parameters to simulation parameters.

Keywords: Anomalous diffusion. Fractional diffusion equation. q -Gaussian. Calibration.

Lista de Figuras

Figura 1 – Gráfico da função $\Gamma(p)$ para $p \in (-6, 6]$	10
Figura 2 – Diagrama de x por t de um CTRW unidimensional onde tanto os saltos quanto os tempos de espera são variáveis aleatórias obtidas a partir de uma PDF (METZLER; KLAFTER, 2000).	27
Figura 3 – <i>Random walks</i> gerados com variáveis aleatórias ângulo e comprimento de saltos segundo, respectivamente, as PDFs uniforme e normal (figura à direita), Cauchy (figura à esquerda).	34
Figura 4 – PDFs $G_\alpha(x, t)$ (69) soluções da EDFT (58) geradas com $0 < \alpha < 1$, $D_\alpha = 0.5$ e $t = 1$ fixos, com o eixo-y em escala logarítmica, modelos para voos subdifusivos.	45
Figura 5 – PDFs $G_\alpha(x, t)$ (69) soluções da EDFT (58), com o eixo-y em escala logarítmica, geradas para o caso subdifusivo com $\alpha = 0.5$, $0 < D_\alpha < 0.5$ e $t = 1$ fixo.	46
Figura 6 – Soluções $L_\gamma(x, t)$ (73), com o eixo-y em escala logarítmica, para $1 < \gamma < 2$ e $t = 1$ fixo.	47
Figura 7 – Soluções $L_\gamma(x, t)$ (73), com o eixo-y em escala logarítmica, para $0 < D_\gamma \leq 3$ e $\gamma = 1.5$, $t = 1$ fixos.	48
Figura 8 – Soluções $P_q(x, t)$ (78), com o eixo-y em escala logarítmica. A figura à direita foi gerada com $0 < q < 1$, $D_q = 0.5$ e $t = 1$ fixos; e a figura à esquerda com $q = 0.9$, $t = 1$ fixos e $0 < D_q < 0.5$. A curva tracejada em ambos os gráficos refere-se à curva normal $P_1(x, t)$	51
Figura 9 – Soluções $P_q(x, t)$ (78), com o eixo-y em escala logarítmica. A figura à direita foi gerada com $1 < q < 3$, $D_q = 0.5$ e $t = 1$ fixos; e a figura à esquerda com $q = 1.1$, $t = 1$ fixos e $0.5 < D_q < 3$. A curva tracejada em ambos os gráficos refere-se à curva normal $P_1(x, t)$	52
Figura 10 – Séries temporais subdifusivas ($1 < s < 2$, $r = 4$) geradas segundo critério de divergência dado no capítulo 3 - tabela 3 em um tempo $t_f = 2^{13}$	60
Figura 11 – Séries temporais superdifusivas ($s = 3$, $2 < r < 3$), geradas segundo critério de divergência dado no capítulo 3 - tabela 3 em um tempo $t_f = 2^{13}$	60
Figura 12 – FSS do parâmetro de escala intermediária número de partículas, N , para a parametrização dos modelos $G_\alpha(x, t)$ (69) e $P_q(x, t)$ (78) aplicado aos processos de subdifusão. Tem-se em (a) $1/N \times \alpha$, em (b) $1/N \times D_\alpha$, em (c) $1/N \times q$ e em (d) $1/N \times D_q$	61

Figura 13 – FSS do parâmetro de escala intermediária tempo, t_f , para a parametrização dos modelos $G_\alpha(x, t)$ (69) e $P_q(x, t)$ (78) aplicado aos processos de subdifusão. Tem-se em (a) $1/t_f \times \alpha$, em (b) $1/t_f \times D_\alpha$, em (c) $1/t_f \times q$ e em (d) $1/t_f \times D_q$	61
Figura 14 – FSS do parâmetro de escala intermediária número de partículas, N , para a parametrização dos modelos $L_\gamma(x, t)$ (73) e $P_q(x, t)$ (78) aos processos de superdifusão. Têm-se em (a) $1/N \times \gamma$, em (b) $1/N \times D_\gamma$, em (c) $1/N \times q$ e em (d) $1/N \times D_q$	62
Figura 15 – FSS do parâmetro de escala intermediária tempo, t_f , para a parametrização dos modelos $L_\gamma(x, t)$ (73) e $P_q(x, t)$ (78) aplicado aos processos de superdifusão. Têm-se em (a) $1/t_f \times \gamma$, em (b) $1/t_f \times D_\gamma$, em (c) $1/t_f \times q$ e em (d) $1/t_f \times D_q$	63
Figura 16 – Evolução temporal do deslocamento médio quadrático no plano $\log_2 t \times \log_2 \langle x^2(t) \rangle$ gerada pelo CTRW de uma população de $N = 20.000$ partículas em um tempo $t_f \geq 2^{13}$, para $r = 4$ fixo e $1 < s < 2$ variando de modo a obter o conjunto de voos subdifusivos. As retas foram ajustadas por regressão linear da equação (59) para determinar os parâmetros subdifusivos. Na medida em que $s \rightarrow 2$ o processo se torna mais próximo do regime de difusão normal. A reta tracejada corresponde ao caso normal, $\mu = 1$ e $D_\mu = 0.5$	64
Figura 17 – Evolução temporal do deslocamento médio quadrático no plano $\log_2 t \times \log_2 \langle x^2(t) \rangle$ gerada pelo CTRW de uma população de $N = 30.000$ partículas em um tempo $t_f \leq 2^{13}$, para $s = 3$ fixo e $2 < r < 3$ variando de modo a obter um conjunto de voos superdifusivos. As retas foram ajustadas por regressão linear da equação (59) para determinar os parâmetros superdifusivos. Na medida em que $r \rightarrow 3$ o processo torna-se mais próximo do regime de difusão normal. A reta tracejada corresponde ao caso normal, $\mu = 1$ e $D_\mu = 0.5$	65
Figura 18 – Histograma de posições de uma população de $N = 20.000$ partículas de um voo subdifusivo gerado controlando a potência da distribuição do tempo de espera entre os saltos, $1 < s < 2$, segundo o critério de convergência / divergência, Tabela 3.	66
Figura 19 – Histograma de posições de uma população $N = 30.000$ partículas um voo superdifusivo gerados controlando a potência da distribuição de comprimento de saltos, $2 < r < 3$, segundo o critério de convergência / divergência (3)..	67

Figura 20 – Histogramas de posições de conjuntos voos subdifusivos com populações de $N = 20.000$ partículas em um tempo $t_f = 2^{13}$ e os respectivos modelos $G_\alpha(x, t)$ (69) e $P_q(x, t)$ (78) com os parâmetros obtidos pelo método de análise da dispersão e pelo método de otimização de BFGS, indexados pelas letras 'd' e 'M', respectivamente.	68
Figura 21 – Histogramas de posições de conjuntos voos superdifusivos com populações de $N = 30.000$ partículas em um tempo $t_f = 2^{13}$ e os respectivos modelos $L_\gamma(x, t)$ (73) e $P_q(x, t)$ (78) com os parâmetros obtidos pelo método de análise da dispersão e pelo método de otimização de BFGS, indexados pelas letras 'd' e 'M', respectivamente.	70
Figura 22 – Calibração dos processos subdifusivos no espaço de parâmetros restrito a $r = 4$ e $1 < s < 2$. (a) - Equação (89) para τ sobre os parâmetros da simulação; (b) e (c)- mostram as dependências entre s , α e $\log_2 D_\alpha$, respectivamente. (d) - reta obtida por regressão linear sobre os parâmetros da simulação.	72
Figura 23 – Calibração dos processos superdifusivos no espaço de parâmetros restrito à $s = 3$ e $2 < r < 3$. (a) - Equação (90) para σ^2 sobre os parâmetros da simulação; (b) e (c)- mostram as dependências entre r , γ e $\log_2 D_\gamma$, respectivamente. (d) - reta obtida por regressão linear sobre os parâmetros da simulação.	73
Figura 24 – Parâmetros obtidos das simulações e relações teóricas entre parâmetros de grande escala dos modelos lineares e não lineares para a subdifusão e a superdifusão. (a) e (b) correspondem aos processos subdifusivos, respectivamente, $\alpha \times q$, e $D_\alpha \times D_q$. (c) e (d) estão as relação entre $\gamma \times q$ e $D_\gamma \times D_q$ para os processos superdifusivos. A Figura (c) corresponde à relação de Tsallis-Bukman.	74

Lista de Tabelas

Tabela 1 – Deslocamento médio quadrático para a classificação dos processos difusivos	36
Tabela 2 – Modelos para descrição da difusão	52
Tabela 3 – Critério de convergência/divergência para simulação de vôos difusivos	56
Tabela 4 – Parâmetros para a descrição da difusão	58
Tabela 5 – Expoentes normal e subdifusivos	66
Tabela 6 – Coeficientes normal e subdifusivos	67
Tabela 7 – Expoentes normal e superdifusivos	69
Tabela 8 – Coeficientes normal e superdifusivos	69
Tabela 9 – Raiz do erro médio quadrático (Δ) entre modelos e simulações	69
Tabela 10 – Modelos mais adequados	71

Lista de Abreviaturas e Siglas

MB	Movimento browniano
PDF	Função densidade de probabilidade
RW	Random walk
CTRW	Random walk de tempo contínuo
TCL	Teorema central do limite
CF	Cálculo fracionário
EDP	Equação diferencial parcial
EDFE	Equação de difusão linear fracionária espacial
EDFT	Equação de difusão linear fracionária temporal
EDNL	Equação de difusão não linear
FSS	Método escala de tamanho finito

Sumário

1 – Introdução	1
1.0.1 Justificativa e objetivos	6
1.0.2 Organização do trabalho	7
2 – Fundamentação Teórica	8
2.1 Técnicas do cálculo fracionário	8
2.1.1 Função gama de Euler	9
2.1.2 Função de Mittag-Leffler	10
2.1.3 O operador integro-diferencial fracionário de Riemann-Liouville	12
2.1.4 O operador diferencial fracionário de Caputo	17
2.1.5 Operador diferencial fracionário de Riesz-Weyl	18
2.2 Transformadas Integrais	19
2.2.1 A transformada de Laplace do operador fracionário de Caputo	19
2.2.2 A transformada de Fourier do operador diferencial fracionário de Riesz-Weyl	22
2.3 Movimentos brownianos, <i>random walks</i> e difusão	25
2.3.1 Movimento em pequena escala	25
2.3.2 Modelo de <i>random walk</i> de tempo contínuo	26
2.3.3 Dinâmica das médias e limite de larga escala	29
2.3.4 O comportamento assintótico de longo alcance	32
2.3.5 Difusão: movimento em grande escala	36
2.4 Distribuições de probabilidades geradas pela equação de difusão generalizada	40
2.4.1 Modelos dados pela equação de difusão linear fracionária	41
2.4.2 Modelo dado pela equação de difusão não linear	49
2.5 Simulação e determinação dos parâmetros de um random walk anômalo	51
3 – Metodologia	55
3.1 Metodologia para a geração de processos difusivos anômalos	55
3.2 Método de escala de tamanho finito	56
3.3 Calibração via método de análise da medida da dispersão	56
3.4 Calibração via método de otimização dos modelos teóricos	57
3.5 Comparação da adequação dos modelos e métodos	58
3.6 Construção do espaço de parâmetros subdifusivos e superdifusivos	58
4 – Resultados e Análise	59
4.1 Simulações lineares dos processos de difusão anômala	59

4.2	Parâmetros N e t_f obtidos pelo método de escala de tamanho finito	61
4.3	Parâmetros obtidos via método de análise da medida da dispersão	63
4.4	Parâmetros obtidos via método de otimização BFGS	65
4.5	Comparação entre métodos e modelos	68
4.6	Espaço de parâmetros subdifusivos e superdifusivos	71
5	– Conclusão	75
5.1	Trabalhos Futuros	77
	Referências	78

Capítulo 1

Introdução

A investigação das propriedades estruturais e dinâmicas de sistemas de muitos corpos com deslocamentos complexos desempenha um papel importante nas ciências exatas e comunidade científica, uma vez que englobam sistemas com naturezas diversas (METZLER; KLAFTER, 2000). Estes sistemas apresentam normalmente em sua estrutura um grande número de partículas que se movimentam de forma irregular e estão sujeitas a interações de pequeno alcance. O movimento individual irregular em pequena escala é responsável pelo movimento do conjunto em grande escala ¹ que, em contraste, apresenta uma interessante regularidade (WANG; UHLENBECK, 1945).

Um importante representante deste tipo de fenômeno de transporte é o movimento browniano (MB), assim nomeado em homenagem ao botânico Roberto Brown. Um MB é dado pelo movimento complexo das partículas suspensas em um fluido, resultante da sua colisão com átomos rápidos ou moléculas do fluido. Em 1827, ao olhar, através de um microscópio, partículas de grãos de pólen na água, Brown observou que essas se moviam através da água mas não foi capaz de determinar os mecanismos que causaram este movimento (SOKOLOV; KLAFTER, 2005). Décadas depois, Albert Einstein revolve o problema e publica um artigo em 1905 explicando em detalhes precisos como o movimento que Brown tinha observado era o resultado do pólen sendo movido por moléculas de água individuais (EINSTEIN, 1956).

Devido à complexidade das interações e ao grande número de graus de liberdade em pequenas escalas em sistemas exibindo um MB, torna-se conveniente usar formulações estocásticas, entre as quais, o passeio aleatório, ou *random walk*, figura como o mais conhecido exemplo (WANG; UHLENBECK, 1945). Historicamente, a teoria dos *random walks* foi desenvolvida por Louis Bachelier em sua notável tese de doutorado, *La Théorie de la Spéculation*, publicada em 1900 (RYCROFT, 2005). Bachelier propôs o *random*

¹Optamos por usar 'grande escala' e 'pequena escala' ao invés de macroscópico e microscópico pois lidamos com sistemas interdisciplinares e, nem sempre a pequena escala é microscópica do ponto de vista físico.

walk como um modelo fundamental para séries temporais financeiras. Décadas depois, essa idéia tornou-se a base para o financiamento teórico moderno (BACHELIER et al., 2011). Bachelier também foi o primeiro a ver a conexão entre *random walks* discretos e a equação de difusão (ou calor) contínua que é um tema importante desta classe de problemas (RYCROFT, 2005).

O termo *random walk*, que denotaremos a partir de agora por RW, só foi proposto em 1950 por Karl Pearson (HUGHES, 1995). Em carta à revista *Nature*, ele deu um modelo simples para descrever uma infestação de mosquitos em uma floresta: o mosquito realiza um salto, de comprimento fixo, em cada intervalo de tempo, t_i , em um ângulo escolhido aleatoriamente. Pearson queria saber qual seria a distribuição de mosquitos depois de n passos terem sido dados. Sua carta foi respondida por Lord Rayleigh, que já havia resolvido uma forma mais geral desse problema em 1880 no contexto de ondas sonoras em materiais heterogêneos: a modelagem de uma onda de som que viaja através do material pode ser considerada como uma soma de uma sequência de vetores aleatórios da onda de amplitude k fixa e fase aleatória. As ondas sonoras no material têm um comprimento de onda aproximadamente constante, mas suas direções são alteradas em locais de dispersão dentro do material. Lord Rayleigh mostrou que a função densidade de probabilidade (PDF) $P_n(R)$ de uma onda que dá n saltos, de tamanho unitário, em uma distância R , quando $n \rightarrow \infty$, é dada por

$$P_n(R) \sim \frac{2R}{n} e^{-R^2/n}.$$

Observe que a distância esperada escala com a raiz do número de passos, $\langle R^2 \rangle \sim n$, um padrão típico de uma classe de movimentos do conjunto de partículas chamado difusão. (RYCROFT, 2005).

De fato, uma descrição da evolução do sistema no tempo t pode ser feita em uma escala intermediária com uma amostra de N partículas suficientemente grande. O MB evolui segundo uma difusão clássica caracterizada pela variância amostral aumentando de forma linear com o tempo

$$\langle x^2(t) \rangle \propto t.$$

A escala intermediária acontece quando a amostra possui um número N de partículas e um tempo t suficientemente grandes. No caso do MB clássico, o limite entre as escalas é descrito pelo Teorema Central do Limite (TCL) (FISCHER, 2010). De acordo com o TCL se a convergência tanto da variância da população como da média da população são observadas em pequena escala então a PDF em grande escala é a gaussiana. Estas são

condições suficientes para a convergência tanto da variância da população quanto da média da população.

Um MB clássico pode ser simulado via um RW baseado em um processo markoviano (sem memória) no qual em tempos regulares de intervalos de tempo a partícula realiza deslocamentos espaciais aleatórios determinados por alguma PDF (METZLER; KLAFTER, 2000). De acordo com TCL, o histograma de posições de uma amostra das partículas se encaixa em uma PDF gaussiana desde que a PDF dos deslocamentos das partículas tenha uma variância populacional convergente. No entanto, sistemas com ocorrência frequente de grandes saltos ou deslocamentos podem não ter variâncias convergentes. Para estes são adequadas simulações baseadas em caminhadas de Lévy (BOUCHAUD; GEORGES, 1990).

O movimento em grande escala do conjunto de partículas pode ser modelado por meio de equações diferenciais parciais determinísticas para a distribuição de probabilidades (SHIN et al., 1991; TSALLIS, 2009). Segue que a PDF da posição das partículas de um processo MB é descrito pela equação de difusão (SHLESINGER; ZASLAVSKY; FRISCH, 1995; SHLESINGER; KLAFTER; ZUMOFEN, 1999; METZLER; KLAFTER, 2000). Assim, segundo o TCL, sistemas com um grande número de partículas de interações de pequeno alcance tendem a exibir um MB em pequena escala e um comportamento clássico de difusão em grande escala. No entanto, fenômenos naturais com detalhes mais complexos na dinâmica das partículas exibem um MB anômalo em pequena escala e um comportamento anômalo de difusão em grande escala. Alguns exemplos são: transporte turbulento em plasmas (BALESCU, 1995), difusão anômala de proteínas (BANKS; RANDIN, 2005; SUGITA; OKAMOTO, 1999), dinâmica populacional (GHAEMI; ZABIHINPOUR; ASGARI, 2009; HOLMES et al., 1994; JOHNSON et al., 1992), sistemas em meios porosos (KIMMICH, 2012), difusão em estruturas fractais (STEPHENSON, 1995), cristais líquidos (KIVELSON; FRADKIN; EMERY, 1998) e organismos (HILL; HÄDER, 1997).

Na construção dos alicerces para o estudo de regimes difusivos em grande escala, destacamos os pesquisadores Fourier, Fick e Richardson. Fourier em 1807 estabeleceu a teoria da propagação do calor em sólidos no trabalho intitulado *Théorie de la propagation de la chaleur dans les solides* (FOURIER, 1807). Em 1855, o fisiologista alemão Adolph Eugen Fick publicou seu trabalho *Über Diffusion* (FICK, 1855). Apesar da diversidade de seus estudos, da cardiologia a ensaios filosóficos, Fick é mais amplamente conhecido pela sua dedicação aos fenômenos chamados difusivos, possuindo até mesmo leis com seu nome. Através de uma equação diferencial a lei de Fick é utilizada para descrever diversos casos de difusão de matéria ou energia (SERAFIM, 2015). Já o estudo de Richardson sobre a difusão turbulenta, em 1926, é considerado um marco para a difusão (RICHARDSON, 1926) uma vez que seus resultados mostraram comportamentos que se diferenciavam do

clássico (GAROSI; BEKEFI; SCHULZ, 1969).

Em alguns esforços recentes para abordar sistemas de difusão anômala por simulações baseadas em RW é possível perceber uma certa dificuldade em se controlar o processo imposto pelo desvio do regime de difusão clássico (BANKS; RANDIN, 2005; BIAGI, 1999; HATTNE; FANGE; ELF, 2005; MAGDZIARZ; WERON; WERON, 2007; PEREIRA et al., 2017). Como consequência, a escolha de modelos de difusão anômala para os casos simulados fica prejudicado. A fim de fornecer modelos para sistemas observados, seria interessante estabelecer uma calibração sistemática entre modelos simulados e teóricos. Com tal finalidade torna-se necessário analisar as muitas escalas envolvidas no processo.

Do ponto de vista de pequenas escalas, os desvios do MB clássico podem ocorrer devido a interações de longo alcance entre as partículas em movimento e / ou entre as partículas com o ambiente (SOKOLOV; KLAFTER, 2005). Nas interações com o ambiente, as partículas em RW podem ter seus deslocamentos influenciados por estados locais com probabilidade significativamente aumentada de ter saltos maiores ou menores do que no clássico MB (SHLESINGER; ZASLAVSKY; FRISCH, 1995; ZABURDAEV; DENISOV; KLAFTER, 2015). Em especial, a ocorrência frequente de grandes saltos é comumente associada à chamada PDF de cauda pesada para os deslocamentos de partículas, eventualmente com variância ou média divergentes. Por exemplo, em sistemas ecológicos, a ausência ou abundância de alimentos pode regular o comprimento do deslocamento na dispersão dos indivíduos de determinada espécie (LEWIS; MAINI; PETROVSKII, 2013). Além disso, as condições do ambiente podem impor limites às partículas, de tal modo que as probabilidades de se observar grandes tempos de espera entre um deslocamento e outro é maior do que no caso clássico (METZLER; KLAFTER, 2000). Um exemplo típico é o efeito de moléculas em um solvente (EINSTEIN, 1956; KRAMERS, 1940). Como estas correlações de longo alcance se devem às interações com as condições do ambiente e não entre as partículas, espera-se que os modelos dinâmicos em grande escala sejam lineares. Processos deste tipo são da classe dos vãos de Lévy (SHLESINGER; ZASLAVSKY; FRISCH, 1995; BARTUMEUS et al., 2005; BENHAMOU, 2007; REYNOLDS, 2015).

Em tais processos, a descrição em uma escala intermediária com uma amostra de um número finito de partículas N se comporta no tempo como um MB anômalo de modo que a variância evolui em uma lei de potência geral com o tempo

$$\langle X^2(t) \rangle \propto t^\mu$$

e se encaixam em uma classe mais geral de difusão anômala (KLAFTER; SHLESINGER; ZUMOFEN, 1996; SOKOLOV; KLAFTER, 2005). Se $\mu < 1$ o processo é dito subdifusivo, se $\mu > 1$ superdifusivo e para $\mu = 1$ a difusão clássica é recuperada (TSALLIS, 2009).

Se as condições de suficiência para a convergência tanto da variância da população quanto da média da população não são satisfeitas a classe resultante de PDFs precisa ser ampliada (KOROLIUK, 2015). Generalizações do TCL são obtidas enfraquecendo as condições de convergência das médias populacionais. Entre as muitas generalizações encontra-se o TCL generalizado de Lévy-Gnedenko obtido por meio de condições assintóticas sobre distribuições segundo lei de potência. Neste caso, a distribuição estável no limite para grandes números tende em probabilidade para as distribuições de Lévy (GNEDENKO; KOLMOGOROV, 1956; SHLESINGER; KLAFTER; WONG, 1982; BOUCHAUD; GEORGES, 1990).

De modo generalizado, o RW de tempo contínuo (CTRW) fornece um método de simulação capaz de modelar a alta frequência relativa à ocorrência de grandes saltos bem como a alta frequência relativa à ocorrência de longos tempos de espera entre um salto e outro (METZLER; KLAFTER, 2000). Considerando uma PDF para a variável aleatória comprimentos de saltos, bem como uma PDF para a variável aleatória tempo de espera entre os saltos, é possível controlar o processo gerado e simular ambos os regimes de subdifusão ou superdifusão (METZLER; KLAFTER, 2000; METZLER; NONNENMACHER, 2002; MONTROLL; WEISS, 1965). Pode-se, ainda, a partir de um CTRW, por meio da fórmula de Montroll-Weiss (MONTROLL; WEISS, 1965; KENKRE; MONTROLL; SHLESINGER, 1973), obter uma equação de difusão generalizada por derivadas fracionárias no tempo e no espaço para descrição do comportamento difusivo anômalo em grande escala (ARAFI; RIDA, 2009; AGRAWAL, 2007; LENZI; MENDES; TSALLIS, 2003; MAINARDI, 1996). Neste caso, a descrição é dada pela equação diferencial parcial linear fracionária (EDPF) com derivadas fracionárias no tempo e/ou no espaço (METZLER; NONNENMACHER, 2002). Em particular, a derivada fracionária no tempo ou no espaço são adequadas para, respectivamente, a subdifusão ou superdifusão (MAINARDI, 1996; METZLER; NONNENMACHER, 2002; LUCHKO, 2012).

Existem, ainda, fenômenos onde a posição das muitas partículas vizinhas influencia no comprimento do salto, bem como o tempo de descanso de uma partícula, caracterizando interações de longo alcance ou correlações entre as partículas (TSALLIS; BUKMAN, 1996). Nesses casos espera-se que a grande escala associada ao modelo dinâmico seja não linear (BOLOGNA; TSALLIS; GRIGOLINI, 2000; LENZI; MENDES; TSALLIS, 2003; TSALLIS, 2009).

Um CTRW também é adequado para estes tipos de correlações entre o movimento das partículas segundo as condições do ambiente. Surge, assim, uma outra classe de equações de difusão generalizadas pela inclusão de não linearidade na equação diferencial parcial (BOLOGNA; TSALLIS; GRIGOLINI, 2000; LENZI; MENDES; TSALLIS, 2003; TSALLIS, 2009).

Alternativamente, para esta classe de equações, o TCL generalizado pela q -gaussiana, no limite para grandes números tende em probabilidade para as distribuições estáveis q -gaussianas, obedecendo condições de convergência sob as definidas q -média e q -variância (UMAROV; CONSTANTINO; STEINBERG, 2008; TSALLIS; BUKMAN, 1996). Nestes casos aparece uma classe estável de distribuições conhecidas como distribuições de cauda pesada cuja variância populacional (e, às vezes a média populacional) torna-se divergente. Por exemplo, se a dinâmica das partículas se dá de modo que sejam interagentes, como na equação não linear de difusão, a PDF satisfaz a equação de difusão correlacionada mais conhecida como equação em meios porosos (TSALLIS; LENZI, 2002; LENZI et al., 2003).

Todas essas abordagens complementares motivam este estudo, que visa compreender os fenômenos de difusão anômala em sistemas dinâmicos complexos estudando os parâmetros e as relações entre os parâmetros das escalas envolvidas.

1.0.1 Justificativa e objetivos

Nos casos gerais de difusão anômala, observa-se uma dificuldade em se estabelecer uma conexão sistemática entre simulações, com variáveis aleatórias, e os modelos de distribuições de posições de partículas. Uma questão de interesse geral na simulação de sistemas de difusão anômala é quais seriam os parâmetros em pequena escala para entrada em simulação a fim de produzir um comportamento em grande escala desejado, como PDFs, médias etc. Por outro lado, ao se modelar um sistema em grande escala, projetando um modelo em larga escala para a PDF estável ou PDF limite, a questão relevante é qual seria o inferido comportamento em pequena escala expresso em sua dinâmica. Portanto, uma parametrização sistemática para comparar e inferir modelos em pequena escala que se encaixam em modelos em grande escala parece ser uma questão relevante.

Existe, ainda, o interesse geral em se simular sistemas de difusão anômala para reproduzir alguns comportamentos observados em larga escala. Por outro lado, é interessante fornecer modelos de difusão anômala em grande escala para explicar a dinâmica detalhada de sistemas cujo comportamento em pequena escala são complexos. Assim, surge uma questão natural: existe uma relação entre parâmetros do modelo em pequena escala e em grande escala de comportamento difusivo anômalo? No caso de uma resposta positiva, qual seria esta relação? Além disso, pode-se perguntar qual é o melhor método para se comparar modelos com simulações, além de, quais são os modelos mais apropriados que se ajustam a estas simulações.

O objetivo deste trabalho é buscar uma calibração que possa auxiliar na simulação de processos gerais de difusão com parâmetros em pequena escala que conduzam a um modelo desejado em grande escala. Ou na via inversa, conhecidos os dados de um processo, determinar os parâmetros em grande escala e, então, inferir as suas características

dinâmicas em pequena escala por meio da calibração.

Os dados são gerados por simulações do tipo CTRW com tempo de espera médio e variância do comprimento de salto controlados para fornecer uma gama completa de casos entre subdifusão e superdifusão. O modelo teórico consiste em um problema de valor de contorno de uma equação diferencial parcial generalizada ora por derivadas fracionárias no espaço ou tempo, ora acrescentando não-linearidade para fornecer soluções q -gaussianas.

A partir das simulações, queremos obter a constante de difusão e os expoentes de difusão, estes últimos associados ora à ordem das derivadas fracionárias, ora ao parâmetro q -gaussiano, utilizando dois métodos diferentes: análise da dispersão no tempo da variância das posições das partículas e por otimização das soluções, modelos teóricos, aos histogramas de posições das partículas. Desejamos avaliar qual o método de maior acurácia para obtenção dos parâmetros.

Adicionalmente, através dos métodos de obtenção de parâmetros, desejamos avaliar qual modelo é mais adequado para explicar em grande escala uma dada dinâmica definida em pequena escala.

Pretende-se, ainda, estabelecer uma conexão entre os parâmetros das simulações e os parâmetros dos modelos teóricos em larga escala, tanto para os casos das derivadas fracionárias no tempo e espaço, quanto para as soluções q -gaussianas.

1.0.2 Organização do trabalho

Este trabalho está organizado da seguinte forma: No capítulo 2, Fundamentação Teórica, faz-se uma revisão teórica para a abordagem do problema generalizado de difusão.

Em seguida, no capítulo 3, apresenta-se os métodos propostos e utilizados para estabelecer uma prescrição para a geração controlada de processos de difusão anômala, baseados em um CTRW, e para associação de modelos difusivos generalizados e suas PDFs aos processos gerados.

Os resultados alcançados por este trabalho são retratados e analisados no capítulo 4, Resultados e Análise. E, no capítulo seguinte, apresentamos a Conclusão e trabalhos futuros.

Capítulo 2

Fundamentação Teórica

Este capítulo apresenta uma revisão teórica para a abordagem do problema generalizado de difusão a fim de fazer uma calibração entre simulações de processos difusivos e modelos teóricos. Os modelos teóricos são descritos por equações de difusão generalizadas. Vamos lidar com o caso em que as derivadas são generalizadas por ordens não inteiras e com o caso de não-linearidade da equação de meios porosos. As simulações são baseadas em um *random walk* de tempo contínuo com tempo de espera entre os saltos e comprimento dos saltos controlados para obter uma gama de casos entre os regimes de subdifusão e superdifusão.

Inicialmente, é feita uma discussão das técnicas do cálculo fracionário utilizadas na solução das equações de difusão fracionárias. Em seguida, aborda-se o tema geral MB anômalo, CTRW e difusão anômala para descrever a difusão em pequena escala por meio de um CTRW e em grande escala pela equação de difusão linear fracionária e pela equação de difusão não linear. Apresenta-se, então, os modelos teóricos utilizados para a descrição da difusão em pequena escala e em grande escala. Por fim, é discutida a simulação e determinação dos parâmetros de um CTRW anômalo.

2.1 Técnicas do cálculo fracionário

O cálculo fracionário (CF) consiste de uma generalização do cálculo integral e diferencial proposto independentemente por Newton e Leibniz. Trata-se, assim, de um campo da análise matemática que promove investigação e aplicações de integrais e derivadas de ordem não necessariamente inteira (GORENFLO et al., 2002). O formalismo envolvido no desenvolvimento do CF faz uso de diversas funções especiais, tais como a generalização da função fatorial, por meio da função gama, a função de Mittag-Leffler para promover uma generalização da função exponencial, dentre outras. Faremos uma exposição catalográfica de algumas funções especiais conhecidas e que são de base para o CF.

2.1.1 Função gama de Euler

A função gama de Euler generaliza o conceito de fatorial de um número natural, $n!$, permitindo que n assumam valores não inteiros e até mesmo complexos (PODLUBNY, 1998; SALGADO, 2015).

Seja z um número complexo, $z = x + yi$ com $x, y \in \mathbb{R}$ e $\Re(z) > 0$. A função gama $\Gamma(z)$, devida a Euler, é definida pela integral imprópria (PODLUBNY, 1998)

$$\Gamma(z) := \int_0^{\infty} t^{z-1} e^{-t} dt. \quad (1)$$

A partir desta definição, utilizando integração por partes, obtêm-se uma importante propriedade da função gama

$$\Gamma(z + 1) = z \Gamma(z),$$

que pode ser interpretada como uma generalização da identidade $n! = n(n-1)!$, $n \in \mathbb{N}$ (SALGADO, 2015). De fato,

$$\begin{aligned} \Gamma(1) &= \int_0^{\infty} e^{-t} dt = 1, \\ \Gamma(2) &= \Gamma(1+1) = 1\Gamma(1) = 1, \\ \Gamma(3) &= \Gamma(2+1) = 2\Gamma(1) = 2, \\ &\vdots \\ \Gamma(n+1) &= n\Gamma(n) = n(n-1)! = n! \end{aligned}$$

caracterizando, portanto, a função Γ como uma generalização do fatorial de um número real positivo.

Pode-se ainda, utilizando esta mesma propriedade, estender o domínio da função gama para o conjunto que contém números negativos $p = -n$, ($n = 0, 1, 2, \dots$) (SALGADO, 2015). Este prolongamento é feito mediante a relação, conhecida como expressão de Mittag-Leffler,

$$\Gamma(p) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!(p+n)} + \int_1^{\infty} e^{-t} t^{p-1} dt$$

onde demonstra-se que a série na expressão precedente tem por soma uma função analítica em todo o plano, $p \in \mathbb{C}$, excluindo-se os pontos $p = -n$ chamados de polos (CAMARGO; CAPELAS, 2015). Na figura (1) observe o gráfico da função gama.

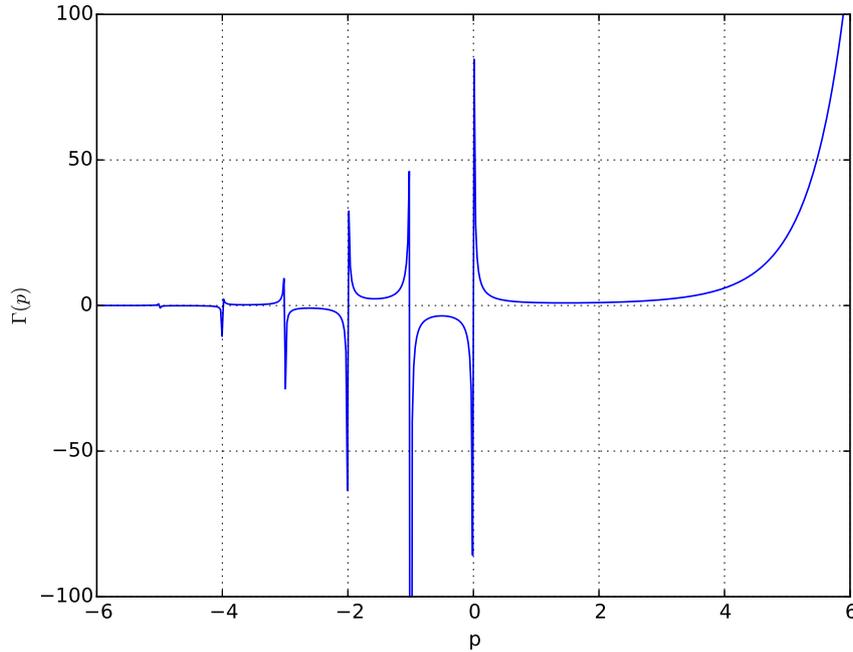


Figura 1 – Gráfico da função $\Gamma(p)$ para $p \in (-6, 6]$.

Utilizando coordenadas polares e a definição da função gama, obtemos a seguinte regra,

$$\int_0^1 \tau^{z-1}(1-\tau)^{w-1}d\tau = \frac{\Gamma(z)\Gamma(w)}{\Gamma(z+w)}, \quad \Re(z) > 0, \Re(w) > 0.$$

A função beta é então definida da seguinte maneira:

$$B(z, w) = \frac{\Gamma(z)\Gamma(w)}{\Gamma(z+w)}. \quad (2)$$

2.1.2 Função de Mittag-Leffler

A função exponencial, e^z , desempenha um papel central na teoria das equações integro-diferenciais. A função de Mittag-Leffler é uma função complexa, dependente do parâmetro complexo α com $\Re(\alpha) > 0$, que generaliza a função exponencial, sendo definida por

$$E_\alpha(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\Gamma(\alpha k + 1)}. \quad (3)$$

Para $\alpha = 1$, recupera-se a função exponencial

$$E_1(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\Gamma(k+1)} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{k!} = e^z.$$

Uma generalização da função de Mittag-Leffler, introduzida por Agrawal ([AGRAWAL, 2007](#)) é a função

$$E_{\alpha,\beta}(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\Gamma(\alpha k + \beta)}, \quad \Re(\alpha) > 0, \beta > 0, \quad (4)$$

conhecida como função de Mittag-Leffler de dois parâmetros. Para $\beta = 1$, (4) reduz-se à função de Mittag-Leffler de um parâmetro (3) $E_{\alpha,1}(z) = E_{\alpha}(z)$ ([CAMARGO; CAPELAS, 2015](#)).

As função cosseno e seno trigonométricas, podem ser escritas como funções de Mittag-Leffler, respectivamente, como

$$\begin{aligned} E_2(-z^2) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n z^{2n}}{\Gamma(2n+1)} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n z^{2n}}{(2n)!} \\ &= \cos z \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} zE_{2,2}(-z^2) &= z \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n z^{2n}}{\Gamma(2n+2)} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n z^{2n+1}}{(2n+1)!} \\ &= \sin z. \end{aligned}$$

Uma função, que desempenha um papel importante na solução de equações diferenciais parciais fracionárias, isto é, equações de difusão-onda ([MAINARDI, 1996](#)), relacionada à função de Mittag-Leffler $E_{\alpha,\beta}(z)$, é a função de Wright ([PODLUBNY, 1998](#); [MAINARDI,](#)

2010). Adotando, convenientemente, a notação de Mainardi (MAINARDI, 1996), a função de Wright é definida por

$$W(z, \alpha, \beta) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{k! \Gamma(\alpha k + \beta)} \quad (5)$$

e possui representação na forma integral dada por

$$W(z, \alpha, \beta) = \frac{1}{2\pi i} \int_{Ha} u^{-\beta} e^{u+zu^{-\alpha}} du, \quad (6)$$

onde Ha denota o contorno de Hankel (PODLUBNY, 1998). Para $\alpha = 0$ e $\beta = 1$ em (5), a função exponencial é recuperada

$$W(z, 0, 1) = e^z.$$

Para $\beta = 1 - \alpha$ em (5), obtêm-se um caso particular da função de Wright

$$W(-z, -\alpha, 1 - \alpha) = M(z; \alpha) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k z^k}{k! \Gamma(-\alpha(k+1) + 1)} \quad (7)$$

conhecida como função de Mainardi (MAINARDI, 1996; PODLUBNY, 1998).

2.1.3 O operador integro-diferencial fracionário de Riemann-Liouville

Existem várias definições possíveis para o CF, sendo cada uma delas mais adequada a um certo conceito físico do que outro. Entre as definições mais difundidas na literatura encontram-se as de Riemann-Liouville (RL) e de Caputo, que são baseadas em uma expressão fechada para a integração de ordem n proposta por Cauchy. Convenientemente, discutiremos aqui conceitos fracionários associados às derivadas de RL, Caputo e Weyl. A fim de compreender o conceito, começamos generalizando as derivadas para ordens negativas para considerar a integração em um mesmo patamar.

Seja f uma função definida em um intervalo fechado $I = [a, b] \subset \mathbb{R}$ e integrável segundo Riemann para $t \in I$. Considere $n \in \mathbb{N}$ e uma sequência infinita de suas derivadas, todas diferenciáveis, e de suas integrais múltiplas na forma

$$\cdots, \int_a^t \int_a^{x_2} \int_a^{x_1} f(x) dx dx_1 dx_2, \int_a^t \int_a^{x_1} f(x) dx dx_1, \int_a^t f(x) dx, f(t), \frac{df(t)}{dt}, \frac{d^2 f(t)}{dt^2}, \cdots \quad (8)$$

Observe que a partir da função $f(t) = f^{(0)}(t)$ o expoente é acrescido de um a cada derivação e decrescido de um a cada integração. A derivada fracionária de ordem $p \in \mathbb{R}$ pode ser considerada como uma interpolação desta sequência de operadores, transformando o índice da sequência $n \in \mathbb{N}$ no parâmetro contínuo p . Utilizando a notação sugerida por Davis (DAVIS, 2008), escreveremos para o operador derivada de ordem p

$${}_a D_t^p f(t)$$

e para o operador integração fracionária de ordem $p > 0$

$${}_a D_t^{-p} f(t)$$

onde $[a, t] \subset I$ é o intervalo de integro-diferenciação (PODLUBNY, 1998).

Como anteriormente mencionado, as definições integro-diferenciais de RL baseiam-se em uma expressão fechada para a integração de ordem n proposta por Cauchy (PODLUBNY, 1998). Nesta direção, considere a integral dupla de $f(t)$ em $[a, t]$,

$$\begin{aligned} {}_a D_t^{(-2)} f(t) &= \int_a^t \int_a^{x_1} f(x) dx dx_1 \\ &= \int_a^t f(x) \int_x^t dx_1 dx \\ &= \int_a^t (t-x) f(x) dx. \end{aligned}$$

De forma análoga, pode-se escrever para a integral tripla de $f(t)$ em $[a, t]$

$$\begin{aligned} {}_a D_t^{(-3)} f(t) &= \int_a^t \int_a^{x_2} \int_a^{x_1} f(x) dx dx_1 dx_2 \\ &= \int_a^t \int_a^{x_2} f(x) \int_x^{x_2} dx_1 dx dx_2 \\ &= \int_a^t \int_a^{x_2} f(x) (x_2 - x) dx dx_2 \\ &= \int_a^t f(x) \int_x^t (x_2 - x) dx_2 dx \\ &= \int_a^t \frac{(t-x)^2}{2} f(x) dx. \end{aligned}$$

Por indução em n , sabendo que a integral de uma função integrável também é integrável e que, sendo as funções integráveis segundo Riemann em I , a ordem de integração pode

ser trocada pelo Teorema de Fubini (SALGADO, 2015), obtêm-se a fórmula da n -ésima integral iterada de Cauchy,

$${}_a D_t^{-n} f(t) := \frac{1}{(n-1)!} \int_a^t (t-x)^{n-1} f(x) dx, \quad n \in \mathbb{N}. \quad (9)$$

Esta expressão fechada para ${}_a D_t^{-n} f(t)$ pode ser estendida, de forma natural, para definir um operador ${}_a D_t^{-p} f(t)$ onde p é um real positivo. Para isso, é necessário utilizar a função gama (1), além de investigar sob que condições a função $(t-x)^{p-1} f(x)$ possui integral convergente no intervalo $[a, t] \subset I$. Utilizando integração por partes, mostra-se (PODLUBNY, 1998; SALGADO, 2015) que uma condição suficiente para que a integral (9) exista ao substituir n pelo real $p > 0$ é que $f(t)$ seja diferenciável em I . Com isso, a integral fracionária segundo RL é definida como

$${}^{\text{RL}} D_a^{-p} f(t) := \frac{1}{\Gamma(p)} \int_a^t (t-x)^{p-1} f(x) dx, \quad p \in \mathbb{R}_+. \quad (10)$$

Vamos calcular a integral segundo RL de ordem $p > 0$ da função potência $f(t) = (t-a)^\beta$ com $\beta > -1$ e $t > a$,

$$\begin{aligned} {}^{\text{RL}} D_a^{-p}((t-a)^\beta) &= \frac{1}{\Gamma(p)} \int_a^t (t-x)^{p-1} (x-a)^\beta dx & (11) \\ &= \frac{1}{\Gamma(p)} \int_0^1 (t-a)^{p-1} (1-u)^{p-1} u^\beta (t-a)^\beta (t-a) du \\ &= \frac{(t-a)^{p+\beta}}{\Gamma(p)} \int_0^1 (1-u)^{p-1} u^\beta du \\ &= \frac{(t-a)^{p+\beta}}{\Gamma(p)} \frac{\Gamma(p)\Gamma(\beta+1)}{\Gamma(p+\beta+1)} \\ &= \frac{\Gamma(\beta+1)}{\Gamma(p+\beta+1)} (t-a)^{p+\beta}, \end{aligned}$$

onde, para este cálculo, utilizamos a mudança de coordenadas $x = a + u(t-a)$, além da função beta (2). Note que se considerarmos $\beta \leq -1$, então ${}^{\text{RL}} D_a^{-p}((t-a)^\beta)$ não existe (SALGADO, 2015).

Salientamos que, embora tenhamos obtido uma expressão fechada para a integral de RL da função potência $f(t) = (t-a)^\beta$, obter expressões fechadas para a integral de RL aplicada a funções mais gerais não é, geralmente, uma tarefa simples (PODLUBNY, 1998).

O conceito de integração fracionária é estendido para a diferenciação fracionária a partir de (10), ${}_a D_t^p f(t)$, $p \in \mathbb{R}_+$. Observe, no entanto, que a simples troca de $-p$ por p fará

com que a integral (10) seja divergente quando $x \rightarrow t$ (SERAFIM, 2015). Para $f(t)$ definida no intervalo I toma-se então, sem perda de generalidade, $p = k - \nu$ (PODLUBNY, 1998), $0 < \nu \leq 1$ e $k \in \mathbb{Z}$ sendo, convenientemente, o menor inteiro maior que p , $k = \lceil p \rceil$. Desta forma,

$$\begin{aligned} {}_a D_t^p f(t) &= {}_a D_t^{k-\nu} f(t) \\ &= \frac{d^k}{dt^k} [{}_a D_t^{-\nu} f(t)] \\ &= \frac{d^k}{dt^k} \left[\frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_a^t (t-x)^{\nu-1} f(x) dx \right] \\ &= \frac{1}{\Gamma(k-p)} \frac{d^k}{dt^k} \int_a^t (t-x)^{k-p-1} f(x) dx, \end{aligned}$$

em que a derivada fracionária de ordem $p \in \mathbb{R}_+$ foi fatorada como uma derivada inteira de ordem k e uma derivada fracionária de ordem ν . Assim, a derivada fracionária segundo RL é definida por (DAS, 2008; DIETHELM, 2010; PODLUBNY, 1998)

$${}^{\text{RL}}_a D_t^p f(t) = \frac{1}{\Gamma(k-p)} \frac{d^k}{dt^k} \int_a^t (t-x)^{k-p-1} f(x) dx, \quad k-1 \leq p < k. \quad (12)$$

Observe que, a partir desta definição, se $p \in \mathbb{N}$, então a derivada de RL é equivalente a uma derivação inteira de ordem p . Têm-se, ainda, que a derivada fracionária de RL é inverso à esquerda do operador integral fracionária de RL de mesma ordem p (PODLUBNY, 1998).

$$\begin{aligned} {}^{\text{RL}}_a D_t^n ({}^{\text{RL}}_a D_t^{-n} f(t)) &= \frac{d^n}{dt^n} \int_a^t (t-x)^{n-1} f(x) dx \\ &= \frac{d}{dt} \int_a^t f(x) dx \\ &= f(t). \end{aligned}$$

Como $k-1 \leq p < k$ e sabendo que

$${}^{\text{RL}}_a D_t^{-p} ({}^{\text{RL}}_a D_t^{-q} f(t)) = {}^{\text{RL}}_a D_t^{-q} ({}^{\text{RL}}_a D_t^{-p} f(t)) = {}^{\text{RL}}_a D_t^{-(q+p)} f(t),$$

escrevemos

$${}^{\text{RL}}_a D_t^{-k} f(t) = {}^{\text{RL}}_a D_t^{-(k-p)} ({}^{\text{RL}}_a D_t^{-p} f(t)),$$

e

$$\begin{aligned}
{}_a^{RL}D_t^p({}_a^{RL}D_t^{-p}f(t)) &= \frac{d^k}{dt^k} \{ {}_a^{RL}D_t^{-(k-p)}({}_a^{RL}D_t^{-p}f(t)) \} \\
&= \frac{d^k}{dt^k} \{ {}_a^{RL}D_t^{-k}f(t) \} \\
&= f(t).
\end{aligned} \tag{13}$$

A derivação de ordem não inteira pode ser interpretada como um deslocamento não inteiro na ordem de derivação para derivadas inteiras. Ou seja, se pretendemos, por exemplo, derivar segundo o operador RL uma ordem de $p = 1.3$ podemos, equivalentemente, aplicar a integral de RL de ordem 0.7 seguindo de uma derivada de ordem 2 (SALGADO, 2015).

Como anteriormente, vamos calcular agora a derivada de ordem $p > 0$ da função $f(t) = (t - a)^\beta$, $\beta > -1$, $p > 0$ e $k = [p]$. Utilizando (11) temos

$$\begin{aligned}
{}_a^{RL}D_t^p((t - a)^\beta) &= \frac{d^k}{dt^k} \left(\frac{\Gamma(\beta + 1)}{\Gamma(k - p + \beta + 1)} (t - a)^{k-p+\beta} \right) \\
&= \frac{\Gamma(\beta + 1)}{\Gamma(k - p + \beta + 1)} \frac{d^k}{dt^k} \left((t - a)^{k-p+\beta} \right).
\end{aligned}$$

Analisando esta última igualdade (SALGADO, 2015), obtemos o seguinte resultado

$${}_a^{RL}D_t^p((t - a)^\beta) = \begin{cases} 0, & \text{se } p - \beta \in \mathbb{N} \\ \frac{\Gamma(\beta + 1)}{\Gamma(\beta - p + 1)} (t - a)^{\beta-p}, & \text{se } p - \beta \notin \mathbb{N}. \end{cases} \tag{14}$$

Considerando $\beta = 0$ em (14) a derivada de ordem p da função constante $f(t) = 1$ é dada por

$${}_a^{RL}D_t^p 1 = \frac{1}{\Gamma(-p + 1)} (t - a)^{-p} \neq 0. \tag{15}$$

A definição da diferenciação fracionária de RL desempenhou um importante papel no desenvolvimento da teoria dos operadores fracionários. No entanto, o resultado da derivada de uma função constante ser diferente de zero é um inconveniente desta definição, uma vez que a derivada não pode ser interpretada como uma taxa de variação (CAMARGO; CAPELAS, 2015) e problemas aplicados exigem definições de derivadas fracionárias que permitam a utilização de condições iniciais fisicamente interpretáveis.

2.1.4 O operador diferencial fracionário de Caputo

Para evitar os inconvenientes da derivada não nula de uma constante e de condições fisicamente não interpretáveis, Caputo propôs, em seu livro (CAPUTO, 1969), uma nova definição para a derivada de ordem arbitrária, mais restritiva, baseada na definição de RL (CAMARGO; CAPELAS, 2015). O operador fracionário segundo Caputo distingue-se do operador de RL em relação à ordem em que os operadores integração e derivação são aplicados. Essa diferença gera consequências significativas no contexto das aplicações da derivada de ordem não inteira ao utilizá-la para encontrar modelos para fenômenos físicos.

Semelhantemente ao realizado em (12) mas de forma mais restritiva, seja $p = k - \nu$ com $p \in \mathbb{R}_+$, $0 < \nu \leq 1$ e $k = \lceil p \rceil$. Desta forma,

$$\begin{aligned} {}_a D_t^p f(t) &= {}_a D_t^{k-\nu} f(t) \\ &= {}_a D_t^{-\nu+k} f(t) \\ &= {}_a D_t^{-\nu} {}_a D_t^k f(t). \end{aligned}$$

Denotando ${}_a D_t^k f(t) = f^{(k)}(t)$, o operador derivada fracionária segundo Caputo é definido por (PODLUBNY, 1998)

$${}_a^C D_t^p f(t) = \frac{1}{\Gamma(k-p)} \int_a^t \frac{f^{(k)}(x)}{(t-x)^{p+1-k}} dx, \quad k-1 < p < k. \quad (16)$$

Para $p = k$, a derivada segundo Caputo é a convencional k -ésima derivada de $f(t)$. Observe que esta derivada é uma formulação em que as operações de derivada e integração aparecem na forma invertida da derivada fracionária segundo RL (12). Assim, vê-se em (16) que a derivada de ordem arbitrária, segundo Caputo, é a integral de ordem arbitrária de uma derivada de ordem inteira (CAMARGO; CAPELAS, 2015). A vantagem deste operador na solução de equações diferenciais fracionárias reside no fato de que as condições impostas podem ser escritas como derivadas de ordem inteira (CAMARGO; CAPELAS, 2015).

Para a derivada de Caputo de ordem p das funções $f(t) = (t-a)^\beta$ temos que se $\beta \in \{0, 1, \dots, k-1\}$ então a derivada de ordem k anula $f(t) = (t-a)^\beta$ e o resultado de ${}_a^{RL} D_t^{k-p}(0) = 0$. Se $\beta > k-1$, então

$$f^{(k-1)}(t) = \beta(\beta-1) \cdots (\beta-k+2)(t-a)^{\beta-k+1},$$

que é integrável em $[a, \infty)$. Além disso, $f^{(k)}(a) = 0$ para $k = 0, 1, \dots, k-1$ de tal forma

que ${}^C D_t^p f(t) = {}^{RL} D_t f(t)$. Logo, temos o seguinte resultado

$${}^C D_t^p f(t) = \begin{cases} 0, & \text{se } \beta \in \{0, 1, \dots, k-1\} \\ \frac{\Gamma(\beta+1)}{\Gamma(\beta+1-p)} (t-a)^{\beta-p}, & \text{se } \beta > k-1. \end{cases} \quad (17)$$

Anteriormente, quando calculamos a derivada de ordem $p > 0$ segundo RL, de $f(t) = (t-a)^\beta$ consideramos $\beta > -1$, enquanto que para a derivada de ordem $p > 0$ segundo Caputo desta mesma função $\beta > k-1$. A diferença deve-se ao fato da integral de RL de funções de potência ser convergente apenas para o expoente maior que -1 . Nesse caso, a potência do termo $d^k(t-a)^\beta/dt^k$ será maior que -1 sempre que $\beta > k-1$ (SALGADO, 2015).

Os trabalhos de RL, Caputo e dentre outros levaram às primeiras definições integro-diferenciais de ordem fracionária até o final do século XIX e início do século XX. Em 1938, Riesz introduziu a integração fracionária de funções de várias variáveis por meio de um operador do tipo potencial, que ficou conhecido como potencial de Riesz (SAMKO et al., 1993; PODLUBNY, 1998; HILFER, 2000; AGRAWAL, 2007). O caso unidimensional do operador de Riesz foi estudado por Weyl (SAMKO et al., 1993). O conhecido operador fracionário de Riesz-Weyl pode simplificar problemas quando se trabalha com o método das transformadas integrais.

2.1.5 Operador diferencial fracionário de Riesz-Weyl

O operador de Riesz-Weyl pode ser escrito partindo dos operadores diferenciais segundo RL e Caputo, tomando-se $a \rightarrow -\infty$. Este operador, como será visto adiante, mostra a vantagem de possuir uma transformada de Fourier simples (SAMKO et al., 1993; SERAFIM, 2015).

Assim, a derivada fracionária segundo Riesz-Weyl de ordem $p > 0$ de uma função f localmente integrável em $(-\infty, \infty)$ é definida por

$${}^{RW} D_x^p f(x) = \frac{1}{\Gamma(k-p)} \int_{-\infty}^x \frac{f^{(k)}(t)}{(x-t)^{p+1-k}} dt \quad k-1 < p < k. \quad (18)$$

Tomando $k = 2$ em (18) reescreve-se (SAMKO et al., 1993; CAMARGO; CAPELAS, 2015)

$${}^{RW} D_x^p f(x) = \frac{d^2}{dx^2} ({}^{RW} D_x^{-(2-p)} f(x)), \quad 1 < p < 2.$$

Para p inteiro, a derivada se reduz à derivada de ordem inteira como é esperado. Por exemplo, para $p = 2$ recupera-se o operador derivada de ordem dois

$${}_{-\infty}^{RW}D_x^2 f(x) = \frac{d^2}{dx^2} f(x).$$

Como mencionado anteriormente, cada um dos operadores integro-diferenciais possui sua vantagem quando aplicados a certos problemas. Por razões que ficarão claras mais a frente, utilizaremos as definições dos operadores fracionários segundo Caputo e segundo Riesz-Weyl.

2.2 Transformadas Integrais

O método das transformadas integrais se baseia em transformar o problema original linear que envolve operadores integrais e diferenciais em um problema algébrico em um espaço adjunto e, portanto, torna-se mais simples de ser solucionado (BOYCE; DIPRIMA, 1985).

Abordaremos, aqui, alguns aspectos de interesse das transformadas de Laplace e Fourier com o objetivo de utilizá-las posteriormente como ferramentas para a resolução de equações diferenciais parciais (EDP) sujeitas a condições adequadas. Uma vez que o problema de valor de contorno (PVC) com EDP a ser resolvido constitui-se como um problema de valor inicial no tempo e de contorno no espaço, utilizaremos o assim denominado método da justaposição de transformadas (COSTA et al., 2011) que, em nosso caso, se baseia em utilizar a transformada de Laplace para eliminar a dependência temporal ($t > 0$) e a transformada de Fourier para a parte espacial ($-\infty < x < \infty$).

2.2.1 A transformada de Laplace do operador fracionário de Caputo

Considere $f(t)$ e $g(t)$ funções denifidas no intervalo $I = 0 \leq t < \infty$. A transformada de Laplace de $f(t)$ de variável s é definida por

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

A convergência desta integral imprópria é garantida para uma classe ampla de funções chamadas admissíveis. Uma função $f : I \rightarrow \mathbb{R}$ é chamada admissível ou de ordem exponencial se for contínua por partes em I e se existirem constantes M e μ tais que para

todo $t \in I$,

$$|f(t)| < Me^{\mu t}.$$

Em outras palavras, a função $f(t)$ não deve crescer mais rápido que uma função exponencial quando $t \rightarrow \infty$ (BOYCE; DIPRIMA, 1985; PODLUBNY, 1998).

A dificuldade maior que ocorre ao se resolver um problema de valor inicial (PVI) pela técnica da transformada está na determinação da função $y = \phi(t)$ correspondente à transformada $\tilde{y}(s)$. Esse problema é conhecido como o problema da inversão da transformada de Laplace. Embora exista uma fórmula geral para a transformada de Laplace inversa, $\mathcal{L}^{-1}\{\tilde{y}(s); t\} = \phi(t)$, nossas funções são especiais o que torna difícil o cálculo da inversa por meio de uma fórmula fechada.

Em geral, a transformada de Laplace do produto de duas funções não é o produto das transformadas; em outras palavras, a transformada inversa de Laplace não se distribui em relação ao produto, mas transforma o produto em uma forma integral chamada produto de convolução ou, simplesmente, convolução (BOYCE; DIPRIMA, 1985). A esta propriedade se dá o nome de Teorema da Convolução. Desta forma, se $\tilde{f}(s)$ e $\tilde{g}(s)$ existem para $s > a \geq 0$ então

$$\mathcal{L}^{-1}\{\tilde{f}(s)\tilde{g}(s); t\} = h(t)$$

onde

$$h(t) = (f * g)(t) = \int_0^t f(t-t')g(t')dt' = \int_0^t f(t')g(t-t')dt' \quad (19)$$

é conhecida como a convolução de f e g .

Uma importante propriedade, que nos será útil devido a sua importância associada com as equações diferenciais, é a fórmula para a transformada de Laplace de uma derivada de ordem n , obtida a partir de n integrações por partes. Assim, sejam $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ e $n \in \mathbb{N}$. Suponha $f, f', \dots, f^{(n-1)}$ funções contínuas ou seccionalmente contínuas em qualquer intervalo $0 \leq t \leq A$. Suponha, ainda, f e as $(n-1)$ derivadas de ordem inteira admissíveis. Então (PODLUBNY, 1998; DAS, 2008),

$$\begin{aligned}\mathcal{L}\{f^{(n)}(t); s\} &= s^n \tilde{f}(s) - s^{(n-1)}f(0) - \dots - sf^{(n-2)}(0) - f^{(n-1)}(0) \\ &= s^n \tilde{f}(s) - \sum_{k=0}^{n-1} s^k f^{(n-k-1)}(0).\end{aligned}\quad (20)$$

É interessante notar que o operador integro-fractionário de RL (10) pode ser escrito como a convolução das funções $g(t) = t^{p-1}$ e $f(t)$ tomando $a = 0$

$${}_a^{RL}D_t^{-p}f(t) = \frac{1}{\Gamma(p)} \int_0^t (t-\tau)^{p-1} f(\tau) d\tau = (t^{p-1} * f)(t). \quad (21)$$

Por outro lado, a transformada de Laplace de t^{p-1} é dada por (PODLUBNY, 1998)

$$\tilde{g}(s) = \mathcal{L}\{t^{p-1}; s\} = \frac{\Gamma(p)}{s^{-p}}. \quad (22)$$

Portanto, valendo-se das equações (21) e (22), a transformada do operador integro-fractionário (10) de RL se reduz ao produto das transformadas (PODLUBNY, 1998),

$$\mathcal{L}\{{}_0^{RL}D_t^{-p}f(t); s\} = s^p \tilde{f}(s). \quad (23)$$

Seja $f(t)$ uma função definida em \mathbb{R}_+ tal que sua transformada, $\mathcal{L}\{f(t); s\} = \tilde{f}(s)$, exista para $s \geq c \in \mathbb{R}$. Se $p > 0$ com $n = \lceil p \rceil$, utilizando a transformada da convolução (19) e os operadores integro-diferenciais segundo RL definidos, respectivamente, em (10) e (12), então para $s > \max\{0, c\}$, a transformada de Laplace da derivada fractionária de RL é dada por (PODLUBNY, 1998)

$$\mathcal{L}\{{}_0^{RL}D_t^p f(t); s\} = s^p \tilde{f}(s) - \sum_{k=0}^{n-1} s^k \left[{}_0^{RL}D_t^{p-k-1} f(t) \right]_{t=0}, \quad n-1 \leq p < n, \quad (24)$$

desde que a integral e as derivadas de ordem não inteira existam em $t = 0$.

A aplicabilidade prática da transformada de Laplace da derivada segundo RL é limitada pela ausência de interpretação física para os valores das derivadas fractionárias de ordem inferior a p calculadas em $t = 0$. Elas corresponderiam a condições iniciais de um PVI que, por sua vez, exigem um forte conteúdo de natureza física. Até o momento, na literatura, tal interpretação não é conhecida (PODLUBNY, 1998).

Por sua vez, derivada de Caputo para $a = 0$ e $p > 0$ pode ser reescrita em termos da convolução entre a derivada n -ésima de uma função $f(t)$ e a função t^{n-p-1} como segue (SALGADO, 2015)

$${}_0^C D_t^p f(t) = \frac{(t^{n-p-1}) * f^{(n)}(t)}{\Gamma(n-p)}. \quad (25)$$

Desta forma, a transformada de Laplace da derivada de Caputo é obtida pela propriedade da transformada da convolução entre as funções t^{n-p-1} , cuja transformada para $n-p-1 > -1$ é dada por

$$\mathcal{L}\{t^{n-p-1}\} = \frac{\Gamma(n-p)}{s^{n-p}},$$

e a função $f^{(n)}(t)$.

Assim, para $f(t)$ uma função definida em \mathbb{R}_+ e diferenciável até ordem $n-1$ em $t > 0$, escrevendo a derivada de Caputo como em (25) e aplicando a transformada de Laplace, obtêm-se a transformada de Laplace da derivada fracionária segundo Caputo

$$\mathcal{L}\{{}_0^C D_t^p f(t)\} = s^p \tilde{f}(s) - \sum_{k=0}^{n-1} s^{p-k-1} f^{(k)}(0), \quad n-1 < p \leq n. \quad (26)$$

Diferentemente da equação (24) em que são calculadas em $t = 0$ um conjunto de derivadas de ordem fracionária, observe que nesta expressão estão envolvidos valores da função $f(t)$ e suas derivadas, aplicadas no ponto $t = 0$, para a qual existe uma interpretação física (por exemplo, $f(0)$ a posição inicial, $f'(0)$ velocidade inicial, $f''(0)$ aceleração inicial) diferente do encontrado para a transformada de Laplace da derivada de RL (24). Este é um fato útil na resolução de problemas aplicados que levam a equações diferenciais lineares fracionárias com coeficientes constantes e condição inicial com derivadas de ordem inteira (PODLUBNY, 1998). Assim, a vantagem do operador segundo Caputo é a existência de constantes de integração que surgem no meio do processo de solução de equações diferenciais, as quais são determinadas por condições iniciais e/ou de contorno que o problema possui e podem ser escritas como derivadas de ordem inteira.

2.2.2 A transformada de Fourier do operador diferencial fracionário de Riesz-Weyl

A transformada de Fourier é uma ferramenta poderosa para a análise, no espaço de frequências espaciais, de sistemas dinâmicos lineares (PODLUBNY, 1998).

A transformada exponencial de Fourier da função contínua $h(x)$, absolutamente integrável em $(-\infty, \infty)$ é definida por (PODLUBNY, 1998; CAMARGO; CAPELAS, 2015)

$$\mathcal{F}\{h(x); k\} = \hat{h}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} h(x) dx,$$

e recupera-se $h(x)$ utilizando-se a inversa da transformada de Fourier

$$h(x) = \mathcal{F}^{-1}\{\hat{h}(k); x\} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{h}(k) e^{-ikx} dk.$$

A convolução entre duas funções $h(x)$ e $g(x)$ definidas em $(-\infty, \infty)$, é definida por

$$h(x) * g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} h(x - x') g(x') dx' = \int_{-\infty}^{\infty} h(x') g(x - x') dx',$$

e o Teorema da Convolução associado tem a forma

$$\mathcal{F}\{h(x) * g(x); k\} = \hat{h}(k) \hat{g}(k) \quad (27)$$

supondo que $\hat{h}(k)$ e $\hat{g}(k)$ existem.

A transformada de Fourier de parâmetro k da n -ésima derivada de $h(x)$ com $-\infty < x < \infty$ é dada por

$$\mathcal{F}\{h^{(n)}(x); k\} = (-ik)^n \hat{h}(k). \quad (28)$$

Considere a integral de RL (10) com $a = -\infty$ e $0 < p < 1$. Assim,

$${}_{-\infty}^{RL} D_x^{-p} g(x) = \frac{1}{\Gamma(p)} \int_{-\infty}^x (x - \tau)^{p-1} g(\tau) d\tau, \quad 0 < p < 1.$$

Seja $h(t) = \frac{t^{p-1}}{\Gamma(p)}$. Calculando a transformada de Laplace de $h(t)$ obtêm-se

$$\mathcal{L}\left\{\frac{t^{p-1}}{\Gamma(p)}; s\right\} = \frac{1}{\Gamma(p)} \int_0^{\infty} t^{p-1} e^{-st} dt = s^{-p}, \quad 0 < p < 1.$$

Para $s = -ik$ com $k \in \mathbb{R}$ essa integral é convergente se $0 < p < 1$. Agora, a transformada de Fourier da função

$$h_+(x) = \begin{cases} \frac{x^{p-1}}{\Gamma(p)}, & \text{se } x > 0, \\ 0, & \text{se } x \leq 0. \end{cases}$$

é dada por

$$\mathcal{F}\{h_+(x); w\} = (-iw)^{-p} \quad 0 < p < 1.$$

Pode-se, assim, escrever integral fracionária de RL como a convolução de $h_+(x)$ e $g(x)$,

$${}^{RL}D_x^{-p}g(x) = h_+(x) * g(x),$$

e sua transformada de Fourier é dada por

$$\mathcal{F}\{{}^{RL}D_x^{-p}g(x); w\} = (iw)^{-p}\widehat{g}(w). \quad (29)$$

Observe que a transformada de Fourier da integral de Caputo também é dada por (29), uma vez que, neste caso, ambas são iguais.

Lembrando que para o operador diferencial segundo RL têm-se que $p > 0$ e $p = k - \nu$ com $k = \lceil p \rceil$. Assim, escreve-se

$$\begin{aligned} \mathcal{F}\{{}^{RL}D_x^{-p}g(x); k\} &= \mathcal{F}\{{}^{RW}D_x^{-(k-p)}g^{(k)}(x); k\} \\ &= \mathcal{F}\left\{\frac{1}{\Gamma(k-p)} \int_{-\infty}^x (x-\tau)^{(k-p)-1} g(\tau); k\right\}. \end{aligned}$$

Como esta última integral só é convergente se $k - 1 < p < 1$, então ${}^{RL}D_x^{-p}g(x)$ pode ser escrita como a seguinte convolução

$${}^{RL}D_x^{-(k-p)}g(x) = \frac{x^{(k-p)-1}}{\Gamma(k-p)} * g^{(k)}(x),$$

onde o primeiro termo só é diferente de zero para $x > 0$.

Desta forma, na discussão da equação de difusão fracionária, a parte espacial é convenientemente tratada com a derivada de Riesz-Weyl, em relação a sua transformada

de Fourier, por meio da expressão (MAINARDI, 1996; SAMKO et al., 1993; METZLER; KLAFTER, 2000; SERAFIM, 2015; CAMARGO; CAPELAS, 2015)

$$\mathcal{F}\{ {}_{-\infty}^{RW}D_x^\gamma g(x); k \} = \mathcal{F}\left\{ \frac{\partial^\gamma g(x)}{\partial |x|^\gamma}; k \right\} = -|k|^\gamma \widehat{g}(k), \quad (30)$$

com $1 < \gamma < 2$ e

$${}_{-\infty}^{RW}D_x^\gamma g(x) = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} |k|^\gamma \widehat{g}(k) e^{-ikx} dk.$$

2.3 Movimentos brownianos, *random walks* e difusão

2.3.1 Movimento em pequena escala

O movimento individual errático em pequena escala de partículas em um determinado meio é um fenômeno de transporte complexo bastante comum e de natureza diversa (METZLER; KLAFTER, 2000). Este tipo de fenômeno foi relatado pela primeira vez em 1785 pelo médico holandês Jan Ingenhousz, mais conhecido pela descoberta da fotossíntese, ao polvilhar carvão em pó em uma superfície contendo álcool e observar que as partículas moviam-se de forma aleatória devido à colisão entre as moléculas do álcool com os grãos do carvão vegetal (SHLESINGER; KLAFTER; ZUMOFEN, 1999).

Em homenagem ao botânico Robert Brown, por sua extensa investigação sobre o movimento realizado por partículas de grãos de pólen na água, a partir de 1827, este tipo de movimento individual e errático de partículas em pequena escala foi chamado de Movimento browniano (MB) (WANG; UHLENBECK, 1945).

Devido às interações e grande número de graus de liberdade em pequenas escalas, um MB pode ser descrito utilizando variáveis aleatórias ou probabilísticas por meio de um *random walk* (RW). Em um modelo simples tipo RW para um MB, a partícula realiza saltos de comprimento fixo Δx , em uma sequência de intervalos de tempo discretos $t = 0, \Delta t, 2\Delta t, \dots$ e em um sentido aleatório. Como cada salto é dado em uma sequência de intervalos de tempo Δt , podemos definir a distribuição de densidade de probabilidade (PDF) $u(x, t)$ de modo que a quantidade $u(x, t)\Delta x$ seja a probabilidade de encontrar a partícula entre as posições x e $x + \Delta x$ no instante de tempo t . Por uma questão de continuidade ou conservação da probabilidade, a probabilidade na posição x em $t + \Delta t$ deve ser a soma normalizada das probabilidades de haver estado entre $x - \Delta x$ e $x + \Delta x$ em t (SALINAS,

1997; LUCHKO, 2012). Assim,

$$u(x, t + \Delta t) = \frac{1}{2}u(x + \Delta x, t) + \frac{1}{2}u(x - \Delta x, t). \quad (31)$$

Considerando esta equação no limite, onde o movimento do conjunto de um número N de partículas é em grande escala, Δt e Δx são muito pequenos comparando-se com a dimensão do sistema observado e com o tempo de observação, de modo que as seguintes representações contínuas podem ser escritas

$$\begin{aligned} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{u(x, t + \Delta t) - u(x, t)}{\Delta t} &\sim \frac{\partial u}{\partial t}, \\ \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{u(x - \Delta x, t) + u(x + \Delta x, t) - 2u(x, t)}{\Delta x^2} &\sim \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}. \end{aligned} \quad (32)$$

Desta forma, subtraindo-se $u(x, t)$ em ambos os membros de (31) nesse limite e considerando os limites de grande escala em (32), obtemos a equação de difusão clássica (METZLER; KLAFTER, 2000)

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \quad (33)$$

onde $D = \frac{\Delta x^2}{2\Delta t}$ é o coeficiente de difusão.

2.3.2 Modelo de *random walk* de tempo contínuo

Partículas em movimentos erráticos podem apresentar uma dinâmica mais complexa provocada, por exemplo, por interações com estados locais do meio ou interações de longo alcance com outras partículas em movimento. Para estes casos, é necessário generalizar o conceito de RW para produzir uma descrição do fenômeno. Em 1965, Montroll e Weiss (MONTROLL; WEISS, 1965) introduziram uma generalização para o RW, o chamado RW de tempo contínuo (CTRW) (METZLER; KLAFTER, 2000).

Um modelo de CTRW é baseado na idéia de que tanto o comprimento de um salto dado pela partícula, como o tempo de espera entre um salto e outro não são constantes mas vinculados a uma PDF $\Psi(x, t)$ que contém toda a informação sobre o movimento da partícula (METZLER; KLAFTER, 2000). Desta forma, a partícula dá um passo de comprimento δx na direção x , com sentido arbitrário, em um dado intervalo de tempo entre t e $t + dt$, observe na Figura (2). Assim, $\Psi(x, t)$ é a probabilidade de que a partícula dê um salto de comprimento x e com o tempo de espera t . Sejam $\lambda(x)$ e $\psi(t)$ as funções

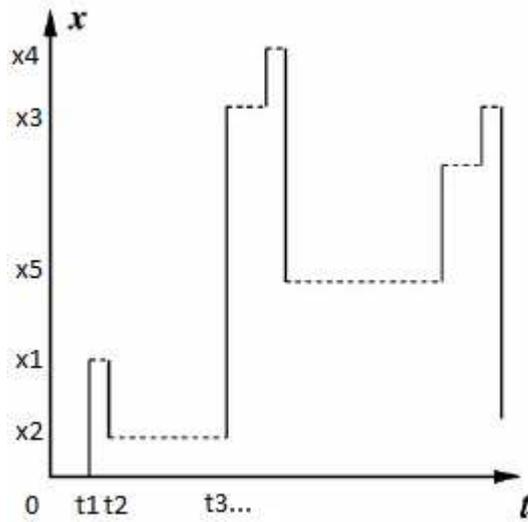


Figura 2 – Diagrama de x por t de um CTRW unidimensional onde tanto os saltos quanto os tempos de espera são variáveis aleatórias obtidas a partir de uma PDF (METZLER; KLAFTER, 2000).

de distribuição de probabilidades marginais, respectivamente, para as variáveis aleatórias comprimento dos saltos e tempo de espera entre os saltos. Assim,

$$\lambda(x) = \int_0^{\infty} \Psi(x, t) dt,$$

e

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

nas quais $\lambda(x)dx$ é a probabilidade de um salto ser dado no intervalo entre x e $x + dx$ e, semelhantemente, $\psi(t)dt$ é a probabilidade de um tempo de espera estar entre t e $t + dt$ (METZLER; KLAFTER, 2000). Desta forma, tanto os comprimentos dos saltos como os tempos de espera são variáveis aleatórias obtidas, respectivamente, a partir das distribuições $\lambda(x)$ e $\psi(t)$ (SERAFIM, 2015).

Pela continuidade das variáveis aleatórias comprimento de salto, δx , e tempo de espera entre os saltos, δt , elas podem ser ou não dependentes uma da outra. Consideremos o caso em que estas variáveis são independentes. Então, a PDF $\Psi(x, t)$ pode ser escrita de forma desacoplada,

$$\Psi(x, t) = \lambda(x)\psi(t). \quad (34)$$

Também por causa da continuidade, pode acontecer que depois de um certo tempo de espera a partícula dê um salto de comprimento igual a zero, ou seja, permanecer em sua posição. Sejam $\phi(t)$ a probabilidade da partícula permanecer na mesma posição por um tempo t e $\int_0^t \psi(t')dt'$ a probabilidade de um salto de comprimento não nulo ser dado entre 0 e t . Então

$$\phi(t) = 1 - \int_0^t \psi(t')dt'. \quad (35)$$

Seja $\eta(x, t)$ a probabilidade por unidade de deslocamento e de tempo de chegada da partícula à posição x no tempo t . Esta probabilidade pode ser escrita de forma recursiva em termos da soma de todas as probabilidades de chegadas em x' e x em t' e t , da seguinte maneira,

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

onde $\delta(x)\delta(t)$ é a condição inicial escolhida para o RW. Desta forma, a PDF $u(x, t)$ da partícula se encontrar em x no tempo t é dada contabilizando todas as probabilidades da PDF de chegada $\eta(x, t)$ e da PDF de permanecer na mesma posição, ou seja,

$$\begin{aligned} u(x, t) &= \int_0^{\infty} \eta(x, t - t'')\phi(t'')dt'' \\ &= \int_0^{\infty} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \eta(x', t - t'')\Psi(x - x', t - t' - t'')dt' dx' + \delta(x)\delta(t - t'') \right] \phi(t'')dt''. \end{aligned}$$

Trocando a ordem de integração e fazendo $T = t' + t''$, obtemos

$$\begin{aligned} u(x, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \left[\left(\int_0^{\infty} \eta(x', T - t'')\phi(t'')dt'' \right) \Psi(x - x', t - T) + \phi(t)\delta(x) \right] dT dx', \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} u(x', T)\Psi(x - x', t - T) + \phi(t)\delta(x) dT dx'. \end{aligned}$$

Aplicando a transformada de Laplace na variável temporal,

$$\begin{aligned} \tilde{u}(x, s) &= \int_0^{\infty} dt \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx' \int_0^{\infty} u(x', T)\Psi(x - x', t - T)dT + \phi(t)\delta(x) \right] e^{-st} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} u(x', s)\Psi(x - x', s)dx' + \phi(s)\delta(x), \end{aligned}$$

e a transformada de Fourier na variável espacial, obtêm-se

$$\begin{aligned}\widehat{u}(k, s) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\int_{-\infty}^{\infty} u(x', s) \Psi(x - x', s) dx' + \phi(s) \delta(x) \right] e^{ikx} \\ &= \widehat{u}(k, s) \Psi(k, s) + \tilde{\phi}(s) \widehat{u}(k, 0),\end{aligned}$$

onde $\mathcal{F}\{\delta(x); k\} = \widehat{u}(k, 0)$.

Agora, aplicando a transformada de Laplace em (35), segue que

$$\tilde{\phi}(s) = \frac{1}{s} - \frac{\tilde{\psi}(s)}{s}.$$

Com isso, utilizando (34) a PDF $u(x, t)$ de grande escala da posição do conjunto de um número N de partículas é escrita no espaço Fourier-Laplace pela relação algébrica

$$\widehat{u}(k, s) = \frac{1 - \tilde{\psi}(s)}{s} \frac{\widehat{u}(k, 0)}{(1 - \widehat{\Psi}(k, s))}, \quad (36)$$

conhecida como fórmula de Montroll-Weiss (MONTROLL; WEISS, 1965).

O segundo momento, $\langle x^2(t) \rangle$, de $u(x, t)$ é dado utilizando a função característica (40) e a fórmula de Montroll-Weiss (36) (SHLESINGER; KLAFTER; WONG, 1982)

$$\begin{aligned}\langle x^2(t) \rangle &= - \left. \frac{\partial^2 \widehat{u}(k, t)}{\partial k^2} \right|_{k=0} \\ &= -\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{\partial^2 \Psi(k, s) / \partial k^2}{[1 - \Psi(k, s)]^2} \frac{1 - \psi(s)}{s} \right\}\end{aligned} \quad (37)$$

com $k = 0$.

2.3.3 Dinâmica das médias e limite de larga escala

Entre a descrição de um MB em pequena escala dada por um modelo baseado em RW e em grande escala dada uma equação diferencial parcial probabilística para a distribuição de probabilidades, existe uma descrição da evolução do sistema no tempo t que pode ser feita em uma escala intermediária com uma amostra de N partículas suficientemente grande.

De acordo com o Teorema Central do Limite (TCL) (MONTGOMERY, 2003; SHLESINGER; KLAFTER; WONG, 1982; TSALLIS, 2009) se a convergência tanto da variância da população, σ^2 , como da média da população, μ , são observadas então a PDF em grande escala é a gaussiana. Assim, supondo que a variância populacional seja finita, $\sigma^2 < \infty$, e a média $\mu = 0$ então pelo TCL a variável aleatória soma X_n de n variáveis aleatórias,

$$X_n = x_1 + \dots + x_n, \quad (38)$$

converge em distribuição para a PDF gaussiana quando $n \rightarrow \infty$, ou seja,

$$\begin{aligned} f(x) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \text{Prob}[x < X_n/\sqrt{n} < x + dx] \\ &= (2\pi\sigma^2)^{-1/2} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}. \end{aligned}$$

Impomos que $\mu = 0$, caso contrário, definimos uma nova variável $y = x - \mu$ que possui média zero. Desta forma, neste trabalho supomos sempre que $\mu = 0$.

A transformada de Fourier é usada na área da Estatística para definir a função característica (FELLER, 2008). Assim, se X_n possui função de distribuição $\lambda(x)$, a função característica de X_n , dada por

$$\widehat{\lambda}(k) = \langle e^{itX} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} f(x) dx, \quad (39)$$

é a definição mais natural no contexto da teoria da probabilidade (CORDEIRO, 1999) e vista como a esperança de uma função exponencial complexa de uma variável aleatória. Por isso ela é chamada de função característica da variável contínua (MONTGOMERY, 2003).

Representando $\widehat{\lambda}(k)$ por meio de uma série de potências e distribuindo as médias, temos,

$$\begin{aligned} \widehat{\lambda}(k) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n k^n \langle x^n \rangle}{n!} \\ &= 1 - i\langle x \rangle k - \frac{1}{2} \langle x^2 \rangle k^2 + \dots \\ \langle x^n \rangle_{\lambda} &= i^n \left. \frac{\partial^n \widehat{\lambda}}{\partial k^n} \right|_{k=0}, \end{aligned} \quad (40)$$

onde $\langle x^n \rangle_\lambda$ é o n -ésimo momento central relativo à distribuição $\lambda(x)$. Observe que $\widehat{\lambda}(k)$ é analítica se, e somente se, todos os momentos existirem e forem finitos.

Adicionalmente, considere em (38) a PDF $\psi(t)$ que governa o tempo de espera entre os eventos x_i e estudemos, então, a soma

$$X_{n(t)} = x_1 + \dots + x_{n(t)},$$

onde a variável aleatória $n(t)$ é o número de eventos ocorridos no intervalo de tempo $[0, t]$.

A transformada de Laplace é análoga à transformada de Fourier de muitas maneiras. Assim como a função geradora dos momentos, $\widehat{\lambda}(k)$, codifica os momentos da PDF $\lambda(x)$ da variável aleatória $-\infty < x < \infty$, a função $\tilde{\psi}(s)$ codifica os momentos para a PDF $\psi(t)$ da variável aleatória $t > 0$, supondo que eles existem. O que determina qual das transformadas utilizar são os limites de integração das variáveis espacial e temporal, $-\infty < x < \infty$ e $t > 0$. Assim,

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(s) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n s^n \langle t^n \rangle}{n!} \\ \langle t \rangle_\psi &= 1 - \langle t \rangle s + \frac{1}{2} \langle t^2 \rangle s^2 + \dots \end{aligned} \quad (41)$$

Desta forma, como $\psi(t)$ possui média de tempo de espera entre os eventos ou primeiro momento central $\langle t \rangle_\psi = \tau$ e $\langle x^2 \rangle_\lambda = \sigma^2$ ambos finitos, segue novamente pelo TCL que a PDF em grande escala é a gaussiana.

Assim, considerando um CTRW em que todos os momentos das PDFs do tempo de espera entre os saltos $\psi(t)$ e do comprimento dos saltos $\lambda(x)$ existem, suas transformadas de Laplace e Fourier possuem, respectivamente, as seguintes expansões

$$\tilde{\psi}(s) = 1 - \tau s + \frac{1}{2} \tau^2 s^2 + \dots = 1 - \tau s + \mathcal{O}(s^2), \quad (42)$$

e

$$\widehat{\lambda}(k) = 1 - \frac{1}{2} \sigma^2 k^2 + \frac{1}{24} \sigma^4 k^4 + \dots = 1 - \frac{1}{2} \sigma^2 k^2 + \mathcal{O}(k^4). \quad (43)$$

Substituindo (42) e (43) na fórmula de Montroll-Weiss (36) obtêm-se no espaço Fourier-Laplace,

$$\widehat{\tilde{u}}(k, s) = \frac{\tilde{u}(k, 0)}{s + Dk^2},$$

onde

$$D = \frac{\sigma^2}{2\tau}. \quad (44)$$

Como

$$\mathcal{L}\{\partial u(x, t)/\partial t\} = s\tilde{u}(x, s) - \tilde{u}(x, 0)$$

e

$$\mathcal{F}\{\partial^2 u(x, t)/\partial x^2; k\} = -k^2\widehat{u}(k, t),$$

tomando as inversas de Laplace e de Fourier e considerando como condição inicial $u(x, 0) = \delta(x)$ a função delta de Dirac, recuperamos a equação clássica de difusão normal que descreve o MB em grande escala (49).

Assim, o MB evolui segundo uma difusão clássica caracterizada pela variância amostral aumentando de forma linear com o tempo

$$\langle x^2(t) \rangle = 2Dt. \quad (45)$$

A escala intermediária acontece quando a amostra possui um número N de partículas e um tempo t suficientemente grandes. Neste caso de MB clássico, o limite entre as escalas é descrito pelo TCL. Sob condições de suficiência para a convergência dos parâmetros de escala intermediária τ e σ^2 , respectivamente, das PDFs dos tempos de espera e dos deslocamentos das partículas da população, o TCL garante que o histograma de posições em grande escala de uma amostra das N partículas tem com limite uma PDF gaussiana.

2.3.4 O comportamento assintótico de longo alcance

Vimos que, em pequena escala, um MB clássico pode ser modelado via um CTRW no qual a partícula realiza deslocamentos espaciais e tempos de espera entre os deslocamentos aleatórios segundo, respectivamente, as PDFs $\lambda(x)$ e $\psi(t)$ (SHLESINGER; KLAFTER, 1986). De acordo com o TCL, se os parâmetros de pequena escala, segundo

momento σ^2 da PDF $\lambda(x)$ e primeiro momento τ da PDF $\psi(t)$ forem convergentes, então o histograma de posições de uma amostra de N partículas é descrita em grande escala por uma PDF gaussiana. No entanto, sistemas com ocorrência frequente de grandes saltos ou deslocamentos ou de longos tempos de espera entre os saltos podem não ter variâncias ou média temporal convergentes, exibindo um comportamento anômalo de MB (METZLER; KLAFTER, 2000).

Do ponto de vista de pequenas escalas, desvios do MB clássico podem ocorrer devido a interações de longo alcance entre as partículas, ou interações entre as partículas e o ambiente (SOKOLOV; KLAFTER, 2005). Em interações com o ambiente, as partículas em RW podem ter seus deslocamentos influenciados por estados locais desse ambiente e apresentar probabilidade significativamente aumentada de ter saltos maiores ou menores do que no clássico MB. Alternativamente, podem ocorrer grandes tempos de espera entre um deslocamento e outro devido às condições do ambiente (KLAFTER; SHLESINGER; ZUMOFEN, 1996). Já, no caso de existência de interações entre as partículas, a interação entre partículas vizinhas pode influenciar o comprimento do salto, bem como o tempo de espera entre os saltos, caracterizando correlações entre as partículas (TSALLIS; LENZI, 2002). Estes tipos de ocorrências frequentes são comumente associadas às chamadas PDFs de cauda pesada para os deslocamentos da partícula (SHLESINGER; ZASLAVSKY; FRISCH, 1995).

Observe na figura (3) o RW de uma partícula gerado com variável aleatória comprimento de saltos δx segundo, respectivamente, as funções de distribuição normal (figura à direita) (50) e de Cauchy (figura à esquerda). A função de distribuição segundo Cauchy não possui média e nem variância definidas. Neste caso, nota-se que a partícula realiza grandes deslocamentos com uma frequência relativamente alta.

Têm-se, portanto, que o primeiro momento da função distribuição do tempo de espera entre os saltos τ e o segundo momento da função de distribuição do comprimento de saltos σ^2 são quantidades de pequena escala que podem influenciar no tipo de PDF em grande escala, caso sejam finitas ou não. Assim, pode-se obter um comportamento não gaussiano adotando um dos seguintes casos

Caso 1. Uma função de distribuição para a variável aleatória espacial x com segundo momento infinito, $\sigma^2 \rightarrow \infty$.

Caso 2. Uma função de distribuição para a variável aleatória temporal t com primeiro momento infinito, $\tau \rightarrow \infty$.

Caso 3. Funções de distribuição para a variável aleatória x e para a variável aleatória t ambos infinitos, $\sigma^2 \rightarrow \infty$ e $\tau \rightarrow \infty$.

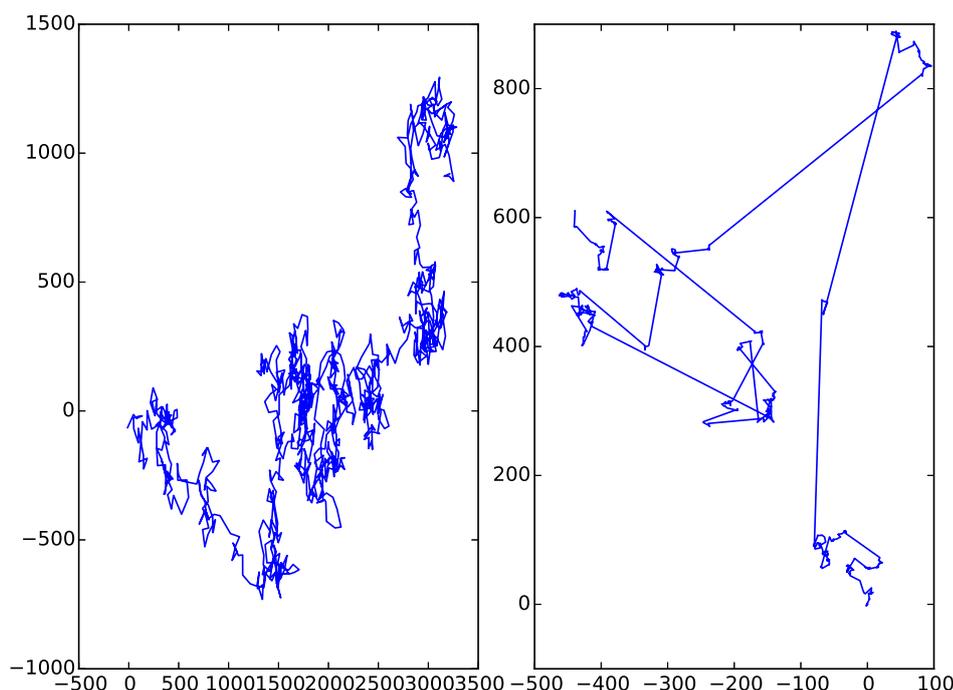


Figura 3 – *Random walks* gerados com variáveis aleatórias ângulo e comprimento de saltos segundo, respectivamente, as PDFs uniforme e normal (figura à direita), Cauchy (figura à esquerda).

Diante disso, as condições de suficiência do TCL não são verificadas e a classe resultante de PDFs precisa ser ampliada (FISCHER, 2010; KOROLIUK, 2015). Generalizações do TCL são obtidas enfraquecendo estas condições de convergência (GNEDENKO; KOLMOGOROV, 1956; GILLIS; WEISS, 1970; FELLER, 2008; TSALLIS, 2009).

Entre as muitas generalizações encontra-se o TCL generalizado de Lévy-Gnedenko (GNEDENKO; KOLMOGOROV, 1956; GILLIS; WEISS, 1970; FELLER, 2008). Paul Pierre Lévy (LÉVY, 1925) estudou o primeiro caso e mostrou que, dada a soma de n variáveis aleatórias X_n (38), se $\lambda(x)$ da variável aleatória $-\infty < x < \infty$ é tal que

$$\lambda(x) \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} \text{Prob}(x < X_n/n^{1/\gamma} < x + dx),$$

a PDF $\lambda(x)$ possui, no espaço Fourier, a seguinte forma (LUCHKO, 2012)

$$\widehat{\lambda}(k) = e^{-b|k|^\gamma}, \quad 0 < \gamma \leq 2, \quad (46)$$

com b uma constante real e positiva e $\langle x \rangle = 0$. Para $\gamma = 2$ tem-se σ^2 finita e recupera-se a PDF gaussiana. Para $0 < \gamma < 2$, $\lambda(x)$ possui $\sigma^2 \rightarrow \infty$ sendo conhecida apenas em termos de séries infinitas no limite assintótico $t \rightarrow \infty$ (FELLER, 2008). Exemplos de PDFs

com funções de distribuição $\lambda(x)$ onde $\sigma^2 \rightarrow \infty$ são os chamados voos de Lévy. Assim, o TCL generalizado de Levy-Gnedenko é obtido por meio de condições assintóticas sobre distribuições segundo lei de potência

$$\lambda(x) = \mathcal{F}^{-1} \left\{ \widehat{\lambda}(k); x \right\} = \frac{1}{|x|^\gamma}, \quad 0 < \gamma \leq 2.$$

O segundo caso, foi discutido por Feller (FELLER, 2008) e em seguida analisado por Montroll e Scher (SCHER; MONTROLL, 1975; MONTROLL; SCHER, 1973; METZLER; KLAFTER, 2000), considerando uma distribuição do tipo Pareto-Lévy para a variável aleatória $t > 0$

$$\psi(t) \sim t^{-1-\alpha}, \quad 0 < \alpha < 1. \quad (47)$$

Têm-se para esta PDF que $\tau \rightarrow \infty$ (METZLER; KLAFTER, 2000). Neste tipo de RW $\psi(t)$ é uma distribuição do tempo de espera entre dois eventos consecutivos possui uma característica de cauda pesada, fazendo com que o tempo médio τ seja divergente. Apesar de σ^2 de $\psi(t)$ ser finito as partículas se difundem de forma não linear com o tempo, de maneira mais lenta do que poderiam no caso de uma difusão clássica (SERAFIM, 2015).

O terceiro caso, ou seja, funções de distribuição com $\tau \rightarrow \infty$ e $\sigma^2 \rightarrow \infty$, foi estudado por Montroll e West (MONTROLL; WEST, 1979) e por Weiss e Rudin (MONTROLL; WEISS, 1965). Nos restringiremos neste trabalho aos primeiro e segundo casos.

Uma vez que é do nosso interesse o estudo de processos dinâmicos, precisamos ter em mente que quando há interações de longo alcance entre as partículas, podem ocorrer eventos raros de deslocamentos e de tempos de espera. Recentemente, alguns resultados sobre o TCL foram obtidos para estas situações fortemente correlacionadas em cenários relacionados à mecânica estatística não extensiva de Tsallis (TSALLIS; BUKMAN, 1996; MENDES et al., 2017). Nestes casos, o TCL é generalizado obedecendo condições de convergência sob as definidas q -médias e q -variância (UMAROV; CONSTANTINO; STEINBERG, 2008; TSALLIS; BUKMAN, 1996). Esta situação será abordada mais à frente.

Em todos os processos acima, a descrição da dinâmica de uma amostra de N partículas, que equivale a uma escala intermediária, apresenta um comportamento anômalo tal que a variância evolui em uma lei de potência geral com o tempo. Nesta escala, este é um atributo crítico de uma partícula que participa de um processo de MB anômalo. Ela apresenta um desvio na dependência linear do tempo do deslocamento quadrático médio (LUCHKO, 2012).

Assim, pode-se distinguir a difusão, de modo geral, pelo deslocamento médio quadrático proporcional à lei de potência

$$\langle x^2(t) \rangle = 2D_\mu t^\mu \quad (48)$$

onde se $\mu = 1$ é a difusão clássica e se $\mu \neq 1$ a difusão é considerada anômala. Observe a tabela (1) os tipos de processos difusivos sob esta classificação.

Tabela 1 – $\langle x^2(t) \rangle$ para a classificação dos processos difusivos.

Processo difusivo	μ
Subdifusão	$\mu < 1$
Difusão normal	$\mu = 1$
Superdifusão	$\mu > 1$

2.3.5 Difusão: movimento em grande escala

Desde 1905, o MB tornou-se o exemplo canônico de um processo aleatório. Na verdade, Louis Bachelier em sua tese em 1900 sobre flutuações no mercado de ações derivou, de forma independente, várias propriedades matemáticas do movimento browniano, incluindo a equação para a probabilidade, $u(x, t)$, de encontrar uma partícula browniana na posição x no tempo t , quando esta parte da origem $u(x, 0)$ (SHLESINGER; KLAFTER; ZUMOFEN, 1999), dada por

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}, \quad (49)$$

com solução gaussiana

$$u(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-x^2/4Dt} \quad (50)$$

e $\langle x^2(t) \rangle = 2Dt$. Esta equação de difusão já era bem conhecida como a equação do calor de Fourier e Bachelier ficou surpreso da probabilidade poder se difundir da mesma maneira que o calor. Observe que o coeficiente de difusão, D , em (49) possui dimensão $[x^2]/[t]$ (SHLESINGER; KLAFTER; ZUMOFEN, 1999).

Estamos interessados, no entanto, em gerar processos baseados em CTRW em que τ ou σ^2 sejam divergentes, desviando em grande escala do comportamento gaussiano (50). Nestes casos como fazer a expansão em séries de potências, no espaço Laplace e Fourier, das distribuições $\tilde{\psi}(s)$ e de $\hat{\lambda}(k)$?

Primeiro, trataremos as correlações de longo alcance onde as correlações se devem às interações com as condições do ambiente não entre as partículas. Nestes tipos de correlações espera-se que a dinâmica em grande escala seja dada por modelos lineares (METZLER; NONNENMACHER, 2002; REYNOLDS, 2015). Na seção seguinte, abordaremos os fenômenos de interações de longo alcance entre as partículas com seu modelo não linear em grande escala (TSALLIS; LENZI, 2002).

Como mencionado anteriormente, Lévy questionou como proceder quando σ^2 fosse divergente apontando, assim, a necessidade de uma generalização para o TCL. Se a variância de cada salto é infinita então a variância de n saltos também é infinita, implicando que a distribuição da soma de n saltos possui uma propriedade similar a de um único salto (fractal) (BOUCHAUD; GEORGES, 1990; GILLIS; WEISS, 1970; MAINARDI, 1996; SHLESINGER; KLAFTER; WONG, 1982).

Lévy encontrou a resposta na transformada de Fourier de $\lambda(x)$ que possui a forma dada por (46) onde, para $\gamma = 2$, recupera-se a gaussiana e, para $\gamma = 1$, a distribuição de Cauchy. Para $1 < \gamma < 2$ os momentos espaciais de $\lambda(x)$ são infinitos. Apesar de $\hat{\lambda}(k)$ possuir uma forma simples, obter $\lambda(x)$ diretamente por meio de inversão analítica não é, de modo geral, simples (SHLESINGER; KLAFTER, 1986). Os momentos infinitos estão associados à velocidade de cada segmento da trajetória do voo. Isso define um processo de RW segundo Lévy (MALLAMACE; STANLEY, 1997; METZLER; KLAFTER, 2000).

Neste caso escreve-se uma expansão de leis de potências de k considerando o limite onde está a informação sobre o comportamento assintótico de grandes distâncias $k \rightarrow 0$, obtendo-se (METZLER; KLAFTER, 2000; LUCHKO, 2012)

$$\hat{\lambda}(k) \sim 1 - \sigma^\gamma |k|^\gamma, \quad 1 < \gamma < 2. \quad (51)$$

Para τ finito tomamos, a partir de (42),

$$\tilde{\psi}(s) \sim 1 - \tau s.$$

Substituindo na fórmula de Montroll-Weiss (36) temos

$$\hat{u}(k, s) = \frac{\hat{u}(k, 0)}{s + D_\gamma |k|^\gamma} \quad (52)$$

onde

$$D_\gamma = \frac{\sigma^\gamma}{\tau}, \quad (53)$$

é o coeficiente de superdifusão. Sabendo que as transformadas de Fourier e Laplace, respectivamente, da derivada fracionária segundo Riesz-Weyl para $1 < \gamma < 2$ (30) e da derivada inteira de primeira ordem (26), são dadas por

$$\begin{aligned} \mathcal{F} \{ \partial u(x, t) / \partial |x|^\gamma; k \} &= -|k|^\gamma \hat{u}(k, t), \\ \mathcal{L} \{ \partial u(x, t) / \partial t; s \} &= s\tilde{u}(x, s) - \tilde{u}(x, 0). \end{aligned}$$

Tomando as transformadas inversas de Laplace e Fourier de (52), e considerando como condição inicial a função delta de Dirac, $u(x, 0) = \delta(x)$, encontramos

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = D_\gamma \frac{\partial^\gamma u(x, t)}{\partial |x|^\gamma} \quad (54)$$

a equação de difusão linear fracionária espacial (EDFE) utilizada como modelo, em grande escala, para a superdifusão (LUCHKO, 2012; ARAFA; RIDA, 2009; BOUCHAUD; GEORGES, 1990; GILLIS; WEISS, 1970; MALLAMACE; STANLEY, 1997; GORENFLO et al., 2002; REYNOLDS, 2015).

Seja, agora, o caso conhecido como RW de tempo fractal (MALLAMACE; STANLEY, 1997) em que $\tau \rightarrow \infty$ e σ^2 é finito (METZLER; KLAFTER, 2000) com comportamento assintótico de longo tempo de espera entre os saltos no limite difusivo, $x \rightarrow \infty$ e $t \rightarrow \infty$. Para isso, pode-se considerar a PDF $\psi(t)$ como em (47) e escreve-se

$$\psi(t) \sim \left(\frac{\tau}{t} \right)^{1+\alpha}, \quad 0 < \alpha < 1,$$

que possui, no limite assintótico difusivo do espaço Laplace, $s \rightarrow 0$, a seguinte forma (METZLER; KLAFTER, 2000; LUCHKO, 2012)

$$\tilde{\psi}(s) \sim 1 - (\tau s)^\alpha, \quad 0 < \alpha < 1. \quad (55)$$

Como σ^2 finito, utilizando (43) temos

$$\hat{\lambda}(k) = 1 - \frac{\sigma^2}{2} k^2.$$

Substituindo $\tilde{\psi}(s)$ e $\hat{\lambda}(k)$ na fórmula de Montroll-Weiss (36) obtêm-se

$$\hat{u}(k, s) = \frac{s^{\alpha-1} \hat{u}(k, 0)}{s^\alpha + D_\alpha k^2}, \quad (56)$$

onde

$$D_\alpha = \frac{\sigma^2}{2\tau^\alpha} \quad (57)$$

é o coeficiente de subdifusão.

Utilizando (26) com $0 < \alpha < 1$ e aplicando as inversas das transformadas de Laplace e Fourier em (56) com ${}^C D_t^\alpha = \partial^\alpha / \partial t^\alpha$, a derivada fracionária de Caputo e condição inicial a função delta de Dirac, $u(x, 0) = \delta(x)$, segue que

$$\frac{\partial^\alpha u(x, t)}{\partial t^\alpha} = D_\alpha \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}, \quad 0 < \alpha < 1, \quad (58)$$

a equação de difusão linear fracionária temporal (EDFT) utilizada como modelo, em grande escala, para a subdifusão (GORENFLO et al., 2002; METZLER; KLAFTER, 2000; POLUBNY, 1998).

Concluimos esta seção destacando que pode-se controlar simulações de processos difusivos baseados em um CTRW utilizando o seguinte critério de convergência ou divergência das PDFs do tempo de espera entre os saltos, $\psi(t)$, e do comprimento dos saltos, $\lambda(x)$:

Critério 1. Se $\tau \rightarrow \infty$ e σ^2 finito o processo é subdifusivo.

Critério 2. Se τ e σ^2 são ambos finitos o processo é de difusão normal.

Critério 3. Se τ é finito e $\sigma^2 \rightarrow \infty$ o processo é superdifusivo.

Salientamos, ainda, que não é importante quais são as distribuições $\psi(t)$ e $\lambda(x)$ adotadas em qualquer um dos casos, desde que τ e σ^2 respeitem o critério de convergência ou divergência para cada um deles.

Aplicando \log_2 em ambos os lados de (48) obtemos uma relação entre as escalas de tempo e da dispersão da variância com os parâmetros em grande escala, expoente de

difusão e coeficiente de difusão. Assim, para a dispersão da população de partículas dada, em um espaço de grandes escalas $\log_2 t \times \log_2 \langle x^2(t) \rangle$, temos a reta

$$\log_2 \langle x^2(t) \rangle = \mu \log_2 t + \log_2(2D_\mu), \quad (59)$$

de coeficientes angular μ e linear $\log_2(2D_\mu)$. Os parâmetros μ e D_μ são os parâmetros de medida para a dispersão das partículas.

2.4 Distribuições de probabilidades geradas pela equação de difusão generalizada

Como apresentado na seção anterior, alguns processos apresentam em pequena escala MBs anômalos e, em grande escala, um movimento coletivo tipo difusão anômala. Estes sistemas apresentam como distribuições limite funções de dependência espaço-temporais não gaussianas. Em particular, os sistemas estudados (fenômenos onde o movimento das partículas é influenciado pelas condições do ambiente) possuem como distribuições associadas as soluções das EDPs lineares fracionárias (54) e (58). Por outro lado, processos estocásticos em que não há interações ou correlações de longo alcance entre seus entes em pequena escala com médias de tempos entre deslocamentos e variância de deslocamentos finita, apresentam como movimento coletivo a difusão normal com a equação de difusão clássica (49).

Agora, em fenômenos de interação de longo alcance entre as partículas espera-se que a grande escala associada ao modelo dinâmico seja não linear, surgindo uma classe de equações de difusão generalizadas pela inclusão de não linearidade na equação diferencial parcial (BOLOGNA; TSALLIS; GRIGOLINI, 2000; LENZI et al., 2003; TSALLIS, 2009). Para esta classe de equações, o TCL generalizado pela q -gaussiana no limite para grandes números tende em probabilidade para as distribuições estáveis q -gaussianas, obedecendo condições de convergência sob as definidas q -médias e q -variância (UMAROV; CONSTANTINO; STEINBERG, 2008; TSALLIS; BUKMAN, 1996). Assim, processos estocásticos com difusão correlacionada podem ser descritos por equações de Fokker-Planck não lineares como a equação de meios porosos (LENZI et al., 2003).

Unificando estes comportamentos, é possível descrever uma extensa classe de processos difusivos por meio de generalizações da equação de Fokker-Planck dada por uma equação de difusão não linear (TSALLIS, 1988; KLAFTER; ZUMOFEN; BLUMEN, 1993).

Considere, desta forma, a equação de difusão generalizada fracionária não linear

$$\frac{\partial^\alpha u(x, t)}{\partial t^\alpha} = D_{\alpha\gamma q} \frac{\partial^\gamma u(x, t)^{2-q}}{\partial |x|^\gamma} \quad (60)$$

$$\begin{cases} u_t(0, t) = 0, \\ u(\pm\infty, t) = 0, \end{cases} \quad t > 0, \quad \text{CC - Condições de contorno homogêneas,} \quad (61)$$

$$u(x, 0) = f(x) \quad -\infty < x < \infty, \quad \text{CI - Condições iniciais.} \quad (62)$$

onde $u_t(0, t) = \partial u(0, t)/\partial t$, formando um problema de valor de contorno (PVC). Os parâmetros ordens das derivadas fracionárias, α e γ , e o parâmetro de não linearidade, q , podem variar em $0 < \alpha < 1$, $1 < \gamma < 2$ e $1 < q < 2$. Para $\alpha = 1$, $\gamma = 2$ e $q = 1$ recupera-se a equação de difusão normal (49) com $D_{121} = D = \frac{\sigma^2}{2\tau}$ o coeficiente de difusão normal (44).

As PDFs soluções do PVC acima são os modelos que descrevem os processos (voos) difusivos anômalos, ou seja, a subdifusão e a superdifusão, bem como a difusão normal, como segue.

2.4.1 Modelos dados pela equação de difusão linear fracionária

Para $q = 1$ em (60) destacamos os dois casos lineares: o primeiro com a derivada fracionária temporal, $0 < \alpha < 1$ e $\gamma = 2$, e o segundo caso com a derivada fracionária no espaço, $\alpha = 1$ e $1 < \gamma < 2$ (PODLUBNY, 1998; SAMKO et al., 1993; METZLER; NONNENMACHER, 2002).

O primeiro caso é utilizado na descrição de voos subdifusivos. Assim, para $0 < \alpha < 1$ e $\gamma = 2$ em (60) temos a EDFT obtida em (58)

$$\frac{\partial^\alpha u(x, t)}{\partial t^\alpha} = D_\alpha \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \quad (63)$$

com $D_\alpha = D_{\alpha 21}$ como em (57). Considere esta EDFT sujeita às condições (62) e (61).

A transformada de Laplace da derivada fracionária no sentido Caputo dada por (26), aplicada na variável temporal, com $0 < \alpha < 1$ resulta em

$$\mathcal{L}\{\partial^\alpha u(x, t)/\partial t^\alpha; s\} = s^\alpha \tilde{u}(x, s) - s^{\alpha-1} \tilde{u}(x, 0). \quad (64)$$

Por sua vez, de (28) a transformada de Fourier da segunda derivada no espaço é dada por

$$\mathcal{F}\{\partial^2 u(x, t)/\partial x^2; k\} = -k^2 \hat{u}(k, t). \quad (65)$$

O metodo de justaposição das transformadas prescreve que, para resolver (58), se aplique a transformada de Fourier (65) na variável espacial e a transformada de Laplace (64) na variável temporal, de modo que o resultado pode ser expresso como

$$\widehat{u}(k, s) = \frac{s^{\alpha-1}}{s^\alpha + D_\alpha k^2}, \quad (66)$$

onde tomamos a CI $f(x) = \delta(x)$ com $\delta(x)$ a função delta de Dirac, de forma que $\mathcal{F}\{\widehat{f}(x); k\} = \mathcal{F}\{\delta(x); k\} = 1$.

O cálculo da transformada de Laplace da função $t^{\beta-1}E_{\alpha,\beta}(ct^\alpha)$, $\Re(\beta) > 0$, onde $E_{\alpha,\beta}(ct^\alpha)$ é a função de Mittag-Leffler (4), nos fornece (CAMARGO; CAPELAS, 2015)

$$\begin{aligned} \mathcal{L}\{t^{\beta-1}E_{\alpha,\beta}(\pm ct^\alpha); s\} &= \int_0^\infty e^{-st}t^{\beta-1}E_{\alpha,\beta}(\pm ct^\alpha)dt \\ &= \sum_{m=0}^\infty \frac{(\pm c)^m}{\Gamma(\alpha m + \beta)} \int_0^\infty e^{-st}t^{\alpha m + \beta - 1}dt. \end{aligned}$$

Fazendo $st = u$ e utilizando a definição da função gama (1), têm-se

$$\begin{aligned} \mathcal{L}\{t^{\beta-1}E_{\alpha,\beta}(\pm ct^\alpha); s\} &= \sum_{m=0}^\infty \frac{(\pm c)^m}{s^{\alpha m + \beta}} \\ &= \frac{s^{\alpha-\beta}}{s^\alpha \mp c}. \end{aligned}$$

Assim, para $\beta = 1$ e $c = -Dk^2$ segue que

$$\mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{s^{\alpha-1}}{s^\alpha + Dk^2}; t\right\} = E_{\alpha,1}(-Dk^2t^\alpha).$$

Desta forma, tomando a transformada inversa de Laplace de (64) voltamos ao domínio do tempo

$$\widehat{u}(k, t) = E_\alpha(-D_\alpha k^2 t^\alpha), \quad (67)$$

e, então, a transformada inversa de Fourier de (67) produz a solução da EDPFT (63) sujeita às condições (62)-(61)

$$u(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} G(x - x', t) f(x') dx'$$

de forma que

$$u(x, t) = G_{\alpha}(x, t) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} E_{\alpha,1}(-D_{\alpha} k^2 t^{\alpha}) \cos(kx) dk,$$

onde $G_{\alpha}(x, t)$ é uma função do tipo Green (PODLUBNY, 1998).

Para calcular esta última integral aplica-se, novamente, a transformada de Laplace (PODLUBNY, 1998) de onde segue que

$$\tilde{g}_{\alpha}(x, s) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\cos(kx)}{D_{\alpha} k^2 + s^2} dk = \frac{1}{2\sqrt{D_{\alpha}}} s^{-\alpha/2} e^{-|x|D_{\alpha}^{-1}s^{\alpha/2}},$$

e a transformada inversa fornece

$$G_{\alpha}(x, t) = \frac{1}{4\sqrt{D_{\alpha}}\pi i} \int_{\Gamma} e^{st} e^{-|x|D_{\alpha}^{-1/2}s^{\alpha/2}} s^{-\alpha/2} ds$$

onde Γ é um contorno do tipo Bromwich modificado (PODLUBNY, 1998). Calculando esta integral de contorno e introduzindo mudanças do tipo $\sigma = st$ e $z = \frac{|x|}{\sqrt{D_{\alpha}}t^{\alpha}}$ obtêm-se

$$G_{\alpha}(x, t) = \frac{t^{1-\frac{\alpha}{2}}}{2\sqrt{D_{\alpha}}} \frac{1}{2\pi i} \int_{Ha} e^{\sigma-z\sigma^{\frac{\alpha}{2}}} \frac{d\sigma}{\sigma^{\frac{\alpha}{2}}} \quad (68)$$

onde Ha denota o contorno de Hankel (PODLUBNY, 1998).

Utilizando (5) em (68) reescreve-se

$$G_{\alpha}(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{D_{\alpha}}} t^{\frac{\alpha}{2}-1} W(-z, -\frac{\alpha}{2}, \frac{\alpha}{2}).$$

Assim a solução da EDFT sujeita às condições (62) é dada pela seguinte PDF

$$u(x, t) = G_{\alpha}(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{D_{\alpha}}t^{\frac{\alpha}{2}}} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-z)^m}{m!\Gamma(-\frac{\alpha}{2}m + (1 - \frac{\alpha}{2}))}, \quad z = \frac{|x|}{\sqrt{D_{\alpha}}t^{\frac{\alpha}{2}}}. \quad (69)$$

normalizada (MAINARDI, 1996). Um conjunto de soluções $G_{\alpha}(x, t)$ pode ser visualizado na figura (4) com $0 < \alpha < 1$, D_{α} e t fixos e na figura (5) com α , t fixos e $0 < D_{\alpha} < 1/2$. Para

$\alpha = 1$ recuperamos a clássica PDF gaussiana (50) solução da equação de difusão normal (49) dada por

$$G_1(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D_\alpha t}} \cdot e^{-\frac{x^2}{4D_\alpha t}}$$

que corresponde às curvas tracejadas nas figuras (4) e (5).

Vimos que a difusão pode ser distinguida, de modo geral, pelo deslocamento médio quadrático proporcional à lei de potência (48). Então, obtemos o deslocamento médio quadrático,

$$\langle x^2(t) \rangle_G = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 G_\alpha(x, t) dx,$$

deste voo subdifusivo via (37) e a expansão em momentos $\psi(s)$ (55). De forma alternativa, este cálculo pode ser inferido a partir da EDFT (63), por meio da integração $\int_{-\infty}^{\infty} x^2 dx$, resultando em $(d/dt)\langle x^2(t) \rangle = {}_0^C D_t^{1-\alpha} 2D_\alpha = 2D_\alpha t^{\alpha-1}/\Gamma(\alpha)$. Desta forma, têm-se que (GORENFLO et al., 2002; METZLER; KLAFTER, 2000; PODLUBNY, 1998)

$$\begin{aligned} {}_0^C D_t^\alpha \int_{-\infty}^{\infty} G(x, t) x^2 dx &= 2D_\alpha \\ {}_0^C D_t^{-1} \left({}_0^C D_t^\alpha (\langle x^2(t) \rangle_G) \right) &= {}_0^C D_t^{-1} (2D_\alpha) \\ {}_0^C D_t^{\alpha-1} (\langle x^2(t) \rangle_G) &= 2D_\alpha t \\ {}_0^C D_t^{-(\alpha-1)} ({}_0^C D_t^{\alpha-1} (\langle x^2(t) \rangle_G)) &= 2D_\alpha {}_0^C D_t^{1-\alpha} t. \end{aligned}$$

Segue de (17) que

$${}_0^C D_t^{1-\alpha} t = \frac{\Gamma(2)}{\Gamma(1+\alpha)} t^\alpha, \quad 0 < \alpha < 1.$$

Assim,

$$\langle x^2(t) \rangle_G = \frac{2D_\alpha}{\Gamma(\alpha+1)} t^\alpha, \quad 0 < \alpha < 1. \quad (70)$$

Aplicando \log_2 em ambos os lados de (70) têm-se no espaço das grandes escalas $\log_2 t \times \log_2 \langle x^2(t) \rangle$

$$\log_2 \langle x^2(t) \rangle_G = \alpha \log_2 t + \log_2 \left(\frac{2D_\alpha}{\Gamma(\alpha + 1)} \right). \quad (71)$$

Comparando (71) com (59), segue que

$$\alpha_d = \mu \quad \text{e} \quad D_{\alpha_d} = D_\mu \Gamma(\alpha_d + 1), \quad (72)$$

com $\alpha = \alpha_d$ e $D_\alpha = D_{\alpha_d}$ indexados com a letra "d" por estarem relacionados com os parâmetros de dispersão μ e D_μ .

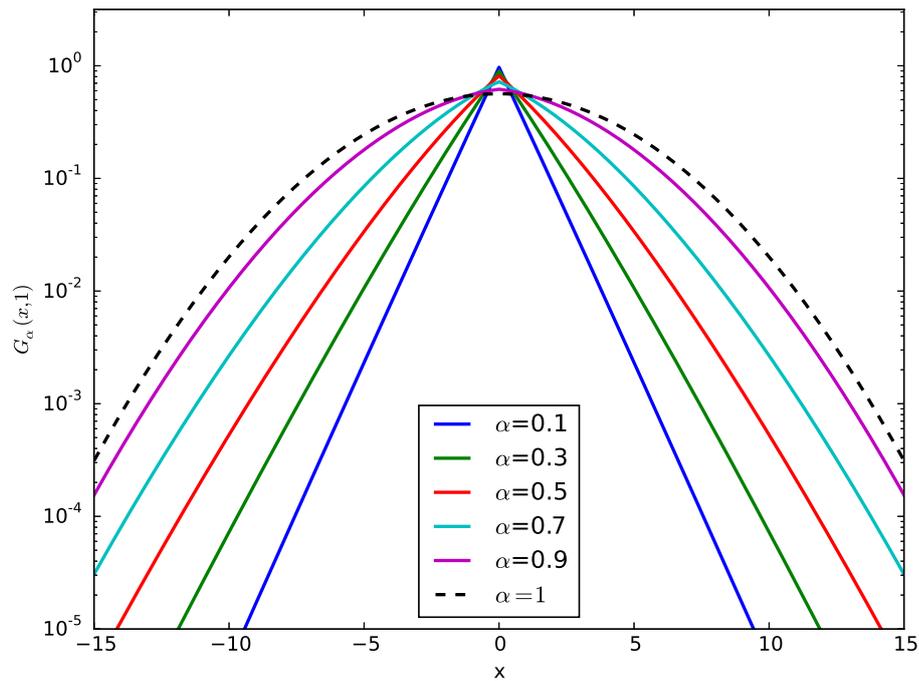


Figura 4 – PDFs $G_\alpha(x, t)$ (69) soluções da EDFT (58) geradas com $0 < \alpha < 1$, $D_\alpha = 0.5$ e $t = 1$ fixos, com o eixo-y em escala logarítmica, modelos para voos subdifusivos.

Agora, $q = 1$, $\alpha = 1$ e $1 < \gamma < 2$ em (60) é adequado para descrever voos superdifusivos. Desta forma, considere a equação de difusão linear fracionária no espaço (EDFE), dada como em (54)

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = D_\gamma \frac{\partial^\gamma u(x, t)}{\partial |x|^\gamma}$$

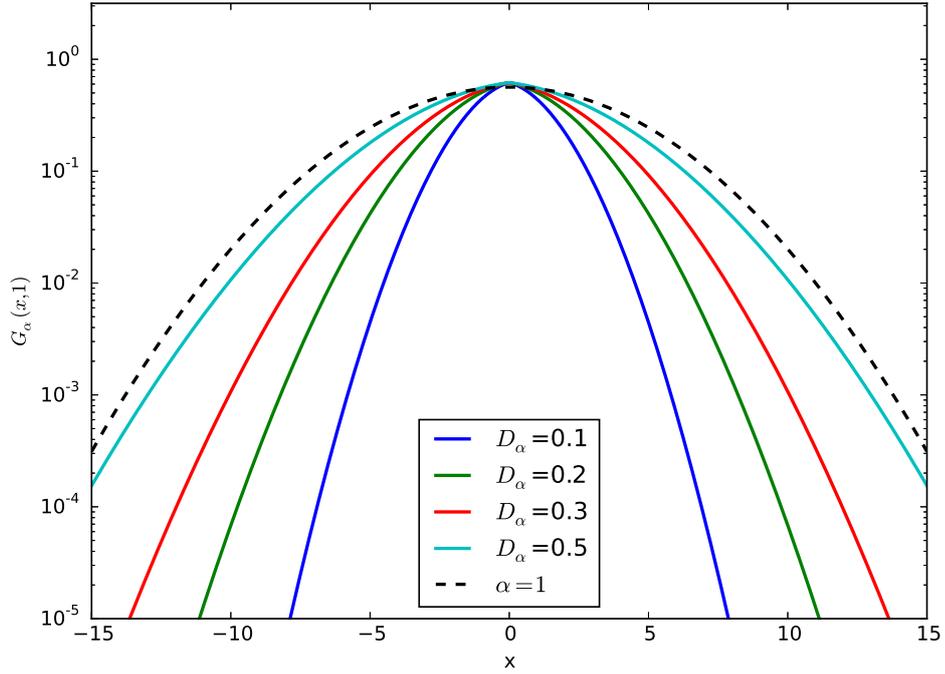


Figura 5 – PDFs $G_\alpha(x, t)$ (69) soluções da EDFT (58), com o eixo-y em escala logarítmica, geradas para o caso subdifusivo com $\alpha = 0.5$, $0 < D_\alpha < 0.5$ e $t = 1$ fixo.

com $D_\gamma = D_{1\gamma 1}$ como em (53) e sujeita às mesmas condições (62) e (61).

Aplicando a transformada de Fourier do operador Riesz-Weyl (30) na variável espacial (SAMKO et al., 1993) obtêm-se a seguinte equação diferencial ordinária de primeira ordem

$$\frac{\partial \hat{u}(k, t)}{\partial t} = -D_\gamma |k|^\gamma \hat{u}(k, t),$$

cuja solução é dada por

$$\hat{u}(k, t) = \hat{u}(0, t) e^{-D_\gamma |k|^\gamma t}.$$

Para voltar ao domínio do espaço escreve-se a solução deste problema como a convolução

$$u(x, t) = L_\gamma * u = \int_{-\infty}^{\infty} L_\gamma(x - x', t) f(x') dx'.$$

Supondo que a CI igual à função delta de Dirac, $f(x) = \delta(x)$, temos que

$$L_\gamma(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-D_\gamma |k|^\gamma t} e^{-ikx} dk.$$

Mas

$$\begin{aligned}
 L_\gamma(x, t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-D|k|^\gamma t} (\cos(kx) - i \sin(kx)) dk \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-D|k|^\gamma t} \cos(kx) dx + \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-D|k|^\gamma t} \sin(kx) dk \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-D|k|^\gamma t} \cos(kx) dx
 \end{aligned}$$

já que $e^{-D_\gamma|k|^\gamma t}$ é par e $\sin(kx)$ ímpar.

Portanto a solução da EDFE (54) é dada pela PDF

$$L_\gamma(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-D|k|^\gamma t} \cos(kx) dk, \quad (73)$$

conhecida como distribuição de Lévy (LENZI; MENDES; TSALLIS, 2003; METZLER; NONNENMACHER, 2002). Um conjunto de soluções $L_\gamma(x, t)$ pode ser visualizado na figura (6) para $1 < \gamma < 2$, D_γ e t fixos e na figura (7) com $0.5 < D_\gamma \leq 3$, γ e t fixos.

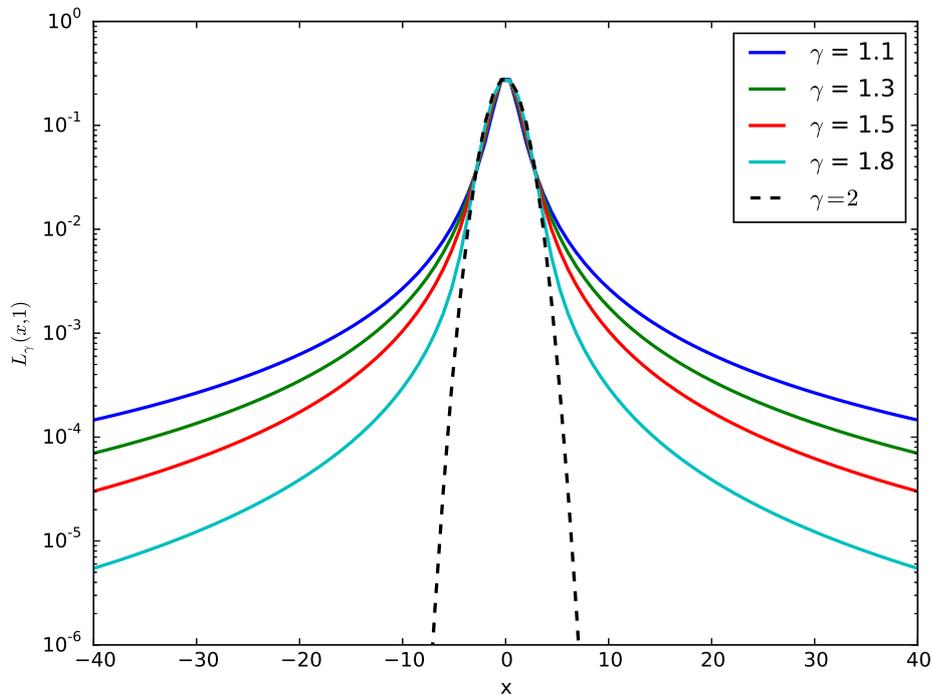


Figura 6 – Soluções $L_\gamma(x, t)$ (73), com o eixo-y em escala logarítmica, para $1 < \gamma < 2$ e $t = 1$ fixo.

Neste caso, o deslocamento médio quadrático, $\langle x^2(t) \rangle_L$, é formalmente divergente e não pode ser computado diretamente. Tal problema é contornado na literatura utilizando

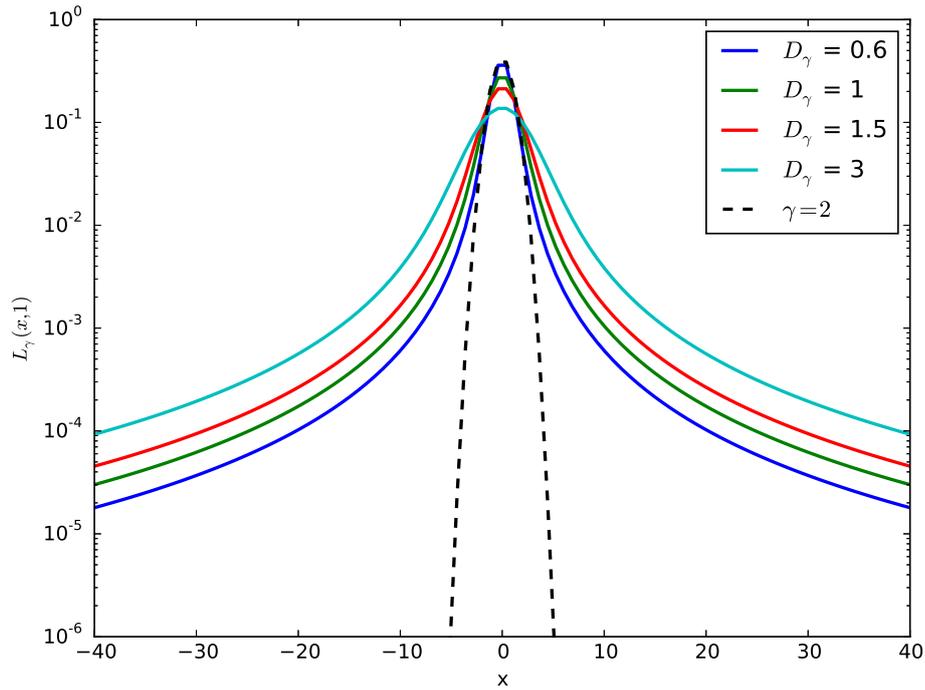


Figura 7 – Soluções $L_\gamma(x, t)$ (73), com o eixo-y em escala logarítmica, para $0 < D_\gamma \leq 3$ e $\gamma = 1.5, t = 1$ fixos.

diversas estratégias como, por exemplo, considerar a largura da distribuição ao invés de sua variância, avaliando a relação de escala entre x e t , definindo um pseudo segundo momento por meio de cortes no domínio da distribuição $L_\gamma(x, t)$ (BOUCHAUD; GEORGES, 1990; KENKRE; MONTROLL; SHLESINGER, 1973; MONTROLL; WEISS, 1965; LENZI; MENDES; TSALLIS, 2003; METZLER; NONNENMACHER, 2002). Assim, o cálculo da dependência do tempo de algo que lembra um segundo momento, $\langle x^2(t) \rangle$, pode ser derivado de (54) para obter

$$\langle x^2(t) \rangle_L = 2D_\gamma t^{\frac{2}{\gamma}}, \quad 1 < \gamma < 2. \quad (74)$$

Comparando (74) com (48) segue que $1 < \gamma < 2$ e os processos são, de fato, superdifusivos.

Aplicando \log_2 em ambos os lados de (74)

$$\log_2 \langle x^2(t) \rangle_L = \frac{2}{\gamma} \log_2 t + \log_2(2D_\gamma) \quad (75)$$

e comparando (75) com (59) obtêm-se os parâmetros $\gamma = \gamma_d$ e $D_\gamma = D_{\gamma_d}$, tais que

$$\gamma_d = \frac{2}{\mu} \quad \text{e} \quad D_{\gamma_d} = D_\mu. \quad (76)$$

2.4.2 Modelo dado pela equação de difusão não linear

Uma variedade de situações em que ocorre a difusão anômala são descritas pela equação de difusão não linear (EDNL) (60) com $\alpha = 1$, $\gamma = 2$ e $1 < q < 3$ dada por

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = D_q \frac{\partial^2 u(x, t)^{2-q}}{\partial x^2} \quad (77)$$

com $D_q = D_{1/2q}$. Esta EDNL é conhecida como a equação de difusão em meios porosos ou difusão anômala correlacionada (TSALLIS, 1988). Existe uma conexão entre esta equação e a entropia de Tsallis baseada no método de separação de variáveis e na família de equações diferenciais não lineares (TSALLIS, 1988; TSALLIS; BUKMAN, 1996; UMAROV; CONSTANTINO; STEINBERG, 2008).

A solução da EDNL (77) sujeita às condições (62) e (61), com $f(x) = \delta(x)$, é dada PDF q -gaussiana, apresentada no trabalho de Tsallis (TSALLIS; BUKMAN, 1996), que é uma generalização da função gaussiana, recuperada quando $q \rightarrow 1$. Esta solução é obtida usando-se o *ansatz* (LENZI; MENDES; TSALLIS, 2003; TSALLIS, 2009)

$$u(x, t) = \frac{1}{\phi(t)} F\left(\frac{x}{\phi(t)}\right)$$

em (77) e é dada por

$$u(x, t) = P_q(x, t) = \frac{\sqrt{\beta}}{A_q} e_q^{-\frac{\beta x^2}{(D_q t)^{2\beta}}} \quad (78)$$

com $\beta = 1/(3 - q)$ real,

$$e_q^x = [1 + (1 - q)x]_+^{\frac{1}{1-q}}, \quad (79)$$

a função q -exponencial e A_q constante de normalização dependente do parâmetro q e da função Γ como segue

$$A_q = \begin{cases} \frac{2\sqrt{\pi}\Gamma(1/(1-q))}{(3-q)\sqrt{1-q}\Gamma((3-q)/(2-2q))} & \text{para } q \neq 1, \\ \sqrt{\pi} & \text{para } q = 1, \\ \frac{\sqrt{\pi}\Gamma((3-q)/(2q-2))}{\sqrt{q-1}\Gamma(1/(q-1))} & \text{para } 1 < q < 3. \end{cases}$$

Se $q \geq 3$ a integral de normalização diverge. Para $q < 1$ a q -gaussiana possui um suporte compacto dado pelo intervalo $[-1/\sqrt{(1-q)\beta}, 1/\sqrt{(1-q)\beta}]$ e para $1 < q < 3$ tem-se $-\infty < x < \infty$ (TSALLIS; BUKMAN, 1996; ANTENEODO; DIAS; MENDES, 2006).

As q -gaussianas são, portanto, generalizações da gaussiana que, em conexão com o TCL generalizado de Tsallis-Umarov, estendem as propriedades dos processos aleatórios analogamente ao caso gaussiano. Assim, este teorema formulado por Umarov et. al. (UMAROV; CONSTANTINO; STEINBERG, 2008), essencialmente, mostra que dado um conjunto de infinitas variáveis aleatórias x_1, x_2, \dots dentre as quais um número $n = 1, 2, 3, \dots$ estão correlacionadas segundo uma certa condição $C_n(q)$, então a soma parcial $\sum_{m=1}^n x_m$, em uma escala apropriada e com $n \rightarrow \infty$, se distribuem de acordo com uma q -gaussiana. Estas condições $C_n(q)$, no entanto, são difíceis de serem analiticamente obtidas, de modo que se o modelo teórico é definido segundo uma PDF $P_q(x, t)$ então teria que ser verificado que esta PDF obedece tais condições. Isso parece ainda não ter sido realizado na literatura (HILHORST, 2009). Adicionalmente, a prova deste teorema é baseada na utilização do espaço q -Fourier (TSALLIS; BUKMAN, 1996) por meio da q -transformada de Fourier, uma transformada ou um funcional não linear que aparentemente não possui inversa (UMAROV; CONSTANTINO; STEINBERG, 2008; HILHORST, 2009).

Têm-se, ainda, que a variância, $\langle x^2(t) \rangle_{P_q}$, das q -gaussianas é finita quando $q < 5/3$ e divergente para $5/3 \leq q < 3$. Implica, pelo q -TCL (TSALLIS, 2009), que aumentando o número de variáveis aleatórias identicamente distribuídas, para $q < 5/3$, a PDF $P_q(x, t)$ tende para a gaussiana e para $5/3 \leq q < 3$ para um tipo de generalização das distribuições de Lévy. Desta forma, x escala com $t^{1/(3-q)}$ e então toma-se (TSALLIS, 2009)

$$\langle x^2(t) \rangle_{P_q} = 2D_q t^{\frac{2}{3-q}}. \quad (80)$$

A relação entre os parâmetros q e μ é obtida comparando-se (80) com (48)

$$\mu = \frac{2}{3-q} \quad (81)$$

sendo conhecida por relação de Tsallis-Bukman (TSALLIS; BUKMAN, 1996; COMBE et al., 2015). Resulta que para $q < 1$ o processo é subdifusivo, $q > 1$ superdifusivo e para $q = 1$ a difusão é normal.

Aplicando \log_2 em ambos os lados de (80)

$$\log_2 \langle x^2(t) \rangle_{P_q} = \frac{2}{3-q} \log_2 t + \log_2(2D_q), \quad (82)$$

e comparando (82) com (59), obtemos

$$q_d = \frac{3\mu - 2}{\mu} \quad \text{e} \quad D_{q_d} = D_\mu. \quad (83)$$

A figura (8) mostra as PDFs soluções $P_q(x, 1)$ (78), primeiramente, para valores de $-1 < q < 1$ com D_q fixo, e então para q fixo e $0 < D_q < 1$. Já na figura (9) geramos as PDFs soluções $P_q(x, 1)$ (78), respectivamente, com $1 < q < 3$ e D_q fixo, e com q fixo $1 < D_q < 3$.

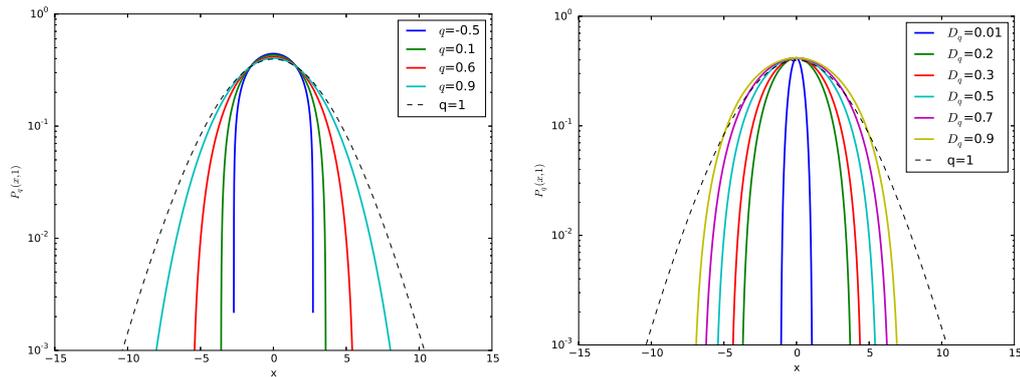


Figura 8 – Soluções $P_q(x, t)$ (78), com o eixo- y em escala logarítmica. A figura à direita foi gerada com $0 < q < 1$, $D_q = 0.5$ e $t = 1$ fixos; e a figura à esquerda com $q = 0.9$, $t = 1$ fixos e $0 < D_q < 0.5$. A curva tracejada em ambos os gráficos refere-se à curva normal $P_1(x, t)$.

Na tabela 9 estão os modelos, com seus parâmetros de grande escala a serem calibrados, dos casos lineares e não lineares utilizados na descrição dos processos de difusão anômala.

2.5 Simulação e determinação dos parâmetros de um random walk anômalo

Estamos interessados em realizar uma simulação linear de processos gerais de difusão. Para controlar o tipo de processo gerado estudamos o comportamento assintótico das PDFs para o tempo de espera entre o saltos e para o comprimento dos saltos. Para tal estudo,

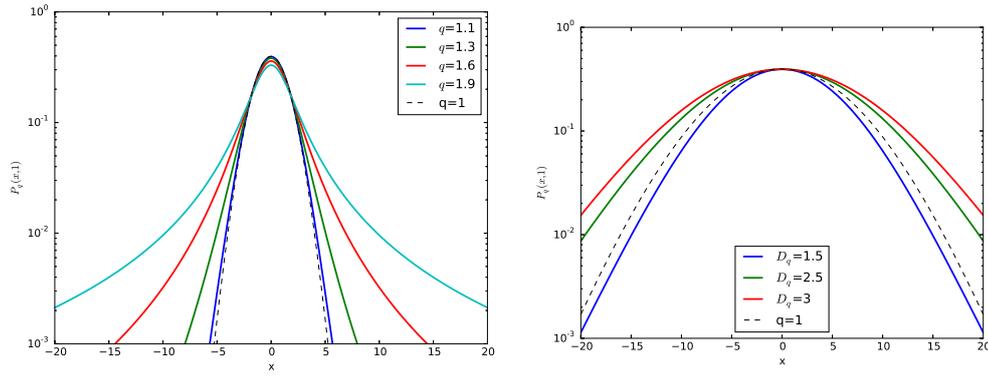


Figura 9 – Soluções $P_q(x, t)$ (78), com o eixo- y em escala logarítmica. A figura à direita foi gerada com $1 < q < 3$, $D_q = 0.5$ e $t = 1$ fixos; e a figura à esquerda com $q = 1.1$, $t = 1$ fixos e $0.5 < D_q < 3$. A curva tracejada em ambos os gráficos refere-se à curva normal $P_1(x, t)$

Tabela 2 – Modelos para a descrição de vôos difusivos anômalos.

Tipos de vôo	Parâmetros do PVC (60)-(61)-(62) $\frac{\partial^\alpha u(x, t)}{\partial t^\alpha} = D_{\alpha \gamma q} \frac{\partial^\gamma u(x, t)^{2-q}}{\partial x ^\gamma}$	Modelos
Subdifusivo ($\gamma = 2$)	Caso linear ($q = 1$): $0 < \alpha < 1$ e D_α Caso não linear ($\alpha = 1$): $q < 1$ e D_q	$G_\alpha(x, t)$ $P_q(x, t)$
Superdifusivo ($\alpha = 1$)	Caso linear ($q = 1$): $1 < \gamma < 1$ e D_γ Caso não linear ($\gamma = 2$): $1 < q < 3$ e D_q	$L_\gamma(x, t)$ $P_q(x, t)$

uma conveniente distribuição para controlar a convergência ou divergência de momentos destas distribuições é a PDF lei de potência

$$K(\xi) = \frac{C}{(\xi + \epsilon)^p} \quad (84)$$

com $\xi \geq 0$, $p > 1$, C a constante de normalização. Para calcular a constante de normalização, bem como os momentos desta PDF tomou-se $\epsilon > 0$ de modo a evitar o ponto singular $\epsilon = 0$. Desta forma, calculamos C sobre os limites $[0, \Lambda]$

$$\int_0^\Lambda \frac{C}{(\xi + \epsilon)^p} = 1. \quad (85)$$

Com isso, obtemos

$$C = \frac{(p-1)}{1 - \left(\frac{\epsilon}{\Lambda}\right)^{p-1}} \epsilon^{p-1}. \quad (86)$$

Os processos (voos) difusivos são gerados sorteando variáveis aleatórias ξ' segundo $K(\xi)$ (84). Neste sentido, a técnica de Monte Carlo (LAGUTIN; TYUMENTSEV, 2013; CLAUSET; SHALIZI; NEWMAN, 2009) considera uma proporção entre áreas. Então sorteia-se uma área a , $0 \leq a \leq 1$. Assim, pode-se escrever

$$a = \int_{-\infty}^{\xi'} K(\xi) d\xi = F(\xi').$$

Então, isola-se o evento ξ' utilizando a técnica da função inversa,

$$\xi' = F^{-1}(a), \quad 0 \leq a \leq 1.$$

De forma geral, o m -ésimo momento da PDF $K(\xi)$ é dado por

$$\langle \xi^m \rangle = \frac{p-1}{p-(m+1)} \epsilon^m \left[\frac{1 - \left(\frac{\epsilon}{\Lambda+\epsilon}\right)^{p-(m+1)}}{1 - \left(\frac{\epsilon}{\Lambda+\epsilon}\right)^{p-1}} \right]. \quad (87)$$

Formalmente, no limite $\Lambda \rightarrow \infty$, $\langle \xi^m \rangle$ é convergente se $m+1 < p$ e divergente se $m+1 \geq p$. Assim, (87) fornece uma maneira teórica de calcular o m momento em função de p da PDF de lei de potência geradora de simulações baseadas em um CTRW.

Particularmente, sejam δx e δt em (84), respectivamente, as variáveis comprimento de saltos e o tempo de espera entre os saltos segundo as PDFs lei de potência $\lambda(\delta x)$ e $\psi(\delta t)$, dadas por

$$\lambda(\delta x) = \frac{A}{(|\delta x| + \epsilon)^r} \quad \text{e} \quad \psi(\delta t) = \frac{B}{(\delta t + \epsilon)^s} \quad (88)$$

com A e B as constantes de normalização. Assim, a simulação linear dos voos difusivos consiste em um CTRW unidimensional de uma população de N partículas, com comprimento de saltos e tempo de espera entre os saltos segundo as PDFs (88) e determinados aleatoriamente pelo algoritmo Monte Carlo, como descrito acima.

Consequentemente, de (57) e (53) pode-se escrever, respectivamente, para os processos subdifusivos e superdifusivos,

$$\log_2 D_\alpha = \log_2 \sigma^2 - \alpha \log_2 \tau \quad (89)$$

e

$$\log_2 D_\gamma = \gamma \log_2 \sigma - \log_2 \tau, \quad (90)$$

que podem ser parametrizadas pelos parâmetros r e s de forma que

$$\alpha = \alpha(\sigma(r), \tau(s)), \quad \gamma = \gamma(\sigma(r), \tau(s)) \quad \text{e} \quad D = D(\sigma(r), \tau(s)) \quad (91)$$

podem ser entendidas no espaço bidimensional de parâmetros α , γ e D .

Capítulo 3

Metodologia

Este capítulo mostra a metodologia proposta para estabelecer uma prescrição para a geração controlada de processos de difusão anômala, baseados em um CTRW, e para associação de modelos difusivos generalizados e suas PDFs aos processos (voos) gerados. Com base no Capítulo 2 - 2.3.5, propõe-se uma técnica para geração de voos difusivos anômalos via CTRW. O controle sistemático da geração dos voos será realizado a partir de distribuições tipo leis de potência com o mínimo de parâmetros livres. Uma vez gerados os voos, estuda-se a obtenção de parâmetros de grande escala da difusão anômala propondo duas abordagens: (i) análise da evolução temporal da dispersão/variância dos deslocamentos, $\langle x^2(t) \rangle$ (48) e (ii) otimização do ajuste dos modelos teóricos, soluções da EDP generalizada (60), aos histogramas para os parâmetros em larga escala. Com o intuito de não apenas a obtenção dos parâmetros de grande escala, mas também avaliar a adequação dos modelos teóricos linear e não linear é apresentado um método de avaliação dos parâmetros da pequena à grande escala, estabelecendo-se uma parametrização entre os parâmetros ótimos obtidos.

3.1 Metodologia para a geração de processos difusivos anômalos

As simulações lineares dos voos difusivos anômalos consistem em realizações de CTRW, gerados via método de Monte Carlo (LAGUTIN; TYUMENTSEV, 2013), com comprimento de saltos, δx , e tempos de espera entre os saltos, δt , aleatórios segundo, respectivamente, as distribuições $\lambda(\delta x)$ e $\psi(\delta t)$ na forma de lei de potências (88), como discutido no Capítulo 2 na seção 2.5. Estas simulações foram realizadas em um sistema de métodos computacionais (programas) desenvolvidos em linguagem Python, utilizando como gerador de números aleatórios o *CryptGenRandom* fornecido pelo sistema operacional Windows.

O controle do tipo de voo a ser gerado é feito por meio das potências s e r , parâmetros de pequena escala das distribuições tipo lei de potência, respectivamente, $\psi(\delta t)$ e $\lambda(\delta x)$ segundo o critério de convergência ou divergência para o primeiro, τ , e segundo, σ^2 , momentos destas PDFs, como mostrado na seção 2.3.5 e organizado na tabela 3 que segue. Desta forma, as simulações resultam em N séries estacionárias artificiais de comprimento $t = t_f$.

Tabela 3 – Critério de convergência/divergência para controlar o tipo de voo difusivo gerado segundo as PDFs $\lambda(\delta x)$ e $\psi(\delta t)$ ((88) para, respectivamente, o comprimento dos saltos e tempo de espera entre os saltos.

s	r	τ	σ^2	Tipo de voo
$1 < s < 2$	$r > 3$	diverge	converge	subdifusivo
$s > 2$	$r > 3$	converge	converge	difusão normal
$s > 2$	$2 < r < 3$	converge	diverge	superdifusivo

3.2 Método de escala de tamanho finito

Em modelos e simulações, frequentemente, uma série de parâmetros coadjuvantes são escolhidos arbitrariamente, tais como o tempo total de simulação t_f , número de partículas N etc. Muitas vezes, estes parâmetros são condicionados por determinantes como tempo computacional. Como não é desejável que os modelos e simulações tenham resultados dependentes destes parâmetros, o estudo de escala de tamanho finito vem como uma técnica para avaliar para quais valores destes parâmetros, o sistema deixa de apresentar sensibilidade às escolhas arbitrárias.

Desta forma, a análise de escala de tamanho finito, em inglês *finite size scaling* (FSS), descreve as propriedades de um sistema físico quando este aumenta seu tamanho. Como simulações computacionais são sempre feitas com amostras finitas, elas dependem da teoria de escala de tamanho finito para a extrapolação e análise de dados (PRIVMAN, 1990).

Os parâmetros de escala intermediária, número N de séries geradas e tempo t_f das simulações, precisam ser suficientemente grandes para que a evolução no tempo presente, de fato, um comportamento difusivo anômalo (PEREIRA et al., 2017). O quão suficientemente grandes estará definido pelo método FSS.

3.3 Calibração via método de análise da medida da dispersão

Calcula-se $\langle x^2(t) \rangle$ das N séries temporais que foram geradas segundo o critério de convergência ou divergência da tabela 3. O método de análise da medida de dispersão

consiste em obter os parâmetros de grande escala μ e D_μ (48) via regressão linear de $\langle x^2(t) \rangle$ sobre a reta (59). Analisando o parâmetro μ segundo a tabela 1, distingue-se o voo gerado em subdifusivo ($\mu < 1$), normal ($\mu = 1$) ou superdifusivo ($\mu > 1$).

Para o voo subdifusivo, dependendo do tipo de modelo escolhido para fazer a descrição do sistema, $\langle x^2(t) \rangle$ assume as formas $\langle x^2(t) \rangle_G$ (70) e $\langle x^2(t) \rangle_{Pq}$ (80) para $q < 1$. São obtidos, assim, os parâmetros $\alpha = \alpha_d$, $D_\alpha = D_{\alpha_d}$ e $q = q_d$, $D_q = D_{q_d}$, indexados com a letra 'd' por serem uma medida da dispersão da amostra de N partículas.

Agora, se o voo gerado é superdifusivo o deslocamento médio quadrático amostral é dado por $\langle x^2(t) \rangle_L$ (74) e pela relação de Tsallis-Bukman $\langle x^2(t) \rangle_P$ (80) para $q > 1$. Assim, são obtidos os parâmetros para a dispersão dos processos superdifusivos γ_d , D_{γ_d} , q_d e D_{q_d} .

3.4 Calibração via método de otimização dos modelos teóricos

Os histogramas de posições das N partículas em um tempo final $t = t_f$ são construídos a partir das N séries artificiais geradas da simulação de cada regime de difusão anômala. A estes histogramas, utilizando o método de otimização BFGS (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno) (LIU; NOCEDAL, 1989), são calibradas as PDFs soluções da EDP generalizada (60), mostradas no capítulo 2, no espaço de grande escala $(x, t_f) \times u(x, t_f)$.

Para o algoritmo do método de otimização BFGS foi utilizado o pacote *NumPy* da linguagem Python. Para este são passados, apenas, os valores dos parâmetros procurados como ponto de partida. Foram tomados como pontos iniciais os parâmetros encontrados via método de análise da medida da dispersão.

Assim, por meio desta calibração são obtidas as soluções modelos $G_{\alpha_M}(x, t)$ (69) da EDFT linear (63), $L_{\gamma_M}(x, t)$ (73) da EDFE linear (54) e as soluções modelos dadas pelas q -gaussianas $P_{q_M}(x, t)$ (78) da EDPNL não linear (77). Os parâmetros de grande escala $\alpha = \alpha_M$ e $D_{\alpha 21} = D_{\alpha_M}$, $\gamma = \gamma_M$ e $D_{1\gamma 1} = D_{\gamma_M}$, $q = q_M$ e $D_{12q} = D_{q_M}$ receberam o índice M por se tratarem dos ajustes de soluções dos modelos teóricos.

Têm-se, ainda, que quando os parâmetros são encontrados pelo método de análise de dispersão nas PDFs soluções (69), (73) e (78), os modelos recebem a denominação $G_{\alpha_d}(x, t)$, $L_{\gamma_d}(x, t)$ e $P_{q_d}(x, t)$.

Na tabela 4, encontram-se os parâmetros que são obtidos via os métodos de análise da dispersão e otimização dos modelos teóricos das N partículas em um tempo t_f , e os modelos calibrados a cada tipo voo gerado.

Tabela 4 – Parâmetros para a descrição da difusão.

Tipo de voo	μ	Parâmetros de dispersão		Parâmetros modelo		Modelos
Subdifusivo	$\mu < 1$	α_d	D_{α_d}	α_M	D_{α_M}	$G_\alpha(x, t)$
	$\mu < 1$	q_d	D_{q_d}	q_M	D_{q_M}	$P_q(x, t)$
Superdifusivo	$\mu > 1$	γ_d	D_{γ_d}	γ_M	D_{γ_M}	$L_\gamma(x, t)$
	$\mu > 1$	q_d	D_{q_d}	q_M	D_{q_M}	$P_q(x, t)$

3.5 Comparação da adequação dos modelos e métodos

A fim de determinar entre o método de otimização segundo BFGS e o método de análise de dispersão qual deles apresenta a maior precisão na determinação dos parâmetros do processo difusivo, serão realizadas comparações via tabelas, análises de gráficos e comparação de erro. A medida mais comumente usada para aferir a qualidade do ajuste de um modelo é a chamada raiz do erro médio quadrático (RMSE). O RMSE é a raiz do erro quadrático da diferença entre a predição e o valor real.

Esta medida será utilizada para comparar a adequação dos modelos diversos, mostrados na tabela 4, para cada regime de processo difusivo, e para comparar os métodos de análise da medida da dispersão e de otimização pelo método BFGS.

3.6 Construção do espaço de parâmetros subdifusivos e superdifusivos

Definidos os valores de N e t_f adequados para que as simulações dos voos difusivos anômalos tornem-se estáveis e selecionados, através do RMSE, os parâmetros que resultam nos melhores modelos será construído e analisado o espaço de parâmetros.

Utilizando a equação (87), o primeiro $\langle \delta t \rangle_\psi$ e segundo $\langle (\delta x)^2 \rangle_\lambda$ momentos das respectivas distribuições do tempo de espera entre os saldos $\psi(\delta t)$ e comprimento de saltos $\lambda(\delta x)$ (88), podem ser calculados teoricamente.

Considerando a parametrização segundo s e r (91), as equações (88) podem ser usadas para calcular o primeiro momento $\langle \delta t \rangle_\psi = \tau$ e o segundo momento $\langle (\delta x)^2 \rangle_\lambda = \sigma^2$ convergentes ou divergentes, verificando os casos dados segundo o critério (2.3.5). Com isso, consegue-se controlar completamente todo o processo em suas diferentes escalas por meio das potências r e s .

Será verificado, por último, se os parâmetros selecionados através do RMSE obedecem a relação Tsallis-Bukman (81).

Capítulo 4

Resultados e Análise

Inicialmente, apresentamos as séries temporais geradas pelas simulações dos voos difusivos anômalos. Em seguida, utilizando o método FSS, visto no Capítulo 3, na seção 3.2, justificamos as escolhas dos parâmetros de escala intermediária N e t_f destas simulações. Analisaremos, então, os parâmetros de pequena escala e grande escala obtidos, respectivamente, pelo método de análise de dispersão e pelo método BFGS. Fazemos um estudo das parametrizações e da adequação dos modelos selecionados por estes dois métodos. Deste estudo, concluímos qual dos métodos de otimização utilizado é mais adequado para a descrição dos voos subdifusivos, normal e superdifusivos gerados. Finalmente, apresentamos e analisamos as relações entre os parâmetros das simulações e parâmetros teóricos, estabelecendo uma parametrização com parâmetros de escala intermediária.

4.1 Simulações lineares dos processos de difusão anômala

As simulações foram geradas controlando-se as potências s e r , respectivamente, das distribuições (88) do tempo de espera entre os saltos, $\psi(\delta t)$, e comprimento dos saltos, $\lambda(\delta x)$, segundo o critério de convergência / divergência, Tabela 3. Assim, se $1 < s < 2$ e $r = 4$, o conjunto de voos gerados é subdifusivo. Se $s = 3$ e $2 < r < 3$, o conjunto de voos gerados é superdifusivo. Para $s = 3$ e $r = 4$ o voo gerado é de difusão normal.

Desta forma, as simulações geradas resultam em séries temporais com N pontos e de comprimento igual a t_f . Na figura 10 estão as séries acumuladas do conjunto de voos normais e subdifusivos de $N = 20.000$ partículas. Com $1 < s < 2$ observa-se o comportamento de longos tempo de espera, δt_i , entre os saltos, o que resulta no conjunto de voos subdifusivos. Vê-se, ainda, que quanto mais crítica a potência s da distribuição $\psi(\delta t)$, ou seja na medida em que $s \rightarrow 1$, maiores são δt_i entre os saltos. Isso é devido à divergência dos primeiros momentos da distribuição $\psi(\delta t)$ quando $s \rightarrow 1$.

A figura 11 mostra as séries do conjunto de voos normais e superdifusivos de uma

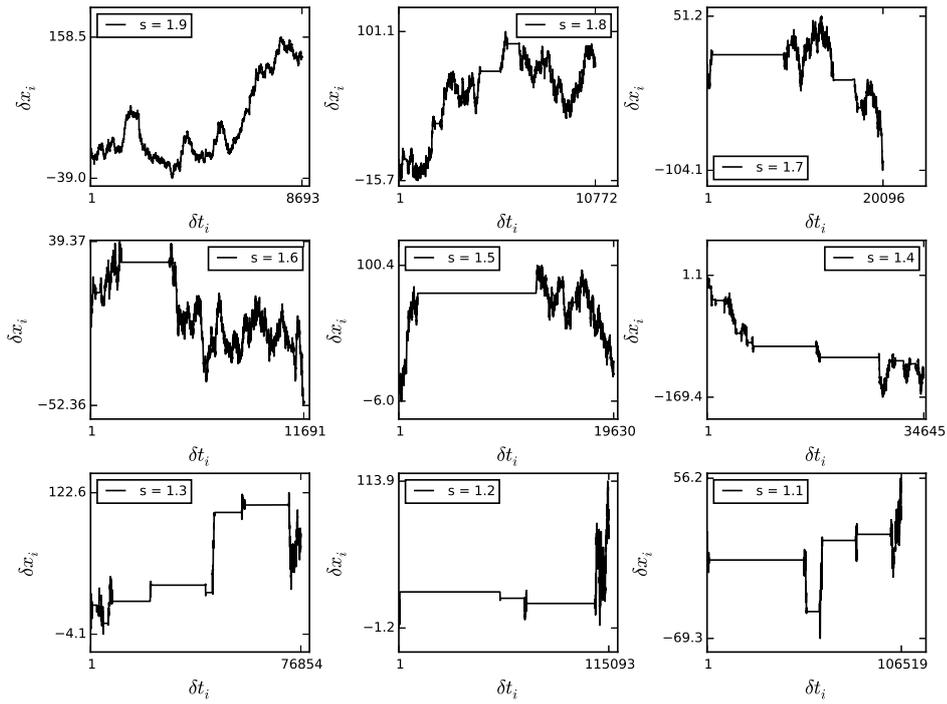


Figura 10 – Séries temporais subdifusivas ($1 < s < 2$, $r = 4$) geradas segundo critério de divergência dado no capítulo 3 - tabela 3 em um tempo $t_f = 2^{13}$.

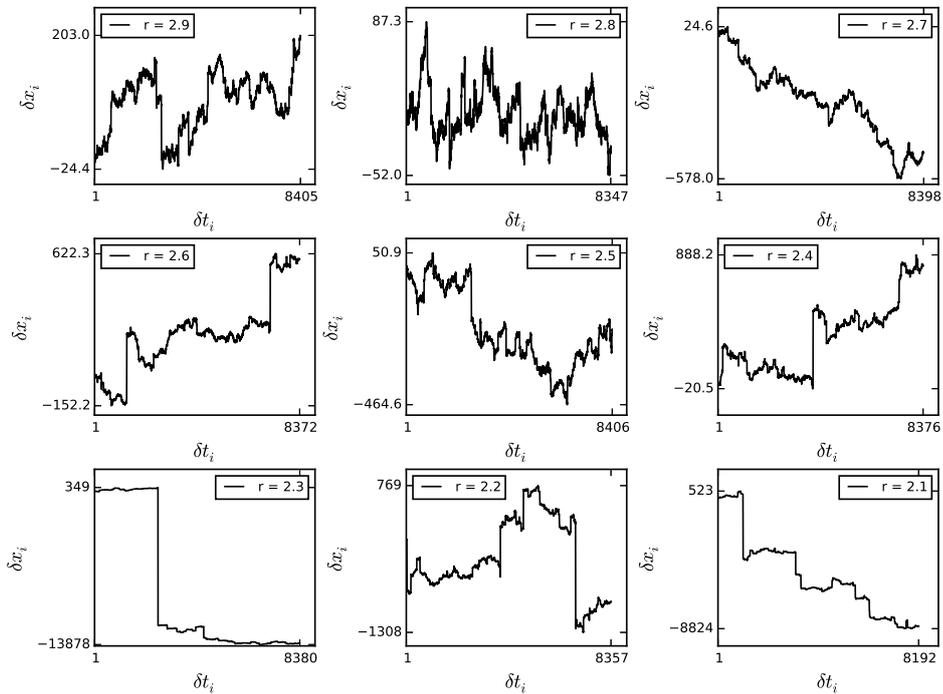


Figura 11 – Séries temporais superdifusivas ($s = 3$, $2 < r < 3$), geradas segundo critério de divergência dado no capítulo 3 - tabela 3 em um tempo $t_f = 2^{13}$.

amostra de $N = 30.000$ partículas. A divergência dos segundos momentos da distribuição $\lambda(\delta x)$ com $2 < r < 3$ resulta em um comportamento de grandes saltos, δx_i , como pode ser observado.

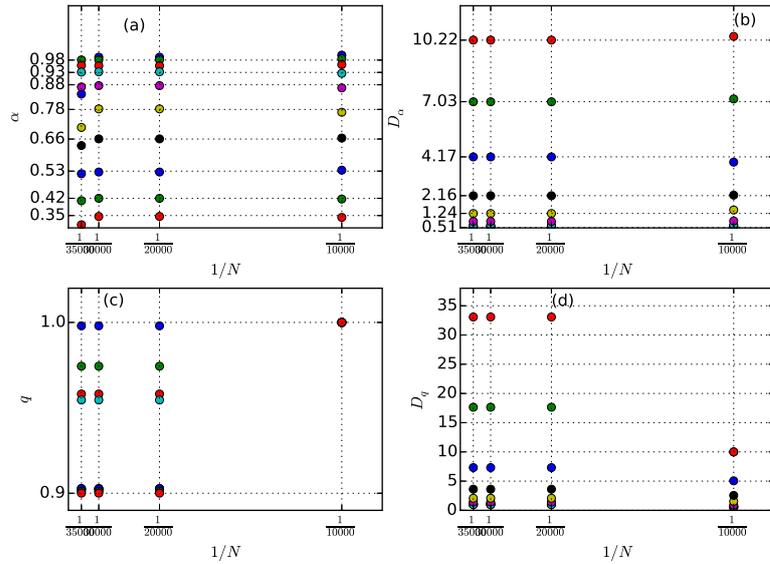


Figura 12 – FSS do parâmetro de escala intermediária número de partículas, N , para a parametrização dos modelos $G_\alpha(x, t)$ (69) e $P_q(x, t)$ (78) aplicado aos processos de subdifusão. Tem-se em (a) $1/N \times \alpha$, em (b) $1/N \times D_\alpha$, em (c) $1/N \times q$ e em (d) $1/N \times D_q$.

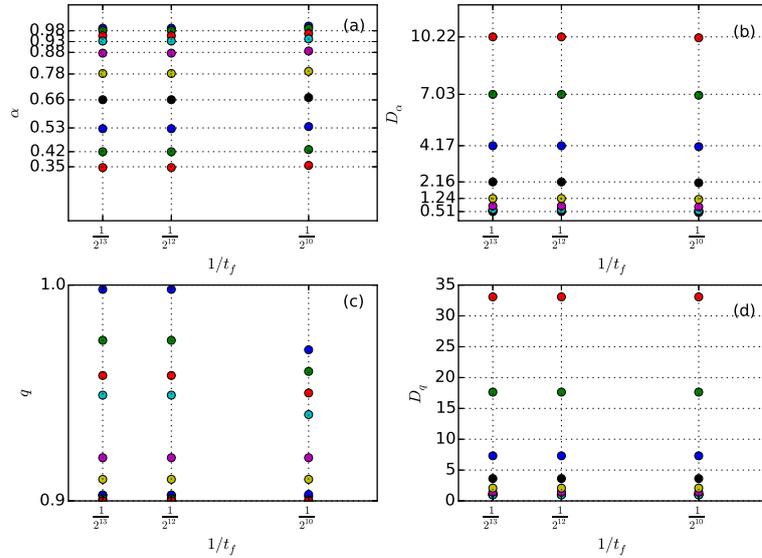


Figura 13 – FSS do parâmetro de escala intermediária tempo, t_f , para a parametrização dos modelos $G_\alpha(x, t)$ (69) e $P_q(x, t)$ (78) aplicado aos processos de subdifusão. Tem-se em (a) $1/t_f \times \alpha$, em (b) $1/t_f \times D_\alpha$, em (c) $1/t_f \times q$ e em (d) $1/t_f \times D_q$.

4.2 Parâmetros N e t_f obtidos pelo método de escala de tamanho finito

Como apresentado no capítulo 3 na seção 3.2, o método de escala de tamanho finito (FSS) foi utilizado para obter qual o número N adequado de séries e o tempo final t_f necessários para que as simulações se tornem estáveis, validando assim os modelos que

descrevem os processos de difusão anômala. As figuras 12, 13 e 14, 15 mostram este método aplicado aos parâmetros de escala intermediária N e t_f , respectivamente, para o conjunto de voos subdifusivos e superdifusivos gerados. As interseções de segmentos horizontais das curvas associadas aos parâmetros α , D_α , q , D_q e γ , D_γ em cada caso, com o eixo-y, mostram os valores de N e t_f para os quais o método mostra pouca sensibilidade ao seu aumento, podendo assim ser considerado ótimo em relação ao tempo de execução e à acurácia.

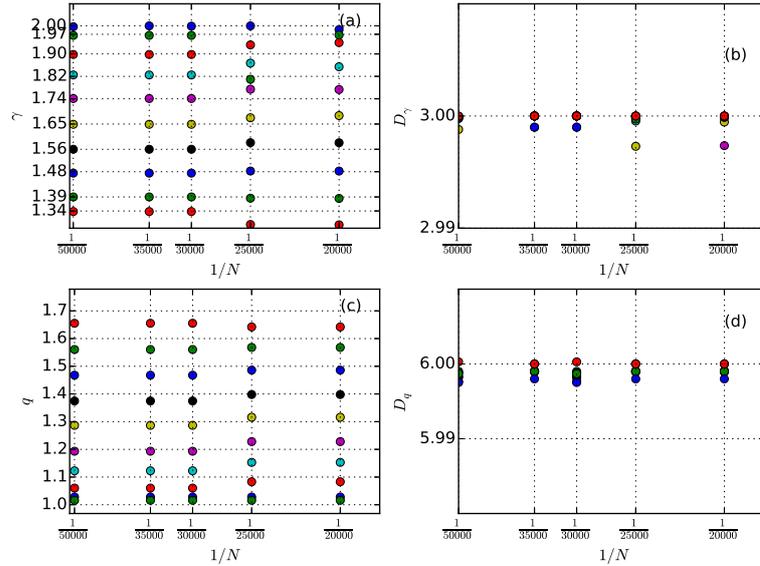


Figura 14 – FSS do parâmetro de escala intermediária número de partículas, N , para a parametrização dos modelos $L_\gamma(x, t)$ (73) e $P_q(x, t)$ (78) aos processos de superdifusão. Têm-se em (a) $1/N \times \gamma$, em (b) $1/N \times D_\gamma$, em (c) $1/N \times q$ e em (d) $1/N \times D_q$.

As figuras 12-(a) $1/N \times \alpha$, 12-(b) $1/N \times D_\alpha$, 12-(c) $1/N \times q$ e 12-(d) $1/N \times D_q$ mostram o FSS aplicado ao parâmetro N das simulações dos processos de subdifusão, $1 < s < 2$ e $r = 4$. É possível observar que quando N cresce em torno $N \approx 20.000$ a curva se torna horizontal próximo ao eixo das ordenadas dos parâmetros α , D_α e q , D_q . Por isso, na análise das simulações dos processos de subdifusão considerou-se $N = 20.000$. Analogamente, as figuras 13-(a) $1/t_f \times \alpha$, 13-(b) $1/t_f \times D_\alpha$, 13-(c) $1/t_f \times q$ e 13-(d) $1/t_f \times D_q$ apresentam o resultado do método FSS aplicado ao parâmetro t_f igual a 2^5 , 2^{10} e 2^{13} . Com base nestes resultados foi escolhido o valor $t_f = 2^{13}$, apesar de que, com $t_f = 2^{10}$, os valores do conjunto dos parâmetros α , D_α e q , D_q não apresentam variação.

As figuras 14-(a) $1/N \times \gamma$, 14-(b) $1/N \times D_\gamma$, 14-(c) $1/N \times q$ e 14-(d) $1/N \times D_q$ em mostram o FSS aplicado ao parâmetro N das simulações dos processos de superdifusão, $s = 4$ e $2 < r < 3$, com valores de N iguais 1.000, 10.000, 20.000 e 30.000. Para $N = 30.000$ a curva se torna horizontal próximo ao eixo das ordenadas dos parâmetros γ , D_γ e q , D_q . Por isso, na análise das simulações dos processos de superdifusão foi considerado

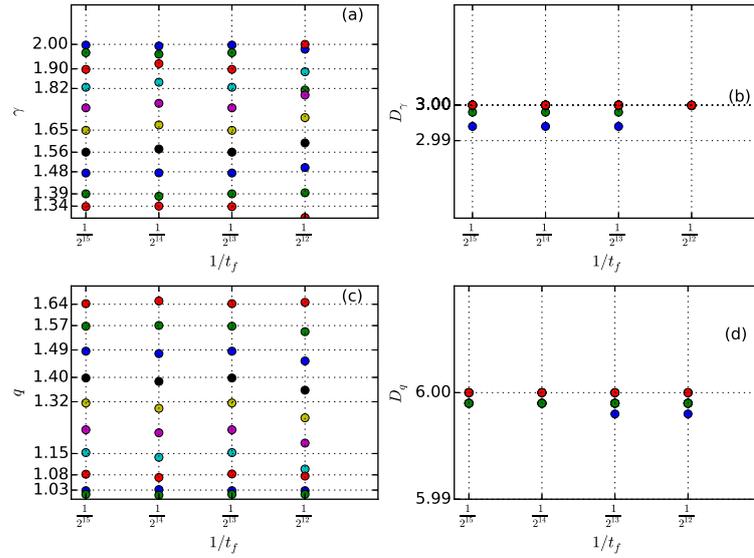


Figura 15 – FSS do parâmetro de escala intermediária tempo, t_f , para a parametrização dos modelos $L_\gamma(x, t)$ (73) e $P_q(x, t)$ (78) aplicado aos processos de superdifusão. Têm-se em (a) $1/t_f \times \gamma$, em (b) $1/t_f \times D_\gamma$, em (c) $1/t_f \times q$ e em (d) $1/t_f \times D_q$.

$N = 30.000$. Analogamente, 15-(a) $1/t_f \times \gamma$, 15-(b) $1/t_f \times D_\gamma$, 15-(c) $1/t_f \times q$ e 15-(d) $1/t_f \times D_q$ apresentam o resultado do método FSS aplicado ao tempo final t_f com valores iguais a 2^{10} , 2^{12} , 2^{13} e 2^{15} . Com base nestes resultados foi tomado $t_f = 2^{13}$.

4.3 Parâmetros obtidos via método de análise da medida da dispersão

Foi calculada a partir das N séries temporais subdifusivas e superdifusivas, respectivamente, Figuras 10 e 11, a evolução temporal do deslocamento médio quadrático, $\langle x^2(t) \rangle$. As figuras 16 e 17 mostram, respectivamente, $\langle x^2(t) \rangle$ calculados para o conjunto de voos subdifusivos e para os voos superdifusivos.

A partir do estudo da evolução temporal de $\langle x^2(t) \rangle$ foram obtidos os parâmetros μ e D_μ ajustando por regressão linear no plano das pequenas escalas, $\log_2 t \times \log_2 \langle x^2(t) \rangle$, a reta (59) aos voos normais ou subdifusivos e normais ou superdifusivos mostrados, respectivamente, nas figuras 16 e 17. Portanto, as retas ajustadas de acordo com estes parâmetros determinam os parâmetros de ajuste por análise da medida de dispersão para os modelos $G_\alpha(x, t)$ (69), $P_q(x, t)$ (78) e $L_\gamma(x, t)$ (73), como discutido no capítulo 3 na seção 3.3.

Utilizando μ e D_μ foram calculados os parâmetros de dispersão: α_d e D_{α_d} , através das relações (72), para os modelos lineares subdifusivos $G_{\alpha_d}(x, t)$ (69); γ_d e D_{γ_d} , através das relações (76), para os modelos lineares superdifusivos $L_{\gamma_d}(x, t)$ (73); e q_d e D_{q_d} , através das

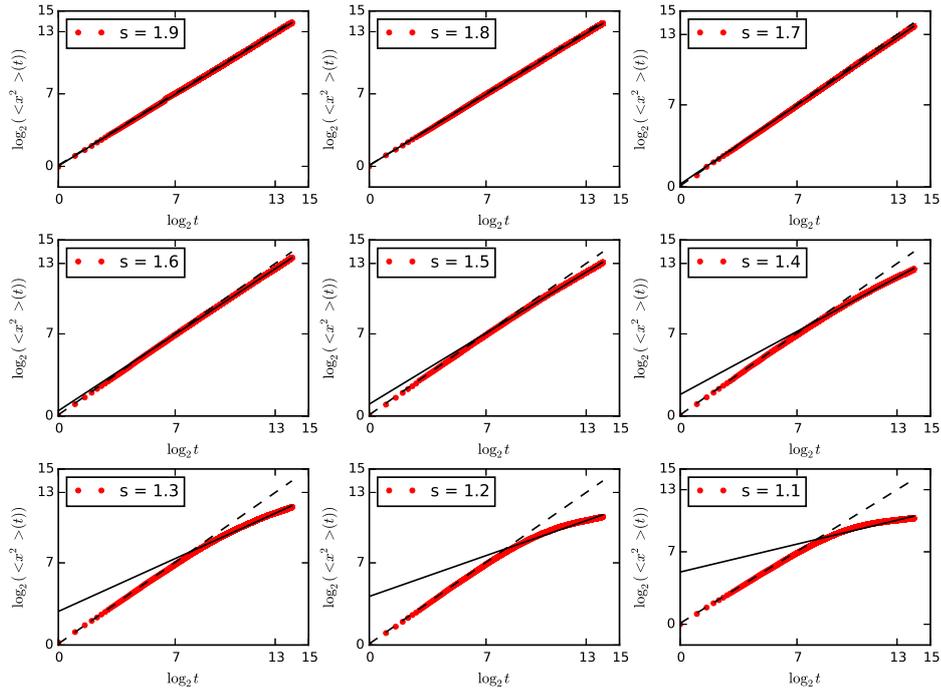


Figura 16 – Evolução temporal do deslocamento médio quadrático no plano $\log_2 t \times \log_2 \langle x^2(t) \rangle$ gerada pelo CTRW de uma população de $N = 20.000$ partículas em um tempo $t_f \geq 2^{13}$, para $r = 4$ fixo e $1 < s < 2$ variando de modo a obter o conjunto de voos subdifusivos. As retas foram ajustadas por regressão linear da equação (59) para determinar os parâmetros subdifusivos. Na medida em que $s \rightarrow 2$ o processo se torna mais próximo do regime de difusão normal. A reta tracejada corresponde ao caso normal, $\mu = 1$ e $D_\mu = 0.5$.

relações de Tsallis-Buckman (83), para o modelos não lineares $P_{q_d}(x, t)$ (78) subdifusivos se $q < 1$ e superdifusivos se $1 < q < 2$.

Os resultados dos parâmetros subdifusivos encontrados por este método podem ser vistos nas Tabelas 5 e 6 com, respectivamente, os expoentes α_d, q_d e os coeficientes D_{α_d}, D_{q_d} . Observe na figura 16 que $\langle x^2(t) \rangle$ exibe, pelo menos, dois regimes: começando no limite gaussiano e, suavemente, mudando a inclinação para, nas proximidades de $t = 2^7$, para alcançar uma assíntota consistente com um regime subdifusão. Isso ocorre à medida em que s torna-se criticamente distante da condição de normalidade ($s \geq 2$) e, então, os tempos muito grandes são eventos raros e estes se acumulam fazendo diferença somente a partir de uma certa escala de tempo, mudando a inclinação. Apesar disso, os parâmetros α_d e D_{α_d} encontrados por meio deste método ajustam bem as PDFs $G_{\alpha_d}(x, t)$ aos voos subdifusivos, como pode ser visto na Figura 20 e pelo RMSE (Δ_d) dado por $[2, 9 \times 10^{-3}, 1 \times 10^{-2}]$. Já os valores q_d encontrados, Tabela 5, pertencem a uma região onde $q < 1$. Neste caso, o teorema q -central do limite, seção 2.3.5, garante que as PDFs q -gaussianas $P_{q_d}(x, t)$ tendem para a PDF gaussiana. À medida que $s \rightarrow 1$ temos $\mu < 0$, ou seja, os modelos se afastam da PDF gaussiana. Desta forma, as PDFs $P_{q_d}(x, t)$ encontradas por este método

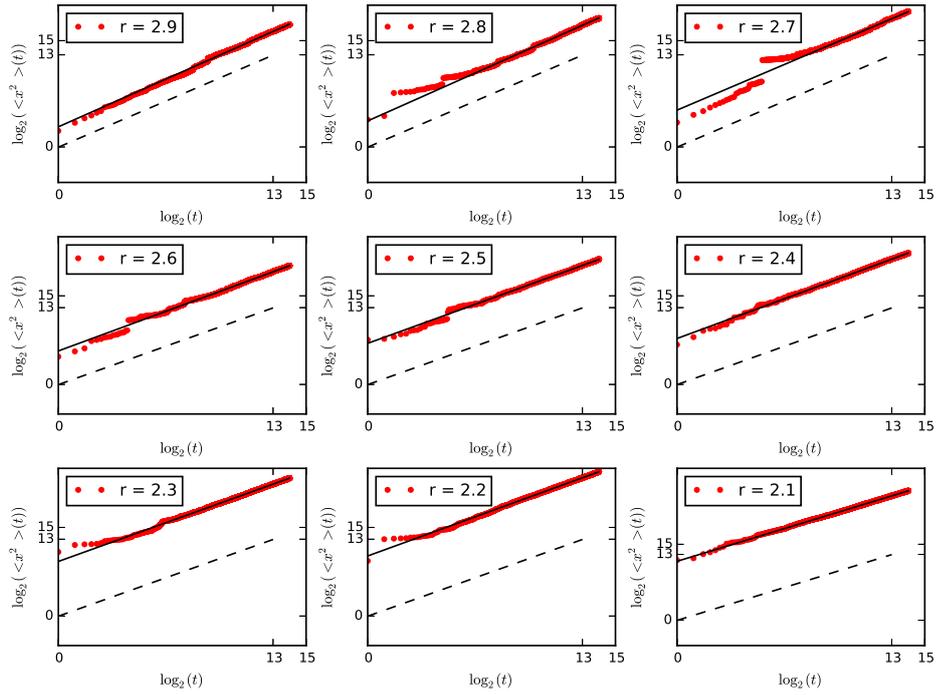


Figura 17 – Evolução temporal do deslocamento médio quadrático no plano $\log_2 t \times \log_2 \langle x^2(t) \rangle$ gerada pelo CTRW de uma população de $N = 30.000$ partículas em um tempo $t_f \leq 2^{13}$, para $s = 3$ fixo e $2 < r < 3$ variando de modo a obter um conjunto de voos superdifusivos. As retas foram ajustadas por regressão linear da equação (59) para determinar os parâmetros superdifusivos. Na medida em que $r \rightarrow 3$ o processo torna-se mais próximo do regime de difusão normal. A reta tracejada corresponde ao caso normal, $\mu = 1$ e $D_\mu = 0.5$.

não se ajustam bem aos voos subdifusivos, como pode ser observado na Figura 20, onde as curvas $P_{q_d}(x, t)$ não aparecem na região do intervalo, e por meio do $\Delta_d > 1$.

Nas Tabelas 7 e 8 estão, respectivamente, os resultados dos expoentes γ_d , q_d e dos coeficientes de difusão D_{γ_d} , D_{q_d} do conjunto de voos superdifusivos encontrados via análise da medida de dispersão. Observe, na figura 17, que os ensaios $\langle x^2(t) \rangle$ deste conjunto de voos sugerem o comportamento de um aspecto fractal chamado 'escadaria do diabo' (BURIONI et al., 2012; MUZY; BACRY; ARNEODO, 1991), especialmente para $r = 2.3$, $r = 2.7$ e $r = 2.8$. Este formato gera imprecisões quando empregamos regressão linear às simulações. Desta forma, os modelos superdifusivos $L_{\gamma_d}(x, t)$ (73) e $P_{q_d}(x, t)$ (78) obtidos por análise de dispersão da variância não se ajustam bem aos voos superdifusivos. Este fato pode ser visto nas Figuras 21 e por meio do $\Delta_d > 1$.

4.4 Parâmetros obtidos via método de otimização BFGS

O ajuste das PDFs $G_\alpha(x, t)$ (69), $L_\gamma(x, t)$ (73) e $P_q(x, t)$ (78), soluções de casos incluídos na equação de difusão não linear e fracionária (60), vista no capítulo 2, diretamente

aos histogramas de posições das Figuras 18 e 19 via método de otimização BFGS, geram as soluções teóricas que são os modelos $G_{\alpha_M}(x, t)$ e $P_{q_M}(x, t)$ com $q < 1$ para o conjunto de voos subdifusivos, e $L_{\gamma_M}(x, t)$ e $P_{q_M}(x, t)$ com $1 < q < 2$ para os voos superdifusivos.

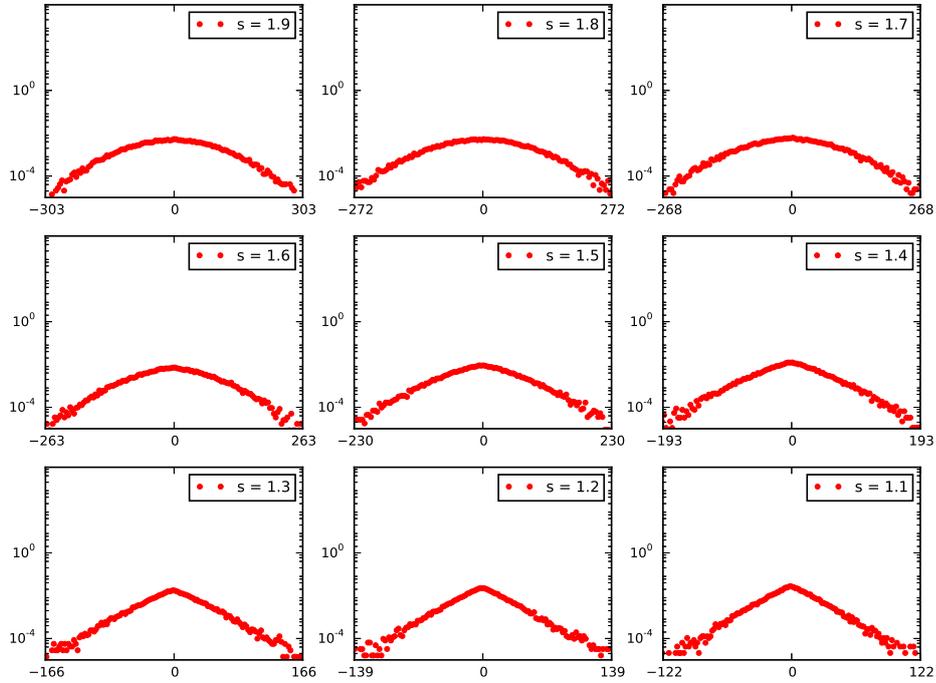


Figura 18 – Histograma de posições de uma população de $N = 20.000$ partículas de um voo subdifusivo gerado controlando a potência da distribuição do tempo de espera entre os saltos, $1 < s < 2$, segundo o critério de convergência / divergência, Tabela 3.

Tabela 5 – Expoentes de difusão α e q de processos subdifusivos gerados segundo PDFs de lei de potência para as variáveis aleatórias comprimento de saltos com $r = 4$ e tempo de espera entre os saltos com $1 < s < 2$. Os parâmetros obtidos por análise da variância e pelo método de otimização BFGS estão indexados, respectivamente, pelas letras d e M.

s	μ	α_d	α_M	q_d	q_M
3	1.001	1.001	0.9918	1.003	0.9980
1.9	0.9805	0.9805	0.9809	0.9603	0.9744
1.8	0.9577	0.9577	0.9569	0.9117	0.9581
1.7	0.9370	0.9370	0.9324	0.8654	0.9546
1.6	0.8764	0.8764	0.8764	0.7178	0.9027
1.5	0.7926	0.7926	0.7822	0.4768	0.9017
1.4	0.6712	0.6712	0.6607	0.0201	0.9027
1.3	0.5284	0.5284	0.5263	-0.7848	0.9026
1.2	0.4099	0.4099	0.4197	-1.880	0.9011
1.1	0.3304	0.3304	0.3464	-3.053	0.9001

Nas Tabelas 5 e 6 estão, respectivamente, os resultados dos expoentes de difusão α_M , q_M e dos coeficientes de difusão D_{α_M} , D_{q_M} do conjunto de voos subdifusivos encontrados

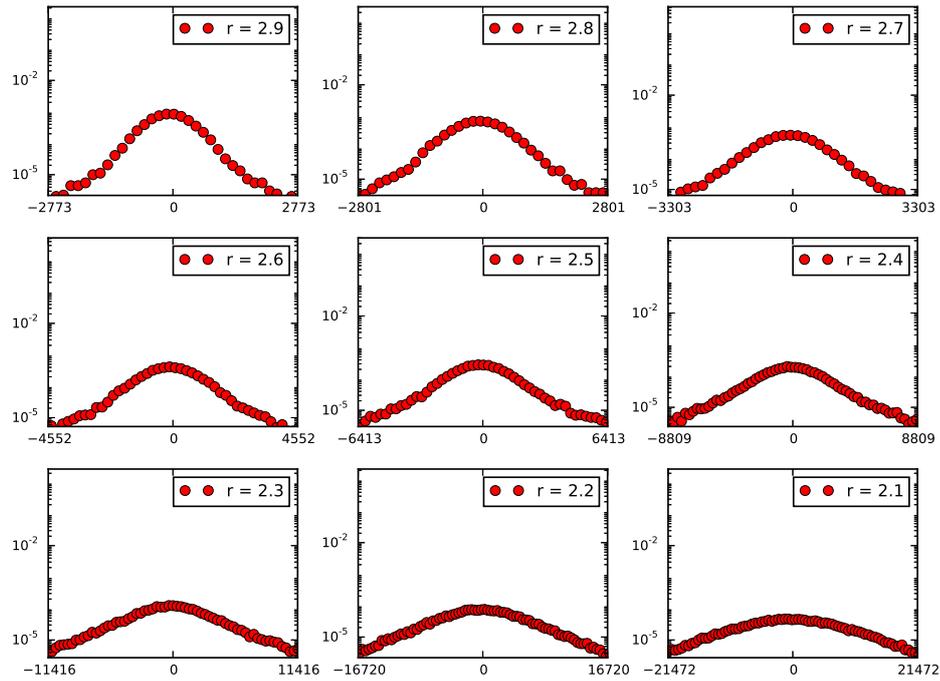


Figura 19 – Histograma de posições de uma população $N = 30.000$ partículas um voo superdifusivo gerados controlando a potência da distribuição de comprimento de saltos, $2 < r < 3$, segundo o critério de convergência / divergência (3)..

Tabela 6 – Coeficientes de difusão D_α e D_q de processos subdifusivos gerados segundo PDFs de lei de potência para as variáveis aleatórias comprimento de saltos com $r = 4$ e tempo de espera entre os saltos com $1 < s < 2$. Os parâmetros obtidos por análise da variância e pelo método de otimização BFGS estão indexados, respectivamente, pelas letras d e M.

s	D_μ	D_{α_d}	D_{α_M}	D_{q_d}	D_{q_M}
3	0.4821	0.4820	0.5362	0.4821	1.037
1.9	0.5111	0.5110	0.5121	0.5111	1.028
1.8	0.5773	0.5759	0.5756	0.5773	1.068
1.7	0.6256	0.6221	0.6215	0.6256	0.9689
1.6	0.8447	0.8245	0.8245	0.8447	1.414
1.5	1.324	1.236	1.236	1.324	2.074
1.4	2.523	2.158	2.157	2.523	3.620
1.3	5.454	4.168	4.168	5.454	7.313
1.2	9.742	6.960	7.026	9.742	17.64
1.1	14.66	10.22	10.22	14.66	33.08

por meio deste método. A Figura 20 mostra os modelos ajustados ao histograma do conjunto de dados gerados pelas simulações. Observe que, novamente, a PDF $P_{q_M}(x, t)$ com $q < 1$ não se adequa como modelo ao regime subdifusivo. Já os parâmetros α_M e D_{α_M} ajustam muito bem os modelos $G_{\alpha_M}(x, t)$ ao voos subdifusivos, como pode ser observado na mesma Figura e pelo $\Delta_M > 1$.

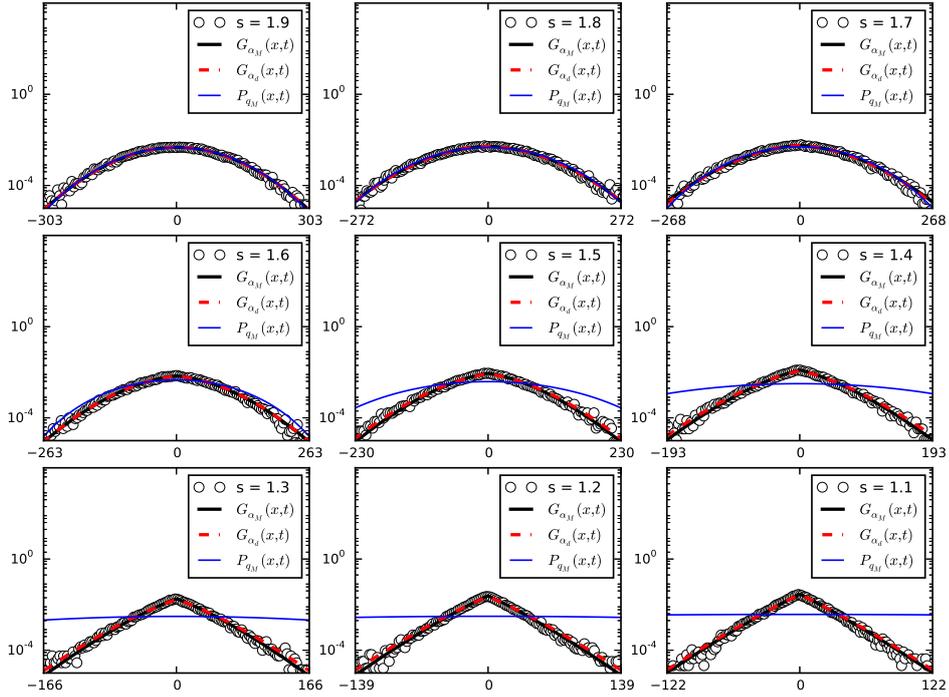


Figura 20 – Histogramas de posições de conjuntos voos subdifusivos com populações de $N = 20.000$ partículas em um tempo $t_f = 2^{13}$ e os respectivos modelos $G_\alpha(x, t)$ (69) e $P_q(x, t)$ (78) com os parâmetros obtidos pelo método de análise da dispersão e pelo método de otimização de BFGS, indexados pelas letras 'd' e 'M', respectivamente.

Já nas Tabelas 7 e 8 estão, respectivamente, os resultados dos expoentes de difusão γ_M, q_M e dos coeficientes de difusão D_{γ_M}, D_{q_M} do conjunto de voos superdifusivos encontrados via método BFGS de otimização. Ambas as PDFs, $L_{\gamma_M}(x, t)$ e $P_{q_M}(x, t)$ com $1 < q < 2$ se adequam bem como modelos ao conjunto de voos superdifusivos gerados com os valores dos parâmetros encontrados, como pode ser observado na Figura 21 e por meio do $\Delta_M = 10^{-4}$.

4.5 Comparação entre métodos e modelos

Como foi mencionado, o RMSE (Δ) foi utilizado para avaliar a qualidade dos ajustes das soluções modelos teóricos $G_\alpha(x, t)$ (69), $P_q(x, t)$ (78) e $L_\gamma(x, t)$ (73) aos dados de voos simulados nos diferentes regimes de subdifusão e superdifusão. Adicionalmente, o Δ pode ser usado para avaliar a acurácia entre os métodos de obtenção dos parâmetros do processo difusivo, são eles: $\alpha, D_\alpha, \gamma, D_\gamma, q$ e D_q . Outra avaliação possível, com esta mesma abordagem, é a adequação dos modelos teóricos aos processos simulados. A Tabela 9 traz a cota inferior ou superior dos valores de Δ para os casos de difusão anômala e classes de modelos. Os valores de Δ resultados da avaliação entre as simulações e os modelos obtidos via análise da dispersão foram indexados pela letra "d", bem como os obtidos via

Tabela 7 – Expoentes de difusão γ e q de processos superdifusivos gerados segundo PDFs de lei de potência para as variáveis aleatórias comprimento de saltos com $r = 4$ e tempo de espera entre os saltos com $1 < s < 2$. Os parâmetros obtidos por análise da variância e pelo método de otimização BFGS estão indexados, respectivamente, pelas letras d e M.

r	μ	γ_d	q_d	γ_M	q_M
4	0.9948	2.011	0.989	1.997	1.028
2.9	1.032	1.938	1.062	1.966	1.016
2.8	1.013	1.974	1.026	1.898	1.083
2.7	1.017	1.966	1.034	1.825	1.153
2.6	1.016	1.969	1.031	1.741	1.228
2.5	1.022	1.957	1.043	1.649	1.316
2.4	0.9925	2.015	0.9849	1.560	1.398
2.3	0.9899	2.004	0.9795	1.475	1.486
2.2	1.003	1.995	1.005	1.390	1.568
2.1	1.009	1.982	1.018	1.338	1.642

Tabela 8 – Coeficientes de difusão D_γ e D_q de processos superdifusivos gerados segundo PDFs de lei de potência para as variáveis aleatórias comprimento de saltos com $r = 4$ e tempo de espera entre os saltos com $1 < s < 2$. Os parâmetros obtidos por análise da variância e pelo método de otimização BFGS estão indexados, respectivamente, pelas letras d e M.

r	D_μ	D_{γ_d}	D_{q_d}	D_{γ_M}	D_{q_M}
4	0.5184	0.5184	0.518	0.4944	0.8574
2.9	3.601	3.601	3.601	2.998	5.999
2.8	9.055	9.055	9.055	3.000	5.958
2.7	14.29	14.29	14.29	3.000	6.000
2.6	28.38	28.38	28.37	3.000	5.999
2.5	55.58	55.58	55.58	3.000	5.999
2.4	159.5	159.5	159.4	3.000	5.999
2.3	350.6	314.5	314.5	2.984	5.998
2.2	667.7	667.7	667.7	3.000	5.999
2.1	1363	1363	1363	3.000	6.000

métodos de otimização BFGS pela letra "M". Quanto menor o valor obtidos de Δ melhor o ajustamento e a qualidade da previsão feita.

Tabela 9 – Cota superior ou inferior para a raiz do erro médio quadrático RMSE (Δ) para os casos de difusão anômala e classes de modelos. Os parâmetros obtidos por análise de dispersão e pelo método BFGS de otimização foram indexados, respectivamente, pelas letras 'd' e 'M'.

Dif. anom.	Método	$G_\alpha(x, t)$	$L_\gamma(x, t)$	$P_q(x, t)$
Subdifusão	An. dispersão	$\Delta_d \leq 10^{-3}$	-	$\Delta_d > 1$
	Otimização	$\Delta_M \leq 10^{-3}$	-	$\Delta_M \geq 10^{-3}$
Superdifusão	An. dispersão	-	$\Delta_d \geq 10^{-3}$	$\Delta_d > 1$
	Otimização	-	$\Delta_M \leq 10^{-4}$	$\Delta_M \leq 10^{-4}$

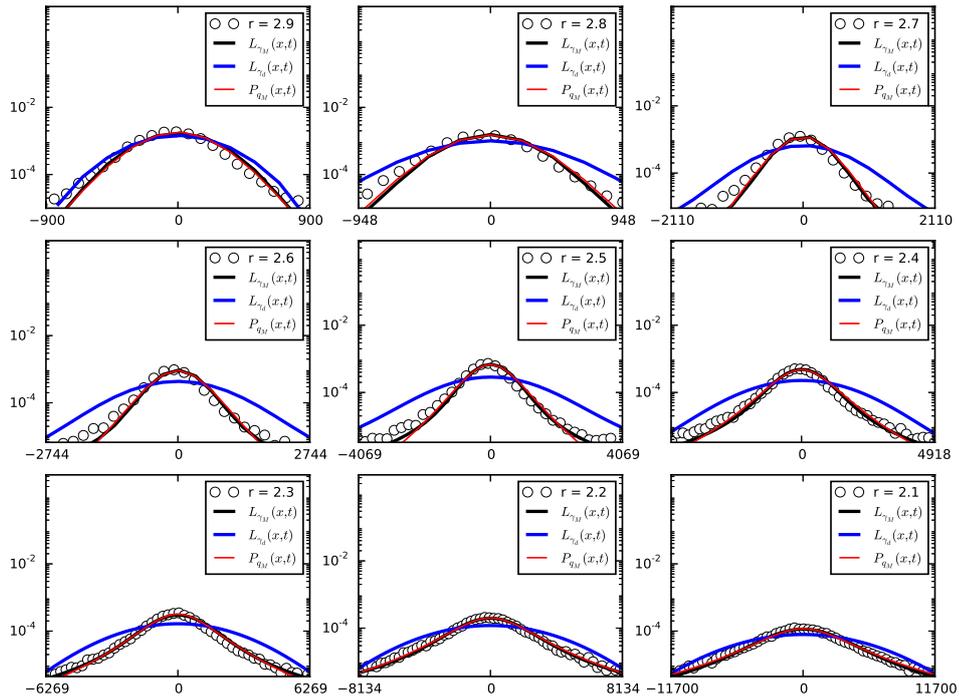


Figura 21 – Histogramas de posições de conjuntos voos superdifusivos com populações de $N = 30.000$ partículas em um tempo $t_f = 2^{13}$ e os respectivos modelos $L_\gamma(x, t)$ (73) e $P_q(x, t)$ (78) com os parâmetros obtidos pelo método de análise da dispersão e pelo método de otimização de BFGS, indexados pelas letras 'd' e 'M', respectivamente.

Quanto à qualidade dos ajustes dos modelos $G_\alpha(x, t)$ (69) e $P_q(x, t)$ (78) com $q < 1$, utilizados na descrição dos voos subdifusivos, pode-se constatar na Tabela 9 que os modelos $G_\alpha(x, t)$, obtidos tanto por análise de dispersão quanto pelo método de otimização, apresentam uma ordem 10^{-3} de Δ , $\Delta_d = \Delta_M \leq 10^{-3}$. O modelo $P_q(x, t)$ se ajusta bem somente para os casos em que o parâmetro expoente $q \rightarrow 1$ ($s = 1.9$, $s = 1.8$ e $s = 1.7$, Figura 20-Tabela 5), nestes casos $\Delta_M \leq 3$. Nesse sentido, o modelo $G_\alpha(x, t)$ é o mais recomendado.

Para ajustes com os modelos $L_\gamma(x, t)$ (73) e $P_q(x, t)$ (78) com $1 < q < 2$, com base na Tabela 9, recomenda-se somente os modelos $L_{\gamma_M}(x, t)$ e $P_{q_M}(x, t)$, obtidos via método de otimização BFGS. Esses apresentam Δ_M de uma ordem 10^{-4} , $\Delta_M \leq 10^{-4}$. É preciso ressaltar que no limite superdifusivo extremo o modelo $P_q(x, t)$ com $1 < q < 2$ se torna cada vez mais adequado.

Agora, analisando as duas abordagens adotadas para a calibração dos dados de voos simulados aos diferentes regimes de difusão anômala, têm-se uma baixa diferença percentual entre valores dos parâmetros encontrados via análise da medida de dispersão e via método de otimização BFGS para os modelos $G_\alpha(x, t)$ subdifusivos, sendo em média de 1.9% entre os expoentes de subdifusão α_d e α_M e de 0.07% entre os coeficientes

de subdifusão D_{α_d} e D_{α_M} . Estas baixas diferenças percentuais são vantajosas uma vez utilizamos os parâmetros α_d e D_{α_d} como pontos iniciais passados para o método de otimização BFGS. Não há diferença, neste caso, na escolha de qualquer um dos métodos para a obtenção dos modelos. O custo computacional de uma regressão linear é menor que métodos de minimizações especificamente se for implementado em algum sistema que envolva várias repetições deste processo. Sendo assim, o método de análise da dispersão, que obtém os modelos $G_{\alpha_d}(x, t)$ para os voos subdifusivos, é mais recomendado. Caso contrário, $G_{\alpha_M}(x, t)$ é mais adequado. Os parâmetros expoentes de subdifusão q_d e coeficiente de subdifusão D_{q_d} não adequam os modelos $P_{q_d}(x, t)$ com $q < 1$ aos voos simulados. Passados estes parâmetros como pontos iniciais ao método de otimização BFGS são encontrados apenas os modelos $P_{q_M}(x, t)$ que se adequam aos voos simulados gerados pela lei de potência (88) com $s = 1.9$, $s = 1.8$ e $s = 1.7$.

As diferenças médias percentuais dos valores entre os parâmetros encontrados via análise da medida de dispersão e via método de otimização BFGS para os modelos superdifusivos, são em média 15,74% para γ , 94,60% para D_γ , e de 20,74% para q e 89,21% para D_q . Isto se deve às já mencionadas imprecisões quando empregamos o método de regressão linear no ajuste às simulações que exibem aspecto de 'escadaria do diabo'. A obtenção dos parâmetros γ_M e D_{γ_M} que definem o modelo $L_{\gamma_M}(x, t)$ exige um tempo computacional elevado frente a obtenção dos parâmetros que definem o modelo $P_{q_M}(x, t)$. Por outro lado, é preciso salientar que as PDFs $P_q(x, t)$ apresentam uma certa sensibilidade à escolha dos parâmetros iniciais passados ao método de otimização BFGS. Deste modo, reforçamos a prescrição de adotar os parâmetros obtidos via método análise de dispersão como estado inicial do método de otimização BFGS. Frente estas observações, o modelo $L_{q_M}(x, t)$, obtido via método de otimização BFGS, pode ser considerado como o mais adequado na descrição de voos superdifusivos.

A Tabela 10 mostra um resumo dos resultados acima apontando o conjunto de modelos mais recomendados para os voos subdifusivos e superdifusivos.

Tabela 10 – Modelos mais adequados às simulações de processos difusivos anômalos.

Regimes de vôos	Modelos		
	Modelo linear	Modelo não linear	Mais recomendados
Subdifusivos	$G_\alpha(x, t)$	$P_q(x, t)$ com $q < 1$	$G_{\alpha_M}(x, t)$
Superdifusivos	$L_\gamma(x, t)$	$P_q(x, t)$ com $1 < q < 2$	$L_{\gamma_M}(x, t)$

4.6 Espaço de parâmetros subdifusivos e superdifusivos

Com o propósito de vincular os parâmetros das diferentes escalas dos processos difusivos anômalos, buscamos uma calibração que possa auxiliar na simulação de processos com parâmetros em pequena escala que conduzam a um modelo desejado em grande

escala. Ou, na via inversa, conhecidos os dados de um processo, determinar os parâmetros em grande escala e, em seguida, inferir as suas características dinâmicas em pequena escala através da calibração. Deste modo, as relações teóricas (89) e (90) dos casos lineares são usadas para comparar as previsões com as simulações para os regimes superdifusivos, figura 20, e superdifusivos, figura 21, no espaço de parâmetros.

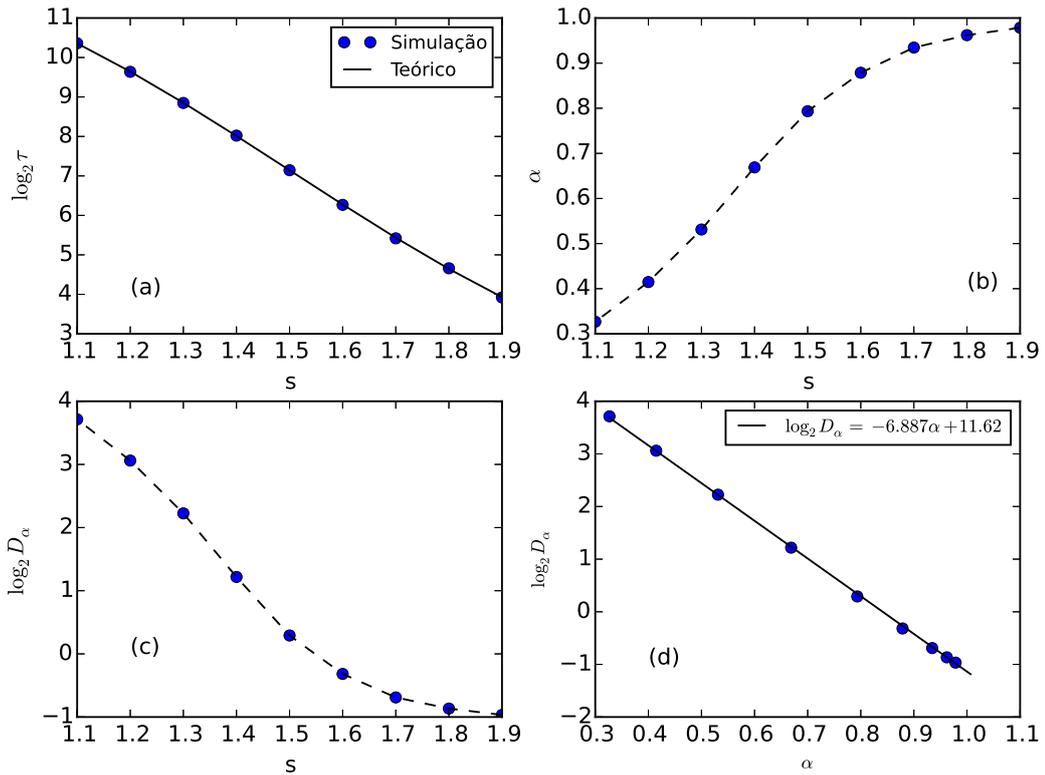


Figura 22 – Calibração dos processos subdifusivos no espaço de parâmetros restrito a $r = 4$ e $1 < s < 2$. (a) - Equação (89) para τ sobre os parâmetros da simulação; (b) e (c)- mostram as dependências entre s , α e $\log_2 D_\alpha$, respectivamente. (d) - reta obtida por regressão linear sobre os parâmetros da simulação.

A dependência paramétrica (91) da equação (89) para os casos subdifusivos pode ser vista na Figura 22. A equação (87) foi utilizada para calcular τ em função de s e, então, na Figura 22-(a), $\log_2 \tau(s)$ é a curva teórica projetada sobre os parâmetros obtidos por simulação. Observe que este modelo se ajusta com precisão aos parâmetros das simulações. Nas Figuras 22-(b) e (c) é retratada a dependência dos parâmetros de grande escala $\log_2 D_\alpha$ e α ao parâmetro de pequena escala s . Os resultados sugerem relações suaves. Para destacar a relação entre os parâmetros de grande escala $\log_2 D_\alpha$ e α foi feita uma regressão linear no espaço de parâmetros de grande escala $\alpha \times \log_2 D_\alpha$.

Semelhantemente, a dependência paramétrica (91) da equação (90) para os casos superdifusivos pode ser vista na Figura 23. Elas explicitam as dependências paramétricas de σ^2 , $\log_2 D_\gamma$ e de γ com r , e a relação entre $\log_2 D_\gamma$ e γ . Os resultados são qualitativamente

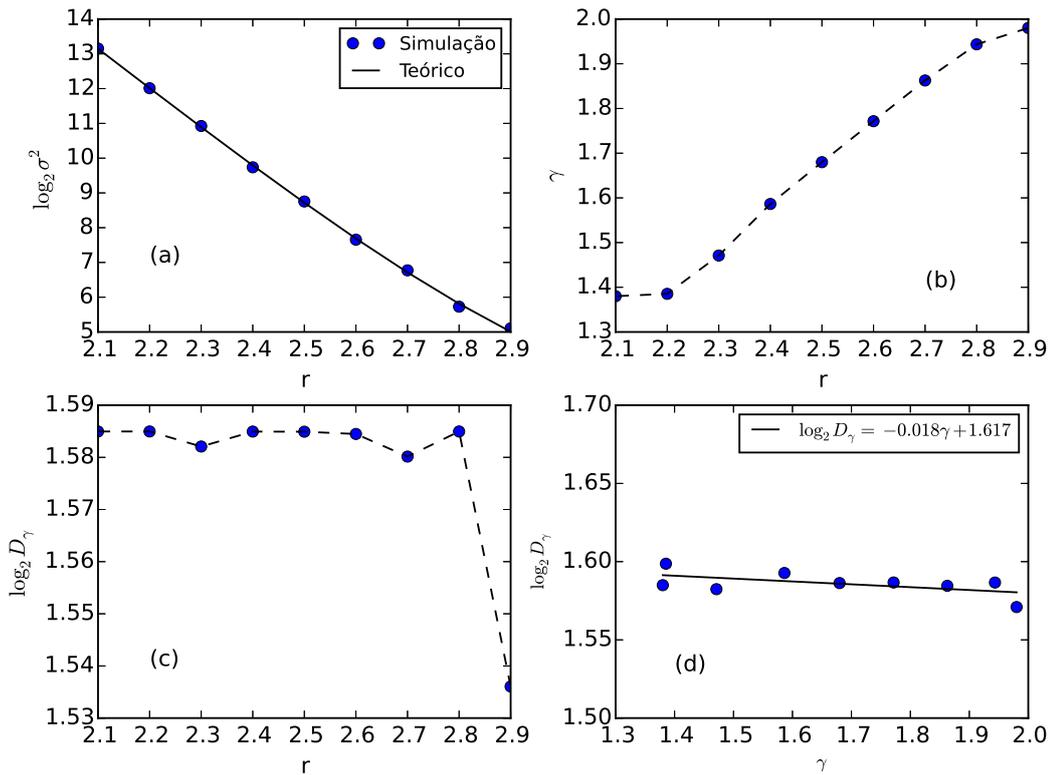


Figura 23 – Calibração dos processos superdifusivos no espaço de parâmetros restrito à $s = 3$ e $2 < r < 3$. (a) - Equação (90) para σ^2 sobre os parâmetros da simulação; (b) e (c)- mostram as dependências entre r , γ e $\log_2 D_\gamma$, respectivamente. (d) - reta obtida por regressão linear sobre os parâmetros da simulação.

similares ao caso subdifusivo discutido acima com flutuações mais visíveis em 23-(c) e 23-(d) provavelmente devido à resolução das escalas nos eixos ordenados.

As Figuras em 24 mostram as relações entre os parâmetros calibrados, incluindo a relação de Tsallis-Bukman (81). As curvas teóricas não se ajustam aos parâmetros encontrados para o caso subdifusivo, como esperado (Figs. 24 (a) e (b)). Para o regime superdifusivo, os processos se ajustam bem às curvas teóricas (Figs. 24 (c) e (d)) exceto para os casos onde os valores dos parâmetros no plano $D_\gamma \times D_q$ encontrados acumulam-se em torno de $D_\gamma \approx D_q \approx 3$. Já os parâmetros q_M e γ_M obtidos obedecem satisfatoriamente a relação de Tsallis-Bukman (81), Figura 24-(c).

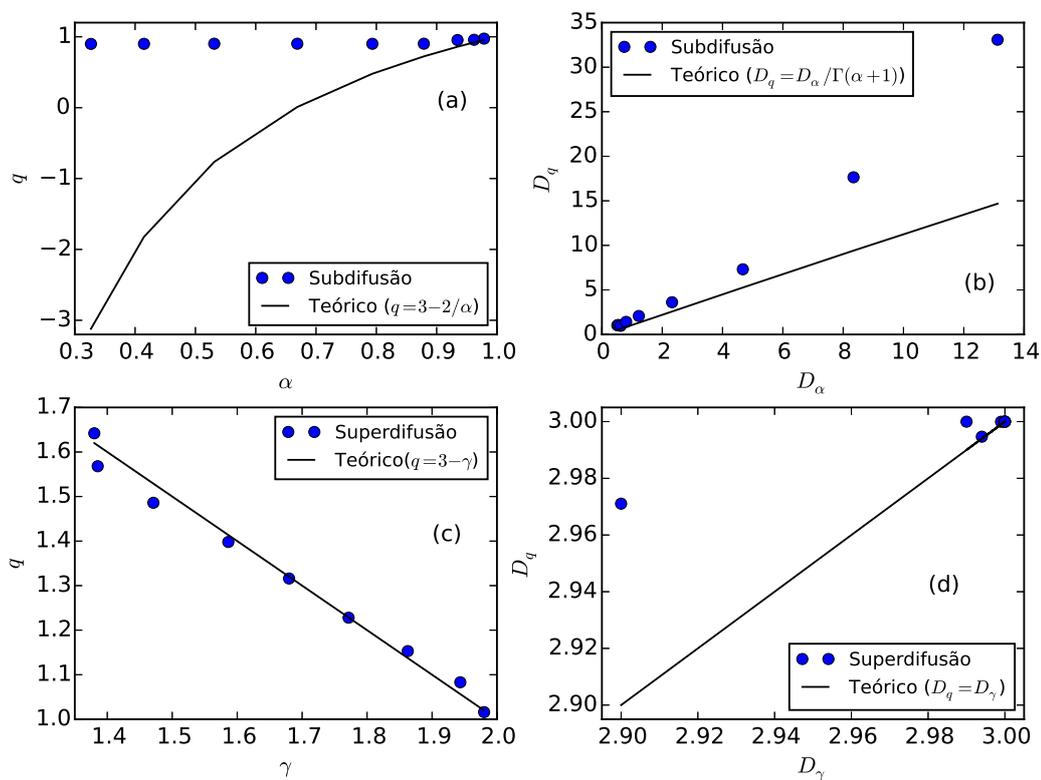


Figura 24 – Parâmetros obtidos das simulações e relações teóricas entre parâmetros de grande escala dos modelos lineares e não lineares para a subdifusão e a superdifusão. (a) e (b) correspondem aos processos subdifusivos, respectivamente, $\alpha \times q$, e $D_\alpha \times D_q$. (c) e (d) estão as relação entre $\gamma \times q$ e $D_\gamma \times D_q$ para os processos superdifusivos. A Figura (c) corresponde à relação de Tsallis-Bukman.

Capítulo 5

Conclusão

Neste trabalho, fixou-se uma prescrição para produzir voos aleatórios com uma lei de potência, que é capaz de determinar o comportamento assintótico das distribuições, sendo possível estabelecer uma calibração entre os parâmetros da simulação e dos modelos. De posse disso, podemos fazer inferência sobre a dinâmica em pequena escala, baseados no comportamento do sistema em grande escala.

Abordamos o problema do movimento browniano anômalo resultando em processos anômalos de difusão, que vão da subdifusão à superdifusão, sistematicamente por meio de simulações baseadas em um CTRW e modelos difusivos generalizados. Foi feita uma calibração entre os parâmetros da simulação e os parâmetros dos modelos e um estudo sobre os métodos de avaliação dos parâmetros. Como resultado obtivemos uma prescrição de duas vias para a associação de processos em pequena escala (ou simulação) e modelos em grande escala.

Em pequena escala, a distribuição escolhida para realizar a aleatoriedade por meio do método de Monte Carlo foi a PDF segundo lei de potência por determinar suficientemente a frequência assintótica dos eventos apenas com alguns parâmetros. Esta PDF mostrou-se, ainda, adequada para controlar os regimes anômalos subdifusivos aos superdifusivos. A definição das PDFs segundo lei de potência não depende unicamente do parâmetro de potência $p(r, s)$ mas também dos limites de integração inferior, ϵ , para evitar a singularidade em zero e superior, Λ , para fornecer a integrabilidade mesmo quando um determinado momento de interesse (τ, σ^2) é divergente. Para evitar a excessiva arbitrariedade, estabelecemos uma restrição a estes limites.

Uma outra restrição foi feita definindo os valores $r = 4$ fixo, enquanto s varia para gerar processos de subdifusão e, de forma análoga, r variando e $s = 3$ fixo para gerar processos de superdifusão. Essas restrições correspondem aos casos em que os momentos τ e σ^2 são, respectivamente, divergente e convergente em cada caso. Embora estabeleçamos um

valor para a convergência, não é restritivo como sugere, uma vez que o momento escolhido volta a ser convergente, de forma que os processos não apresentam muita sensibilidade ao valor fixo particular da lei de potência.

Da mesma forma, nem todos os casos de derivadas fracionárias combinadas no espaço e no tempo foram explorados e nos restringimos a dois casos especiais: em primeiro lugar, a derivada de primeira ordem no tempo foi definida inteira e igual a um, deixando a derivada fracionária apenas na variável espacial. Então, o contrário foi feito, definindo a derivada espacial inteira igual a dois com a derivada fracionária apenas na variável temporal. O caso geral, com derivadas fracionárias tanto na variável espacial quanto na variável temporal, ainda deve ser estudado.

O estudo da comparação entre os métodos de avaliação dos parâmetros do modelo em grande escala e das simulações indicaram que, a otimização via método BFGS das PDFs soluções modelos aos histogramas de posições do CTRW anômalo apresentou raiz do erro médio quadrático dos desvios inferior ao método de regressão linear da evolução temporal da variância. O resultado foi importante para definir o método mais preciso para o estudo da calibração a ser conduzida.

Ao longo dos testes, a análise de variância nem sempre mostrou tendências em dados recuperados pelo conjunto de voos superdifusivos estudados. Atribuímos este fato a imprecisões introduzidas pela oscilação da escada do diabo. Além disso, para a o conjunto de voos subdifusivos, observou-se um período transitório de difusão normal. Este efeito também pode causar imprecisões. Estes efeitos são razoáveis uma vez que para tempos grandes as etapas no CTRW são de eventos raros, levando a um tempo grande de simulação para que seus efeitos prevaleçam no processo.

O ajuste por otimização dos modelos aos dados de simulação para avaliar os parâmetros de grande escala são referidos aos próprios modelos e assim, pode-se decidir de acordo com as características do processo como linearidade ou não. Por essas razões, o método de otimização foi preferencial para realizar a calibração.

Os modelos lineares de equações diferenciais parciais fracionárias foram adequados aos processos de subdifusão e superdifusão com exatidão satisfatória. Com os parâmetros recuperados e com base na teoria subjacente desenvolvida, foi possível estabelecer relações entre os parâmetros da simulação e os modelos úteis para decidir qual o modelo mais adequado para um determinado processo bem como a simulação mais adequada para uma distribuição observada.

Nos ajustes para a superdifusão a distribuição com a q -gaussiana apresentou valores maiores na raiz dos desvios quadráticos médios do que as distribuições de Lévy, no entanto,

o ajuste com a q -gaussiana é satisfatório. Verificou-se também para o processo superdifusivo as relações entre os parâmetros de grande escala nos casos dos modelos lineares e não lineares, bem como as relações entre os coeficientes de difusão. As q -gaussianas não se ajustaram bem ao conjunto de voos subdifusivos. Desta forma, as relações entre os expoentes e as relações entre os coeficientes de difusão não foram verificadas para os modelos não lineares. Contudo, é preciso ter em mente o fato de que a equação diferencial cujo resultado é a q -gaussiana é uma equação de Fokker-Planck não linear que é compatível com interações entre as partículas do sistema e nossas simulações não contemplam este tipo de relação. No entanto, as q -gaussianas tiveram ajustes satisfatórios aos histogramas de posições nos voos superdifusivos pois, no limite deste processo, as interações entre as partículas tornam-se menos importantes do que no limite do processo subdifusivo. Como trabalho futuro, a calibração pode se estender para simulações e modelos de interação entre as partículas.

5.1 Trabalhos Futuros

Como continuidade destes estudos, apontamos:

- (1) Simulações não lineares (interações entre as partículas).
- (2) Recomenda-se estudos adicionais sobre métodos de otimização.
- (3) Casos mais gerais das EDPs e incluir outros termos como drift nas equações.
- (4) Estamos trabalhando na difusão anômala de preços de ativos financeiros e de fatores de transcrição do DNA, usando o aparato desenvolvido neste trabalho.
- (5) Aplicar o método de escala finita sobre r e s .

Referências

- AGRAWAL, O. P. Fractional variational calculus in terms of riesz fractional derivatives. **Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical**, IOP Publishing, v. 40, n. 24, p. 6287, 2007. Citado 3 vezes nas páginas 5, 11 e 18.
- ANTENEODO, C.; DIAS, J. C.; MENDES, R. S. Long-time behavior of spreading solutions of schrödinger and diffusion equations. **Physical Review E**, APS, v. 73, n. 5, p. 051105, 2006. Citado na página 50.
- ARAFI, A. A. M.; RIDA, S. Z. Exact solutions of fractional-order biological. **Communications in Theoretical Physics**, v. 6, p. 992–996, 2009. Citado 2 vezes nas páginas 5 e 38.
- BACHELIER, L. et al. **Louis Bachelier's Theory of Speculation: The Origins of Modern Finance**. [S.I.]: Princeton University Press, 2011. ISBN 9781400829309. Citado na página 2.
- BALESCU, R. Anomalous transport in turbulent plasmas and continuous time random walks. **Physical Review E**, APS, v. 51, n. 5, p. 4807, 1995. Citado na página 3.
- BANKS, D. S.; RANDIN, C. Anomalous diffusion of proteins due to molecular crowding. **Biophysical Journal**, Elsevier, v. 89, n. 5, p. 2960 – 2971, 2005. Citado 2 vezes nas páginas 3 e 4.
- BARTUMEUS, F. et al. Animal search strategies: A quantitative random-walk analysis. **Ecology**, Wiley Online Library, v. 86, n. 11, p. 3078–3087, 2005. Citado na página 4.
- BENHAMOU, S. How many animals really do the lévy walk? **Ecology**, Wiley Online Library, v. 88, n. 8, p. 1962–1969, 2007. Citado na página 4.
- BIAGI, S. F. Monte carlo simulation of electron drift and diffusion in counting gases under the influence of electric and magnetic fields. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment**, Elsevier, v. 421, n. 1, p. 234–240, 1999. Citado na página 4.
- BOLOGNA, M.; TSALLIS, C.; GRIGOLINI, P. Anomalous diffusion associated with nonlinear fractional derivative fokker-planck-like equation: exact time-dependent solutions. **Physical Review E**, v. 62, p. 2213, 2000. Citado 2 vezes nas páginas 5 e 40.
- BOUCHAUD, J. F.; GEORGES, A. Anomalous diffusion in disordered media: statistical mechanisms, models and physical applications. **Physics Reports**, v. 195, p. 127–293, 1990. Citado 5 vezes nas páginas 3, 5, 37, 38 e 48.
- BOYCE, W. E.; DIPRIMA, R. C. **Equações diferenciais elementares e problemas de valores de contorno**. [S.I.]: Guanabara Dois, 1985. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 20.
- BURIONI, R. et al. Scattering lengths and universality in superdiffusive lévy materials. **Physical Review E**, APS, v. 86, n. 3, p. 031125, 2012. Citado na página 65.
- CAMARGO, R. F.; CAPELAS, E. O. **Cálculo Fracionário**. 1a. ed.. ed. [S.I.]: Editora livraria da física, 2015. Citado 8 vezes nas páginas 9, 11, 16, 17, 18, 23, 25 e 42.

- CAPUTO, M. **Elasticita e Dissipazione**. [S.l.]: Zanichelli, 1969. Citado na página 17.
- CLAUSET, A.; SHALIZI, C. R.; NEWMAN, M. E. J. Power-law distributions in empirical data. **SIAM review**, SIAM, v. 51, n. 4, p. 661–703, 2009. Citado na página 53.
- COMBE, G. et al. Experimental validation of a nonextensive scaling law in confined granular media. **Physical Review Letters**, APS, v. 115, p. 238301, Dec 2015. Citado na página 50.
- CORDEIRO, G. M. **Introdução à teoria assintótica**. [S.l.]: IMPA, 1999. Citado na página 30.
- COSTA, F. S. et al. As integrais de mellin-barnes e a função de fox. **Trends in Applied and Computational Mathematics**, v. 12, n. 2, p. 157–169, 2011. Citado na página 19.
- DAS, S. **Functional Fractional Calculus for Systems Identifications and Controls**. [S.l.]: Springer-Verlag, 2008. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 20.
- DAVIS, H. T. **The Theory of Linear Operators**. [S.l.]: Read Books, 2008. Citado na página 13.
- DIETHELM, K. **The Analysis of Fractional Differential Equations**. [S.l.]: Springer-Verlag, 2010. Citado na página 15.
- EINSTEIN, A. **Investigations on the Theory of the Brownian Movement**. [S.l.]: Courier Corporation, 1956. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 4.
- FELLER, W. **An introduction to probability theory and its applications**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2008. v. 2. Citado 3 vezes nas páginas 30, 34 e 35.
- FICK, A. Ueber diffusion. **Annalen der Physik**, WILEY-VCH Verlag, v. 170, n. 1, p. 59–86, 1855. Citado na página 3.
- FISCHER, H. **A history of the central limit theorem: From classical to modern probability theory**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2010. Citado 2 vezes nas páginas 2 e 34.
- FOURIER, J. B. J. **Théorie de la propagation de la chaleur dans les solides**. [S.l.: s.n.], 1807. Citado na página 3.
- GAROSI, G. A.; BEKEFI, G.; SCHULZ, M. Anomalous diffusion and resistivity of a turbulence, weakly ionized plasma. **Physical Review Letters**, v. 15, p. 334, 1969. Citado na página 4.
- GHAEMI, M.; ZABIHINPOUR, Z.; ASGARI, Y. Computer simulation study of the lévy flight process. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, Elsevier, v. 388, n. 8, p. 1509–1514, 2009. Citado na página 3.
- GILLIS, J. E.; WEISS, G. H. Expected number of distinct sites visited by a random walk with an infinite variance. **Journal of Mathematical Physics**, AIP, v. 11, n. 4, p. 1307–1312, 1970. Citado 3 vezes nas páginas 34, 37 e 38.
- GNEDENKO, B. V.; KOLMOGOROV, A. N. Limit distributions for sums of independent random variables. **Bull. Amer. Math. Soc**, v. 62, p. 50–52, 1956. Citado 2 vezes nas páginas 5 e 34.

- GORENFLO, R. et al. Fractional diffusion: probability distributions and random walk models. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, Elsevier, v. 305, n. 1, p. 106–112, 2002. Citado 4 vezes nas páginas 8, 38, 39 e 44.
- HATTNE, J.; FANGE, D.; ELF, J. Stochastic reaction-diffusion simulation with meso rd. **Bioinformatics**, Oxford University Press, v. 21, n. 12, p. 2923–2924, 2005. Citado na página 4.
- HILFER, R. (Ed.). **Applications of fractional calculus in physics**. [S.l.]: World Scientific, 2000. Citado na página 18.
- HILHORST, H. J. Central limit theorems for correlated variables: some critical remarks. **Brazilian Journal of Physics**, SciELO Brasil, v. 39, n. 2A, p. 371–379, 2009. Citado na página 50.
- HILL, N. A.; HÄDER, D. P. A biased random walk model for the trajectories of swimming micro-organisms. **Journal of Theoretical Biology**, Elsevier, v. 186, n. 4, p. 503–526, 1997. Citado na página 3.
- HOLMES, E. E. et al. Partial differential equations in ecology: spatial interactions and population dynamics. **Ecology**, Wiley Online Library, v. 75, n. 1, p. 17–29, 1994. Citado na página 3.
- HUGHES, B. **Random walks and random environments**. [S.l.]: Clarendon Press; Oxford University Press, 1995. v. 2. 252 p. Citado na página 2.
- JOHNSON, A. R. et al. Animal movements and population dynamics in heterogeneous landscapes. **Landscape ecology**, Springer, v. 7, n. 1, p. 63–75, 1992. Citado na página 3.
- KENKRE, V. M.; MONTROLL, E. W.; SHLESINGER, M. F. Generalized master equations for continuous-times random walks. **Journal of Statistical Physics**, v. 9, p. 45–50, 1973. Citado 2 vezes nas páginas 5 e 48.
- KIMMICH, R. **NMR: tomography, diffusometry, relaxometry**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012. Citado na página 3.
- KIVELSON, S. A.; FRADKIN, E.; EMERY, V. J. Electronic liquid-crystal phases of a doped mott insulator. **Nature**, Nature Publishing Group, v. 393, n. 6685, p. 550–553, 1998. Citado na página 3.
- KLAFTER, J.; SHLESINGER, M. F.; ZUMOFEN, G. Beyond brownian motion. **Physics today**, AIF, v. 49, n. 2, p. 33–39, 1996. Citado 2 vezes nas páginas 4 e 33.
- KLAFTER, J.; ZUMOFEN, G.; BLUMEN, A. Non-brownian transport in complex systems. **Chemical physics**, Elsevier, v. 177, n. 3, p. 821–829, 1993. Citado na página 40.
- KOROLIUK, V. S. Classic of limit theorems in the theory of probability. **Methodology and Computing in Applied Probability**, Springer Science & Business Media, v. 17, n. 1, p. 5, 2015. Citado 2 vezes nas páginas 5 e 34.
- KRAMERS, H. A. Brownian motion in a field of force and the diffusion model of chemical reactions. **Physica**, Elsevier, v. 7, n. 4, p. 284–304, 1940. Citado na página 4.

LAGUTIN, A.; TYUMENTSEV, A. Monte carlo simulations of anomalous diffusion of cosmic rays. **Journal of physics: conference series**, v. 409, 2013. Citado 2 vezes nas páginas [53](#) e [55](#).

LENZI, E. K. et al. Anomalous diffusion, nonlinear fractional fokker–planck equation and solutions. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, Elsevier, v. 319, p. 245–252, 2003. Citado 2 vezes nas páginas [6](#) e [40](#).

LENZI, E. K.; MENDES, R. S.; TSALLIS, C. Crossover in diffusion equation: Anomalous and normal behaviors. **Physical Review E**, v. 67, 2003. Citado 4 vezes nas páginas [5](#), [47](#), [48](#) e [49](#).

LÉVY, P. **Calcul des probabilités**. [S.I.]: Gauthier-Villars, 1925. Citado na página [34](#).

LEWIS, M. A.; MAINI, P. K.; PETROVSKII, S. V. Dispersal, individual movement and spatial ecology. **Lecture Notes in Mathematics (Mathematics Bioscience Series)**, Springer, v. 2071, 2013. Citado na página [4](#).

LIU, D. C.; NOCEDAL, J. On the limited memory bfgs method for large scale optimization. **Mathematical programming**, Springer, v. 45, n. 1-3, p. 503–528, 1989. Citado na página [57](#).

LUCHKO, Y. Anomalous diffusion: Models, their analysis, and interpretation. In: **Advances in Applied Analysis**. [S.I.]: Springer, 2012. p. 115–145. Citado 6 vezes nas páginas [5](#), [26](#), [34](#), [35](#), [37](#) e [38](#).

MAGDZIARZ, M.; WERON, A.; WERON, K. Fractional fokker-planck dynamics: Stochastic representation and computer simulation. **Physical Review E**, APS, v. 75, n. 1, p. 016708, 2007. Citado na página [4](#).

MAINARDI, F. The fundamental solutions for the fractional diffusion-wave equations. **Applied Mathematics Letters**, v. 9, n. 6, p. 23–28, 1996. Citado 6 vezes nas páginas [5](#), [11](#), [12](#), [25](#), [37](#) e [43](#).

MAINARDI, F. **Fractional Calculus and Waves in Linear Viscoelasticity: An Introduction to Mathematical Models**. 2. ed. [S.I.]: Imperial College Press, 2010. Citado 2 vezes nas páginas [11](#) e [12](#).

MALLAMACE, F.; STANLEY, H. **The Physics of Complex Systems**. [S.I.]: IOS Press, 1997. v. 134. Citado 2 vezes nas páginas [37](#) e [38](#).

MENDES, R. S. et al. Random walks associated with nonlinear fokker–planck equations. **Entropy**, Multidisciplinary Digital Publishing Institute, v. 19, n. 4, p. 155, 2017. Citado na página [35](#).

METZLER, R.; KLAFTER, J. The random walk’s guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach. **Physics reports**, Elsevier, v. 339, n. 1, p. 1–77, 2000. Citado 14 vezes nas páginas [x](#), [1](#), [3](#), [4](#), [5](#), [25](#), [26](#), [27](#), [33](#), [35](#), [37](#), [38](#), [39](#) e [44](#).

METZLER, R.; NONNENMACHER, T. F. Space - and time-fracitonal diffusion and wave equations, fractional fokker-planck equations, and physical motivation. **Chemical Physics**, v. 284, p. 67–90, 2002. Citado 5 vezes nas páginas [5](#), [37](#), [41](#), [47](#) e [48](#).

MONTGOMERY, D. C. **Estatística aplicada e probabilidade para engenheiros**. [S.l.]: Livros Técnicos e Científicos, 2003. Citado na página 30.

MONTROLL, E. W.; SCHER, H. Random walks on lattices. iv. continuous-time walks and influence of absorbing boundaries. **Journal of Statistical Physics**, Springer, v. 9, n. 2, p. 101–135, 1973. Citado na página 35.

MONTROLL, E. W.; WEISS, G. H. Random walks on lattices. **Journal of Mathematical Physics**, II, p. 6–167, 1965. Citado 5 vezes nas páginas 5, 26, 29, 35 e 48.

MONTROLL, E. W.; WEST, B. J. On an enriched collection of stochastic processes. **Fluctuation phenomena**, North-Holland, Amsterdam, v. 66, p. 61, 1979. Citado na página 35.

MUZY, J.; BACRY, E.; ARNEODO, A. Wavelets and multifractal formalism for singular signals: Application to turbulence data. **Physical review letters**, APS, v. 67, n. 25, p. 3515, 1991. Citado na página 65.

PEREIRA, A. P. P. et al. Simulation and calibration between parameters of continuous time random walks and subdiffusive model. **Tema**, v. 18, p. 1–11, 2017. Citado 2 vezes nas páginas 4 e 56.

PODLUBNY, I. **Fractional Differential Equations: An Introduction to Fractional Derivatives, Fractional Differential Equations, to Methods of Their Solution and Some of Their Applications**. [S.l.]: Elsevier Science, 1998. (Mathematics in Science and Engineering). ISBN 9780080531984. Citado 16 vezes nas páginas 9, 11, 12, 13, 14, 15, 17, 18, 20, 21, 22, 23, 39, 41, 43 e 44.

PRIVMAN, V. **Finite size scaling and numerical simulation of statistical systems**. [S.l.]: World Scientific, 1990. Citado na página 56.

REYNOLDS, A. Liberating lévy walk research from the shackles of optimal foraging. **Physics of Live Reviews**, v. 14, p. 59–83, 2015. Citado 3 vezes nas páginas 4, 37 e 38.

RICHARDSON, L. F. Atmospheric diffusion shown on a distance-neighbour graph. **Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, The Royal Society, v. 110, n. 756, p. 709–737, 1926. Citado na página 3.

RYCROFT, C. H. **Lecture 1: Introduction to Random Walks and Diffusion**. [S.l.]: Massachusetts institute of technology, 2005. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 2.

SALGADO, G. H. O. **Métodos numéricos para solução de equações diferenciais segundo a derivada de Caputo**. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Minas Gerais, Departamento de Engenharia Elétrica, Curso de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica, Belo Horizonte, 2015. Citado 5 vezes nas páginas 9, 14, 16, 18 e 22.

SALINAS, S. R. A. **Introdução a física estatística**. [S.l.]: Edusp, 1997. v. 9. Citado na página 26.

SAMKO, S. G. et al. **Fractional Integrals and Derivatives: Theory and Applications**. [S.l.]: Gordon and Breach Science Publishers, 1993. Citado 4 vezes nas páginas 18, 25, 41 e 46.

SCHER, H.; MONTROLL, E. W. Anomalous transit-time dispersion in amorphous solids. **Physical Review B**, APS, v. 12, n. 6, p. 2455, 1975. Citado na página 35.

SERAFIM, D. V. **Equações de difusão e o cálculo fracionário**. Tese (Doutorado) — Universidade Estadual de Maringá, Departamento de Física, Curso de Pós-Graduação em Física, Maringá, 2015. Citado 6 vezes nas páginas 3, 15, 18, 25, 27 e 35.

SHIN, Y. K. et al. Microscopic versus macroscopic diffusion in model membranes by electron spin resonance spectral-spatial imaging. **Biophysical journal**, Elsevier, v. 59, n. 4, p. 950–957, 1991. Citado na página 3.

SHLESINGER, M. F.; KLAFTER, J. On the relationship among three theories of relaxation in disordered systems. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, v. 83, p. 848–851, 1986. Citado 2 vezes nas páginas 32 e 37.

SHLESINGER, M. F.; KLAFTER, J.; WONG, Y. M. Random walks with infinite spatial and temporal moments. **Journal of Statistical Physics**, v. 27, n. 3, p. 499–512, Mar 1982. Citado 4 vezes nas páginas 5, 29, 30 e 37.

SHLESINGER, M. F.; KLAFTER, J.; ZUMOFEN, G. Above, below and beyond brownian motion. **American Journal of Physics**, AAPT, v. 67, n. 12, p. 1253–1259, 1999. Citado 3 vezes nas páginas 3, 25 e 36.

SHLESINGER, M. F.; ZASLAVSKY, G. M.; FRISCH, U. Lévy flights and related topics in physics. **Lecture notes in physics**, Springer, v. 450, p. 52, 1995. Citado 3 vezes nas páginas 3, 4 e 33.

SOKOLOV, I. M.; KLAFTER, J. From diffusion to anomalous diffusion: a century after einstein's brownian motion. **Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science**, AIP, v. 15, n. 2, p. 026103, 2005. Citado 3 vezes nas páginas 1, 4 e 33.

STEPHENSON, J. Some non-linear diffusion equations and fractal diffusion. **Physica A**, v. 222, p. 234–247, 1995. Citado na página 3.

SUGITA, Y.; OKAMOTO, Y. Replica-exchange molecular dynamics method for protein folding. **Chemical physics letters**, Elsevier, v. 314, n. 1, p. 141–151, 1999. Citado na página 3.

TSALLIS, C. Possible generalization of boltzmann-gibbs statistics. **Journal of Statistical Physics**, v. 52, p. 479–487, 1988. Citado 2 vezes nas páginas 40 e 49.

TSALLIS, C. **Introduction to Nonextensive Statistical Mechanics: Approaching a Complex World**. [S.l.]: Springer New York, 2009. Citado 8 vezes nas páginas 3, 4, 5, 30, 34, 40, 49 e 50.

TSALLIS, C.; BUKMAN, D. J. Anomalous diffusion in the presence of external forces: Exact time-dependent solutions and their thermostistical basis. **Physical Review E**, v. 54, p. R2197, 1996. Citado 6 vezes nas páginas 5, 6, 35, 40, 49 e 50.

TSALLIS, C.; LENZI, E. K. Anomalous diffusion: nonlinear fractional fokker–planck equation. **Chemical Physics**, Elsevier, v. 284, n. 1, p. 341–347, 2002. Citado 3 vezes nas páginas 6, 33 e 37.

UMAROV, S.; CONSTANTINO, T.; STEINBERG, S. On a q-central limit theorem consistent with nonextensive statistical mechanics. **Milan Journal of Mathematics**, v. 76, p. 307–328, 2008. Citado 5 vezes nas páginas 6, 35, 40, 49 e 50.

WANG, M. C.; UHLENBECK, G. E. On the theory of the brownian motion ii. **Reviews of Modern Physics**, APS, v. 17, n. 2-3, p. 323, 1945. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 25.

ZABURDAEV, V.; DENISOV, S.; KLAFTER, J. Lévy walks. **Reviews of Modern Physics**, APS, v. 87, n. 2, p. 483, 2015. Citado na página 4.