
UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS
PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Tese de Doutorado

**Processos Estocásticos e Difusão Anômala em
Sistemas Complexos**

Angel Akio Tateishi

Orientador: Prof. Dr. Ervin Kaminski Lenzi

Maringá, Novembro de 2013.

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS
PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Tese de Doutorado

**Processos Estocásticos e Difusão Anômala em
Sistemas Complexos**

Angel Akio Tateishi

*Tese de Doutorado
submetida ao Departamento de
Física da Universidade Estadual
de Maringá.*

Orientador: Prof. Dr. Ervin Kaminski Lenzi

Maringá, Novembro de 2013.

Fusão, difusão, confusão...

(Capítulo LXXIX do livro *Esaú e Jacó* de Machado de Assis)

“Era um espetáculo misterioso, vago, obscuro, em que as figuras visíveis se faziam impalpáveis, o dobrado ficava único, o único desdobrado, uma fusão, uma confusão, uma difusão...”

Agradecimentos

Ao amigo e professor Ervin Kaminski Lenzi pelas oportunidades acadêmicas e profissionais proporcionadas e também pela confiança no decorrer do desenvolvimento de nossas colaborações.

Aos companheiros e amigos de graduação e pós-graduação: Haroldo, Rodolfo, Roberto, Fernando, Marcos Paulo, Diogo, pelos cafés (que nunca tomei), conversas, motivação e amizade durante nosso período de formação acadêmica.

Ao professores: Renio, Renato, Evangelista e Malacarne, pelas conversas e conselhos.

Aos meus familiares, por todo o apoio e confiança.

À Karin Schmidt pelo apoio, compreensão e companheirismo.

Aos amigos do Complex System Research Group (COSY): Christos Tsiapalis, Rudolph Hanel, Stefan Thurner, Bernat Corominas-Mutra e Peter Klimek, pela oportunidade de estágio de doutorado e por tornarem a estadia em Viena algo memorável e produtivo.

À Mônica e à Akiko, da secretária de Pós-Graduação em Física, por toda a ajuda e por tornarem a burocracia algo menos traumatizante.

Aos membros da banca de doutorado, por disporem tempo e atenção para avaliar e tornar essa tese possível.

Aos amigos, pelos longos períodos de ócio criativo e pelo companheirismo.

Por fim, à Capes pelo apoio financeiro.

Resumo

Processos estocásticos desempenham um papel importante na dinâmica de sistemas complexos. Tais sistemas são compostos por inúmeros elementos que podem interagir não linearmente, resultando em um comportamento global não trivial; e/ou apresentam grande complexidade estrutural. Nesse contexto, essa tese é dedicada ao estudo de processos difusivos em sistemas complexos, com ênfase em difusão anômala. Iniciamos contextualizando processos difusivos no estudo desses sistemas, com o objetivo de relacionar os mecanismos de difusão anômala à natureza das interações e às estruturas heterogêneas. Consoantemente, abordamos as generalizações das conjecturas da difusão usual que foram propostas para modelar sistemas complexos, ou seja, os conceitos e métodos matemáticos de: *i*) caminhada aleatória contínua no tempo; *ii*) equação de difusão fracionária; e *iii*) equação de Langevin generalizada. Na sequência, investigamos algumas extensões da equação de difusão com vínculos geométricos, denominada modelo de pente. Em particular, discutimos como a dispersão do sistema é influenciada por forças externas e pela presença do termo de *backbone*, bem como analisamos o tempo de primeira passagem e a probabilidade de sobrevivência para o modelo de pente. Por meio de soluções analíticas dependentes do tempo, obtidas utilizando transformadas integrais e o método das funções de Green, demonstramos como vínculos geométricos e efeitos de memória, estes em termos de derivadas fracionárias, podem conduzir a uma rica classe de comportamentos difusivos anômalos. Por fim, apresentamos nossas conclusões gerais.

Palavras-chave: Sistemas complexos. Processos estocásticos. Difusão anômala. Equação de difusão. Modelo de pente. Soluções analíticas.

Abstract

Stochastic processes play an important role in the dynamics of complex systems. Such systems are compound by several elements which may interact nonlinearly, leading to a non-trivial global behavior; and/or show high structural complexity. In this context, the present thesis is dedicated to the study of diffusive processes in complex systems, mainly focused on anomalous diffusion. Our study begins by contextualizing diffusive processes in the study of these systems, in order to relate the mechanisms of anomalous diffusion to the nature of the interactions and to the structural heterogeneities. Thus, we discuss some generalizations of the conjectures of usual diffusion proposed to model complex system, i.e., concepts and mathematical methods give by: *i*) continuous time random walk; *ii*) fractional diffusion equation; and *iii*) generalized Langevin equation. Following, we investigate some extensions of the diffusion equation with geometrical constraints, called comb model. In particular, we discuss the relation between the spreading of the system with the presence of external forces, and with the presence of the backbone term. We also analyze the first passage time and the survival probability of the comb model. By means of time dependent analytical solutions, obtained by using integral transform and the Green's Functions approach, we show how geometrical constraints and memory effects (fractional derivatives), can lead to a rich class of anomalous diffusive behaviors. Finally, we present our general conclusions.

Keywords: Complex systems. Stochastic processes. Anomalous diffusion. Diffusion equation. Comb model. Analytical solutions.

Sumário

Resumo	3
Abstract	4
1 Introdução	9
2 Difusão Anômala e Sistemas Complexos	13
2.1 Difusão usual	13
2.2 Difusão anômala	15
2.3 Caminhada aleatória contínua no tempo	16
2.4 Cálculo fracionário e equação de difusão fracionária	18
3 Um Modelo Simples para Sistemas Complexos	26
3.1 Processo difusivo em uma estrutura backbone com termos de arraste	28
3.2 Equação de difusão com um termo de backbone	37
3.3 Tempo de primeira passagem para um processo difusivo sob uma restrição geométrica	48
4 Conclusão geral	62
Apêndice A	64
Referências Bibliográficas	66

Lista de Figuras

3.1	Ilustração do modelo de pente. O eixo- x corresponde a estrutura de <i>backbone</i> (“espinha dorsal”) e o eixo- y desempenha o papel das armadilhas ou ramificações.	27
3.2	Comportamento temporal do deslocamento quadrático médio com $v_x = 0$, $\mathcal{D}_y = 20$, $\mathcal{D}_x = 10$ e $\tilde{y} = 0.8$. A linha sólida corresponde ao caso $v_y = 0.1$ e a linha tracejada ao caso $v_y = 1$. Note que a saturação na direção x é alcançada mais rapidamente para grandes valores de v_y e mais lentamente para valores pequenos. A linha pontilhada foi introduzida para ilustrar o comportamento subdifusivo presente no sistema antes de atingir o estado estacionário.	32
3.3	Comportamento temporal do deslocamento quadrático médio para $v_y = 0$, $\mathcal{D}_y = 20$, $\mathcal{D}_x = 10$, e $\tilde{y} = 0.8$. As retas pontilhadas foram adicionadas para ilustrar os comportamentos usual e subdifusivo que podem ser manifestado pelo deslocamento quadrático médio obtido das Eqs. (3.24) e (3.25). As linhas: tracejada, sólida e pontilhada correspondem respectivamente aos casos $\bar{v}_x = 10$, $\bar{v}_x = 1$, e $\bar{v}_x = 0.1$, conforme indicado.	34
3.4	Comportamento temporal do deslocamento quadrático médio para $v_y = 5 \times 10^{-4}$, $v_x = 0$, $\bar{v}_x = 1$, $\mathcal{D}_y = 5$, $\mathcal{D}_x = 10$ e $\tilde{y} = 0.1$. A linha pontilhada e a tracejada foram introduzidas para ilustrarem os comportamentos subdifusivos presentes no sistema antes desse atingir o estado estacionário.	35
3.5	A primeira figura, à esquerda ilustra a região acessível (sombreado) ao sistema na difusão usual. Na figura á direita está ilustrado o sistema descrito pela Eq. (3.26), na qual a difusão pode ocorrer na região ou pode ser confinada na estrutura de pente	37
3.6	Figuras (a) e (b) ilustram para $\bar{\mathcal{D}}_x = 2$ e $\mathcal{D}_x = 0$ o comportamento da Eq. (3.34) versus x e y considerando $\mu = 2$, $\bar{y} = 0.1$ e $t = 0.3$. Note que o termo de <i>backbone</i> possui uma distribuição usual, e como consequência, um comportamento do tipo bimodal é verificado quando a condição inicial não está centralizada no ponto $x = 0$ e $y = 0$	39

3.7	Comportamento de σ_x^2 versus t para $\mathcal{D}_x = \mathcal{D}_y = 1$, $\bar{\mathcal{D}}_x = 10$ e $\tilde{y} = 0.5$. Note que as linhas retas são utilizadas para evidenciar os distintos regimes difusivos apresentados por um sistema governado Eq. (3.34). Para esse caso, temos três regimes difusivos diferentes, isto é, tempos pequenos e longos são caracterizados pelo regime difusivo usual, e tempos intermediários apresentam um regime de superdifusão seguido de subdifusão.	40
3.8	Comportamento de σ_x^2 versus t para $\mathcal{D}_x = \mathcal{D}_y = 1$, $\bar{\mathcal{D}}_x = 10$ e $\tilde{y} = 0$ com a finalidade de mostrar a influência da condição inicial no espalhamento do sistema. Assim como no Fig. (3.7), linhas retas são utilizadas para evidenciar os regimes difusivos apresentados por um sistema governado pela Eq. (3.34). Em contraste com a Fig. (3.7) a posição da condição inicial aqui considerada gera dois (e não três) regimes difusivos distintos. Sendo um deles subdifusivo e o outro o usual.	41
3.9	Figuras (a) e (b) ilustram para $\mu = 3/2$ e $1/2$ o comportamento da Eq. (3.38) versus x e y considerando, por simplicidade, $\mathcal{D}_x = \mathcal{D}_y = 1$, $\bar{\mathcal{D}}_x = 10$, $\bar{y} = 0.1$ e $t = 0.5$	42
3.10	Figuras (a) e (b) ilustram para $\mu = 3/2$ e $1/2$ o comportamento da Eq. (3.38). Em (a), fixamos o valor de y , ou seja, $y = 0$, e mostramos para tempos diferentes o comportamento da Eq. (3.38) versus x . Em (b), fixamos x , ou seja, $x = 0$, e mostramos para tempos diferentes o comportamento da Eq. (3.38) versus y . Consideramos, por simplicidade, $\mathcal{D}_x = \mathcal{D}_y = 1$, $\bar{\mathcal{D}}_x = 10$ e $\bar{y} = 0.1$	43
3.11	Comportamento de $\rho_x(x, t)$ versus x ilustrado para $\mu = 1$ considerando por simplicidade $\mathcal{D}_x = \mathcal{D}_y = \bar{\mathcal{D}}_x = 1$ e $\tilde{y} = 0.1$. Esta figura mostra que o limite assintótico é uma lei de potência (linha pontilhada vermelha) em virtude da presença da derivada fracionária na equação difusão.	44
3.12	Comportamento de $1/\rho_x^2(0, t)$ versus t é ilustrado para diferentes valores de μ considerando, por simplicidade, $\mathcal{D}_x = \mathcal{D}_y = \bar{\mathcal{D}}_x = 1$ e $\tilde{y} = 0.1$. Esta figura mostra regimes difusivos diferentes para o sistema governado pela Eq. (3.38) a qual, dependendo do valor de μ , pode apresentar três ($\mu = 3/2$ e 2) ou dois ($\mu = 1$) regimes difusivos. A linha reta vermelha corresponde ao caso usual, isto é, $1/\rho_x^2(0, t) \sim t$	45
3.13	Comportamento de $1/\rho_x^2(0, t)$ versus t com $\mu = 3/2$ considerando, por simplicidade, $\mathcal{D}_x = \mathcal{D}_y = \bar{\mathcal{D}}_x = 1$ e $\tilde{y} = 0.1$. Essa figura mostra o comportamento anômalo presente no espalhamento do sistema, o qual para tempos pequenos e longos é governado pela difusão usual. A linha reta vermelha corresponde ao caso usual, isto é, $1/\rho_x^2(0, t) \sim t$	46
3.14	Ilustração do modelo de pente para uma região semi-infinita na direção x . Note que em $x = 0$ temos uma superfície adsorvente (linhas hachuradas).	50

3.15	Comportamento da Eq.(3.56) considerando $\mathcal{K}_x = 10$, $\mathcal{K}_y = 0.1$ e a condição inicial $\Phi(x, y) = \delta(x - \bar{x})\delta(y - \bar{y})$ com $\bar{x} = 1$ e $\bar{y} = 1.2$. As linhas azul e vermelha indicam os regimes distintos da probabilidade de sobrevivência.	51
3.16	Comportamento da Eq.(3.54) considerando $\mathcal{K}_x = 10$, $\mathcal{K}_y = 0.1$ e a condição inicial $\Phi(x, y) = \delta(x - \bar{x})\delta(y)$ com $\bar{x} = 1.2$. A linha vermelha indica o regime assintótico.	52
3.17	Comportamento da Eq.(3.56) considerando $\mathcal{K}_x = 10$, $\mathcal{K}_y = 0.1$ e a condição inicial $\Phi(x, y) = \delta(x - \bar{x})\delta(y - \bar{y})$ com $\bar{x} = 1$ para diferentes valores de \bar{y} a fim de destacar a influência da condição inicial no comportamento da probabilidade de sobrevivência. As linhas azul, vermelha e preta correspondem aos casos $\bar{y} = 0$, $\bar{y} = 0.5$, e $\bar{y} = 1.2$	53
3.18	Comportamento da Eq. (3.58) considerando $\mathcal{K}_x = 10$, $\mathcal{K}_y = 0.1$ e a condição inicial $\Phi(x, y) = \delta(x - \bar{x})\delta(y - \bar{y})$ com $\bar{x} = 1$ e $\bar{y} = 1.2$. As linhas azul e vermelha indicam os diferentes regimes da distribuição do tempo de primeira passagem.	55
3.19	Comportamento da Eq.(3.64) considerando $\mathcal{K}_x = 10$, $\mathcal{K}_y = 0.1$ e a condição inicial $\Phi(x, y) = \delta(x - \bar{x})\delta(y - \bar{y})$ com $\bar{x} = 1$ e $\bar{y} = 1.2$. As linhas retas azul e verde foram adicionadas para indicar os comportamentos assintóticos da variância.	56
3.20	Comportamento da Eq.(3.66) considerando $\mathcal{K}_x = 10$, $\mathcal{K}_y = 0.1$, e a condição inicial $\Phi(x, y) = \delta(x - \bar{x})\delta(y - \bar{y})$ com $\bar{x} = 1$ e $\bar{y} = 1.2$ com a finalidade de mostrar a influência da condição inicial na probabilidade de sobrevivência. As linhas azul e vermelhas correspondem ao comportamento assintótico da probabilidade de sobrevivência para tempos longos.	58

Capítulo 1

Introdução

O estudo de sistemas complexos tem se desenvolvido notoriamente nas últimas décadas [1, 2] com a colaboração de pesquisadores das ciências naturais, humanas e sociais, sendo esse um possível caminho para preencher a lacuna que existe entre essas distintas áreas do conhecimento. Dessa maneira, o estudo de sistemas complexos transcende as disciplinas tradicionais e tem sido uma nova fonte de *insights* na Física, Biologia, Geologia, Cosmologia e também nas Ciências Sociais [3]. Stephen Hawking¹, por sua vez, classifica esse século como o século da complexidade. Portanto, uma notável e inerente característica do estudo de sistemas complexos é a sua multidisciplinaridade.

Entretanto, não existe uma maneira simples e singular para definir *complexidade*, fato esse muito bem elucidado nas seguintes palavras de Murray Gell-Mann [4]:

*“Probably no single concept of complexity can adequately capture our intuitive notions of what the word ought to mean. Several different kinds of complexity may have to be defined, some of which may not yet have been conceived.”*²

Da mesma maneira, não existe uma definição singular para descrever o que são *sistemas complexos*. No prefácio do livro *Complex Systems and Binary Networks* [5] encontramos um modo agradavelmente vago de definir sistemas complexos:

*“Complex Systems are like beauty: You know it when you see it.”*³

Uma maneira eficaz de compreender intuitivamente o que são tais sistemas é por meio de alguns exemplos: colônias de insetos, tráfegos aéreo e rodoviário, cérebro humano, formação de opinião em sistemas sociais, dinâmica do mercado financeiro e a internet.

¹Em 23 de Janeiro de 2000 Stephen Hawking disse no SAN JOSE MERCURY NEWS: “I think the next century will be the century of complexity.”

²“Provavelmente nenhum conceito único de complexidade pode capturar adequadamente nossas noções intuitivas do que essa palavra deve significar. Vários tipos distintos de complexidade podem ser definidos, alguns dos quais podem ainda nem terem sido concebidos”.

³“Sistemas Complexos são como a beleza: você a (re)conhece quando a vê.”

Esses poucos sistemas citados compartilham o fato de serem constituídos por uma grande diversidade de partes elementares (ou elementos) que interagem entre si – geralmente de modo não linear – e são caracterizados por um comportamento global (ou macroscópico) emergente e não trivial, o qual resulta dessas interações, mas que geralmente é muito difícil de ser predito a partir delas.

Nessa breve discussão sobre o conceito de complexidade é importante abordar as diferenças entre *caos* (processos caóticos) e *ruído* (processos estocásticos). De acordo com a argumentação de West *et al.* [6], um sistema não linear com apenas algumas variáveis dinâmicas pode gerar padrões aleatórios, e portanto, tem soluções caóticas. Dessa maneira, encontramos as mesmas restrições em nossas habilidades de conhecer e compreender um sistema quando existem apenas poucos elementos dinâmicos bem como quando existe um grande número de elementos dinâmicos, mas isso por diferentes razões. Vamos nos referir ao último caso de processo aleatório como processo estocástico (ruído), ou seja, a influência imprevisível do meio sob o sistema. Aqui, assume-se que o meio é composto por um número infinito de elementos, os quais não conhecemos, mas eles estão acoplados ao sistema de interesse e perturbam-no de uma maneira aleatória, isto é, não conhecida. O caos por sua vez é uma consequência das interações determinísticas não lineares em um sistema dinâmico isolado, resultando em um comportamento errático de predicatibilidade limitada. Caos é uma propriedade implícita de um sistema complexo, enquanto ruído é uma propriedade do meio em contato com o sistema de interesse. Caos pode, portanto, ser controlado e predito em pequenos intervalos de tempo, enquanto ruído – relacionado à correlações de curto alcance – não pode ser predito nem controlado, exceto talvez por meio da maneira que ele interage com o sistema. Portanto, no decorrer do texto ao utilizarmos a terminologia *aleatório* (e termos derivados) subentende-se que estamos nos referindo a processos estocásticos. Uma abordagem mais detalhada sobre a distinção entre caos e ruído pode ser encontrada na Ref.[7].

Ainda segundo West *et al.* [6], essa distinção entre caos e ruído destaca uma das dificuldades em formular uma medida não ambígua (inequívoca) de complexidade. Uma vez que ruído não pode ser predito ou controlado ele pode ser visto como sendo complexo, portanto, sistemas com muitos graus de liberdade que manifestam aleatoriedade podem ser considerados complexos. Por outro lado, um sistema com apenas alguns elementos dinâmicos, quando esse é caótico, pode ser considerado como simples. Assim, dois sistemas com aparentemente o mesmo comportamento errático podem, devido à distintas causas desses comportamentos, apresentar definições conflitantes de complexidade. Nesse sentido o conceito de complexidade é problemático e uma nova abordagem para sua definição é necessária desde que ruído e caos são confundidos entre si com frequência. Contudo, não temos a intenção de nos aprofundarmos mais na discussão epistemológica do conceito de complexidade.

Em relação à estrutura, Feldman *et al.*[8] definem sistemas complexos como uma classe

muito ampla e geral de materiais que são tipicamente não cristalinos. Polímeros, biopolímeros, sistemas coloidais, células biológicas, materiais porosos e cristais líquidos, de acordo com [8], podem ser todos considerados como sistemas complexos.

Nesse cenário, que demonstra perspectivas fecundas de pesquisa, não é nenhuma surpresa que o estudo de sistemas complexos tenha despertado grande interesse de parte da comunidade da Física, em particular da Física Estatística. Schadschneider *et al.*[9] destacam que alguns físicos estatísticos, motivados pelo sucesso dos conceitos e técnicas da Mecânica Estatística em compreender as propriedades físicas da matéria inanimada, deram passos ousados ao explorar territórios que vão além das fronteiras tradicionais da física usando as mesmas ferramentas. De fato, a abordagem da física estatística tem revelado sua conveniência e provado ser muito eficaz para descrever tais sistemas, particularmente considerando a sua capacidade de abordar a conexão entre a evolução dinâmica microscópica dos elementos básicos do sistema e a emergência de fenômenos macroscópicos [10].

De modo geral, os objetivos da Física Estatística podem ser assim resumidos [11]: por um lado estudar sistemas compostos de um número grande de elementos interagentes; e por outro lado prever o comportamento macroscópico (ou coletivo) do sistema considerado a partir de leis microscópicas que governam a dinâmica individual dos elementos. Ambos objetivos, até certo ponto, são também compartilhados pelo que chamamos atualmente de ciência dos sistemas complexos. Ainda de acordo com [11], sistemas estudados no âmbito da Física Estatística podem ser considerados como os exemplos mais simples de sistemas complexos. Em relação às outras ciências que objetivam descrever o comportamento coletivo de sistemas complexos, outra vantagem da Física Estatística é a possibilidade de uma abordagem matemática já bem desenvolvida e estabelecida. Contudo, ainda não existe a Mecânica Estatística definitiva para sistemas complexos. Nessa direção, Thurner e Hanel [12] contribuíram significativamente ao considerarem algumas das principais características dos sistemas complexos: quebra de ergodicidade, interações fortes ou de longo alcance e não markovianas.

Entre os tópicos de pesquisas da Física Estatística o conceito de difusão possui um papel importante, sendo parte da agenda dos físicos pelo menos desde os trabalhos de Einstein, Smoluchowski e Langevin, os quais demonstraram que fenômenos difusivos podem ser interpretados como a manifestação macroscópica de um processo microscópico estocástico (movimentos irregulares das partículas). Tais fenômenos são onipresentes na natureza (desde átomos à galáxias) e até mesmo na sociedade. Nesse último caso, o termo “partículas” pode representar ideias ou seres humanos. Como tais processos ocorrem em todos os estados da matéria e em diversas escalas de tempo e comprimento, o conceito de difusão é bastante geral, sendo de grande interesse científico em diversas áreas das ciências naturais tais como Física, Biologia, Química e Geologia.

Processos difusivos também possuem notável relevância prática tanto na indústria

[13] quanto na manutenção da vida (processos biológicos). Por exemplo, na ciência dos materiais [14] a difusão desempenha um papel importante na cinética de várias mudanças microestruturais que ocorrem durante o processamento de ligas metálicas, cerâmicas, vidros, polímeros e semicondutores. Por sua vez, em sistemas biológicos, a difusão é essencial para o transporte intracelular e, como destacado por Regner [15], possui um papel importante em cada processo bioquímico nas células vivas. Vattulainen e Mouritsen [16] vão além e afirmam que a natureza, para aproveitar a onipresença e robustez da difusão tem desenvolvido estratégias para compartimentar e estruturar a matéria viva em escalas que vão desde nanômetros até o tamanho de células inteiras e organismos.

Nesse sentido, a difusão é incontestavelmente um tópico universal, inter e multidisciplinar. Além disso, outro fator que corrobora com a interdisciplinaridade do conceito de difusão é o surgimento de sua formalização matemática, em termos da equação de difusão, de maneira independente em diferentes contextos (veja Ref.[17]): na econometria com Bachelier; na teoria dos erros com Edgewort e Thiele; e na física com Rayleigh (estudo de vibrações sonoras), Einstein e Smoluchowski (estudo do movimento browniano).

Portanto, o estudo e compreensão de processos difusivos é algo imprescindível também no estudo de sistemas complexos. Desse modo, o intuito desta tese é estudar conceitos e mecanismos de difusão anômala, bem como utilizar os métodos físicos-matemáticos desenvolvidos na Física Estatística para modelar processos difusivos, estendendo e/ou generalizando tais métodos de forma a contribuir diretamente em problemas que buscam uma melhor compreensão da dinâmica anômala de sistemas complexos. No que segue, apresentaremos alguns conceitos e métodos no Capítulo 2, os quais são necessários para motivar e ajudar compreender os investigações reportadas no Capítulo 3. Por fim, no Capítulo 4, apresentamos nossas conclusões gerais.

Capítulo 2

Difusão Anômala e Sistemas Complexos

2.1 Difusão usual

Fenômenos de flutuação são onipresentes na natureza. Por exemplo, considere uma pequena partícula movendo-se em um fluido viscoso. De acordo com as leis da Mecânica, espera-se que a partícula atinja um estado de equilíbrio após algum tempo de relaxação, devido à ação do atrito. Contudo, experimentos mostraram que a partícula mantém-se agitada (em movimento aleatório) e exibe difusão. Se a origem física dessas flutuações da posição era um mistério no tempo de sua primeira investigação detalhada feita por Robert Brown em 1827 [18], hoje sabemos que elas são induzidas pelas colisões irregulares de muitas moléculas do fluido circundante. Conforme suposto por Albert Einstein em 1905 [19], a observação do movimento irregular (browniano) da partícula revela a natureza molecular do fluido e sua agitação termal. Sendo extremamente pequenos, portanto, desprezíveis para objetos macroscópicos, os efeitos de flutuação dominam a escala microscópica e são, assim, particularmente relevantes, por exemplo, no nível de uma célula biológica.

Matematicamente, a dinâmica de partículas pequenas (brownianas) podem ser descritas, segundo Einstein, por uma equação de difusão usual ou mais geralmente uma Fokker-Planck

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x, t) = \mathcal{D}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\rho(x, t), \quad (2.1)$$

relacionada com processos markovianos, isto é, eventos de natureza aleatória e não correlacionados. Na equação acima $\rho(x, t)$ representa a função distribuição probabilidade de encontrar a partícula na posição $x + dx$ no tempo t e \mathcal{D} representa o coeficiente de difusão. Um método alternativo, proposto por Paul Langevin em 1908 [20], faz uso de uma generalização da equação do movimento de Newton: a equação de Langevin. Uma nova força estocástica (ruído) é introduzida para considerar explicitamente as flutuações

térmicas, isto é,

$$\frac{dv}{dt} = -\zeta v + \xi(t), \quad (2.2)$$

na qual v denota a velocidade da partícula, ζ está relacionado com a força de atrito e $\xi(t)$ representa a força aleatória, ou fonte de “ruído”. No caso de sistemas markovianos, é utilizado o ruído branco o qual possui como propriedades $\langle \xi(t) \rangle = 0$ e $\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = k_B T \delta(t-t')$. Esse método deu origem ao que conhecemos hoje como processos estocásticos.

Mais formalmente, a onipresença da difusão na natureza e a universalidade de processos difusivos usuais resultam de conexões profundas com resultados gerais da teoria da probabilidade, tais como o *Teorema do Limite Central*, o qual assegura que incrementos independentes e identicamente distribuídos de uma variável aleatória (posição de uma partícula, por exemplo) com média e variância finitas sempre geram uma distribuição de probabilidade gaussiana [16]. Dessa conexão, origina-se uma das principais características da difusão usual: a dispersão¹ usual do sistema descrita pelo comportamento temporal linear da variância, ou seja,

$$\sigma_x^2(t) = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle \sim t. \quad (2.3)$$

De fato, Einstein em 1905, ao desenvolver sua celebrada teoria sobre o movimento browniano, assume duas considerações importantes, que estão relacionadas às condições para as quais o Teorema do Limite Central é válido:

- Cada partícula executa um movimento que é independente do movimento de todas as outras partículas;
- Os movimentos da mesma partícula em intervalos de tempos diferentes são processos mutualmente independentes (em intervalos de tempos pequenos, mas suficientemente grandes para dar margem à observação).

De maneira mais específica e também baseado em aspectos físicos, Kimmich [21] descreve as condições para que o deslocamento de uma partícula seja considerado “normal” ou “usual”:

- As trajetórias da partícula correspondem à caminhadas puramente aleatórias. Não existem correlações ou efeitos de memória entre os passos elementares no que se refere à probabilidade (sem distribuição de tempo de espera entre um passo e outro) e à direção (o sistema é isotrópico);
- Os deslocamentos da partícula não são restritos à escala temporal do experimento. Não existem bordas, confinamentos geométricos, obstáculos ou heterogeneidades no meio onde ocorre a difusão. Em princípio, esse meio é homogêneo e “infinito”. Qualquer possível trajetória da partícula no espaço é permitida;

¹Durante o decorrer do trabalho usaremos também a terminologia *deslocamento quadrádico médio*.

- Não há obstrução mútua das partículas.

Portanto, a difusão usual está intrinsecamente relacionada com processos markovianos, isto é, eventos de natureza aleatória e não correlacionados.

2.2 Difusão anômala

Diferentemente do que foi mencionado anteriormente, desde o trabalho de Richardson em 1926 [22], muitos têm sido os sistemas estudados nos quais os processos difusivos apresentam um comportamento não usual, nos quais a dispersão apresenta um comportamento não linear com o tempo e/ou um propagador não gaussiano. Nesses casos, nos quais as conjecturas que definem a difusão usual não valem, é comum utilizar o termo *difusão anômala*, que é principalmente caracterizada pelo comportamento lei de potência da variância, $\sigma_x^2(t) \sim t^\alpha$. O expoente α é conhecido como *expoente de difusão anômala*, ou somente como *expoente anômalo*. Para $\alpha = 1$ temos o comportamento usual. Os termos sub-difusão e superdifusão designam os casos $\alpha < 1$ e $\alpha > 1$, respectivamente. Além disso, incrementos independentes e identicamente distribuídos de uma variável aleatória com segundo momento divergente também não correspondem à difusão usual. Porém, a generalização do Teorema do Limite Central assegura que incrementos desse tipo de variável sempre geram distribuições estáveis de Lévy.

No caso de sistemas complexos, que são caracterizados por interações fortes e/ou de longo alcance, é esperado que as conjecturas que conduzem à difusão usual não sejam as mais apropriadas para descrever processos difusivos nesses sistemas. Tais interações entre os elementos de um sistema possuem um papel fundamental no comportamento global emergente, o qual pode apresentar correlações temporais e/ou espaciais (processos não markovianos). Para descrever tais sistemas, algumas generalizações da Mecânica Estatística clássica de Boltzmann-Gibbs têm sido consideradas [23, 24], as quais demonstram que a difusão usual pode ser vista como um caso particular, sugerindo que os processos difusivos em sistemas complexos apresentam uma dinâmica anômala em virtude da natureza das interações.

Além das interações, outro aspecto que pode causar a difusão não usual em sistemas complexos é a estrutura heterogênea desses sistemas. Por exemplo, a difusão em espaços com dimensão não inteira, tais como estruturas fractais [25], nas quais a dispersão pode estar relacionada com a *dimensão fractal* d_W do sistema, $\sigma_x^2(t) \sim t^{2/d_W}$, sendo que a difusão usual corresponde ao caso particular $d_W = 2$. Por outro lado, algumas estruturas podem não apresentar um “espaço físico” bem definido, tais como as redes complexas livres de escala [26], cujos exemplos mais proeminentes são a rede WWW (World Wide Web) e a Internet. Como destacado em [21], a geometria do sistema também pode ser um fator fundamental no comportamento difusivo de um dado sistema.

Por fim, destacamos os processos difusivos em células vivas, sistemas complexos que apresentam tanto a presença de distintos tipos de interações quanto heterogeneidade estrutural. Nesses sistemas as interações ocorrem tanto no nível intracelular (macromoléculas e organelas no citoplasma) quanto no nível extracelular (transporte através de membranas e migração celular) [27, 28]. Estudos experimentais sobre o movimento de partículas em células vivas tem relatado que a difusão pode ser subdifusiva [15, 29, 30, 31], superdifusiva [32, 33] ou possuir diferentes comportamentos difusivos dependendo da escala temporal analisada [34]. Contudo, os mecanismos microscópicos adjacentes do movimento subdifusivo em células vivas ainda não são identificados sem ambiguidade [35, 36]. Ademais, Robson *et al* [37] destaca que diferentes modos complexos de difusão coexistem e que discriminá-los em nível molecular é um desafio devido ao comportamento estocástico subjacente. Entre os possíveis mecanismos da dinâmica anômala encontram-se a aglomeração molecular, a propriedade viscoelástica do meio e o confinamento ou aprisionamento de partículas. Esses mecanismos podem estar relacionados à geometria heterogênea das células e/ou com interações bioquímicas entre os elementos do sistema.

O comportamento da dinâmica anômala em diversos sistemas complexos [38], em particular células vivas, tem sido modelado com relativo sucesso por métodos físico-matemáticos tais como: *i*) caminhada aleatória contínua no tempo, *ii*) equação de difusão fracionária e *iii*) equação de Langevin generalizada. Tais métodos são as nossas principais ferramentas e discutiremos um pouco sobre eles na sequência, de modo a deixar evidente que esses podem ser eficazes e contribuir para uma melhor compreensão de sistemas complexos.

2.3 Caminhada aleatória contínua no tempo

O melhor modelo físico é aquele mais simples que pode explicar todos os dados experimentais com o menor número de suposições possível. Um desses modelos é a *caminhada aleatória*, que mesmo em sua forma mais simplista fornece uma descrição física da difusão ordinária (usual). A força real desse modelo, entretanto, está na facilidade com a qual ele pode ser generalizado para descrever fenômenos mais complexos, tais como processos aleatórios com memória de longo alcance.

O termo *random walk*, isto é, caminhada aleatória, foi introduzido por K. Pearson [39] em 1905, embora o conceito em si já tenha sido proposto desde 1880 por Rayleigh [40]. Por sua vez, o termo *continuous time random walk* (caminhada aleatória contínua no tempo), apareceu pela primeira vez no trabalho de Montroll e Weiss [41], no qual foi estudado a dispersão anômala em sólidos amorfos. Os autores perceberam que as cargas elétricas ao se moverem em meios amorfos têm a tendência de ficarem presas nas armadilhas oriundas das imperfeições locais, e após algum tempo conseguem escapar em virtude das flutuações térmicas. Nesse caso, o tempo entre um passo e outro na caminhada

aleatória não é constante; todavia, é subordinado a uma distribuição de probabilidade do tipo lei de potência.

Começamos considerando uma caminhada aleatória na qual o caminhante (partícula), por simplicidade, está confinado em uma dimensão. O tamanho dos passos, assim como o intervalo de tempo entre esses, não são constantes, contudo, estão vinculados a algum tipo de distribuição contínua de probabilidade. Mediante isso, seja $\psi(x, t)$ a distribuição de probabilidade de realizar um passo de comprimento x durante um intervalo de tempo entre t e $t + dt$. A soma da probabilidade total de transição, isto é, de passar de um lugar para outro nesse intervalo de tempo $\psi(t)$ com a probabilidade de permanecer no mesmo ponto $\Phi(t)$ deve ser igual a unidade. Portanto, $\Phi(t) = 1 - \int_0^t \psi(\tau) d\tau$, ou na representação no espaço de Laplace, $\Phi(s) = (1 - \psi(s))/s$.

O que almejamos agora é saber qual a probabilidade, $\rho(x, t)$, de que o caminhante esteja em alguma posição x no tempo t . Para isso, considera-se a densidade de probabilidade do caminhante chegar em x durante o intervalo de tempo entre t e $t + dt$, representada pela função $\eta(x, t)$ com

$$\eta(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \int_0^{\infty} dt' \eta(x', t') \psi(x - x', t - t') + \delta(t) \delta(x). \quad (2.4)$$

Na equação acima, o segundo termo do lado direito da igualdade representa a condição inicial do caminhada aleatória. Assim sendo, a probabilidade $\rho(x, t)$ é obtida multiplicando a densidade de probabilidade de transição pela probabilidade de permanecer na mesma posição e integrando no tempo, ou seja,

$$\rho(x, t) = \int_0^t \eta(x, t - \tau') \Phi(\tau') d\tau'. \quad (2.5)$$

Substituindo a equação (2.4) em (2.5) e considerando a mudança de variável $\tau = \tau' + t'$, obtemos

$$\rho(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \int_0^{\infty} \rho(x', t) \psi(x - x', t - \tau) d\tau + \Phi(t) \delta(x). \quad (2.6)$$

A probabilidade $\rho(x, t)$, equação (2.6), está representada na forma de uma equação integral, o que a torna “não amigável”. Utilizando transformadas integrais de Fourier e Laplace é possível obter

$$\rho(k, s) = \frac{1}{1 - \psi(k, s)} \frac{1 - \psi(s)}{s}. \quad (2.7)$$

Com a equação (2.7) a resolução do problema fica dependente da escolha da distribuição de probabilidade $\psi(k, s)$. A escolha mais simples é quando a distribuição para o tamanho dos passos e a distribuição do tempo de espera entre dois passos consecutivos são independentes, isto é, $\psi(x, t) = \lambda(x) \psi(t)$ (ou $\psi(k, s) = \lambda(k) \psi(s)$).

Dependendo das escolhas de $\lambda(x)$ e $\psi(t)$ o caminhada aleatória pode representar o processo difusivo usual ou o caso anômalo [42], descrito também pela equação de di-

fusão fracionária (a conexão e equivalência entre esses dois métodos ocorre no espaço de Laplace-Fourier). Por exemplo, Ribeiro *et al* [43] demonstraram que é possível obter diferentes regimes difusivos realizando mudanças apropriadas na escolha das distribuições do tamanho dos passos e do tempo de espera.

Em resumo, os mecanismos de difusão anômala relacionados à caminhada aleatória contínua no tempo são a presença de “armadilhas”, resultando em tempos médio de espera divergentes que geram subdifusão; e saltos de Lévy, ou seja, a distância percorrida pelo caminhante em um passo pode ocorrer em diversas escalas de comprimento.

2.4 Cálculo fracionário e equação de difusão fracionária

2.4.1 Conceito

O conceito de *cálculo fracionário*² é quase tão antigo quanto o cálculo tradicional, como indicado na carta de Leibniz para L’Hospital de 1695. Sendo os primeiros estudos sistemáticos atribuídos à Lacroix, Laurent, Liouville, Riemann, Leibniz entre outros renomados matemáticos [44]. Desse ponto de vista histórico, o cálculo fracionário pode ser descrito como uma extensão do conceito do operador diferencial de ordem inteira n para uma ordem arbitrária γ , cujos valores podem ser reais ou complexos:

$$\frac{d^n}{dx^n} \rightarrow \frac{d^\gamma}{dx^\gamma}. \quad (2.8)$$

Apesar desse conceito ter despertado o interesse de grandes matemáticos, o trabalho de Abel sobre o problema da curva tautocrônica de 1823 permaneceu, de acordo com [44], por muito tempo sendo, talvez, o único exemplo de uma solução dada em termos de uma derivada fracionária, ou seja, ele mostrou que a equação integral

$$\frac{1}{\Gamma(\gamma)} \int_0^x \frac{g(u)}{(x-u)^{1-\gamma}} du = f(x), \quad 0 < \gamma < 1 \quad (2.9)$$

tem como solução

$$g(x) = \frac{1}{\Gamma(1-\gamma)} \frac{d}{dx} \int_0^x \frac{f(u)}{(x-u)^\gamma} du. \quad (2.10)$$

²A terminologia “cálculo fracionário” é tido por alguns autores como um abuso de linguagem, sendo a designação mais apropriada “integração e diferenciação de ordem arbitrária”. Apesar disso, essa terminologia é utilizada desde a época de L’Hospital

Contudo, o cálculo fracionário somente começou a deixar de ser um objeto de estudo puramente matemático e ter aplicações práticas nas últimas décadas [45, 46, 47, 48]. De acordo com Ref. [49], a dinâmica fracionária tem se desenvolvido rapidamente juntamente com a teoria de controle fracionário, certificando que o cálculo fracionário é uma ferramenta fundamental para descrever a dinâmica de sistemas complexos.

2.4.2 Definições

No que concerne às derivadas fracionárias no tempo, entre as várias definições, vamos abordar os operadores de Riemann-Liouville, Caputo e Grünwald–Letnikov. Os dois primeiros serão utilizados ao longo dessa tese; e o último, embora não utilizado aqui, destaca-se no tratamento numérico de equações diferenciais fracionárias. Em relação às derivadas fracionárias no espaço, consideraremos apenas o operador de Riesz–Feller, o qual também será utilizado no decorrer do texto.

Operador de Riemann–Liouville

O operador (ou derivada fracionária) de Riemann-Liouville é definido pela seguinte expressão integro-diferencial

$${}_0\mathcal{D}_t^{1-\gamma} f(t) = \frac{1}{\Gamma(k-\gamma)} \frac{d^k}{dt^k} \int_0^t d\tau \frac{f(\tau)}{(t-\tau)^{\gamma-k+1}}, \quad k-1 \leq \gamma < k \quad (2.11)$$

cuja transformada de Laplace é dada por

$$\mathcal{L} \{ {}_0\mathcal{D}_t^{1-\gamma} f(t) \} = s^{1-\gamma} f(s) - \sum_{k=0}^{k-1} \left[{}_0\mathcal{D}_t^{\gamma-k} f(t) \right]_{t=0}. \quad (2.12)$$

De acordo com Podlubny [50], a definição (2.11) desempenhou um importante papel para o desenvolvimento da teoria das derivadas e integrais fracionárias e para suas aplicações na matemática pura. Entretanto, essa formulação apresenta problemas na interpretação física das condições iniciais. Destacamos ainda, apenas como ilustração, que ao utilizar a definição (2.11), a derivada de uma constante A não é igual a zero. Por exemplo, para $\gamma = 1/2$, temos

$${}_0\mathcal{D}_t^{1/2} A = \frac{At^{-1/2}}{\Gamma(1/2)} = \frac{A}{\sqrt{\pi t}}. \quad (2.13)$$

Operador de Caputo

Motivado pela necessidade de uma definição de derivada fracionária que possibilitasse a utilização de condições iniciais fisicamente interpretáveis ($f(0), f'(0), \dots$), M. Caputo propôs a seguinte definição

$$\frac{\partial^\gamma}{\partial t^\gamma} f(t) = \frac{1}{\Gamma(n-\gamma)} \int_0^t \frac{f^{(n)}(\tau) d\tau}{(t-\tau)^{\gamma+1-n}}, \quad n-1 < \gamma \leq n \quad (2.14)$$

sendo d^γ/dt^γ denominado operador de Caputo, cuja transformada de Laplace é dada por

$$\mathcal{L}\left\{\frac{d^\gamma}{dt^\gamma} f(t)\right\} = s^\gamma f(s) - \sum_{j=0}^{n-1} s^{\gamma-1-j} f^{(j)}(0), \quad n-1 < \gamma < n. \quad (2.15)$$

De fato, a evidente preferência pelo operador de Caputo em problemas aplicados e teoria de controle está relacionada com o tratamento das condições iniciais. Com tais derivadas fracionárias, as condições iniciais possuem a mesma forma utilizada nas equações diferenciais de ordem inteira, logo possuindo as mesmas interpretações físicas (por exemplo, $f(0)$, $f'(0)$ e $f''(0)$ são respectivamente a posição inicial, a velocidade inicial e a aceleração inicial). Além disso, a derivada de Caputo aplicada a uma constante é zero.

Operador de Grünwald-Letnikov

A derivada fracionária de Grünwald-Letnikov é uma generalização direta da derivada ordinária e conduz à formulas e equações que recuperam os casos ordinários quando a ordem da derivada torna-se inteira. Esse operador de ordem γ , com $m-1 \leq \gamma < m$ pode ser definido por

$${}_{GL}\mathcal{D}_{0,t}^\gamma f(t) = \sum_{k=0}^{m-1} \frac{f^{(k)}(0)t^{-\gamma+k}}{\Gamma(-\gamma+k+1)} + \frac{1}{\Gamma(m-\gamma)} \int_0^t (t-\tau)^{m-\gamma-1} f^{(m)}(\tau) d\tau. \quad (2.16)$$

Para o caso $0 \leq \gamma < 1$ ($m=1$), a transformada de Laplace obtida é

$$\mathcal{L}\left\{{}_{GL}\mathcal{D}_{0,t}^\gamma f(t)\right\} = f(0)s^{\gamma-1} + (sf(s) - f(0))s^{\gamma-1} = s^\gamma f(s). \quad (2.17)$$

Porém, esta não é a definição original da derivada de Grünwald-Letnikov. A primeira definição foi dada em termos do limite

$${}_{GL}\mathcal{D}_{0,t}^\gamma f(t) = \lim_{h \rightarrow 0} h^{-\gamma} \sum_{k=0}^{\gamma} (-1)^k \binom{\gamma}{k} f(t - kh). \quad (2.18)$$

Essa expressão, apesar de não ser conveniente para análise, mostra-se muito útil para aproximações numéricas. Devido a nossa abordagem analítica no decorrer dessa tese, não vamos utilizar esse operador. Contudo, para uma abordagem mais detalhada das propri-

idades e aplicações da derivada fracionária de Grünwald–Letnikov pode ser encontrada na Ref. [51]

Operador Riesz–Feller

De maneira geral, a derivada fracionária no espaço de Riesz–Feller é representada explicitamente por

$$\begin{aligned} {}_x\mathcal{D}_\theta^\mu f(x) &= \frac{\Gamma(1+\mu)}{\pi} \left\{ \sin\left(\left(\mu+\theta\right)\frac{\pi}{2}\right) \int_0^\infty \frac{f(x+\xi)-f(x)}{\xi^{1+\mu}} d\xi \right. \\ &\quad \left. + \sin\left(\left(\mu-\theta\right)\frac{\pi}{2}\right) \int_0^\infty \frac{f(x+\xi)-f(x)}{\xi^{1+\mu}} d\xi \right\} \end{aligned} \quad (2.19)$$

com $0 < \mu \leq 2$ e $|\theta| \leq \min(\mu, 2-\mu)$, sendo θ o parâmetro de assimetria. No decorrer desse trabalho, consideraremos $\theta = 0$. Nesse caso, assumimos a seguinte notação ${}_x\mathcal{D}_0^\mu f(x) = \partial^\mu/\partial|x|^\mu$, portanto,

$$\frac{\partial^\mu}{\partial|x|^\mu} f(x) = \frac{\Gamma(1+\mu)}{\pi} \sin\left(\frac{\mu\pi}{2}\right) \int_0^\infty \frac{f(x+\xi) - 2\xi f(x) + f(x-\xi)}{\xi^{1+\mu}} d\xi, \quad (2.20)$$

cuja transformada de Fourier é dada por

$$\mathcal{F}\left\{\frac{\partial^\mu}{\partial|x|^\mu} f(x)\right\} = -|k|^\mu f(k). \quad (2.21)$$

A representação no espaço de Fourier é de grande importância, uma vez que ao lidarmos com equações diferenciais parciais as transformadas integrais são ferramentas essenciais. Além disso, derivadas fracionárias no espaço estão relacionadas aos processos estocásticos do tipo Lévy.

2.4.3 Conexão com sistemas complexos

Uma questão que emerge naturalmente é: quais seriam as propriedades das derivadas fracionárias que as tornam apropriadas para modelar determinados sistemas complexos? A resposta está na propriedade exibida por muitos sistemas citados na introdução: *dinâmica não local*, isto é, processos nos quais a dinâmica possui certo grau de “memória”. Operadores fracionários são não locais, enquanto derivadas ordinárias são claramente derivadas locais. Em outras palavras, a derivada fracionária não depende somente das condições locais, mas depende de toda “história” da função. A não localidade temporal da derivada fracionária no tempo não viola os princípios básicos da Física, conforme esses

se referem à causalidade [38]. Na verdade, não localidade causal no tempo é um fenômeno comum em sistemas fora do equilíbrio conhecido como histerese, dependência da história e memória [52].

Efeito memória

Como vimos, uma possível interpretação física de equações com derivadas e integrais fracionárias com relação ao tempo, é a presença de memória nos sistemas que essas equações descrevem. Para elucidar isso e ter uma noção um pouco mais intuitiva, consideramos os efeitos de memória e o casos limites amplamente utilizados na Física: *i*) a ausência de memória; *ii*) a memória completa ou total; *iii*) a memória lei de potência.

Suponha que a evolução de um sistema dinâmico em que alguma quantidade $F(t)$ está relacionada a outra quantidade $f(t)$ por meio de uma função memória $M(t)$:

$$F(t) = \int_0^t M(t - \tau) f(\tau) d\tau. \quad (2.22)$$

A Eq. (2.22) significa que o valor $F(t)$ está relacionado à $f(t)$ por uma operação de convolução

$$F(t) = M(t) * f(t). \quad (2.23)$$

Além de definir matematicamente o conceito de memória, a Eq. (2.22) é uma típica equação não markoviana obtida no estudo de sistemas acoplados ao meio, considerando-se a média dos graus de liberdade do sistema. A seguir consideraremos os casos especiais da Eq. (2.22).

i) Para um sistema sem memória, temos um processo markoviano e a dependência temporal da função memória é

$$M(t - \tau) = \delta(t - \tau), \quad (2.24)$$

sendo $\delta(t - \tau)$ a função³ delta de Dirac. A ausência de memória implica que a função $F(t)$ é definida por $f(t)$ somente no instante t . Para esse caso limite, o sistema perde (esquece) todos os estados (anteriores) exceto pelo estado com densidade infinitamente alta. Usando (2.22) e (2.24), temos

$$F(t) = \int_0^t \delta(t - \tau) f(\tau) d\tau = f(t). \quad (2.25)$$

A expressão (2.25) corresponde ao processo com ausência total de memória. Em outras palavras, isso significa que a cada passo da evolução do sistema, o estado subsequente

³A denominação formalmente mais adequada seria *distribuição delta de Dirac*.

depende somente do estado atual do sistema e não de todos os estados anteriores em quais o sistema já esteve.

ii) Se efeitos de memória são introduzidos no sistema, a função delta cede lugar a alguma função no intervalo de tempo durante o qual $f(t)$ afeta a função $F(t)$. Portanto, para esse caso limite, seja $M(t)$ a função passo (*step function*)

$$\begin{aligned} M(t - \tau) &= t^{-1}, & (0 < \tau < t); \\ M(t - \tau) &= 0, & (\tau > t). \end{aligned} \quad (2.26)$$

O fator t^{-1} é escolhido de tal maneira que a normalização da função memória seja igual a unidade:

$$\int_0^t M(\tau) d\tau = 1.$$

Portanto, durante a evolução do processo, o sistema passa continuamente por todos os estados sem qualquer perda. Nesse caso,

$$F(t) = \frac{1}{t} \int_0^t f(\tau) d\tau,$$

o que corresponde à memória completa.

iii) A função memória tipo lei de potência

$$M(t - \tau) = M_0(t - \tau)^{\gamma-1} \quad (2.27)$$

indica a presença da derivada ou integral fracionária. A substituição de (2.27) em (2.22) conduz-nos a definição da integral fracionária de ordem γ :

$$F(t) = \frac{\lambda}{\Gamma(\gamma)} \int_0^t (t - \tau)^{\gamma-1} f(\tau) d\tau, \quad (0 < \gamma < 1), \quad (2.28)$$

em que $\Gamma(\gamma)$ é a função Gamma, e $\lambda = \Gamma(\gamma)M_0$. O parâmetro λ pode ser considerado como a força da perturbação que o meio induz no sistema. A interpretação física da integração fracionária é a existência de um efeito memória do tipo lei de potência. A memória determina um intervalo t durante o qual a função $f(\tau)$ afeta a função $F(t)$.

Vale ressaltar que os casos (*ii*) e (*iii*) correspondem a processos não markovianos. Em particular, a forma da integral fracionária (2.28), relacionada com a memória do tipo lei de potência, está presente nas definições dos operados de Riemann-Liouville, Caputo e Grünwald-Letnikov, e também na equação de Langevin generalizada.

Equação de difusão fracionária

Nesse contexto, a equação de difusão fracionária é uma ferramenta eficaz no estudo de processos de transporte anômalo, sendo representada por

$$\frac{\partial^\gamma \rho(x, t)}{\partial t^\gamma} = \mathcal{D} \frac{\partial^\mu \rho(x, t)}{\partial |x|^\mu}. \quad (2.29)$$

Nesta equação \mathcal{D} representa o coeficiente de difusão, as derivadas fracionárias $\partial^\gamma/\partial t^\gamma$ e $\partial^\mu/\partial |x|^\mu$ correspondem, respectivamente, aos operadores de Caputo e Riesz–Feller. Consequentemente, $0 < \gamma \leq 1$ e $0 < \mu \leq 2$. A equação (2.29), sujeita à condição de contorno $\rho(\pm\infty, t) = 0$ e à condição inicial arbitrária e normalizada $\rho(x, 0)$, tem como solução o propagador não gaussiano representado pela função de Fox

$$\mathcal{G}(x, t) = \frac{1}{\mu|x|\sqrt{\pi}} \mathbb{H}_{2,3}^{2,1} \left[\frac{|x|}{(2\mathcal{D}t^\gamma)^{1/\mu}} \left| \begin{matrix} (1, \frac{1}{\mu}), (1, \frac{\gamma}{\mu}) \\ (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}), (1, \frac{1}{\mu}), (1, \frac{1}{2}) \end{matrix} \right. \right]. \quad (2.30)$$

Para o caso $\gamma \neq 1$ e $\mu = 2$ o propagador descreve um processo difusivo anômalo com $\sigma_x^2(t) \sim t^\gamma$, quando $\mu \neq 2$ a variância não é finita. Já, o propagador gaussiano corresponde ao caso particular, $\gamma = 1$, $\mu = 2$ e $\rho(x, 0) = \delta(x)$.

Extensões e generalizações da equação (2.29) têm demonstrado grande aplicabilidade em distintos sistemas físicos [53], pois processos estocásticos governados por tais equações refletem os efeitos de memória no nível microscópico. Além disso, a utilização de equações diferenciais parciais fornece uma grande flexibilidade na escolha das coordenadas e condições de contorno a serem consideradas, sendo muitas vezes possível obter soluções analíticas para descrever sistemas que possuem certo grau de complexidade.

2.4.4 Equação de Langevin generalizada

Outra possibilidade para descrever processos estocásticos de transporte é considerar as flutuações do sistema como uma força de caráter aleatório na equação do movimento. Tal método é denominado cálculo estocástico, pois é baseado em equações diferenciais estocásticas e teve como fundador Langevin, o qual, ao propor uma teoria para descrever o movimento browniano [20], introduziu o conceito de equação de movimento de uma variável aleatória. A generalização da equação de Langevin (Eq. (2.2)) é representada da seguinte maneira

$$\frac{dv(t)}{dt} + \int_0^t dt' \zeta(t-t')v(t') = \xi(t). \quad (2.31)$$

A presença da função convoluída $\zeta(t)$ está relacionada com a força de atrito (dissipação) e representa a memória intrínseca do sistema, conforme detalhado anteriormente. A força aleatória é (flutuação) representada por $\xi(t)$, cuja média é nula ($\langle \xi(t) \rangle = 0$). A relação entre tais forças no equilíbrio termodinâmico é dada em termos do Teorema da Flutuação-

Dissipação, isto é,

$$\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = C(|t - t'|) = k_B T \zeta(|t - t'|). \quad (2.32)$$

Novamente, para exemplificar o conceito de memória, consideramos o caso de $\zeta(t) = \delta(t)$, para o qual a equação usual de Langevin (Eq.(2.2)) é recuperada e corresponde a um processo sem memória (markoviano). Por sua vez, a escolha de $\zeta(t) \sim t^{-\beta}$ introduz uma correlação no tempo e o movimento da partícula entre intervalos distintos de tempo não é mais independente, o que é denominado “efeito de memória”, caracterizando um processo difusivo anômalo, $\sigma_x^2(t) \sim t^\alpha$. A exata relação entre o expoente de memória β e o expoente da difusão anômala depende do tipo de ruído a ser considerado. Tal fato é explorado em detalhes na Ref. [54], em que os autores mostram que é possível obter regimes difusivos diferentes a partir de uma extensão da Eq.(2.31), ao considerar $\xi(t)$ sendo a soma de um ruído branco com um ruído lei de potência, configurando um regime difusivo usual seguido de um comportamento subdifusivo. Em outras palavras, consideraram um meio no qual diferentes tipos de efeito memória afetam o sistema e por meio do deslocamento quadrático médio observaram que dependendo da escala de tempo, um ou outro, pode governar a dinâmica.

Essa abordagem generalizada tem sido utilizada para descrever o movimento de uma partícula que faz parte de um sistema de interações complexas em um meio viscoelástico, de modo que o movimento de uma parte do sistema depende das outras, como no caso que a partícula considerada faz parte de uma molécula de um polímero ou de uma rede de polímeros [34]. Além disso, processos estocásticos não se limitam apenas aos domínios tradicionais da Física, ou seja, é possível encontrar sistemas cujas dinâmicas sofrem grande influência de flutuações em uma determinada variável, como por exemplo a variação do preço das ações no mercado financeiro. Dessa forma, uma abordagem estocástica baseada na equação de Langevin também se mostra muito versátil no estudo de sistemas complexos.

Capítulo 3

Um Modelo Simples para Sistemas Complexos

Goldenfeld e Kadanoff [55] destacam que a natureza pode produzir estruturas complexas mesmo em situações simples, e pode obedecer leis simples mesmo em situações complexas. Nesse contexto, o modelo de pente foi proposto como um modelo simplista para descrever o movimento difusivo em estruturas complexas e heterogêneas, tais como *clusters* (aglomerados) de percolação [56]. A estrutura geométrica do modelo está ilustrada na Fig. (3.1), na qual o eixo x corresponde à espinha dorsal¹ (cluster infinito) e o eixo y representa as armadilhas ou ramificações (clusters finitos). A equação de difusão desse modelo foi proposta na Ref. [57] e é representada pela seguinte equação bidimensional

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x, y; t) = \mathcal{D}_y \frac{\partial^2}{\partial y^2}\rho(x, y; t) + \delta(y)\mathcal{D}_x \frac{\partial^2}{\partial x^2}\rho(x, y; t), \quad (3.1)$$

sendo \mathcal{D}_y e \mathcal{D}_x os coefficients de difusão nas direções x e y . A presença da função delta de Dirac na Eq. (3.1) implica que a difusão na direção x ocorra somente quando $y = 0$. Portanto, a difusão na direção y ocorre perpendicularmente ao eixo x , assim, caracterizando uma estrutura que lembra a imagem de um pente (Fig. 3.1).

As distribuições obtidas a partir dessa equação mostram que a difusão na direção x é não usual e podem estar conectadas com a equação de difusão fracionária, como mostrado nas Refs. [58, 59, 60]. Esse modelo, apesar de ser uma figura simplificada de sistemas altamente desordenados e heterogêneos, pode estar conectado a uma rica classe de processos difusivos anômalos [57, 61, 62, 63, 64] devido aos vínculos geométricos [65], com a vantagem de realizar análises exatas e prover soluções analíticas [66, 67], as quais podem ser usadas como guias para situações mais complexas. Em trabalhos anteriores, casos de subdifusão ($\alpha < 1$) e superdifusão ($\alpha > 1$) foram abordados [66, 67, 68, 69, 70, 71, 72]. Um modelo para descrever a dinâmica da proliferação de câncer é desenvolvido

¹No decorrer do texto utilizaremos o termo em inglês, *backbone*

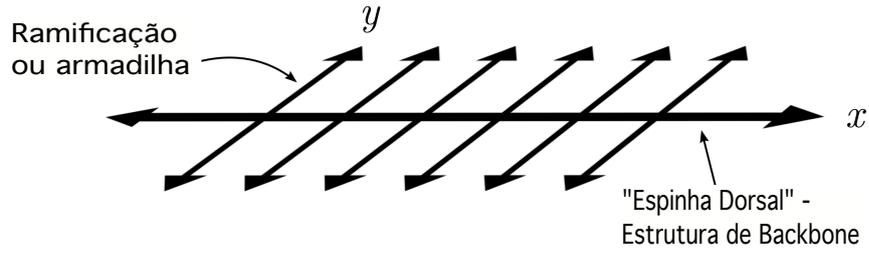


Figura 3.1: Ilustração do modelo de pente. O eixo- x corresponde a estrutura de *backbone* (“espinha dorsal”) e o eixo- y desempenha o papel das armadilhas ou ramificações.

nas Refs. [73, 74], nas Refs. [75] e [76] uma dinâmica quântica fracionária é investigada.

O modelo de pente possui uma das características de sistemas complexos que citamos acima: a estrutura heterogênea, a qual cria armadilhas geométricas. Como demonstrado em [57, 66, 77], apenas esta restrição geométrica já é um mecanismo que caracteriza o modelo de pente como subdifusivo.

Nesse sentido, no que segue vamos apresentar três investigações² [77, 78, 79] em que estudamos algumas extensões da Eq. (3.1), e suas conseqüentes propriedades que podem estar relacionadas com propriedades de alguns sistemas complexos. Na Seção 3.1 (Ref.[78]), adicionamos forças externas constantes e investigamos a influência dessas sobre o sistema. Os resultados obtidos são não triviais e compatíveis com os reportados no estudo de difusão em aglomerados de percolação, destacando-se o regime difusivo confinado. Já na Seção 3.2 (Ref. [77]), estudamos o comportamento difusivo em um sistema no qual as partículas podem tanto se difundir livremente ou podem ficar presas por algum tempo na estrutura de *backbone*. Também introduzimos a derivada fracionária no espaço, no termo difusivo do *backbone*. Como veremos, os resultados mostram que a dinâmica do sistema pode apresentar regimes difusivos distintos. Na Seção 3.3 (Ref. [79]), com a finalidade de caracterizar melhor o modelo de pente, estudamos a probabilidade de sobrevivência e a distribuição do tempo de primeira passagem. Além disso, por meio de derivadas fracionárias, introduzimos efeitos de memória no sistema e estudamos como a probabilidade de sobrevivência pode ser útil para distinguir entre mecanismos distintos de difusão anômala: efeito memória e vínculo geométrico.

²A fim de tornar a leitura dos trabalhos independentes, cada seção contém introdução, desenvolvimento e conclusão.

3.1 Processo difusivo em uma estrutura backbone com termos de arraste

3.1.1 Introdução

“*A formiga no labirinto*” foi a expressão proposta por de Gennes [80] para ilustrar o problema da caminhada aleatória em um aglomerado de percolação infinito. Como é sabido, o conceito de caminhada aleatória é intrinsecamente relacionado com o fenômeno de difusão, o qual dependendo das condições impostas pelo sistema, pode exibir características não usuais. Uma delas é a presença da relaxação anômala, isto é, uma dependência temporal não linear do deslocamento quadrático médio $\langle (r - \langle r \rangle)^2 \rangle \sim t^\alpha$. Essa lei de potência tem sido amplamente encontrada em diversos sistemas com estruturas desordenadas [25], fractais [81], e aglomerados de percolação [82, 83] com $\alpha = 2/d_W$, sendo d_W a dimensão fractal. Nesse contexto, uma estrutura de pente (veja Fig. (3.1)) foi proposto como modelo para investigar difusão anômala em aglomerados de percolação com tendência topológica [56, 84] em que, de acordo com a Ref. [25], as ramificações do pente desempenham o mesmo papel dos caminhos sem saída do aglomerado de percolação e o *backbone* é análoga a estrutura quasilinear do caminho de percolação.

Um processo difusivo sujeito a uma estrutura de pente é descrita pela seguinte equação de Fokker-Planck, como reportado na Ref. [57],

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, y; t) = \mathcal{D}_y \frac{\partial^2}{\partial y^2} \rho(x, y; t) + \delta(y) \mathcal{D}_x \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, y; t) \quad (3.2)$$

sendo \mathcal{D}_x e \mathcal{D}_y os coeficientes de difusão nas direções x e y , respectivamente. A presença da delta de Dirac na Eq. (3.2) implica que a difusão na direção x ocorre somente quando $y = 0$. Conseqüentemente, a difusão na direção y ocorre somente perpendicularmente à direção x , assim caracterizando a estrutura de pente.

Aqui investigamos os efeitos produzidos por uma força externa no processo difusivo sujeito à estrutura representada na Fig. (3.1). Em particular, consideramos a equação de Fokker-Planck

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, y; t) = \mathcal{D}_y \frac{\partial^2}{\partial y^2} \rho(x, y; t) + \mathcal{D}_x \delta(y) \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \bar{v}_x \frac{\partial}{\partial x} \right) \rho(x, y; t) - \nabla \cdot (\vec{v} \rho(x, y; t)), \quad (3.3)$$

com $\vec{v} = (v_x, v_y)$, sendo v_x, v_y e \bar{v}_x constantes. A equação (3.3) estende a Eq. (3.2) ao incorporar o termo de arraste $\vec{F} = (v_x + \delta(y)\bar{v}_x, v_y)$, o qual representa uma força atuando no sistema. As condições de contorno utilizadas para investigar as soluções da Eq. (3.3) são $\rho(\pm\infty, y; t) = 0$ e $\rho(x, \pm\infty; t) = 0$, isto é, as ramificações e o *backbone* do

pende são ilimitados. Também consideramos uma condição inicial arbitrária dada por $\rho(x, y; 0) = \widehat{\rho}(x, y)$, em que $\widehat{\rho}(x, y)$ é normalizado. Nossos resultados mostram que a presença de forças externas muda o processo difusivo e pode introduzir regimes difusivos distintos dependendo das escolhas dos parâmetros v_x, v_y e \bar{v}_x .

3.1.2 Força de arraste e estrutura de backbone

Vamos começar nossa análise considerando o caso em que as forças de arraste atuam fora da estrutura de *backbone*, ou seja, $v_x \neq 0, v_y \neq 0$, com $\bar{v}_x = 0$. Para esse caso, a Eq. (3.3) pode ser escrita como

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, y; t) = \mathcal{D}_y \frac{\partial^2}{\partial y^2} \rho(x, y; t) + \delta(y) \mathcal{D}_x \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, y; t) - \nabla \cdot (\bar{v} \rho(x, y; t)), \quad (3.4)$$

com $\bar{v} = (v_x, v_y)$. Para obtermos a solução da Eq.(3.4) em termos da função de Green, sujeita às condições discutidas na seção anterior, utilizamos transformadas integrais de Laplace e Fourier. Aplicando a transformada de Laplace ($\mathcal{L}\{\dots\} = \int_0^\infty dt e^{-st} \dots$ e $\mathcal{L}^{-1}\{\dots\} = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty+c}^{i\infty+c} ds e^{st} \dots$), obtemos

$$\mathcal{D}_y \frac{\partial^2}{\partial y^2} \rho(x, y; s) + \delta(y) \mathcal{D}_x \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, y; s) - \nabla \cdot (\bar{v} \rho(x, y; s)) = s \rho(x, y; s) - \widehat{\rho}(x, y). \quad (3.5)$$

Essa equação pode ser simplificada empregando-se a transformada de Fourier na variável x ($\mathcal{F}_x\{\dots\} = \int_{-\infty}^\infty dx e^{-ik_x x} \dots$ e $\mathcal{F}_x^{-1}\{\dots\} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty dk e^{ik_x x}$), conduzindo à equação diferencial

$$\mathcal{D}_y \frac{\partial^2}{\partial y^2} \rho(k_x, y; s) - \left(s + v_y \frac{\partial}{\partial y} + \delta(y) \mathcal{D}_x k_x^2 + ik_x v_x \right) \rho(k_x, y; s) = -\widehat{\rho}(k_x, y), \quad (3.6)$$

que pode ser resolvida utilizando o método da função de Green. Ao aplicar esse método a solução da Eq.(3.6) é dada por

$$\rho(k_x, y; s) = - \int_{-\infty}^\infty d\bar{y} \widehat{\rho}(k_x, \bar{y}) \mathcal{G}(k_x, y, \bar{y}; s), \quad (3.7)$$

com a função de Green, \mathcal{G} , obtida a partir da equação

$$\left(\mathcal{D}_y \frac{\partial^2}{\partial y^2} - v_y \frac{\partial}{\partial y} - \delta(y) \mathcal{D}_x k_x^2 - ik_x v_x - s \right) \mathcal{G}(k_x, y, \bar{y}; s) = \delta(y - \bar{y}) \quad (3.8)$$

sujeita à condição de contorno do tipo Dirichlet, ou seja, $\mathcal{G}(k_x, \pm\infty, \bar{y}; s) = 0$. A equação (3.8) pode ser resolvida utilizando a transformada de Fourier com relação a variável y ($\mathcal{F}_y\{\dots\} = \int_{-\infty}^\infty dy e^{-ik_y y} \dots$ e $\mathcal{F}_y^{-1}\{\dots\} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty dk e^{ik_y y}$). A solução no espaço de

Fourier para Eq.(3.8) é

$$\mathcal{G}(k_x, k_y, \bar{y}; s) = -\frac{e^{-ik_y\bar{y}}}{\mathcal{D}_y k_y^2 + ik_y v_y + ik_x v_x + s} - \frac{\mathcal{D}_x k_x^2}{\mathcal{D}_y k_y^2 + ik_y v_y + ik_x v_x + s} \mathcal{G}(k_x, 0, \bar{y}; s). \quad (3.9)$$

O último termo da Eq. (3.9) tem a presença da função de Green em $y = 0$, isto é, $\mathcal{G}(k_x, 0, \bar{y}; s)$, a qual corresponde a difusão na estrutura de *backbone* e desempenha um papel importante na caracterização do sistema. Considerando $k_y = 0$ na Eq.(3.9) é possível demonstrar que

$$\mathcal{G}(k_x, 0, \bar{y}; s) = -\frac{e^{-\frac{v_y}{2\mathcal{D}_y}\bar{y}} e^{\frac{\sqrt{\beta}}{2\mathcal{D}_y}|\bar{y}|}}{\sqrt{\beta} + \mathcal{D}_x k_x^2}, \quad (3.10)$$

em que $\beta = v_y^2 + 4\mathcal{D}_y s + 4i\mathcal{D}_y k_x v_x$. Substituindo a Eq.(3.10) na Eq.(3.9) e realizando a transformada inversa de Laplace, obtém-se

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(k_x, y, \bar{y}; t) &= -e^{\frac{v_y}{2\mathcal{D}_y}(y-\bar{y})} e^{-\frac{v_y^2}{4\mathcal{D}_y}t} e^{-ik_x v_x t} \left\{ \frac{1}{\sqrt{4\pi\mathcal{D}_y t}} \left(e^{-\frac{(|y|+|\bar{y}|)^2}{4\mathcal{D}_y t}} - e^{-\frac{(y-\bar{y})^2}{4\mathcal{D}_y t}} \right) \right\} \\ &+ \frac{1}{2\mathcal{D}_y} (|y| + |\bar{y}|) \int_0^t d\bar{t} \frac{e^{-\frac{(|y|+|\bar{y}|)^2}{4\mathcal{D}_y(t-\bar{t})}}}{\sqrt{4\pi\bar{t}(t-\bar{t})^3}} E_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} \left(-\frac{\mathcal{D}_x k_x^2}{2\sqrt{\mathcal{D}_y}} \sqrt{\bar{t}} \right). \quad (3.11) \end{aligned}$$

Note que a presença da função de Mittag-Leffler generalizada $E_{\alpha, \beta}(x)$ [50] na última parte da equação anterior é uma consequência da difusão anômala produzida pelos vínculos geométricos, isto é, a estrutura de *backbone*. Aplicando a transformada inversa de Fourier na variável x e considerando algumas identidades da função de Fox [50], é possível mostrar que a função de Green é dada por

$$\mathcal{G}(x, y, \bar{y}; t) = -e^{\frac{v_y}{2\mathcal{D}_y}(y-\bar{y})} e^{-\frac{v_y^2}{4\mathcal{D}_y}t} \bar{\mathcal{G}}'(x, y, \bar{y}; t), \quad (3.12)$$

com

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{G}}'(x, y, \bar{y}; t) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi\mathcal{D}_y t}} \delta(x - v_x t) \left(e^{-\frac{(y-\bar{y})^2}{4\mathcal{D}_y t}} - e^{-\frac{(|y|+|\bar{y}|)^2}{4\mathcal{D}_y t}} \right) + \frac{1}{\sqrt{8\mathcal{D}_x} \sqrt{\mathcal{D}_y}} \frac{|y| + |\bar{y}|}{\sqrt{4\pi\mathcal{D}_y}} \\ &\times \int_0^t d\bar{t} \frac{e^{-\frac{(|y|+|\bar{y}|)^2}{4\mathcal{D}_y(t-\bar{t})}}}{[(t-\bar{t})\bar{t}^{\frac{1}{2}}]^{\frac{3}{2}}} H_{1,1}^{1,0} \left[\sqrt{\frac{2}{\mathcal{D}_x} \sqrt{\frac{\mathcal{D}_y}{\bar{t}}}} |x - v_x \bar{t}| \left| \begin{matrix} (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}) \\ (0, 1) \end{matrix} \right. \right]. \quad (3.13) \end{aligned}$$

Esse resultado incorpora, como caso particular, os resultados apresentados na Ref. [66] ao considerar a ausência de forças de arraste, isto é, $v_x = v_y = 0$.

Na sequência, vamos investigar a relaxação do sistema com a finalidade de caracterizar os efeitos produzidos pelas forças de arraste no sistema. Para realizar essa análise, consideramos o deslocamento quadrático médio para as direções x e y . Por simplicidade, a

condição inicial $\hat{\rho}(x, y) = \delta(x)\delta(y - \tilde{y})$ será considerada. Após alguns cálculos, é possível mostrar que

$$\begin{aligned}\sigma_x^2(t) &= \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle \\ &= 2\mathcal{D}_x e^{-\frac{v_y}{2\mathcal{D}_y}\tilde{y}} \int_0^t \frac{d\tau}{\sqrt{4\pi\mathcal{D}_y\tau}} e^{-\frac{v_y^2}{4\mathcal{D}_y}\tau} e^{-\frac{\tilde{y}^2}{4\mathcal{D}_y\tau}}\end{aligned}\quad (3.14)$$

e $\sigma_y^2(t) = 2\mathcal{D}_y t$. A Eq. (3.14) mostra que a força de arraste v_x não tem influência na estrutura de *backbone* e que, para $v_y = 0$, o deslocamento quadrático médio obtido na Ref. [66] é recuperado, isto é

$$\sigma_x^2(t) = 2\mathcal{D}_x \sqrt{\frac{t}{\pi\mathcal{D}_y}} e^{-\frac{\tilde{y}^2}{4\mathcal{D}_y t}} - |\tilde{y}| \frac{\mathcal{D}_x}{\mathcal{D}_y} \operatorname{erfc}\left(\frac{|\tilde{y}|}{\sqrt{4\mathcal{D}_y t}}\right).\quad (3.15)$$

Para $v_y \neq 0$, observamos um tipo de regime difusivo confinado, como mostrado na Fig. (3.2). Esse tipo de comportamento tem sido reportado em simulações da dinâmica browniana de um polímero [85], em séries temporais de caminhadas aleatórias no tempo e movimento browniano fracionário [86]; e também em células vivas [31, 87, 88, 89], onde o ambiente lotado do citoplasma e a difusão restrita são os possíveis mecanismos da difusão anômala. Além disso, uma vez que o modelo de pente foi proposto para imitar, com certo grau de simplicidade, estruturas de percolação é notável destacar que o comportamento do espalhamento obtido aqui está em bom acordo com a difusão reportada em aglomerados de percolação abaixo da criticalidade, ou seja, $p < p_c$, em que p_c é a probabilidade crítica limiar da transição de percolação, e os aglomerados são considerados finitos (veja Ref. [25]). Portanto, devido à força constante agindo no eixo y , o sistema permanece confinado nas ramificações. Em outras palavras, as partículas entram em uma armadilha do labirinto e não retornam ao *backbone*. Dessa maneira, verificamos que o termo de arraste na direção y altera o espalhamento do sistema no *backbone* e conduz-nos a uma solução estacionária na direção x . No que segue, vamos adicionar a força de arraste que atua na estrutura de *backbone*. Nesse caso temos que $\bar{v}_x \neq 0$ na direção x , o que corresponde a resolver a seguinte equação:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\rho(x, y; t) &= \mathcal{D}_y \frac{\partial^2}{\partial y^2}\rho(x, y; t) + \delta(y) \left(\mathcal{D}_x \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \bar{v}_x \frac{\partial}{\partial x} \right) \rho(x, y; t) \\ &\quad - v_y \frac{\partial}{\partial y}\rho(x, y; t) - v_x \frac{\partial}{\partial x}\rho(x, y; t).\end{aligned}\quad (3.16)$$

Para resolvermos essa equação, é possível empregar o mesmo procedimento utilizado para obter a solução da Eq. (3.4). Consoante a isso, aplicamos inicialmente a transformada de

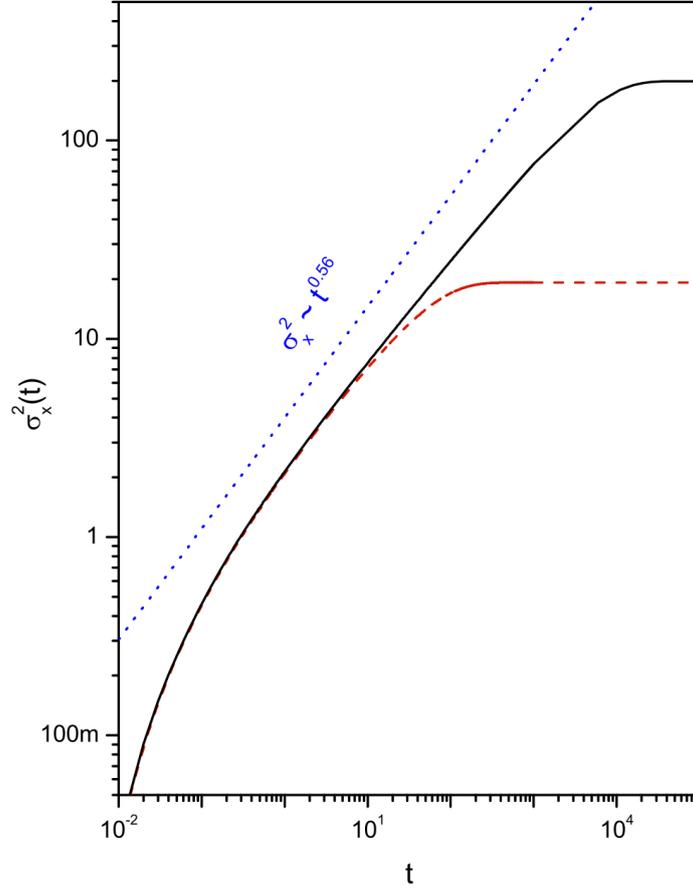


Figura 3.2: Comportamento temporal do deslocamento quadrático médio com $v_x = 0$, $\mathcal{D}_y = 20$, $\mathcal{D}_x = 10$ e $\bar{y} = 0.8$. A linha sólida corresponde ao caso $v_y = 0.1$ e a linha tracejada ao caso $v_y = 1$. Note que a saturação na direção x é alcançada mais rapidamente para grandes valores de v_y e mais lentamente para valores pequenos. A linha pontilhada foi introduzida para ilustrar o comportamento subdifusivo presente no sistema antes de atingir o estado estacionário.

Laplace em t e a transformada de Fourier em x na equação precedente para obtermos

$$\mathcal{D}_y \frac{\partial^2}{\partial y^2} \rho(k_x, y; s) - \left(s + v_y \frac{\partial}{\partial y} + \delta(y)(\mathcal{D}_x k_x^2 + ik_x \bar{v}_x) + ik_x v_x \right) \rho(k_x, y; s) = -\hat{\rho}(k_x, y; s), \quad (3.17)$$

com a solução dada pela Eq. (3.7) e a função de Green governada pela equação

$$\mathcal{D}_y \frac{\partial^2}{\partial y^2} \mathcal{G}(k_x, y; s) - \left(s + v_y \frac{\partial}{\partial y} + \delta(y)(\mathcal{D}_x k_x^2 + ik_x \bar{v}_x) + ik_x v_x \right) \mathcal{G}(k_x, y; s) = \delta(y - \bar{y}) \quad (3.18)$$

sujeita à condição de contorno $\mathcal{G}(k_x, \pm\infty, \bar{y}; s) = 0$. Utilizando a transformada de Fourier

na variável y e realizando alguns cálculos, é possível mostrar que a solução no espaço de Fourier é

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(k_x, k_y, \bar{y}; s) &= -\frac{e^{-ik_y\bar{y}}}{\mathcal{D}_y k_y^2 + ik_y v_y + ik_x v_x + s} \\ &\quad - \frac{\mathcal{D}_x k_x^2 + ik_x \bar{v}_x}{\mathcal{D}_y k_y^2 + ik_y v_y + ik_x v_x + s} \mathcal{G}(k_x, 0, \bar{y}; s), \end{aligned} \quad (3.19)$$

com

$$\mathcal{G}(k_x, 0, \bar{y}; s) = -\frac{e^{-\frac{v_y}{2\mathcal{D}_y}\bar{y}} e^{-\frac{\sqrt{\beta}}{2\mathcal{D}_y}|\bar{y}|}}{\sqrt{\beta} + \mathcal{D}_x k_x^2 + ik_x \bar{v}_x}. \quad (3.20)$$

Aplicando as transformadas inversas de Laplace e Fourier, obtemos

$$\mathcal{G}(x, y, \bar{y}; t) = -e^{-\frac{v_y^2}{4\mathcal{D}_y}t} e^{\frac{v_y}{2\mathcal{D}_y}(y-\bar{y})} \tilde{\mathcal{G}}(x, y, \bar{y}; t), \quad (3.21)$$

em que

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{G}}(x, y, \bar{y}; t) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi\mathcal{D}_y t}} \delta(x - v_x t) \left(e^{-\frac{(y-\bar{y})^2}{4\mathcal{D}_y t}} - e^{-\frac{(|y|+|\bar{y}|)^2}{4\mathcal{D}_y t}} \right) \\ &\quad + \frac{1}{t} \int_0^\infty du (|y| + |\bar{y}| + 2\mathcal{D}_y u) \\ &\quad \times \mathcal{G}_y(|y|, |\bar{y}|, 2\mathcal{D}_y u; u) \mathcal{G}_x(x, -\bar{v}_x u, -v_x t; t), \end{aligned} \quad (3.22)$$

e

$$\mathcal{G}_\alpha(x, y, z; u) = \frac{e^{-\frac{(x+y+z)^2}{4\mathcal{D}_\alpha u}}}{\sqrt{4\pi\mathcal{D}_\alpha u}} \quad (3.23)$$

Similarmente ao caso anterior, analisamos o comportamento do deslocamento quadrático médio na direção x , a fim de investigar os efeitos da força externa na relaxação do sistema.

Para esse caso, obtemos

$$\langle x(t) \rangle = v_x t + \frac{\bar{v}_x e^{-\frac{v_y}{2\mathcal{D}_y}\bar{y}}}{\sqrt{4\pi\mathcal{D}_y}} \int_0^t d\tau \frac{e^{-\frac{v_y^2}{4\mathcal{D}_y}\tau} e^{-\frac{\bar{y}^2}{4\mathcal{D}_y\tau}}}{\sqrt{\tau}} \quad (3.24)$$

e

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= v_x^2 t^2 + \int_0^t \frac{d\bar{t}}{\sqrt{\pi\mathcal{D}_y \bar{t}}} (2v_x \bar{v}_x (t - \bar{t}) + \mathcal{D}_x) e^{-\frac{(\bar{y}+v_y \bar{t})^2}{4\mathcal{D}_y \bar{t}}} \\ &\quad + \frac{\bar{v}_x^2}{2\mathcal{D}_y} \int_0^t d\bar{t} e^{-\frac{v_y}{2\mathcal{D}_y}\bar{y}} e^{-\frac{v_y^2}{4\mathcal{D}_y}\bar{t}} \operatorname{erfc} \left(-\frac{|\bar{y}|}{2\sqrt{\mathcal{D}_y \bar{t}}} \right). \end{aligned} \quad (3.25)$$

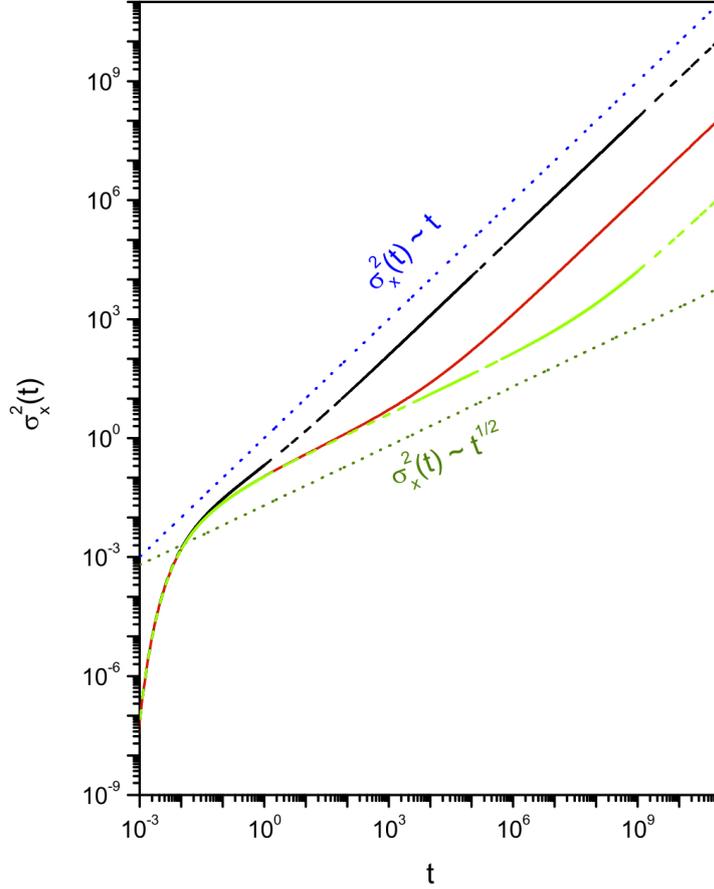


Figura 3.3: Comportamento temporal do deslocamento quadrático médio para $v_y = 0$, $\mathcal{D}_y = 20$, $\mathcal{D}_x = 10$, e $\tilde{\gamma} = 0.8$. As retas pontilhadas foram adicionadas para ilustrar os comportamentos usual e subdifusivo que podem ser manifestado pelo deslocamento quadrático médio obtido das Eqs. (3.24) e (3.25). As linhas: tracejada, sólida e pontilhada correspondem respectivamente aos casos $\bar{v}_x = 10$, $\bar{v}_x = 1$, e $\bar{v}_x = 0.1$, conforme indicado.

Na Fig. (3.3) ilustramos o comportamento do deslocamento quadrático médio, $\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$, obtido por meio das equações anteriores considerando-se $v_y = 0$ e $v_x = 0$. Uma característica interessante é a presença de dois regimes difusivos após um regime transiente inicial. Um desses regimes é subdifusivo e o outro é usual. Nesse sentido, note que a presença do regime subdifusivo depende dos valores de \bar{v}_x ; por exemplo, $\bar{v}_x \gg 1$ conduz ao comportamento usual, enquanto $\bar{v}_x \ll 1$ conduz ao comportamento subdifusivo. Além disso, o mesmo *crossover* dinâmico entre subdifusão e difusão usual foi reportado na Ref. [61], cujos autores estudaram uma caminhada aleatória no modelo de pente por meio de simulação numérica. Esse tipo de *crossover* também é encontrado na física de polímeros.

De acordo com a Ref. [90], a dinâmica de um monômero marcado em um polímero deve ser anômala até o tempo de relaxação terminal, e essa dinâmica anômala está conectada com a resposta média da relaxação do polímero às deformações locais [91]. Em particular,

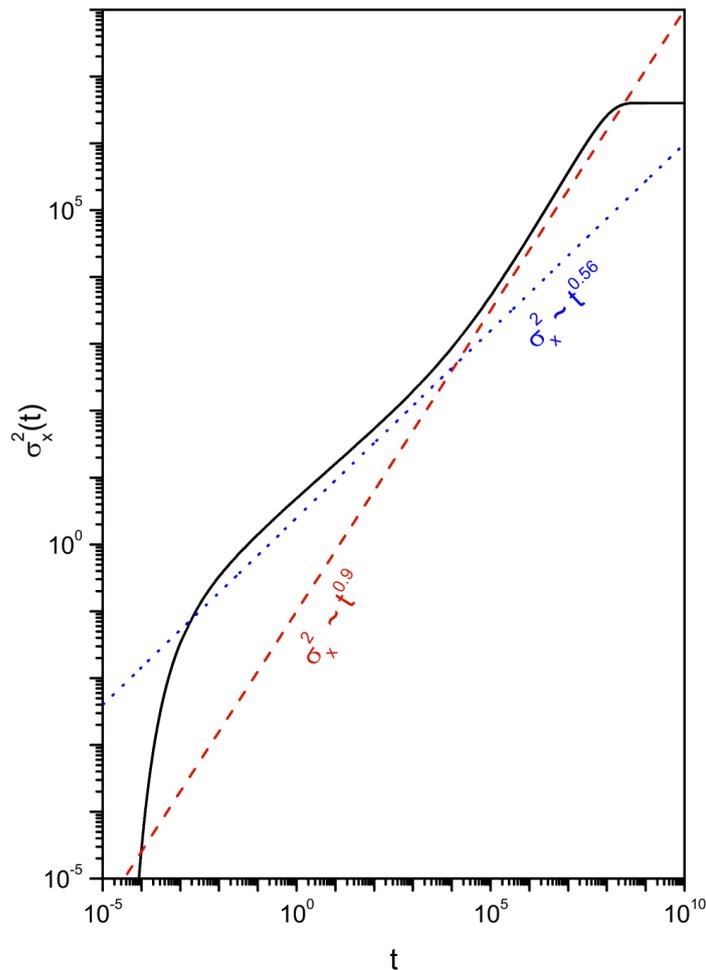


Figura 3.4: Comportamento temporal do deslocamento quadrático médio para $v_y = 5 \times 10^{-4}$, $v_x = 0$, $\bar{v}_x = 1$, $\mathcal{D}_y = 5$, $\mathcal{D}_x = 10$ e $\tilde{y} = 0.1$. A linha pontilhada e a tracejada foram introduzidas para ilustrarem os comportamentos subdifusivos presentes no sistema antes desse atingir o estado estacionário.

para os polímeros descritos pelo modelo de Rouse o deslocamento quadrático médio de um monômero marcado comporta-se com $t^{1/2}$ até o tempo de relaxação terminal, e somente após esse tempo a dinâmica do polímero se torna difusiva [92]. Ademais, na teoria de aglomerados de percolação a difusão é usual quando a percolação ocorre, ou seja, $p > p_c$, e os aglomerados são considerados infinitos [25]. Na Fig.(3.4), incorporamos o termo de arraste na direção y , isto é, $v_y \neq 0$, e o comportamento estacionário é obtido para a dis-

tribuição na direção x , uma vez que $\sigma_x^2(t)$ é constante para tempos longos como no caso anterior para o termo de arraste fora da estrutura de *backbone*.

3.1.3 Discussões e conclusões

Nesse trabalho, analisamos uma equação de Fokker-Planck em uma estrutura de *backbone* considerando a presença de termos de arraste atuando em ambas direções x e y . O termo de arraste possui componentes tanto dentro como fora dessa estrutura. Para o caso caracterizado por termos de arraste com componentes fora do *backbone*, a componente dependente de v_x não influencia o espalhamento do sistema. Nesse caso, a presença de v_y conduz à solução estacionária para a direção x , como mostrado na Fig.(3.2), e como esperado não tem influência na direção y , a qual é caracterizada pela difusão usual. Para o caso $v_x = 0$, $\bar{v}_x \neq 0$, e $v_y = 0$, obtemos um comportamento interessante para o sistema ao analisarmos a direção x . Tal direção apresenta regimes difusivos diferentes, sendo um subdifusivo e o outro usual. A existência do comportamento subdifusivo depende dos valores de \bar{v}_x , ou seja, para $\bar{v}_x \ll 1$ o sistema permanece um longo período no regime subdifusivo e para $\bar{v}_x \gg 1$ a existência desse regime pode não ser manifestada. Tal fato indica que para grandes valores de \bar{v}_x o sistema permanece um curto tempo na estrutura de *backbone*, que é governada pelo caso subdifusivo em conexão com a equação de difusão fracionária. Nesse contexto, a presença de v_y muda o último regime difusivo e leva a uma solução estacionária, assim como no primeiro caso caracterizado por $\bar{v}_y = 0$ e ilustrado pela Fig.(3.2).

3.2 Equação de difusão com um termo de backbone

Seguindo as investigações sobre o modelo de pente, nessa seção, investigaremos o caso em o sistema pode tanto se difundir usualmente, como também a difusão pode ficar restrita à estrutura de pente. A seguinte equação de difusão fracionária descreve esse sistema

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x, y; t) = \mathcal{D}_y \frac{\partial^2}{\partial y^2}\rho(x, y; t) + \mathcal{D}_x \frac{\partial^2}{\partial x^2}\rho(x, y; t) + \bar{\mathcal{D}}_x \delta(y) \frac{\partial^\mu}{\partial |x|^\mu}\rho(x, y; t), \quad (3.26)$$

em que $\rho(x, y; t)$ representa a função densidade de probabilidade do sistema, a derivada fracionária espacial considerada aqui é o operador de Riesz–Feller e \mathcal{D}_x , \mathcal{D}_y e $\bar{\mathcal{D}}_x$ representam os coeficientes de difusão. Note que as dimensões de \mathcal{D}_x e \mathcal{D}_y são $[L]^2/[T]$ e a dimensão de $\bar{\mathcal{D}}_x$ é $[L]^{1+\mu}/[T]$. Sendo $[L]$ e $[T]$ correspondentes ao comprimento e ao tempo, respectivamente. A dimensão de $\bar{\mathcal{D}}_x$ difere de \mathcal{D}_x e \mathcal{D}_y devido a presença da função delta e da derivada fracionária espacial. Essa equação possui dois termos difusivos na direção x . O primeiro está relacionado ao processo difusivo usual e o outro tem uma difusão preferencial quando $y = 0$, caracterizando a estrutura de *backbone*, similar a que está presente no modelo de pente (veja Fig.(3.5)). Esse termo difusivo pode surgir em várias situações, tais como em aglomerados de percolação, que correspondem à caminhada aleatória em uma direção preferencial, o *backbone*, com ramificações laterais ou armadilhas; processos de eletroforese e desenvolvimento de tumores. A presença desses dois termos difusivos introduz diferentes comportamentos para a solução; a qual será governada por uma difusão anômala ou usual, dependendo da escala de tempo e da condição inicial a serem consideradas.

O objetivo dessa seção é investigar as soluções exatas para a equação (3.26), su-

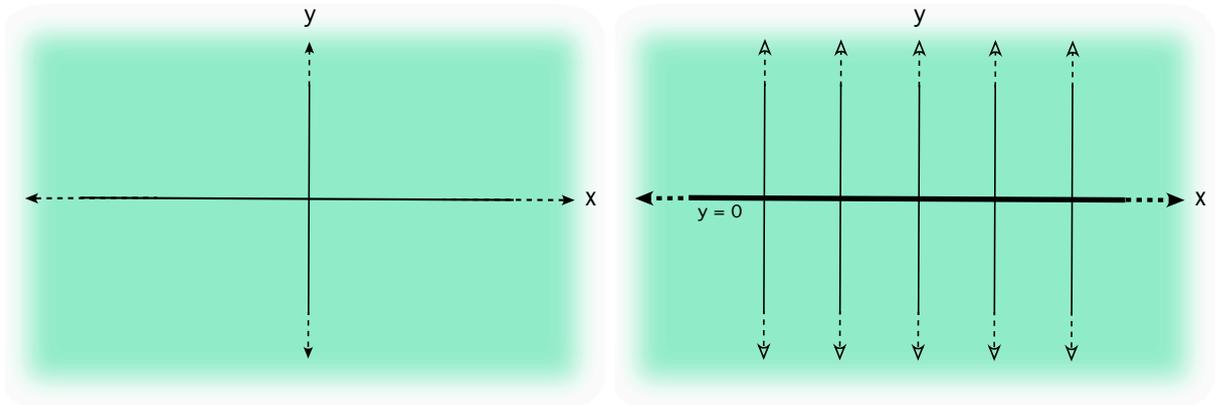


Figura 3.5: A primeira figura, à esquerda ilustra a região acessível (sombreado) ao sistema na difusão usual. Na figura à direita está ilustrado o sistema descrito pela Eq. (3.26), na qual a difusão pode ocorrer na região ou pode ser confinada na estrutura de pente .

jeita às condições de contorno $\rho(\pm\infty, y; t) = 0$ e $\rho(x, \pm\infty; t) = 0$, e à condição inicial $\rho(x, y; 0) = \hat{\rho}(x, y)$. Utilizando esse resultado, analisamos o espalhamento do sistema por meio do cálculo do deslocamento quadrático médio ou variância para as variáveis x e y ao considerarmos $\mu = 2$. Para $\mu \neq 2$, analisamos o comportamento de $1/(\rho_x(0; t))^2$, em que $\rho_x(x; t)$ é a distribuição reduzida, isto é, $\rho_x(x; t) = \int_{-\infty}^{\infty} dy \rho(x, y; t)$.

3.2.1 Equação de Difusão e a estrutura de backbone

Investigaremos as soluções da equação (3.26) considerando as condições de contorno precedentes e uma condição inicial arbitrária para o sistema. Inicialmente analisamos a equação considerando $\mu = 2$, o que corresponde a inserir na equação de difusão o termo difusivo presente no modelo de pente e, posteriormente, discutimos o caso $\mu \neq 2$. Para o primeiro caso a equação (3.26) pode ser escrita como

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, y; t) = \mathcal{D}_y \frac{\partial^2}{\partial y^2} \rho(x, y; t) + (\mathcal{D}_x + \bar{\mathcal{D}}_x \delta(y)) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, y; t), \quad (3.27)$$

em que as dimensões de \mathcal{D}_x e \mathcal{D}_y são $[L]^2/[T]$ enquanto a dimensão de $\bar{\mathcal{D}}_x$ agora é $[L]^3/[T]$, como anteriormente. Note que a equação (3.27) recupera, para $\bar{\mathcal{D}}_x = 0$, a equação de difusão usual, e para $\mathcal{D}_x = 0$, a equação de difusão empregada para analisar a difusão em uma estrutura de *backbone* é obtida. Nessa direção é válido notar que a solução obtida para a equação (3.27) estende os resultados encontrados em [66]. O procedimento para obter uma solução da equação (3.27) inicia-se aplicando-lhe a transformada de Laplace ($\mathcal{L}\{\dots\} = \int_0^{\infty} dt e^{-st} \dots$ and $\mathcal{L}^{-1}\{\dots\} = (1/2\pi i) \int_{-i\infty+c}^{\infty+c} ds e^{st} \dots$) o que resulta em

$$\mathcal{D}_y \frac{\partial^2}{\partial y^2} \rho(x, y; s) + (\mathcal{D}_x + \bar{\mathcal{D}}_x \delta(y)) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, y; s) = s\rho(x, y; s) - \hat{\rho}(x, y). \quad (3.28)$$

Essa equação pode também ser simplificada utilizando a transformada de Fourier na variável x ($\mathcal{F}\{\dots\} = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ik_x x} \dots$ and $\mathcal{F}^{-1}\{\dots\} = (1/2\pi) \int_{-\infty}^{\infty} dk_x e^{ik_x x} \dots$), o que nos leva à seguinte equação diferencial na variável y :

$$\mathcal{D}_y \frac{d^2}{dy^2} \rho(k_x, y; s) - (s + \mathcal{D}_x k_x^2 + \delta(y) \bar{\mathcal{D}}_x k_x^2) \rho(k_x, y; s) = -\hat{\rho}(k_x, y). \quad (3.29)$$

Utilizando o método das funções de Green, a solução da equação (3.29) pode ser representada como

$$\rho(k_x, y; s) = - \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{y} \hat{\rho}(k_x, y) \mathcal{G}(k_x, y, \bar{y}; s), \quad (3.30)$$

com a função de Green obtida a partir da equação

$$\mathcal{D}_y \frac{d^2}{dy^2} \mathcal{G}(k_x, y, \bar{y}; s) - (s + \mathcal{D}_x k_x^2 + \delta(y) k_x^2 \bar{\mathcal{D}}_x) \mathcal{G}(k_x, y, \bar{y}; s) = \delta(y - \bar{y}), \quad (3.31)$$

sujeita à condição $\mathcal{G}(k_x, \pm\infty, \bar{y}; s) = 0$. A Eq. (3.31) pode ser simplificada empregando a transformada de Fourier na variável y ($\mathcal{F}\{\dots\} = \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-ik_y y} \dots$ e $\mathcal{F}^{-1}\{\dots\} = (1/2\pi) \int_{-\infty}^{\infty} dk_y e^{ik_y y} \dots$). Dessa maneira, é possível mostrar que

$$\mathcal{G}(k_x, k_y, \bar{y}; s) = -\frac{e^{-ik_y \bar{y}}}{s + \mathcal{D}_y k_y^2 + \mathcal{D}_x k_x^2} - \frac{\bar{\mathcal{D}}_x k_x^2}{s + \mathcal{D}_y k_y^2 + \mathcal{D}_x k_x^2} \mathcal{G}(k_x, 0, \bar{y}; s). \quad (3.32)$$

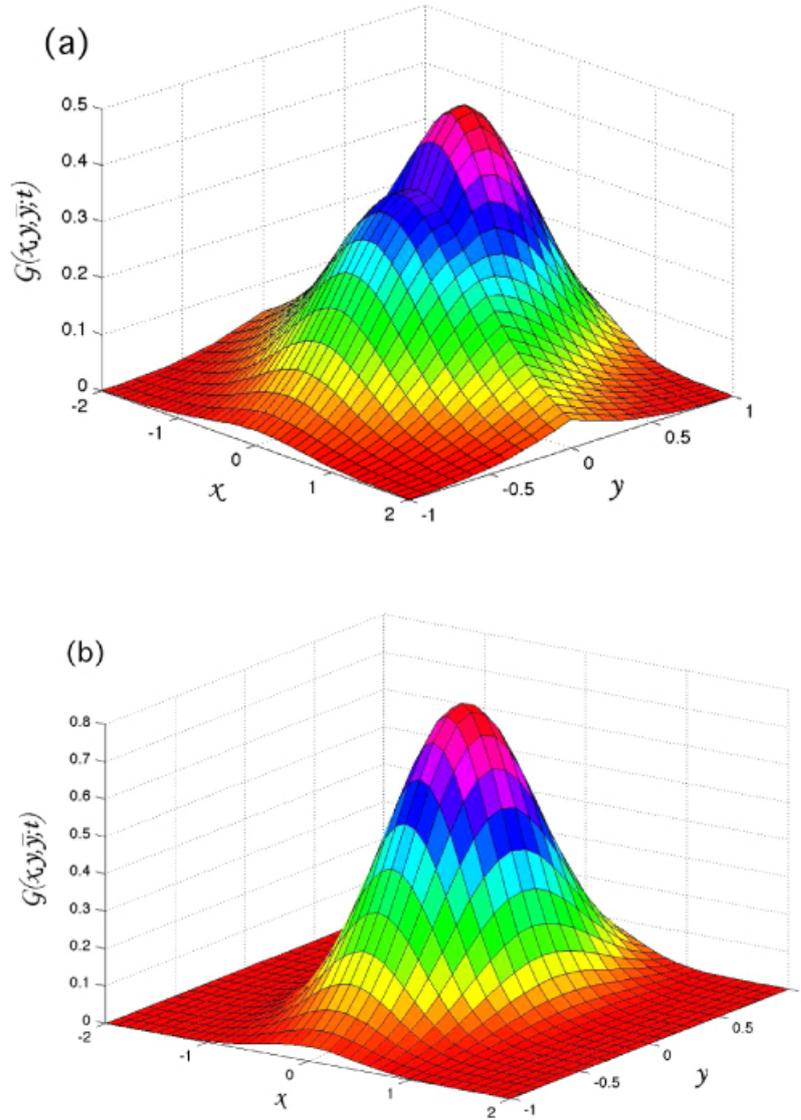


Figura 3.6: Figuras (a) e (b) ilustram para $\bar{\mathcal{D}}_x = 2$ e $\mathcal{D}_x = 0$ o comportamento da Eq. (3.34) versus x e y considerando $\mu = 2$, $\bar{y} = 0.1$ e $t = 0.3$. Note que o termo de *backbone* possui uma distribuição usual, e como consequência, um comportamento do tipo bimodal é verificado quando a condição inicial não está centralizada no ponto $x = 0$ e $y = 0$.

O último termo tem a presença de $\mathcal{G}(k_x, 0, \bar{y}; s)$, que corresponde à direção preferencial da difusão no eixo x (também chamado de *backbone* por alguns autores). Tal termo desempenha um papel importante para tempos intermediários como mostraremos abaixo ao analisar o comportamento de $\sigma_x^2(t)$ para uma condição inicial não localizada na origem. Esse termo é dado por

$$\mathcal{G}(k_x, 0, \bar{y}; s) = -\frac{e^{-\sqrt{((s+\mathcal{D}_x k_x^2)/\mathcal{D}_y)|\bar{y}|}}}{2\sqrt{\mathcal{D}_y}\sqrt{s + \mathcal{D}_x k_x^2 + \bar{\mathcal{D}}_x k_x^2}}. \quad (3.33)$$

Substituindo a equação (3.33) na equação (3.32) e realizando as transformadas inversas de Laplace e Fourier, obtemos a função de Green

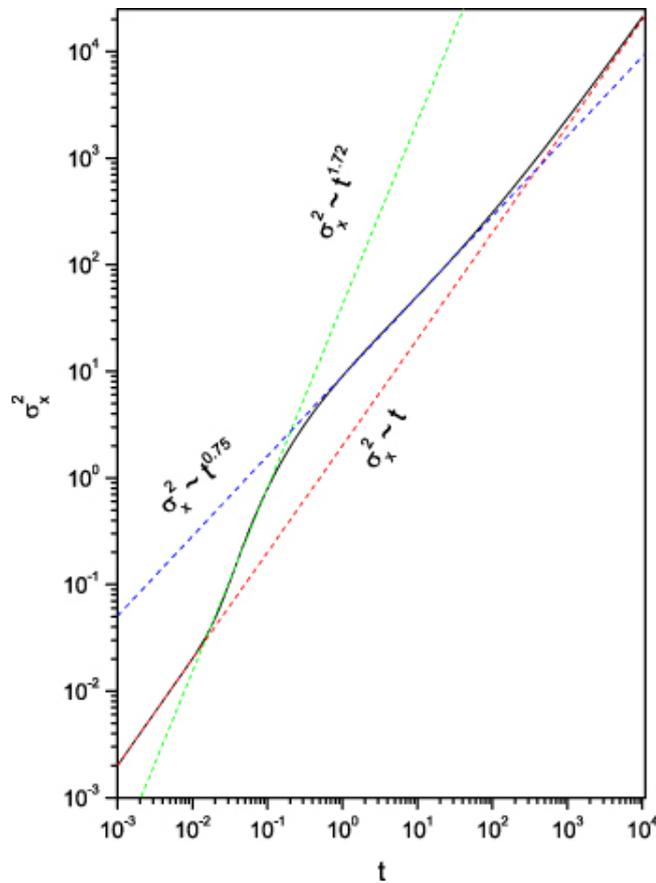


Figura 3.7: Comportamento de σ_x^2 versus t para $\mathcal{D}_x = \mathcal{D}_y = 1$, $\bar{\mathcal{D}}_x = 10$ e $\bar{y} = 0.5$. Note que as linhas retas são utilizadas para evidenciar os distintos regimes difusivos apresentados por um sistema governado Eq. (3.34). Para esse caso, temos três regimes difusivos diferentes, isto é, tempos pequenos e longos são caracterizados pelo regime difusivo usual, e tempos intermediários apresentam um regime de superdifusão seguido de subdifusão.

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}(x, y, \bar{y}; t) &= -\frac{e^{-x^2/4\mathcal{D}_x t}}{4\pi t \sqrt{\mathcal{D}_x \mathcal{D}_y}} \left(e^{-(y-\bar{y})^2/4\mathcal{D}_y t} - e^{-(|y|-\bar{y})^2/4\mathcal{D}_y t} \right) \\
&- \frac{1}{\sqrt{8\bar{\mathcal{D}}_x \sqrt{\mathcal{D}_y}} \left(\frac{|y| + |\bar{y}|}{\sqrt{4\pi \mathcal{D}_y}} \right)} \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{x} \frac{e^{-(x-\bar{x})^2/4\mathcal{D}_x t}}{\sqrt{4\pi \mathcal{D}_x t}} \\
&\times \int_0^t d\bar{t} \frac{e^{-(|y|+|\bar{y}|)^2/4\mathcal{D}_y(t-\bar{t})}}{[(t-\bar{t})\bar{t}^{1/2}]^{3/2}} H_{1,1}^{1,0} \left[\sqrt{\frac{2}{\bar{\mathcal{D}}_x} \sqrt{\frac{\mathcal{D}_y}{\bar{t}}}} |\bar{x}| \left| \begin{matrix} (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}) \\ (0,1) \end{matrix} \right. \right], \quad (3.34)
\end{aligned}$$

em que $H_{p,q}^{m,n} \left[x \left| \begin{matrix} (a_1, A_1), \dots, (a_q, A_q) \\ (b_1, B_1), \dots, (b_q, B_q) \end{matrix} \right. \right]$ é a função de Fox [93]. Esse resultado tem como caso particular os resultados apresentados em [66] para o modelo de pente. Ao compararmos a equação (3.34) com a solução da equação de difusão usual, ou seja, o caso para o qual $\bar{\mathcal{D}}_x = 0$, observamos diferenças que resultam da presença do termo de *backbone*. A principal diferença se deve a presença da função H de Fox, relacionada ao comportamento

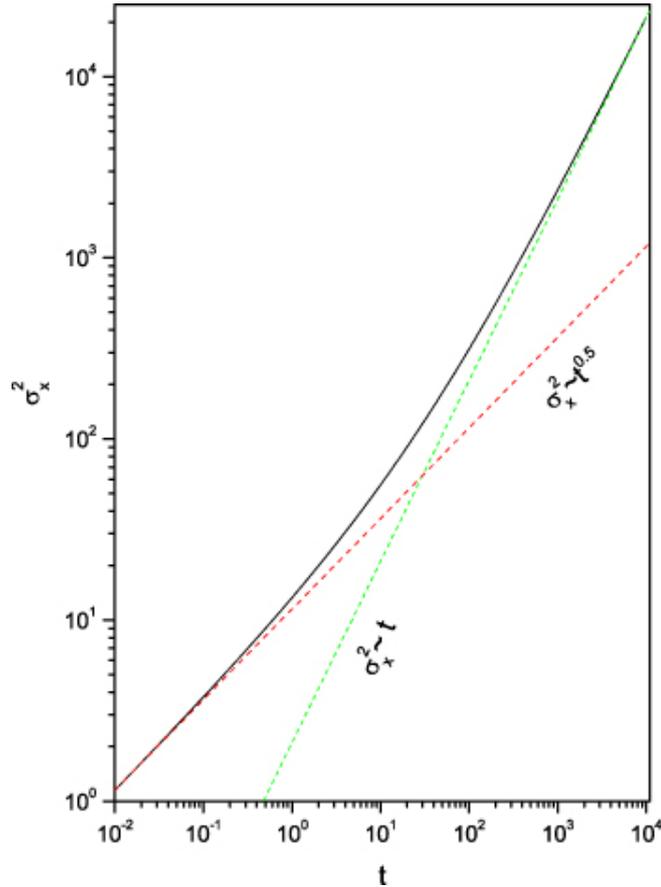


Figura 3.8: Comportamento de σ_x^2 versus t para $\mathcal{D}_x = \mathcal{D}_y = 1$, $\bar{\mathcal{D}}_x = 10$ e $\bar{y} = 0$ com a finalidade de mostrar a influência da condição inicial no espalhamento do sistema. Assim como no Fig. (3.7), linhas retas são utilizadas para evidenciar os regimes difusivos apresentados por um sistema governado pela Eq. (3.34). Em contraste com a Fig. (3.7) a posição da condição inicial aqui considerada gera dois (e não três) regimes difusivos distintos. Sendo um deles subdifusivo e o outro o usual.

não usual da solução. Essa característica pode ser verificada ao realizar a expansão assintótica dessa função, o que conduz à função exponencial esticada (*stretched*) [93]. Outro aspecto interessante é que o primeiro termo da equação (3.34) contribui para a solução $\rho(x, y; t)$ se e somente se a condição inicial não é centralizada na origem. Na Fig. (3.6), mostramos o comportamento da solução para $\bar{D}_x \neq 0$ e $\bar{D}_x = 0$ para ilustrar as mudanças causadas pela presença do termo de *backbone*. Note que, para $\bar{D}_x \neq 0$ temos um comportamento do tipo bimodal distinto do caso $\bar{D}_x = 0$ caracterizado pela difusão usual.

Para investigar o espalhamento da distribuição que é governada pela função de Green precedente, Eq. (3.34), calcula-se o deslocamento quadrático médio para as direções x e y . Realizando alguns cálculos, usando as Eqs. (3.30) e (3.34) e a condição inicial $\hat{\rho}(x, y) = \delta(x)\delta(y - \tilde{y})$, obtemos

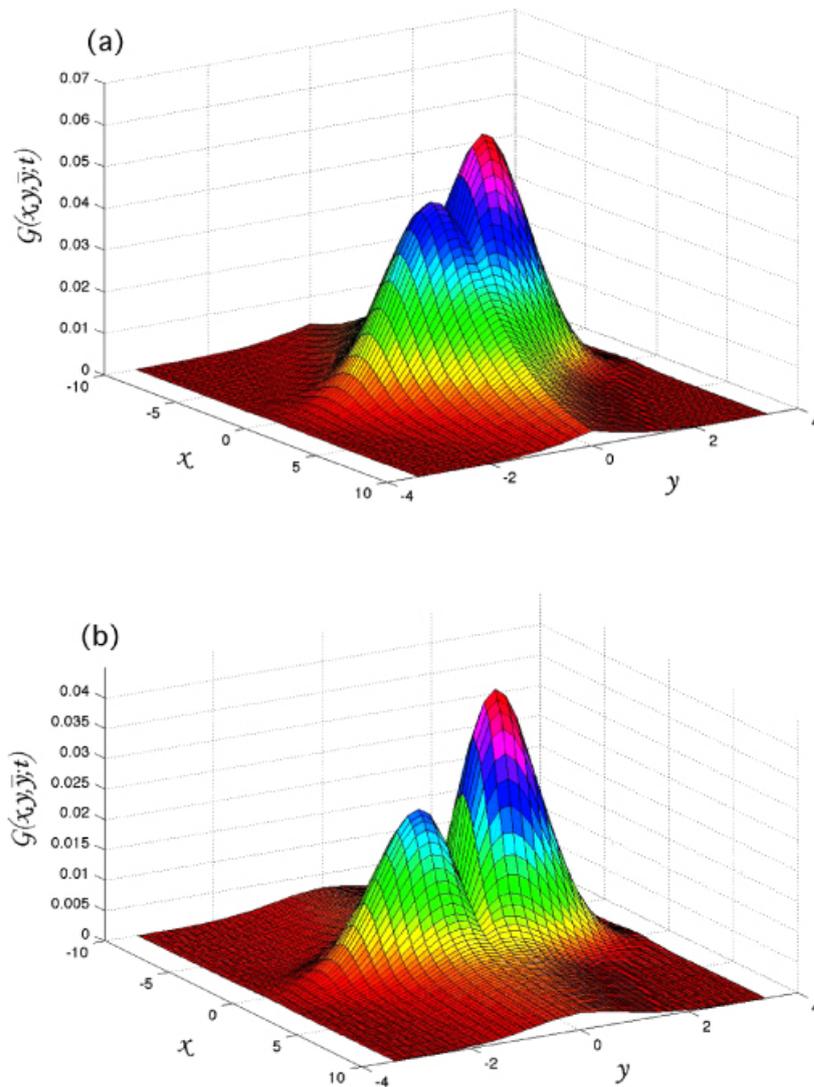


Figura 3.9: Figuras (a) e (b) ilustram para $\mu = 3/2$ e $1/2$ o comportamento da Eq. (3.38) versus x e y considerando, por simplicidade, $D_x = D_y = 1$, $\bar{D}_x = 10$, $\bar{y} = 0.1$ e $t = 0.5$.

$$\begin{aligned}
\sigma_x^2(t) &= \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle \\
&= 2\mathcal{D}_x t + 2\bar{\mathcal{D}}_x \sqrt{\frac{t}{\pi\mathcal{D}_y}} \exp\left(-\frac{\tilde{y}^2}{4\mathcal{D}_y t}\right) + |\tilde{y}| \frac{\bar{\mathcal{D}}_x}{\mathcal{D}_y} \operatorname{erfc}\left(\frac{|\tilde{y}|}{\sqrt{4\mathcal{D}_y t}}\right) \quad (3.35)
\end{aligned}$$

e $\sigma_y^2(t) = 2\mathcal{D}_y$. Efetuando uma análise dimensional, é possível mostrar que a equação (3.35) possui a dimensão correta, ou seja, $[L]^2$ como esperado. O resultado para $\sigma_y^2(t)$ mostra que a estrutura de *backbone* não tem influência nessa direção. Um resultado notável é verificado para $\sigma_x^2(t)$ a presença de (dois ou três) regimes difusivos diferentes, dependendo das escolhas de \mathcal{D}_x , $\bar{\mathcal{D}}_x$, \mathcal{D}_y e \tilde{y} . Em particular, para $\tilde{y} \neq 0$ o sistema apresenta difusão usual para tempos pequenos e longos. A estrutura de *backbone* desempenha um papel importante nos tempos intermediários, como ilustrado na Fig. (3.7) na qual as linhas retas mostram o comportamento anômalo de $\sigma_x^2(t)$. A linha pontilhada indica o intervalo para o qual o espalhamento do sistema é superdifusivo. O regime subdifusivo é representado pela linha tracejada e o regime usual pela linha pontilhada (vermelha). Para o caso $\tilde{y} = 0$ o sistema manifesta dois regimes distintos, como mostrado na Fig. (3.8).

Vamos incorporar na análise precedente a derivada fracionária espacial no termo de

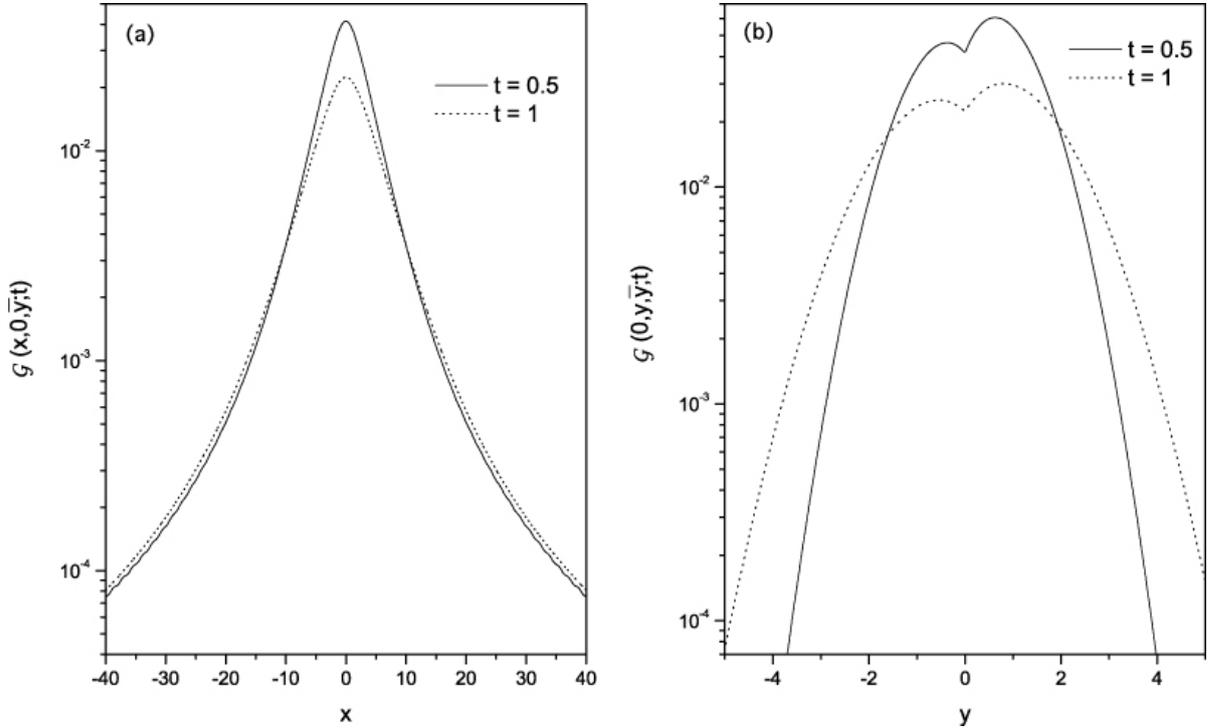


Figura 3.10: Figuras (a) e (b) ilustram para $\mu = 3/2$ e $1/2$ o comportamento da Eq. (3.38). Em (a), fixamos o valor de y , ou seja, $y = 0$, e mostramos para tempos diferentes o comportamento da Eq. (3.38) versus x . Em (b), fixamos x , ou seja, $x = 0$, e mostramos para tempos diferentes o comportamento da Eq. (3.38) versus y . Consideramos, por simplicidade, $\mathcal{D}_x = \mathcal{D}_y = 1$, $\bar{\mathcal{D}}_x = 10$ e $\bar{y} = 0.1$

difusão relacionado à estrutura de *backbone*. Para esse caso, a equação de difusão a ser investigada é a equação (3.26) com $\mu \neq 2$. A presença da derivada fracionária espacial no último termo da equação (3.26) adiciona uma distribuição de cauda longa na difusão da estrutura de *backbone*. Dessa maneira, o sistema em $y \neq 0$ é essencialmente governado por distribuições de cauda curta e para $y = 0$ podemos ter a presença de uma distribuição de cauda longa como uma distribuição de Lévy. A solução para equação (3.26) pode ser obtida utilizando o mesmo procedimento do caso anterior, isto é, $\mu = 2$. Começamos aplicando as transformadas de Laplace e Fourier na equação (3.26) nas variáveis x e t , resultando na equação diferencial

$$\mathcal{D}_y \frac{d^2}{dy^2} \rho(k_x, y; s) - (s + \mathcal{D}_x k_x^2 + \delta(y) \bar{\mathcal{D}}_x |k_x|^\mu) \rho(k_x, y; s) = -\hat{\rho}(k_x, y), \quad (3.36)$$

que tem como solução a equação (3.30) com a função de Green dada por

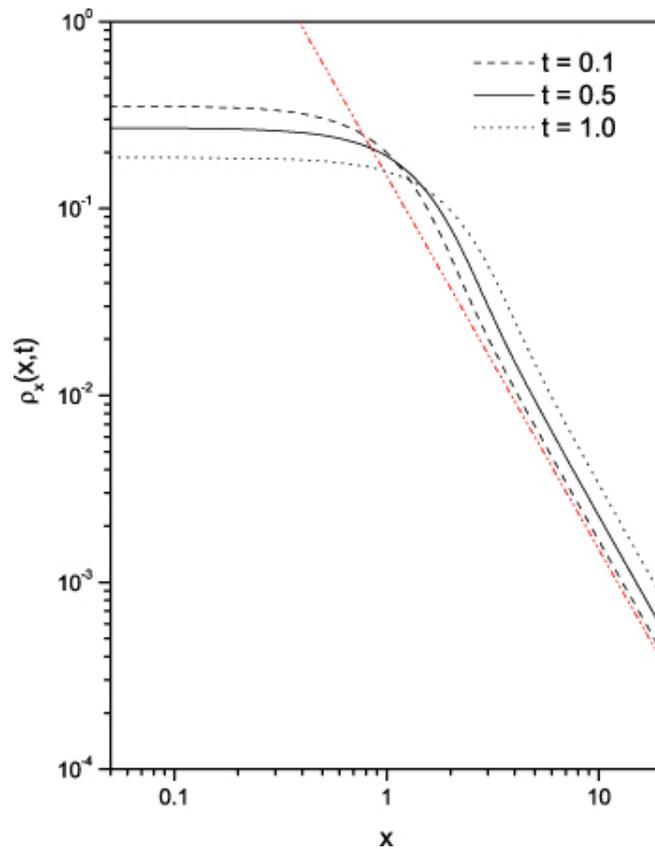


Figura 3.11: Comportamento de $\rho_x(x, t)$ versus x ilustrado para $\mu = 1$ considerando por simplicidade $\mathcal{D}_x = \mathcal{D}_y = \bar{\mathcal{D}}_x = 1$ e $\tilde{y} = 0.1$. Esta figura mostra que o limite assintótico é uma lei de potência (linha pontilhada vermelha) em virtude da presença da derivada fracionária na equação de difusão.

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(k_x, y, \bar{y}; t) &= -\frac{e^{-k_x^2 \mathcal{D}_x t}}{\sqrt{4\pi \mathcal{D}_y t}} \left(e^{-(y-\bar{y})^2/4\mathcal{D}_y t} - e^{-(|y|+|\bar{y}|)^2/4\mathcal{D}_y t} \right) \\ &- \left(\frac{|y|+|\bar{y}|}{4\mathcal{D}_y \sqrt{\pi}} \right) e^{-k_x^2 \mathcal{D}_x t} \int_0^t d\bar{t} \frac{e^{-(|y|+|\bar{y}|)^2/4\mathcal{D}_y(t-\bar{t})}}{\sqrt{t(t-\bar{t})^3}} E_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} \left(-\frac{\bar{\mathcal{D}}_x |k_x|^\mu \sqrt{\bar{t}}}{\sqrt{4\mathcal{D}_y}} \right), \end{aligned} \quad (3.37)$$

sendo $E_{\alpha, \beta}(x)$ a função de Mittag-Leffler generalizada. Em particular, essa função é definida com $E_{\alpha, \beta}(x) = \sum_{n=0}^{\infty} x^n / \Gamma(\beta + \alpha n)$ [50]. Procedendo com a transformada inversa de Fourier, é possível mostrar que a função de Green é dada por

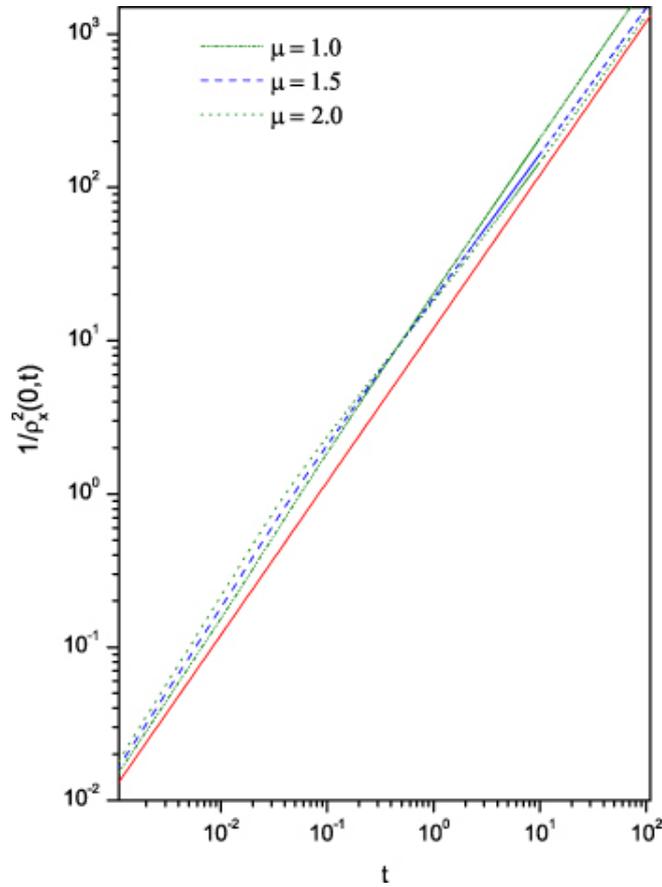


Figura 3.12: Comportamento de $1/\rho_x^2(0, t)$ versus t é ilustrado para diferentes valores de μ considerando, por simplicidade, $\mathcal{D}_x = \mathcal{D}_y = \bar{\mathcal{D}}_x = 1$ e $\bar{y} = 0.1$. Esta figura mostra regimes difusivos diferentes para o sistema governado pela Eq. (3.38) a qual, dependendo do valor de μ , pode apresentar três ($\mu = 3/2$ e 2) ou dois ($\mu = 1$) regimes difusivos. A linha reta vermelha corresponde ao caso usual, isto é, $1/\rho_x^2(0, t) \sim t$.

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}(x, y, \bar{y}; t) &= -\frac{e^{-x^2/4\mathcal{D}_x t}}{4\pi t \sqrt{\mathcal{D}_x \mathcal{D}_y}} \left(e^{-(y-\bar{y})^2/4\mathcal{D}_y t} - e^{-(|y|+|\bar{y}|)^2/4\mathcal{D}_y t} \right) \\
&- \left(\frac{|y|+|\bar{y}|}{2\bar{\mathcal{D}}_x \sqrt{\pi \mathcal{D}_y}} \right) \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{x} \frac{e^{-(x-\bar{x})^2/4\mathcal{D}_x t}}{\sqrt{4\pi \mathcal{D}_x t}} \int_0^t d\bar{t} \frac{e^{-(|y|+|\bar{y}|)^2/4\mathcal{D}_y (t-\bar{t})}}{\sqrt{t(t-\bar{t})^3 \bar{t}^2}} \\
&\times |\bar{x}|^{\mu-1} H_{3,3}^{2,1} \left[\frac{2}{\bar{\mathcal{D}}_x} \sqrt{\frac{\mathcal{D}_y}{\bar{t}}} |\bar{x}|^{\mu} \begin{matrix} (0,1), (0,\frac{1}{2}), (1-\frac{\mu}{2}, \frac{\mu}{2}) \\ (1-\mu, \mu), (0,1), (1-\frac{\mu}{2}, \frac{\mu}{2}) \end{matrix} \right]. \quad (3.38)
\end{aligned}$$

O comportamento dessa equação é ilustrada pela Fig. (3.9). Note que a presença do termo adicional, termo de *backbone*, altera o comportamento da solução e pode exibir um comportamento bimodal, similar ao caso $\mu = 2$ analisado anteriormente. A Fig. (3.10) mostra o comportamento da equação (3.38) para a projeção de uma coordenada singular em tempos diferentes. Por meio da equação anterior, é possível obter a solução $\rho(x, y; t)$ e, conseqüentemente, a distribuição reduzida $\rho_x(x, t)$ efetuando a integral $\rho_x(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dy \rho(x, y; t)$. Para $\rho_x(x, t)$ com a condição inicial $\hat{\rho}(x, y) = \delta(x)\delta(y - \bar{y})$, temos

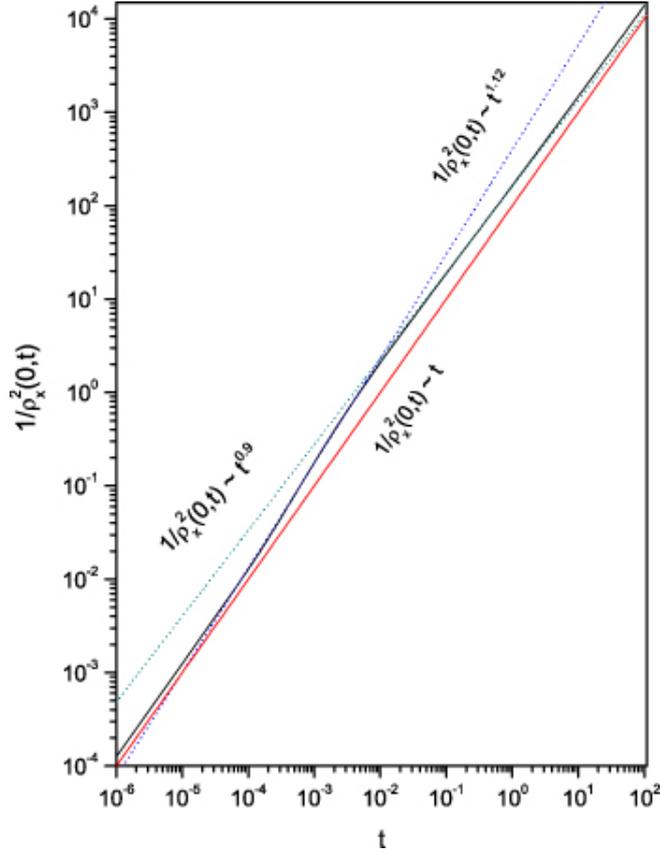


Figura 3.13: Comportamento de $1/\rho_x^2(0, t)$ versus t com $\mu = 3/2$ considerando, por simplicidade, $\mathcal{D}_x = \mathcal{D}_y = \bar{\mathcal{D}}_x = 1$ e $\bar{y} = 0.1$. Essa figura mostra o comportamento anômalo presente no espalhamento do sistema, o qual para tempos pequenos e longos é governado pela difusão usual. A linha reta vermelha corresponde ao caso usual, isto é, $1/\rho_x^2(0, t) \sim t$.

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}(x;t) &= -\frac{e^{-x^2/4\mathcal{D}_x t}}{\sqrt{4\pi t\mathcal{D}_x}} \operatorname{erf}\left(\frac{|\tilde{y}|}{\sqrt{4\mathcal{D}_y t}}\right) + \frac{2}{\mathcal{D}_x} \sqrt{\frac{\mathcal{D}_y}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{x} \frac{e^{-(x-\bar{x})^2/4\mathcal{D}_x t}}{\sqrt{4\pi\mathcal{D}_x t}} \\
&\times \int_0^t d\bar{t} \frac{|\bar{x}|^{\mu-1}}{\sqrt{t(t-\bar{t})}^3 \bar{t}^2} H_{3,3}^{2,1} \left[\frac{2}{\mathcal{D}_x} \sqrt{\frac{\mathcal{D}_y}{\bar{t}}} |\bar{x}|^\mu \begin{matrix} (0,1), (0,\frac{1}{2}), (1-\frac{\mu}{2}, \frac{\mu}{2}) \\ (1-\mu,\mu), (0,1), (1-\frac{\mu}{2}, \frac{\mu}{2}) \end{matrix} \right],
\end{aligned} \tag{3.39}$$

sendo $\operatorname{erf}(x)$ a função erro. Na Fig. (3.11), o comportamento da equação 3.39 em termos de t mostra que no limite assintótico, o perfil de cauda longa da equação 3.39 é governado por uma lei de potência, como demonstrado pela reta pontilhada-tracejada vermelha nessa figura. A Fig. (3.12), por sua vez, mostra que o espalhamento do sistema com uma derivada fracionária no termo difusivo do *backbone* introduz regimes diferentes para um tempos intermediários. Já na Fig.(3.13), ilustramos para um valor de μ o comportamento anômalo presente quando tempos intermediários são considerados. Em particular, dependendo do valor de μ apenas um regime difusivo distinto do usual é verificado.

3.2.2 Discussões e conclusões

Investigamos soluções para uma equação de difusão não markoviana (3.26). Inicialmente, consideramos a situação caracterizada por $\mu = 2$, a qual corresponde ao operador usual para a variável x . Depois, analisamos o caso $\mu \neq 2$, correspondente ao operador espacial fracionário. A equação (3.26) tem uma superposição de dois processos difusivos diferentes, um deles caracterizado pela difusão usual e o outro pela difusão em uma estrutura *backbone*. Essa característica é representada pela presença de dois termos difusivos diferentes associados com a variável x . A difusão na estrutura de *backbone* pode ter uma distribuição de cauda curta ou longa dependendo do valor de μ . O primeiro caso analisado, $\mu = 2$, emprega a operador diferencial usual e conseqüentemente tem uma distribuição de cauda curta. Nesse contexto, o deslocamento quadrático médio apresenta comportamentos difusivos distintos, os quais são essencialmente devido à estrutura de *backbone* incorporada na equação de difusão. Uma situação similar é verificada quando a derivada fracionária espacial é utilizada, isto é, quando consideramos $\mu \neq 2$.

3.3 Tempo de primeira passagem para um processo difusivo sob uma restrição geométrica

3.3.1 Introdução

Como já destacamos, a difusão é um dos processos mais importantes na natureza. Dependendo da situação, esse processo pode ser usual [94] ou anômalo [95]. A difusão usual descrita, por exemplo, em termos das equações de Langevin e Fokker–Planck [94] está conectada a um processo markoviano, tendo como principal característica o deslocamento quadrático médio com uma dependência temporal linear, $\langle (r - \langle r \rangle)^2 \rangle \sim t$. Já a difusão anômala é caracterizada por um comportamento não linear do deslocamento quadrático médio $\langle (r - \langle r \rangle)^2 \rangle \propto t^\alpha$, com $\alpha \neq 1$ ($\alpha < 1$, $\alpha = 1$, e $\alpha > 1$ correspondem à: subdifusão, difusão normal (ou usual), e superdifusão, respectivamente). Em geral, vários métodos tem sido utilizados para investigar difusão anômala, tais como equações de Langevin generalizadas [96], equações de Fokker–Planck fracionárias [42, 97, 98] ou não lineares [99] e caminhada aleatória contínua no tempo [100]. Nos casos anteriores, como destacado nas Refs.[65, 101], somente o conhecimento da função distribuição de probabilidade ou do deslocamento quadrático médio pode não ser suficiente para fornecer toda a informação necessária para compreender o comportamento do sistema. Nesse sentido, a probabilidade de sobrevivência e o problema do tempo de primeira passagem (FTP³) vem ganhando destaque como ferramentas para estudar e caracterizar os processos presentes em sistemas complexos que exibem comportamento difusivo anômalo. Exemplos típicos incluem redes complexas [102, 103], estruturas fractais [104, 105], comportamento de forrageamento animal [106, 107, 108], difusão em membranas [109, 110], processos invariantes por escala [111, 112], propriedades de transporte em células biológicas [113, 114, 115], mercado financeiro [116, 117], dinâmica da proliferação de câncer [73, 74], e cinética de reação-difusão [118, 119]. Particularmente, a análise do tempo de primeira passagem foi utilizada para distinguir as propriedades de transporte de dois modelos de difusão anômala que apresentam a mesma função distribuição de probabilidade no limite de tempos longos [65]; para comparar equações de difusão não lineares oriundas de entropias não aditivas com o modelo de difusão fracionário (uma vez que a função de Green dessas equações conduzem a exatamente mesma relação para o deslocamento quadrático médio) [120]; e como uma maneira não ambígua de discriminar dois modelos de subdifusão em células [121].

Aqui, investigamos as soluções, probabilidade de sobrevivência e a distribuição do

³Sigla oriunda do termo em inglês, *First Passage Time*.

tempo de primeira passagem para um processo difusivo bidimensional sujeito a um vínculo geométrico representado pela estrutura de *backbone* (modelo de pente, veja Fig.(3.14)). Esse modelo, como já foi dito, foi proposto inicialmente para estudar difusão anômala em aglomerados de percolação com tendência topológica [56, 84], em que de acordo com [25], o *backbone* corresponde a estrutura quasilinear do caminho principal do aglomerado, e suas ramificações correspondem às armadilhas ou caminhos sem saída do aglomerado de percolação. Portanto, um processo difusivo relacionado com essa estrutura é descrito pela seguinte equação de Fokker-Planck modificada, como proposto na Ref. [57],

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x, y; t) = \mathcal{K}_y \frac{\partial^2}{\partial y^2}\rho(x, y; t) + \delta(y)\mathcal{K}_x \frac{\partial^2}{\partial x^2}\rho(x, y; t); \quad (3.40)$$

em que \mathcal{K}_y e \mathcal{K}_x são os coeficientes de difusão nas direções x e y . Note, novamente que a presença da função delta de Dirac na Eq. (3.40) implica que a difusão na direção x ocorre somente quando $y = 0$. Consequentemente, a difusão na direção y sempre ocorre perpendicularmente ao eixo x , caracterizando a estrutura que lembra o formato de um pente. Também é interessante mencionar que a distribuição de probabilidade efetiva ao longo do eixo x pode ser conectada com a obtida para a equação de difusão fracionária com expoente de difusão anômalo $\alpha = 1/2$ (veja [57]). Esse resultado foi generalizado em [60], no qual uma equação de Fokker-Planck fracionária no tempo e no espaço é derivada a partir do modelo de pente.

Sabe-se que a geometria intrínseca do modelo de pente é um mecanismo de difusão anômala. Podemos tirar vantagem desse fato e considerar no mesmo modelo outros mecanismos que conduzem à propriedades dinâmicas anômalas. Por exemplo, em células biológicas [15, 35], onde a estrutura do ambiente intracelular é abarrotada e altamente heterogênea, as interações entre moléculas e organelas são muito complexas resultando em diferentes tipos de processos difusivos. Com essa motivação, analisamos a seguinte extensão da Eq. (3.40):

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x, y; t) = {}_0\mathcal{D}_t^{1-\gamma_y} \left(\mathcal{K}_y \frac{\partial^2}{\partial y^2}\rho(x, y; t) \right) + \delta(y) {}_0\mathcal{D}_t^{1-\gamma_x} \left(\mathcal{K}_x \frac{\partial^2}{\partial x^2}\rho(x, y; t) \right) \quad (3.41)$$

a partir da qual uma rica classe de processos difusivos pode ser obtida; sendo \mathcal{K}_y e \mathcal{K}_x os coeficientes de difusão e ${}_0\mathcal{D}_t^{1-\gamma_y}(\dots)$ e ${}_0\mathcal{D}_t^{1-\gamma_x}(\dots)$ derivadas temporais fracionárias. Em particular, consideramos o operador de Riemann-Liouville [50], ou seja,

$${}_0\mathcal{D}_t^{1-\gamma}(\rho(x, y; t)) = \frac{1}{\Gamma(k-\gamma)} \frac{d^k}{dt^k} \int_0^t dt' \frac{\rho(x, y; t')}{(t-t')^{\gamma-k+1}}, \quad (3.42)$$

com $k-1 < \gamma < k$. A equação (3.41) estende a Eq. (3.40) incorporando derivadas temporais fracionárias que podem estar conectadas com processos não markovianos e,

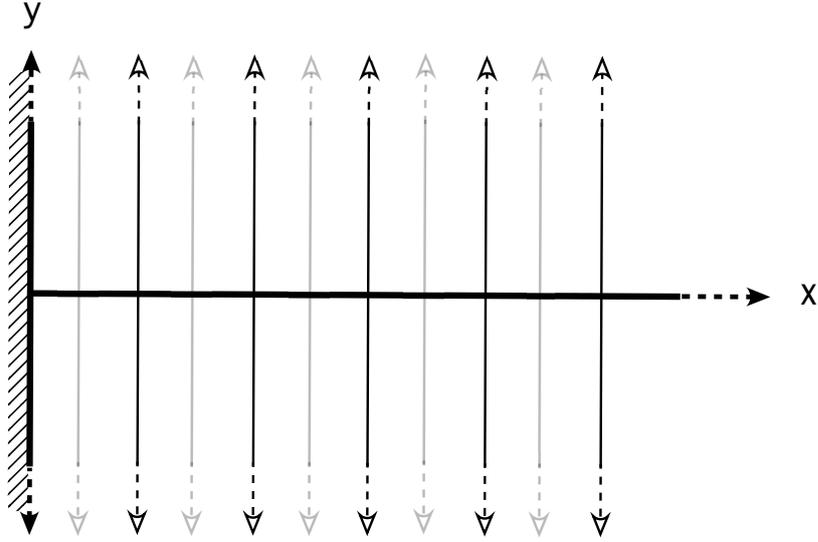


Figura 3.14: Ilustração do modelo de pente para uma região semi-infinita na direção x . Note que em $x = 0$ temos uma superfície adsorvente (linhas hachuradas).

consequentemente, com os trabalhos realizados nas Refs. [67, 68, 77]. Nesse caso, consideramos dois expoentes distintos para as derivadas no tempo (γ_x e γ_y) com o intuito de representar sistemas isotrópicos, nos quais o tipo de correlação temporal pode depender fortemente da direção. Além disso, recentemente derivadas temporais fracionárias tem sido aplicadas para descrever difusão anômala em dendritos espinhosos [122, 123]. Similarmente à Eq.(3.40), a distribuição de probabilidade efetiva que emerge da Eq.(3.41) ao longo do eixo x pode ser relacionada com a equação de difusão fracionária com expoente de difusão anômala dependente de γ_x e γ_y . As condições de contorno utilizadas para investigar as soluções das Eqs. (3.40) e (3.41) são $\rho(0, y; t) = \rho(\infty, y; t) = 0$ e $\rho(x, \pm\infty; t) = 0$, as quais caracterizam uma superfície adsorvente em $x = 0$. Também consideramos uma condição inicial arbitrária, $\rho(x, y; 0) = \Phi(x, y)$, em que $\Phi(x, y)$ está normalizada.

3.3.2 Probabilidade de Sobrevivência e Tempo de Primeira Passagem

Iniciaremos nossa análise considerando a Eq. (3.40), que corresponde ao caso particular da Eq.(3.41) para $\gamma_y = 1$ e $\gamma_x = 1$. Posteriormente, estenderemos nossa discussão da Eq.(3.41) considerando o caso geral $\gamma_y \neq 1$ e $\gamma_x \neq 1$. Esta discussão é realizada com as condições prévias de contorno e inicial. A solução para Eq.(3.40), sujeita às condições mencionadas, pode ser obtida utilizando transformadas integrais de Laplace e Fourier, e o método da função de Green. De fato, aplicando a transformada de Laplace é possível mostrar que

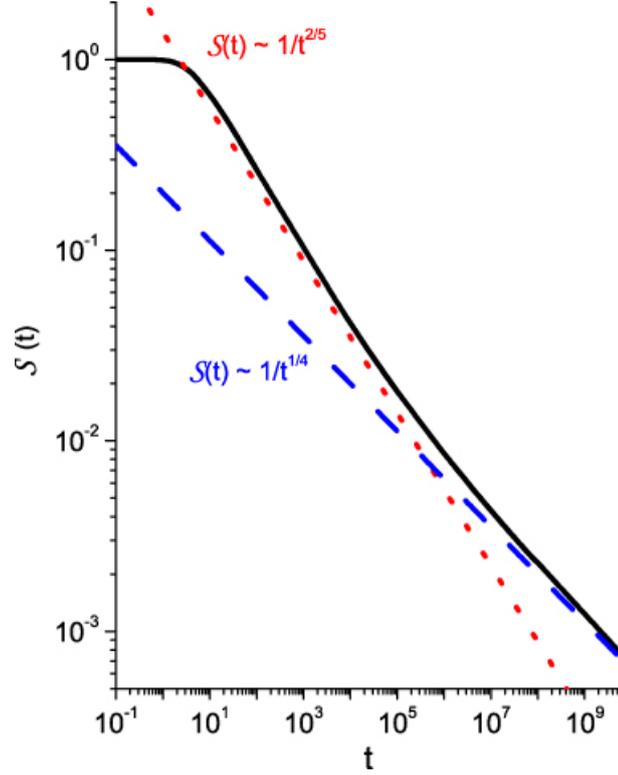


Figura 3.15: Comportamento da Eq.(3.56) considerando $\mathcal{K}_x = 10$, $\mathcal{K}_y = 0.1$ e a condição inicial $\Phi(x, y) = \delta(x - \bar{x})\delta(y - \bar{y})$ com $\bar{x} = 1$ e $\bar{y} = 1.2$. As linhas azul e vermelha indicam os regimes distintos da probabilidade de sobrevivência.

$$\mathcal{K}_y \frac{\partial^2}{\partial y^2} \rho(x, y; s) + \delta(y) \mathcal{K}_x \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, y; s) = s\rho(x, y; s) - \Phi(x, y). \quad (3.43)$$

Utilizando a transformada de Fourier na direção y , podemos representar a Eq.(3.43) como

$$\rho(x, y; s) = \frac{1}{\sqrt{4s\mathcal{K}_y}} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(x, \bar{y}) e^{-\sqrt{\frac{s}{\mathcal{K}_y}}|y-\bar{y}|} d\bar{y} + \frac{e^{-\sqrt{\frac{s}{\mathcal{K}_y}}|y|}}{\sqrt{4s\mathcal{K}_y}} \mathcal{K}_x \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, 0; s) \quad (3.44)$$

e, conseqüentemente, para $y = 0$ temos

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, 0; s) - \frac{1}{\mathcal{K}_x} \sqrt{4s\mathcal{K}_y} \rho(x, 0; s) = -\frac{1}{\mathcal{K}_x} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(x, \bar{y}) e^{-\sqrt{\frac{s}{\mathcal{K}_y}}|\bar{y}|} d\bar{y}. \quad (3.45)$$

Empregando o método da função de Green, a solução da Eq. (3.45) é dada por

$$\rho(x, 0; s) = - \int_0^{\infty} d\bar{x} \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{y} \Phi(\bar{x}, \bar{y}) e^{-\sqrt{\frac{s}{\mathcal{K}_y}}|\bar{y}|} \mathcal{G}_b(x, \bar{x}; s) \quad (3.46)$$

sendo a função de Green, $\mathcal{G}_b(x, \bar{x}; s)$, obtida a partir da seguinte equação

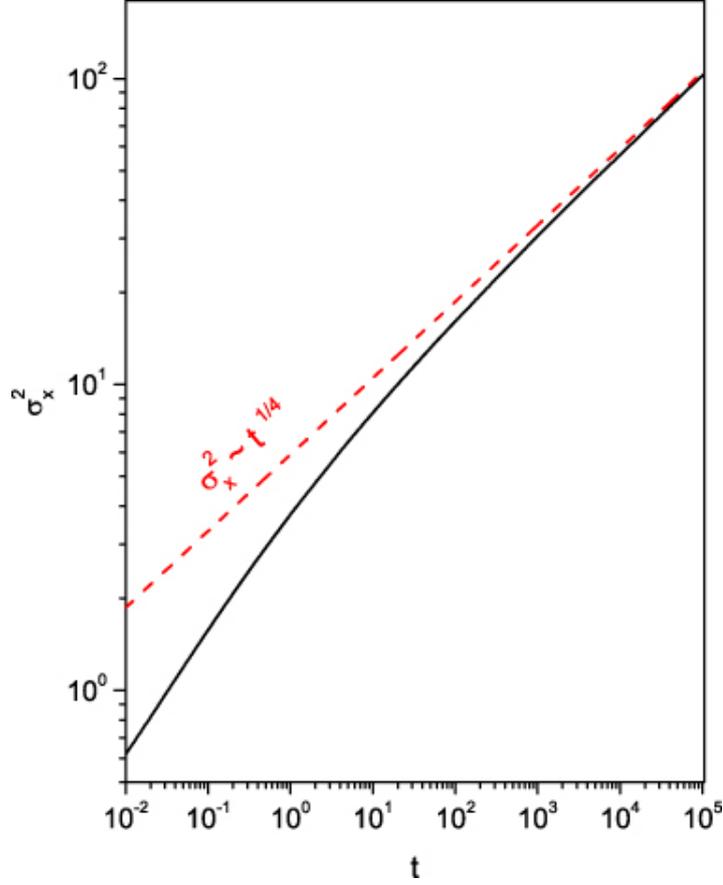


Figura 3.16: Comportamento da Eq.(3.54) considerando $\mathcal{K}_x = 10$, $\mathcal{K}_y = 0.1$ e a condição inicial $\Phi(x, y) = \delta(x - \bar{x})\delta(y)$ com $\bar{x} = 1.2$. A linha vermelha indica o regime assintótico.

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \mathcal{G}_b(x, \bar{x}; s) - \frac{1}{\mathcal{K}_x} \sqrt{4s\mathcal{K}_y} \mathcal{G}_b(x, \bar{x}; s) = \delta(x - \bar{x}) \quad (3.47)$$

sujeita às condições $\mathcal{G}_b(0, \bar{x}; s) = \mathcal{G}_b(\infty, \bar{x}; s) = 0$. Como estamos considerando o espaço semi-infinito no eixo x , utilizamos a transformada seno de Fourier. Após alguns cálculos, é possível mostrar que a Eq.(3.47) é satisfeita por

$$\mathcal{G}_b(k_x, \bar{x}; s) = -\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin(k_x \bar{x})}{\sqrt{4\mathcal{K}_y s / \mathcal{K}_x + k_x^2}}. \quad (3.48)$$

Realizando a transformada inversa do seno de Fourier na equação precedente, obtemos que a função de Green que governa o processo difusivo no eixo x é dada por

$$\mathcal{G}_b(x, \bar{x}; s) = -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\mathcal{K}_x}{2\sqrt{\mathcal{K}_y s}}} \left(e^{-\sqrt{\frac{2}{\mathcal{K}_x}} \sqrt{\mathcal{K}_y s} |x-x'|} - e^{-\sqrt{\frac{2}{\mathcal{K}_x}} \sqrt{\mathcal{K}_y s} |x+x'|} \right), \quad (3.49)$$

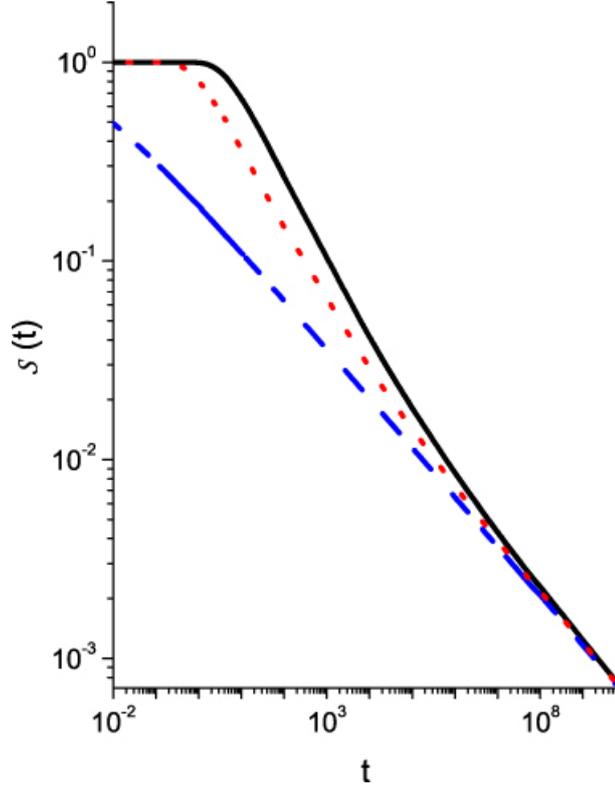


Figura 3.17: Comportamento da Eq.(3.56) considerando $\mathcal{K}_x = 10$, $\mathcal{K}_y = 0.1$ e a condição inicial $\Phi(x, y) = \delta(x - \bar{x})\delta(y - \bar{y})$ com $\bar{x} = 1$ para diferentes valores de \bar{y} a fim de destacar a influência da condição inicial no comportamento da probabilidade de sobrevivência. As linhas azul, vermelha e preta correspondem aos casos $\bar{y} = 0$, $\bar{y} = 0.5$, e $\bar{y} = 1.2$.

,e conseqüentemente,

$$\begin{aligned} \rho(x, y; s) &= \frac{1}{\sqrt{4\mathcal{K}_y s}} \int_{-\infty}^{\infty} dy' \Phi(x, y') \left(e^{-\sqrt{\frac{s}{\mathcal{K}_y}}|y-y'|} - e^{-\sqrt{\frac{s}{\mathcal{K}_y}}(|y|+|y'|)} \right) \\ &- \frac{1}{\mathcal{K}_x} \int_0^{\infty} d\bar{x} \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{y} \Phi(\bar{x}, \bar{y}) e^{-\sqrt{\frac{s}{\mathcal{K}_y}}(|y|+|y'|)} \mathcal{G}_b(x, \bar{x}; s). \end{aligned} \quad (3.50)$$

Ressaltamos que a distribuição efetiva que emerge no espaço de Laplace, a partir da Eq.(3.50) após uma integração na variável y , corresponde à distribuição obtida para a equação de difusão fracionária com expoente de difusão anômala $\alpha = 1/2$ para um sistema em uma região semi-infinita e com a condição inicial $\Phi(x, y) = \bar{\Phi}(x)\delta(y)$. Também é interessante mencionar que utilizando as soluções apresentadas na Ref. [57] e o método das imagens [124] é possível obter a solução para a Eq.(3.43) quando a condição inicial anterior é considerada. Aplicando a transformada inversa de Laplace na Eq.(3.48), obtemos que

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_b(x, \bar{x}; t) &= -\sqrt{\frac{\mathcal{K}_x}{8\sqrt{\mathcal{K}_y t^3}}} \\ &\times \left\{ \mathbf{H}_{1,1}^{1,0} \left[\sqrt{\frac{2}{\mathcal{K}_x} \sqrt{\frac{\mathcal{K}_y}{t}}} |x - \bar{x}| \left| \begin{matrix} (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}) \\ (0, 1) \end{matrix} \right. \right] - \mathbf{H}_{1,1}^{1,0} \left[\sqrt{\frac{2}{\mathcal{K}_x} \sqrt{\frac{\mathcal{K}_y}{t}}} |x + \bar{x}| \left| \begin{matrix} (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}) \\ (0, 1) \end{matrix} \right. \right] \right\}, \end{aligned} \quad (3.51)$$

e, conseqüentemente,

$$\rho(x, 0; t) = - \int_0^\infty d\bar{x} \int_{-\infty}^\infty d\bar{y} \int_0^t d\bar{t} \frac{|\bar{y}|}{\sqrt{4\pi\mathcal{K}_y\bar{t}^3}} e^{-\frac{\bar{y}^2}{4\mathcal{K}_y\bar{t}}} \Phi(\bar{x}, \bar{y}) \mathcal{G}_b(x, \bar{x}; t - \bar{t}). \quad (3.52)$$

Usando os resultados anteriores, a solução da Eq. (3.40) pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \rho(x, y; t) &= \int_{-\infty}^\infty d\bar{y} \Phi(x, \bar{y}) \left(\mathcal{G}_u(|y - \bar{y}|; t) - \mathcal{G}_u(|y| + |\bar{y}|; t) \right) \\ &- \int_0^\infty d\bar{x} \int_{-\infty}^\infty d\bar{y} \int_0^t d\bar{t} \frac{|y| + |\bar{y}|}{\sqrt{4\pi\mathcal{K}_y\bar{t}^3}} e^{-\frac{(|y| + |\bar{y}|)^2}{4\mathcal{K}_y\bar{t}}} \Phi(\bar{x}, \bar{y}) \mathcal{G}_b(x, \bar{x}; t - \bar{t}), \end{aligned} \quad (3.53)$$

em que $\mathcal{G}_u(y; t) = e^{y^2/(4\mathcal{K}_y t)} / \sqrt{4\mathcal{K}_y t}$. Note que a presença do primeiro termo da Eq.(3.53) depende da condição inicial. Particularmente, para $\rho(x, y; 0) = \rho_x(x)\delta(y)$, esse termo é nulo. Outro ponto interessante relacionado com esse termo é presença de regimes diferentes na probabilidade de sobrevivência e na distribuição no tempo de primeira passagem. Conforme veremos, essa característica implica que, dependendo de sua distribuição inicial, o sistema pode apresentar diferentes comportamentos para essa quantidade devido a presença de comportamentos difusivos distintos manifestados pelo sistema, veja as Figs. (3.15) e (3.18). O deslocamento quadrático médio na direção x , $\sigma_x^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$, associado à Eq.(3.53), para $\Phi(x, y) = \delta(x - x')\delta(y - y')$, é dado por

$$\begin{aligned} \sigma_x^2 &= 2\mathcal{K}_x \sqrt{\frac{t}{\pi\mathcal{K}_y}} e^{-\frac{y'^2}{4\mathcal{K}_y t}} - \frac{\mathcal{K}_x}{\sqrt{\mathcal{K}_y}} \int_0^t dt' \frac{e^{-\frac{y'^2}{4\mathcal{K}_y(t-t')}}}{\sqrt{\pi(t-t')}} \mathbf{H}_{1,1}^{1,0} \left[\sqrt{\frac{2}{\mathcal{K}_x} \sqrt{\frac{\mathcal{K}_y}{t'}}} x' \left| \begin{matrix} (1, \frac{1}{4}) \\ (0, 1) \end{matrix} \right. \right] \\ &+ x'^2 \int_0^t dt' \frac{e^{-\frac{y'^2}{4\mathcal{K}_y(t-t')}}}{\sqrt{\pi(t-t')}} t' \mathbf{H}_{1,1}^{1,0} \left[\sqrt{\frac{2}{\mathcal{K}_x} \sqrt{\frac{\mathcal{K}_y}{t'}}} x' \left| \begin{matrix} (\frac{1}{2}, \frac{1}{4}) \\ (0, 1) \end{matrix} \right. \right]. \end{aligned} \quad (3.54)$$

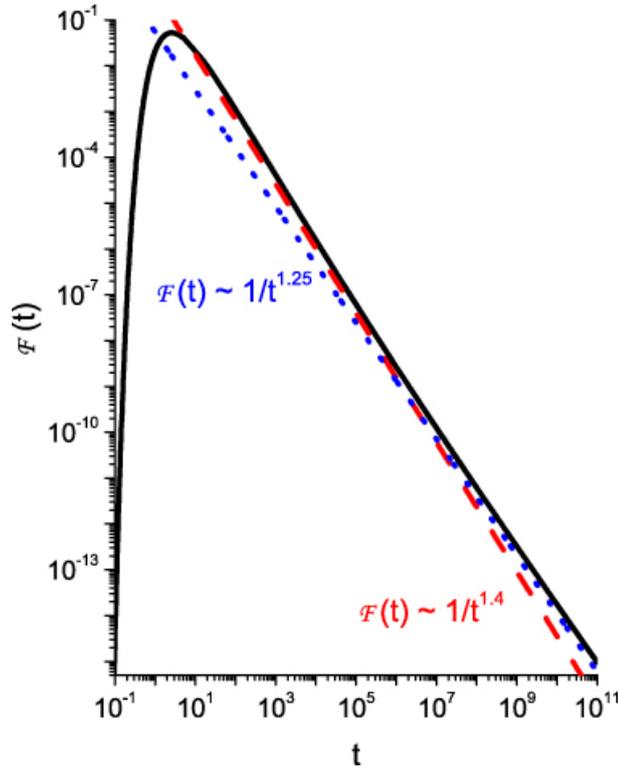


Figura 3.18: Comportamento da Eq. (3.58) considerando $\mathcal{K}_x = 10$, $\mathcal{K}_y = 0.1$ e a condição inicial $\Phi(x, y) = \delta(x - \bar{x})\delta(y - \bar{y})$ com $\bar{x} = 1$ e $\bar{y} = 1.2$. As linhas azul e vermelha indicam os diferentes regimes da distribuição do tempo de primeira passagem.

No limite assintótico de $t \rightarrow \infty$, a expressão precedente pode ser aproximada por

$$\sigma_x^2 \sim \sqrt{\frac{2\mathcal{K}_x}{\sqrt{\mathcal{K}_y}}} x' \frac{t^{1/4}}{\Gamma(5/4)}. \quad (3.55)$$

A Fig. (3.16) ilustra o comportamento temporal da Eq.(3.54). Note que a linha reta vermelha foi utilizada para evidenciar o regime difusivo assintótico correspondente à Eq.(3.55). Esse expoente anômalo $1/4$ também pode ser obtido para o modelo de pente tridimensional para o caso do espaço ilimitado [125]. Entretanto, em nosso caso, o expoente anômalo é menor do que no modelo de pente bidimensional em virtude da presença de uma superfície adsorvente. Agora, obteremos a probabilidade de sobrevivência e a distribuição do tempo de primeira passagem do processo descrito pela Eq. (3.53). Além das soluções analíticas em termos de equações integrais, também obtemos as leis de escala para a dependência temporal assintótica utilizando o método detalhado na Ref.[126]. Para a probabilidade de sobrevivência, isto é, $\mathcal{S}(t) = \int_0^\infty dx \int_{-\infty}^\infty dy \rho(x, y; t)$, obtemos que

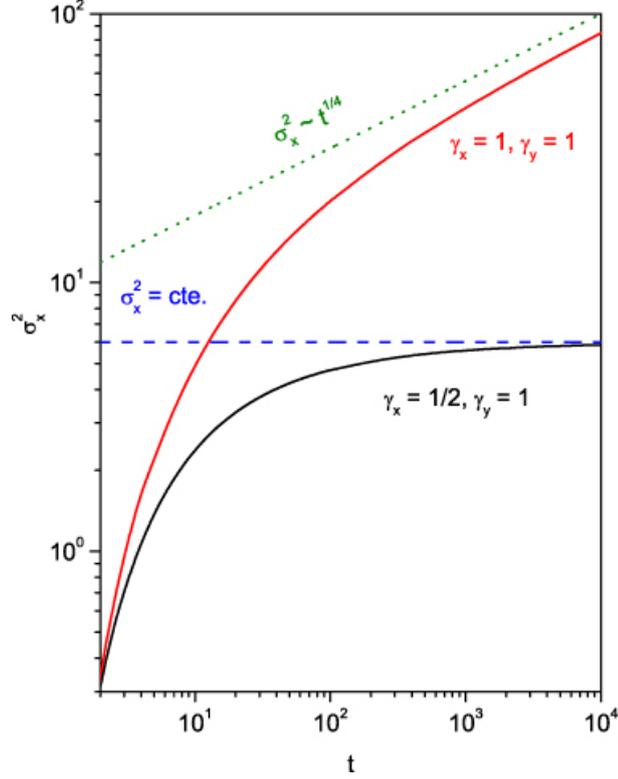


Figura 3.19: Comportamento da Eq.(3.64) considerando $\mathcal{K}_x = 10$, $\mathcal{K}_y = 0.1$ e a condição inicial $\Phi(x, y) = \delta(x - \bar{x})\delta(y - \bar{y})$ com $\bar{x} = 1$ e $\bar{y} = 1.2$. As linhas retas azul e verde foram adicionadas para indicar os comportamentos assintóticos da variância.

$$\begin{aligned} \mathcal{S}(t) &= \int_0^\infty dx \int_{-\infty}^\infty dy \Phi(x, y) \operatorname{erf} \left(\frac{|y|}{\sqrt{4\mathcal{K}_y t}} \right) + \int_0^\infty dx \int_{-\infty}^\infty dy |y| \Phi(x, y) \\ &\times \int_0^t \frac{dt'}{\sqrt{4\pi\mathcal{K}_y t'^3}} e^{-\frac{y^2}{4\mathcal{K}_y t'}} \left\{ 1 - \mathbf{H}_{1,1}^{1,0} \left[\sqrt{\frac{2}{\mathcal{K}_x} \sqrt{\frac{\mathcal{K}_y}{t-t'}}} |x| \left| \begin{matrix} (1, \frac{1}{4}) \\ (0, 1) \end{matrix} \right. \right] \right\}, \quad (3.56) \end{aligned}$$

cujo comportamento assintótico para tempos longos é dado por

$$\mathcal{S}(t) \sim \int_0^\infty dx' \int_{-\infty}^\infty dy' \Phi(x', y') \left(\left(\frac{|y'|}{\sqrt{\mathcal{K}_y}} - \frac{1}{\mathcal{K}_x} \sqrt{\mathcal{K}_y} \right) \frac{1}{\sqrt{\pi t}} + \sqrt{\frac{2}{\mathcal{K}_x} \sqrt{\mathcal{K}_y}} \frac{|x'|}{\Gamma(\frac{3}{4}) t^{1/4}} \right) \quad (3.57)$$

e dependendo das condições iniciais e da escala de tempo considerada pode ser governada por uma probabilidade de sobrevivência usual, $\mathcal{S}(t) \sim t^{-1/2}$, ou aumentada, $\mathcal{S}(t) \sim t^{-1/4}$, (primeiro e segundo termo da Eq. (3.57), respectivamente) no limite $t \rightarrow \infty$ com $|y'|/\sqrt{\mathcal{K}_y} > \sqrt{\mathcal{K}_y}/\mathcal{K}_x$. A Fig. (3.15) ilustra o comportamento da Eq. (3.56) para valores de \mathcal{K}_x , \mathcal{K}_y , \bar{x} , e \bar{y} . Nessa figura, podemos observar a presença de regimes difusivos diferentes. Um aparece para tempos pequenos e o outro para tempos longos, conforme indicado pelas retas (azul e vermelha) presentes na Fig. (3.15). Em particular,

o comportamento para tempos longos corresponde ao segundo termo da Eq. (3.57), uma vez que o primeiro termo para $t \rightarrow \infty$ não possui uma contribuição relevante. Na Fig. (3.17), ilustramos o comportamento da Eq. (3.56) para valores distintos de \bar{y} , que correspondem a diferentes posições da condição inicial. Os resultados obtidos ao escolhermos diversos valores de \bar{y} mostram que a presença de regimes distintos depende da escolha da condição inicial. Além disso, um decaimento assintótico não usual similar foi reportado na Ref. [127], na qual um campo de velocidade (*shear flow*) é considerado na equação de Fokker–Planck. Contudo, nesse trabalho o resultado é obtido devido apenas aos vínculos geométricos intrínsecos do modelo.

O tempo de primeira passagem pode ser obtido utilizando a definição $\mathcal{F}(t) = -\partial_t \mathcal{S}(t)$. Após efetuarmos alguns cálculos, é possível mostrar que a distribuição do tempo de primeira passagem referente à Eq. (3.56) é

$$\mathcal{F}(t) = \int_0^\infty dx \int_{-\infty}^\infty d\bar{y} \Phi(x, y) \int_0^t \frac{d\bar{t}}{\bar{t}} \frac{y e^{-\frac{\bar{y}^2}{4\mathcal{K}_y(t-\bar{t})}}}{\sqrt{4\pi\mathcal{K}_y(t-\bar{t})}^3} \mathbf{H}_{1,1}^{1,0} \left[\sqrt{\frac{2}{\mathcal{D}_x} \sqrt{\frac{\mathcal{D}_y}{\bar{t}}}} |x| \left| \begin{matrix} (1, \frac{1}{4}) \\ (0, 1) \end{matrix} \right. \right]. \quad (3.58)$$

O comportamento assintótico dessa equação para tempos longos é representado por

$$\mathcal{F}(t) \sim \int_0^\infty dx' \int_{-\infty}^\infty dy' \Phi(x', y') \left(\left(\frac{|y'|}{\sqrt{\mathcal{K}_y}} - \frac{1}{\mathcal{K}_x} \sqrt{\mathcal{K}_y} \right) \frac{1}{2t\sqrt{\pi t}} + \sqrt{\frac{2}{\mathcal{K}_x} \sqrt{\mathcal{K}_y}} \frac{|x'|}{4\Gamma(\frac{3}{4}) t^{5/4}} \right) \quad (3.59)$$

Semelhantemente ao resultado anterior obtido para a probabilidade de sobrevivência, dependendo da condição inicial o primeiro ou o segundo termo pode governar o comportamento assintótico da Eq. (3.59). Nesse sentido, podemos recuperar os resultados para comportamentos assintóticos de dois modelos diferentes de difusão anômala relacionados aos vínculos geométricos presentes na Ref. [65]. O primeiro, $\mathcal{F}(t) \sim t^{-3/2}$, é relacionado com a caminhada aleatória; e o segundo, $\mathcal{F}(t) \sim t^{-5/4}$, é relacionado com o modelo de pente (descrito por uma caminhada aleatória contínua no tempo). Na Fig.(3.18), encontra-se a ilustração da Eq. (3.58) (por simplicidade consideramos os valores de \mathcal{K}_x e \mathcal{K}_y utilizado na Fig.(3.15)), na qual também observamos a presença de dois regimes diferentes que dependem da escolha da condição inicial do sistema. Esses resultados significam que após um tempo transiente inicial algumas partículas passam longos períodos presas no eixo y antes de finalmente serem adsorvidas em $x = 0$.

Consideramos agora o caso geral em que $\gamma_y \neq 1$ and $\gamma_x \neq 1$. Nesse contexto, somos aptos a investigar como possíveis mecanismos de memória podem afetar o comportamento difusivo em uma estrutura de *backbone*, ou seja, introduzimos efeitos de memória conectados com derivadas temporais fracionárias presentes na Eq.(3.41). Para esse caso, empregando um procedimento análogo ao caso anterior, é possível mostrar que a solução é dada por

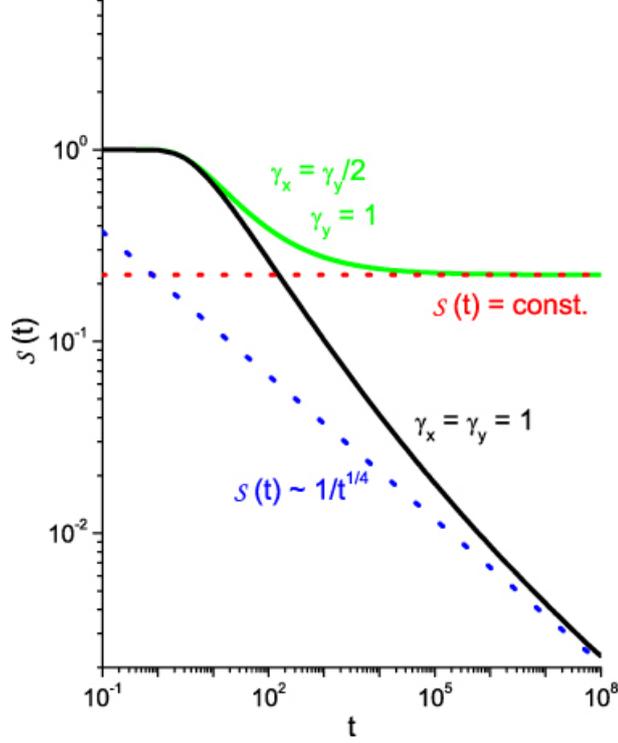


Figura 3.20: Comportamento da Eq.(3.66) considerando $\mathcal{K}_x = 10$, $\mathcal{K}_y = 0.1$, e a condição inicial $\Phi(x, y) = \delta(x - \bar{x})\delta(y - \bar{y})$ com $\bar{x} = 1$ e $\bar{y} = 1.2$ com a finalidade de mostrar a influência da condição inicial na probabilidade de sobrevivência. As linhas azul e vermelhas correspondem ao comportamento assintótico da probabilidade de sobrevivência para tempos longos.

$$\begin{aligned} \rho(x, y; t) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{y} \Phi(x, \bar{y}) (\bar{\mathcal{G}}_y(|y - \bar{y}|; t) - \bar{\mathcal{G}}_y(|y| + |\bar{y}|; t)) + \int_0^{\infty} d\bar{x} \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{y} \int_0^t d\bar{t} \Phi(\bar{x}, \bar{y}) \\ &\times \mathcal{G}_y(|y| + |\bar{y}|; t - \bar{t}) (\mathcal{G}_b(|x - \bar{x}|; \bar{t}) - \mathcal{G}_b(|x + \bar{x}|; \bar{t})) \end{aligned} \quad (3.60)$$

com

$$\bar{\mathcal{G}}_y(y; t) = \frac{1}{\sqrt{4\mathcal{K}_y t^{\gamma_y}}} \mathbf{H}_{1,1}^{1,0} \left[\frac{|y - \bar{y}|}{\sqrt{\mathcal{K}_y t^{\gamma_y}}} \left| \begin{matrix} (1 - \frac{\gamma_y}{2}, \frac{\gamma_y}{2}) \\ (0, 1) \end{matrix} \right. \right], \quad (3.61)$$

$$\mathcal{G}_y(y; t) = \frac{1}{t \sqrt{4\mathcal{K}_y / t^{\gamma_y}}} \mathbf{H}_{1,1}^{1,0} \left[\frac{|y| + |\bar{y}|}{\sqrt{\mathcal{K}_y \bar{t}^{\gamma_y}}} \left| \begin{matrix} (1 - \frac{\gamma_y}{2}, \frac{\gamma_y}{2}) \\ (0, 1) \end{matrix} \right. \right], \quad (3.62)$$

e

$$\mathcal{G}_b(x; t) = \sqrt{\frac{2\sqrt{\mathcal{K}_y t^{\gamma_y}}}{\mathcal{K}_x t^{2\gamma_x}}} \mathbf{H}_{1,1}^{1,0} \left[\sqrt{\frac{2\sqrt{\mathcal{K}_y t^{\gamma_y}}}{\mathcal{K}_x t^{\gamma_x}}} |x| \left| \begin{matrix} (1 - \frac{1}{2}(\gamma_x - \frac{\gamma_y}{2}), \frac{1}{2}(\gamma_x - \frac{\gamma_y}{2})) \\ (0, 1) \end{matrix} \right. \right]. \quad (3.63)$$

Similarmente ao caso anterior, obtemos o deslocamento quadrático médio para o processo relacionado com a Eq.(3.60) sujeito à condição inicial $\Phi(x, y) = \delta(x - x')\delta(y - y')$, ou seja,

$$\begin{aligned}
\sigma_x^2 &= \frac{\mathcal{K}_x}{\sqrt{\mathcal{K}_y}} t^\eta \mathbb{H}_{1,1}^{1,0} \left[\sqrt{\frac{2}{\mathcal{K}_x t^{\gamma_x}} \sqrt{\mathcal{K}_y t^{\gamma_y}}} x' \middle| \begin{matrix} (1+\eta, \frac{\gamma_y}{2}) \\ (0, 1) \end{matrix} \right] \\
&- \frac{\mathcal{K}_x}{\sqrt{\mathcal{K}_y}} \int_0^t \frac{dt'}{t'^{1-\eta}} \mathbb{H}_{1,1}^{1,0} \left[\frac{|y'|}{\sqrt{\mathcal{K}_y (t-t')^{\gamma_y}}} \middle| \begin{matrix} (1, \frac{\gamma_y}{2}) \\ (0, 1) \end{matrix} \right] \mathbb{H}_{1,1}^{1,0} \left[\sqrt{\frac{2}{\mathcal{K}_x t'^{\gamma_x}} \sqrt{\mathcal{K}_y t'^{\gamma_y}}} x' \middle| \begin{matrix} (1+\eta, \frac{\eta}{2}) \\ (0, 1) \end{matrix} \right] \\
&+ x'^2 \int_0^t \frac{dt'}{t'} \mathbb{H}_{1,1}^{1,0} \left[\frac{|y'|}{\sqrt{\mathcal{K}_y (t-t')^{\gamma_y}}} \middle| \begin{matrix} (1, \frac{\gamma_y}{2}) \\ (0, 1) \end{matrix} \right] \mathbb{H}_{1,1}^{1,0} \left[\sqrt{\frac{2}{\mathcal{K}_x t'^{\gamma_x}} \sqrt{\mathcal{K}_y t'^{\gamma_y}}} x' \middle| \begin{matrix} (0, \frac{\eta}{2}) \\ (0, 1) \end{matrix} \right], \quad (3.64)
\end{aligned}$$

sendo $\eta = \gamma_x - \gamma_y/2$. No limite assintótico $t \rightarrow \infty$, obtém-se

$$\sigma_x^2 \sim \sqrt{\frac{2\mathcal{K}_x}{\sqrt{\mathcal{K}_y}}} \frac{t^{\eta/2}}{\Gamma(1 + \eta/2)}. \quad (3.65)$$

Para esse caso, a dependência temporal assintótica é caracterizada por ambos expoentes anômalos (γ_x e γ_y). Note que a presença de efeitos de memória nas ramificações e no *backbone* pode conduzir ou induzir à difusão mais lenta no sistema. Na Fig.(3.19), está ilustrado o comportamento temporal da Eq.(3.64) para alguns valores de γ_x e γ_y . Um aspecto interessante é a existência de uma situação estacionária para σ_x^2 a depender da escolha de γ_x and γ_y . Comportamentos estacionários (platô de saturação) e subdifusão com o expoente de escala do deslocamento quadrático médio em torno de 1/4 podem ser relacionados com o movimento confinado e com a aglomeração molecular, conforme tem sido reportado em experimentos de rastreamento de uma única partícula em células vivas [31, 128]. Em particular, é mostrado na Ref. [129] que essas dinâmicas anômalas de relaxação são influenciadas pela combinação dos efeitos de aglomeração molecular e armadilhas óticas. De fato, estas características não usuais da ação recíproca entre efeitos de memória e vínculos geométricos também aparecem na probabilidade de sobrevivência e na distribuição do tempo de primeira passagem relacionadas ao processo descrito pela Eq. (3.60). Portanto, usando as definições anteriores, estas propriedade de transporte são dadas por

$$\begin{aligned}
\mathcal{S}(t) &= 1 - \int_0^\infty dx \int_{-\infty}^\infty dy \int_0^t dt' \frac{\Phi(x, y)}{\sqrt{t'(t-t')}} \mathbb{H}_{1,1}^{1,0} \left[\frac{|y|}{\sqrt{\mathcal{K}_y (t-t')^{\gamma_y}}} \middle| \begin{matrix} (0, \frac{\gamma_y}{2}) \\ (0, 1) \end{matrix} \right] \\
&\times \mathbb{H}_{1,1}^{1,0} \left[\sqrt{\frac{2\sqrt{\mathcal{K}_y t'^{\gamma_y}}}{\mathcal{K}_x t'^{\gamma_x}}} |x| \middle| \begin{matrix} (0, \frac{1}{2}(\gamma_x - \frac{\gamma_y}{2})) \\ (0, 1) \end{matrix} \right] \quad (3.66)
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}(t) &= \int_0^\infty dx \int_{-\infty}^\infty dy \int_0^t dt' \frac{\Phi(x, y)}{t'(t-t')} \mathbf{H}_{1,1}^{1,0} \left[\frac{|y|}{\sqrt{\mathcal{K}_y} (t-t')^{\gamma_y}} \middle| \begin{matrix} (0, \frac{\gamma_y}{2}) \\ (0, 1) \end{matrix} \right] \\
&\times \mathbf{H}_{1,1}^{1,0} \left[\sqrt{\frac{2\sqrt{\mathcal{K}_y} t'^{\gamma_y}}{\mathcal{K}_x t'^{\gamma_x}}} |x| \middle| \begin{matrix} (0, \frac{1}{2}(\gamma_x - \frac{\gamma_y}{2})) \\ (0, 1) \end{matrix} \right].
\end{aligned} \tag{3.67}$$

Para as Eqs. (3.66) e (3.67), o comportamento assintótico para tempos longos é governado por

$$\mathcal{S}(t) \sim \frac{1}{\Gamma(1 - \frac{\eta}{2}) t^{\frac{\eta}{2}}} \sqrt{\frac{2}{\mathcal{K}_x}} \sqrt{\mathcal{K}_y} \int_0^\infty dx' \int_{-\infty}^\infty dy' |x'| \Phi(x', y') \tag{3.68}$$

e

$$\mathcal{F}(t) \sim \frac{\eta}{2t^{1+\frac{\eta}{2}} \Gamma(1 - \frac{\eta}{2})} \sqrt{\frac{2}{\mathcal{K}_x}} \sqrt{\mathcal{K}_y} \int_0^\infty dx' \int_{-\infty}^\infty dy' |x'| \Phi(x', y'). \tag{3.69}$$

Na Fig. (3.20), ilustramos o comportamento da probabilidade de sobrevivência, Eq. (3.66), para o caso $\gamma_x = \gamma_y/2$ com $\gamma_y = 1$ e $\gamma_x = \gamma_y = 1$. Para o primeiro caso, verificamos que o comportamento de $\mathcal{S}(t)$ no limite assintótico para tempos longos é uma constante, em contraste com o segundo caso. Essa característica sugere que os efeitos de memória podem aumentar a probabilidade de sobrevivência, isto é, parte do sistema permanece preso nas ramificações e, conseqüentemente, não são adsorvidos pela superfície presente em $x = 0$. O comportamento assintótico é governado por $\mathcal{S}(t) \sim 1/t^{\eta/2}$ e também é influenciado pelas correlações temporais nas ramificações, que são representadas pelo expoente γ_y . Esse fato e os resultados da Eq. (3.58) sugerem que para esse modelo um comportamento não usual da probabilidade de sobrevivência devido a efeitos de memória podem surgir independentemente das escolhas da condição inicial e escala de tempo, enquanto os efeitos dos vínculos geométricos podem ser negligenciados dependendo dessas escolhas. A mesma análise pode ser aplicada para a distribuição do tempo de primeira passagem dada pela Eq. (3.67).

3.3.3 Discussões e Conclusões

Investigamos a solução, deslocamento quadrático médio, probabilidade de sobrevivência e a distribuição do tempo de primeira passagem de um processo difusivo relacionado à Eq.(3.41), na qual uma estrutura de *backbone* e derivadas fracionárias estão presentes. Essas quantidades foram obtidas considerando um sistema em uma região semi-infinita

na direção x com uma condição de contorno adsorvente em $x = 0$ para uma condição inicial arbitrária. Mesmo para o caso mais simples, $\gamma_x = \gamma_y = 1$, resultados não triviais são obtidos devido à presença de vínculos geométricos. Dependendo da condição inicial, o sistema pode exibir regimes difusivos distintos: uma para tempos pequenos e outro para tempos longos como indicado nas Figs. (3.15) e (3.18) pelas linhas retas (azul e vermelha). Nesse sentido, a Fig. (3.17) mostra que para a condição inicial $\tilde{y} = 0$, regimes distintos não são manifestados. Em seguida, adicionamos efeitos de memória ao considerarmos o caso geral ($\gamma_x \neq 1$ e $\gamma_y \neq 1$), no qual mostramos que, dependendo da escolha de γ_x e γ_y , partículas podem permanecer aprisionadas nas ramificações da estrutura de pente e, conseqüentemente, não ser absorvidas pela superfície presente em $x = 0$. Essa característica é ilustrada nas Figs. (3.19) e (3.20) para $\gamma_x = \gamma_y/2$, fato esse que conduz a um valor constante para $\sigma_x^2(t)$ e $\mathcal{S}(t)$ no comportamento assintótico de tempos longos. A partir dessas figuras, observamos que o deslocamento quadrático médio aumenta com o mesmo expoente de escala que a probabilidade de sobrevivência decresce. Isso significa que a presença de efeitos de memória pode diminuir o movimento difusivo na direção x , aumentando conseqüentemente a probabilidade de sobrevivência. Além disso, nossos resultados mostram que as escolhas da condição inicial e da escala temporal desempenham papéis importantes na detecção da dinâmica anômala oriunda de vínculos geométricos e efeitos de memória.

Capítulo 4

Conclusão geral

O conhecimento de como algo se difunde pode ser uma maneira eficaz de quantificar a complexidade de um sistema, tanto em relação à natureza estrutural do sistema, quanto em relação à natureza das interações entre os elementos do sistema. Por exemplo, um método não evasivo de investigar a estrutura de tecidos biológicos *in vivo* é quantificar a difusão molecular por meio de ressonância magnética nuclear [131]. Esse método experimental tem se mostrado eficaz para investigar micro-estruturas biológicas, e de materiais porosos, uma vez que a complexidade geométrica de sistemas heterogêneos pode ser caracterizada pela maneira na qual as pequenas moléculas (geralmente água) se difundem neles [132]. Um resultado notável, ao utilizar esse método aplicado à estrutura cerebral, é a discriminação entre a matéria cinzenta (onde a difusão é isotrópica) e a matéria branca (onde a difusão é anisotrópica e onde existe grande concentração de axônios).

O sucesso dessa aplicação está relacionada com aos conceitos e modelos físico-matemáticos muito bem estabelecidos que definem o que é a difusão usual, bem como com as generalizações e extensões desses conceitos e modelos propostos para tratar casos de difusão anômala. Alguns desses conceitos e modelos foram abordados no Capítulo 2, no qual procuramos elucidar quais as propriedades dos modelos de difusão anômala que os tornam aptos para descrever alguns sistemas complexos. Ainda nesse capítulo, destacamos o uso de derivadas fracionárias, e nesse contexto, fazendo uma conexão com o exemplo do primeiro parágrafo, destacamos o trabalho de Magin e colaboradores [133]. Nesse trabalho, a difusão em cérebro de ratos é estudada e os dados obtidos por ressonância magnética são ajustados por uma equação de difusão fracionária, Eq. (2.29). Os mapas dos parâmetros γ e μ mostram excelente contraste entre a matéria branca e a cinza. Em particular, para a matéria branca $\gamma \sim 0.7$ (subdifusão), enquanto para a matéria cinza $\gamma \sim 1$ (difusão usual).

No Capítulo 3, motivados pelo papel fundamental que a geometria pode desempenhar em sistemas difusivos, apresentamos nossos trabalhos baseados em extensões do modelo de pente, Eqs. (3.3), (3.26) e (3.41). Nos três casos obtemos a respectiva função densidade de probabilidade analiticamente, a partir da qual foi possível inferir as propriedades

de transporte do sistema. Em particular, na Seção 3.1 observamos que o simples fato de considerar forças constantes atuando no modelo de pente conduz a resultados não triviais, isto é, diferentes regimes difusivos e difusão confinada. Já na Seção 3.2, obtemos uma rica classe de regimes difusivos distintos – difusão, superdifusão, subdifusão – ao considerar um sistema no qual as partículas podem tanto se difundir livremente quanto ficar restritas à estrutura do modelo de pente. Na Seção 3.3, buscando uma melhor compreensão das propriedades do modelo de pente, obtemos a probabilidade de sobrevivência e a distribuição do tempo de primeira passagem. Em cada um desses trabalhos, mostramos as possíveis conexões com alguns sistemas complexos e os possíveis mecanismos que estão relacionados à dinâmica anômala.

Destacamos ainda que a tendência atual das pesquisas sobre difusão em sistemas complexos, principalmente em células vivas, vai além de apenas classificar o comportamento difusivo de um sistema por meio do deslocamento quadrático médio, estando focada em compreender e discernir os mecanismos da difusão anômala. Isso também reflete na necessidade de compreender melhor quais são os mecanismos relacionados aos modelos de difusão anômala (caminhada aleatória no tempo, equações generalizadas de difusão e Langevin). Nesse contexto, outras quantidades tem ganhado destaque, tais como probabilidade de sobrevivência, distribuição do tempo de primeira passagem e funções de correlação. Além disso, outro fator importante para se considerar na hora da escolha de um modelo é a questão da ergodicidade. De acordo com [31], identificar a verdadeira natureza do processo anômalo é um verdadeiro desafio teórico, em especial em células vivas. Por fim, nesse contexto, o estudo da ergodicidade e de outras propriedades (complementares ao deslocamento quadrático médio) referentes aos principais modelos de difusão anômala mostra-se como um bom caminho a ser seguido em nossas futuras pesquisas.

Apêndice A

Função H de Fox

A função H de Fox (função H) pode ser definida em termos da integral do tipo Mellin-Barnes

$$\begin{aligned} \mathbb{H}_{p,q}^{m,n} \left[x \left| \begin{matrix} (a_p, A_p) \\ (b_q, B_q) \end{matrix} \right. \right] &= \mathbb{H}_{p,q}^{m,n} \left[x \left| \begin{matrix} (a_1, A_1), \dots, (a_p, A_p) \\ (b_1, B_1), \dots, (b_q, B_q) \end{matrix} \right. \right] = \frac{1}{2\pi i} \int_L \chi(\xi) x^{-\xi} d\xi \\ \chi(\xi) &= \frac{\prod_{j=1}^m \Gamma(b_j - B_j \xi) \prod_{j=1}^n \Gamma(1 - a_j + A_j \xi)}{\prod_{j=m+1}^q \Gamma(1 - b_j + B_j \xi) \prod_{j=n+1}^p \Gamma(a_j - A_j \xi)} \end{aligned} \quad (4.1)$$

sendo m, n, p and q os números inteiros que satisfazem $0 \leq n \leq p$ e $1 \leq m \leq q$. Também pode ser definido por sua transformada de Mellin

$$\int_0^\infty \mathbb{H}_{p,q}^{m,n} \left[ax \left| \begin{matrix} (a_p, A_p) \\ (b_q, B_q) \end{matrix} \right. \right] x^{\xi-1} dx = a^{-\xi} \chi(\xi). \quad (4.2)$$

Aqui, os parâmetros devem ser definidos de tal maneira que $A_j > 0$, $B_j > 0$ e $a_j(b_h + \nu) \neq B_h(a_j - \lambda - 1)$ em que $\nu, \lambda = 0, 1, 2, \dots$, $h = 1, 2, \dots, m$ e $j = 1, 2, \dots, m$. O contorno L separa os pólos de $\Gamma(b_j - B_j \xi)$ para $j = 1, 2, \dots, m$ daqueles de $\Gamma(1 - a_j + A_j \xi)$ for $j = 1, 2, \dots, n$ [93]. A função H é analítica em x se (i) $x \neq 0$ e $M > 0$ or (ii) $0 < |x| < 1/B$ e $M = 0$, com $M = \sum_{j=1}^q B_j - \sum_{j=1}^p A_j$ e $B = \prod_{j=1}^p A_j \prod_{j=1}^q B_j^{-B_j}$.

Algumas propriedades úteis da função H de Fox, encontradas na Ref. [93] estão listadas abaixo.

(i) A função H é simétrica nos pares $(a_1, A_1), \dots, (a_p, A_p)$, do mesmo modo $(a_{n+1}, A_{n+1}), \dots, (a_p, A_p)$; in $(b_1, B_1), \dots, (b_q, B_q)$ e em $(b_{n+1}, B_{n+1}), \dots, (b_q, B_q)$.

(ii) Para $k > 0$

$$\mathbb{H}_{p,q}^{m,n} \left[x \left| \begin{matrix} (a_p, A_p) \\ (b_q, B_q) \end{matrix} \right. \right] = k \mathbb{H}_{p,q}^{m,n} \left[x^k \left| \begin{matrix} (a_p, kA_p) \\ (b_q, kB_q) \end{matrix} \right. \right] \quad (4.3)$$

(iii) A regra da multiplicação é

$$x^k \mathbb{H}_{p;q}^{m,n} \left[x \left| \begin{matrix} (a_p, A_p) \\ (b_q, B_q) \end{matrix} \right. \right] = \mathbb{H}_{p,q}^{m,n} \left[x \left| \begin{matrix} (a_p + kA_p, A_p) \\ (b_q + kB_q, B_q) \end{matrix} \right. \right] \quad (4.4)$$

(iv) Para $n \geq 1$ e $q > m$,

$$\mathbb{H}_{p,q}^{m,n} \left[x \left| \begin{matrix} (a_1, A_1) \cdots (a_p, A_p) \\ (b_1, B_1) \cdots (b_{q-1}, B_{q-1}) \end{matrix} \right. \right] = \mathbb{H}_{p-1, q-1}^{m, n-1} \left[x \left| \begin{matrix} (a_2, A_2) \cdots (a_p, A_p) \\ (b_1, B_1) \cdots (b_{q-1}, B_{q-1}) \end{matrix} \right. \right] \quad (4.5)$$

(v) Para $m \geq 2$ e $p > n$

$$\mathbb{H}_{p,q}^{m,n} \left[x \left| \begin{matrix} (a_1, A_1) \cdots (a_{p-1}, A_{p-1}) \\ (b_1, B_1) \cdots (b_q, B_q) \end{matrix} \right. \right] = \mathbb{H}_{p-1, q-1}^{m-1, n} \left[x \left| \begin{matrix} (a_2, A_2) \cdots (a_{p-1}, A_{p-1}) \\ (b_2, B_2) \cdots (b_q, B_q) \end{matrix} \right. \right] \quad (4.6)$$

(vi) A relação entre a função generalizada de Mittag-Leffler e a função H de Fox é dada por

$$E_{\alpha, \beta}(x) = \mathbb{H}_{1,2}^{1,1} \left[-x \left| \begin{matrix} (0,1) \\ (0,1)(1-\beta, \alpha) \end{matrix} \right. \right] \quad (4.7)$$

(vii) Sob a transformada cosseno de Fourier, a função H se transforma de acordo com

$$\int_0^\infty \mathbb{H}_{p,q}^{m,n} \left[k \left| \begin{matrix} (a_p, A_p) \\ (b_q, B_q) \end{matrix} \right. \right] \cos(kx) dx = \frac{\pi}{x} \mathbb{H}_{q+1, p+2}^{n+1, m} \left[x \left| \begin{matrix} (1-b_q, B_q), (1, 1/2) \\ (1, 1), (1-a_p, A_p), (1, 1/2) \end{matrix} \right. \right]. \quad (4.8)$$

Referências Bibliográficas

- [1] P. Érdi, *Complexity Explained* (Springer, Berlin 2007).
- [2] D. Helbing (Ed.), *Managing Complexity: Insights, Concepts, Applications* (Springer, Berlin, 2008).
- [3] W. Fontana, S. Ballati, *Complexity – Why the sudden fuss?*, *Complexity* **3**(3) (1999).
- [4] M. Gell-Mann, *The Quark and the Jaguar – Adventures in the simple and the complex* (W. H. Freeman and Company, New York, 1994).
- [5] R. Lopez-Pena *et al.*, *Complex System and Binary Networks* (Springer, Berlin, 1995).
- [6] B. West, M. Bologna, P. Grigolini, *Physics of Fractal Operators* (Spring-Verlag, New York, 2003).
- [7] O. A. Rosso *et al.*, Distinguishing Noise from Chaos, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 154102 (2007).
- [8] Y. Feldman, A. Puzenko, Y. Ryabov. *Advances in Chemical Physics, Part A, Fractals, Diffusion and Relaxation in disordered Complex Systems* (Jonh Wiley & Sons, New York, 2006).
- [9] A. Schadschneider, D. Chowdhury, K. Nishimori, *Stochastic Transport in Complex Systems – From Molecules do Vehicles*(Elsevier, Amsterdam, 2011).
- [10] A. Barrat, M. Barthélemy, A. Vespignani, *Dynamical Processes on Complex Networks* (Cambridge University Press, 2010).
- [11] E. Bertin, *A Concise Introduction to the Statistical Physics of Complex Systems* (Springer, Berlin, 2011).
- [12] R. Hanel, S. Thurner, *A comprehensive classification of complex statistical systems and an ab-initio derivation of their entropy and distribution functions*, *Europhys. Lett.* **93**, 20006 (2011).
- [13] D. Gupta (Ed.), *Diffusion Processes in Advanced Technological Materials* (William Andrew, Norwich, NY, 2005).

- [14] H. Mehrer, *Diffusion in Solids: Fundamentals, Methods, Materials, Diffusion-controlled Processes* (Springer, London, 2007).
- [15] B. M. Regner *et al.*, *Anomalous Diffusion of Single Particle in Cytoplasm*, *Biophys. J.* **104**, 1652 (2013).
- [16] P. Heitjans, J. Kärger (Eds.), *Diffusion in Condensed Matter – Methods, Material, Models* (Springer, Berlin 2005).
- [17] A. A. Tateishi, *Desenvolvimento do Conceito de Difusão: de Fourier ao Modelo de Pente*, Dissertação (Mestrado em Física), Universidade Estadual de Maringá (2010).
- [18] R. Brown, *A brief Account of Microscopical Observations made in the Months of June, July, and August, 1827, on the Particles contained in the Pollen of Plants; and on the general Existence of active Molecules in Organic and Inorganic Bodies*, *Philosophical Magazine N. S.* **4**, 161, (1828).
- [19] A. Einstein, *On the Movement of Small Particles Suspended in Stationary Liquids Required by the Molecular-Kinetic Theory of Heat*, *Ann. Physik* **17**, 549 (1905).
- [20] P. Langevin, *Sur la théorie de Mouvement Brownien*, *C.R. Acad. Sci. Paris* **146**, 530 (1908).
- [21] R. Kimmich, *Strange Kinetics, Porous Media, and NMR*, *Chem. Phys.* **284**, 253 (2002).
- [22] L. F. Richardson, *Atmospheric diffusion shown on a distance–neighbour graph*, *Proc. R. Soc. Lond. A* **110**, 709 (1926).
- [23] C. Tsallis, R. S. Mendes, A. R. Plastino, *The role of constraints within generalized non-extensive statistics*, *Physica A* **261**, 534 (1998).
- [24] R. Hanel, S. Thurner, M. Gell-Mann, *Generalized entropies and the transformation group of superstatistics*, *Proc. Nat. Acad. Sci. USA* **108**, 6390 (2011).
- [25] D. ben-Avraham, S. Havlin, *Diffusion and Reaction in Fractals and Disordered Systems* (Cambridge University Press, 2000).
- [26] S. Havlin, R. Cohen, *Complex Networks – Structures, Robustness and Function* (Cambridge University Press, 2010).
- [27] G. Franzese, M. Rubi, (Eds.), *Aspects of Physical Biology: Biological Water, Protein Solutions, Transport and Replication*, *Lect. Notes Phys.* **752** (Springer, Berlin Heidelberg, 2008).

- [28] C. P. Brangwyne *et al.*, *Cytoplasmatic diffusion: Molecular motors mix it up*, J. Cell. Biol. **183**, 583 (2008).
- [29] P. Dieterich, R. Klages, R. Preuss, A. Schwab, *Anomalous dynamics of cell migration*, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **105**, 461 (2008).
- [30] M. Javainen *et al.*, *Anomalous and Normal diffusion of proteins and lipids in crowded lipid membrane*, Faraday Discuss **161**, 397 (2013).
- [31] N. Leijnse *et al.*, *Diffusion inside living human cells*, Eur. Phys. J. Special Topics **204**, 75 (2012).
- [32] A. Caspi, R. Granek, M. Elbaum, *Enhanced Diffusion in Active Intracellular Transport*, Phys. Rev. Lett. **85**, 5622 (2000).
- [33] F. C. MacKintosh, *Active Diffusion: The erratic dance of chromosomal loci*, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **109**, 7139 (2012).
- [34] I. M. Sokolov, *Models of anomalous diffusion in crowded environments*, Soft Matter **8**, 9043 (2013).
- [35] F. Höffing, T. Franosch, *Anomalous transport in the crowded world of biological cells*, Rep. Prog. Phys. **76**, 046602 (2013).
- [36] M. C. Leake, *The physics of life: one molecule at a time*, Phil. Trans. R. Soc. B **368**, 20120248 (2013).
- [37] A. Robson, K. Burrage, M. C. Leake, *Inferring diffusion in single live cells at the single-molecule level*, Phil. Trans. R. Soc. B **368**, 20120029 (2013).
- [38] R. Klages, G. Radons, I. M. Sokolov (Eds.), *Anomalous transport – Foundations and Applications* (Wiley-VCH, Weinheim, 2008).
- [39] K. Pearson, Nature **72**, 294 (1905).
- [40] L. Rayleigh, *On the resultant of a large number of vibrations of the same pitch and of arbitrary phase*, Philos. Mag. **10** 73, (1880).
- [41] E. W. Montroll, G. H. Weiss, *Random Walks on Lattices: II.*, J. Math. Phys. **6**, 167 (1965).
- [42] R. Metzler, J. Klafter, *The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach*, Phys. Rep. **339**, 1 (2000).
- [43] H. V. Ribeiro, R. Rossato, A. A. Tateishi, E. K. Lenzi, R. S. Mendes, *Continuous Time Random Walk and different diffusive regimes*, Acta Scientiarum. Technology **34**, 201 (2012).

- [44] K. B. Oldham, J. Spanier, *The fractional calculus* (Academic Press, New York, 1974).
- [45] S. G. Samko, A. A. Kilbas, O. I. Marichev, *Fractional integrals and derivatives: theory and applications* (Gordon and Breach, Amsterdam, 1993).
- [46] J. T. Machado, V. Kiryakova, F. Mainardi, *Recent history of fractional calculus*, Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul. **16**, 1140 (2011).
- [47] D. Baleanu, B. Z. Guvenc, J. A. T. Machado (Eds.), *New Trends in Nanotechnology and Fractional Calculus Applications* (Springer, 2010).
- [48] J. T. Machado, A. M. Galhano, J. J. Trujillo, *Science Metrics on Fractional Calculus Development Since 1966*, Fract. Calc. Appl. Anal. **16**, 479 (2013).
- [49] D. Baleanu, J. A. T. Machado, A. C. J. Luo (Eds.), *Fractional Dynamics and Control* (Springer, New York, 2012).
- [50] I. Podlubny, *Fractional Differential Equations* (Academic Press, San Diego, 1999).
- [51] M. D. Ortigueira, *Fractional Calculus for Scientists and Engineers* (Springer, 2011).
- [52] R. Hilfer, *An extension of the dynamical foundations for statistical equilibrium concept*, Physica A **221**, 89 (1995).
- [53] R. Metzler, J. Klafter, *The Restaurant at the end of the random walk: recent developments in the description of anomalous transport by fractional dynamics*, J. Phys. A: Math. Gen **37**, R161 (2004).
- [54] A. A. Tateishi *et al.*, *Different diffusive regimes, generalized Langevin and diffusion equations*, Phys. Rev. E **85**, 011147 (2012).
- [55] N. Goldenfeld, L. P. Kadanoff, *Simple lessons from complexity*, Science **284**, 87 (1999).
- [56] S. R. White, M. Barma, *Field-Induced drift and trapping in percolation networks*, J. Phys. A: Math. Gen. **17**, 2995 (1984).
- [57] V. E. Arkhincheev, E. M. Baskin, *Anomalous diffusion and drift in a comb of percolation clusters*, Zh. Ekso. Teor. Fiz. **100**, 292 (1991).
- [58] M. A. Zahran, *On the derivation of fractional diffusion with an absorbent term and a linear external force*, Appl. Math. Model **33**, 3088 (2009).
- [59] M. A. Zahran, E.M. Abulwafa, S.A. El-Wakil, *The fractional Fokker-Planck equation on comb – like model*, Physica A **323**, 237 (2003).
- [60] S. A. El-Wakil, M. A. Zahran, E. M. Abulwafa, *Fractional (space-time) diffusion equation on comb – like model*, Chaos Solitons & Fractals **20**, 1113 (2004).

- [61] D. Villamaina *et al.*, *On anomalous diffusion and the out of equilibrium response function in one-dimensional models*, J. Stat. Mech. L01002 (2011) .
- [62] R. Burioni, D. Cassi, G. Giusiano, S. Regina, *Anomalous diffusion and Hall effect on comb lattices*, Phys. Rev. E **67**, 016116 (2003).
- [63] A. M. Reynolds, *On Anomalous Transport on Comb Structures*, Physica A **334**, 39 (2004).
- [64] O. A. Dvoretzkaya, P. S. Kondratenko, *Anomalous transport regimes and asymptotic concentration distributions in the presence of advection and diffusion on a comb structure*, Phys. Rev. E **79**, 041128 (2009).
- [65] Y. Meroz, I. M. Sokolov, J. Klafter, *Unequal Twins: Probability Distributions Do Not Determine Everything*, Phys. Rev. Lett. **107**, 260601 (2011) .
- [66] L. R. da Silva, A. A. Tateishi, M. K. Lenzi, E. K. Lenzi, P. C. da Silva, *Green-Function for a non-Markovian Fokker-Planck Equation*, Braz. J. Phys. **39**, 483 (2009).
- [67] V. E. Arkhincheev, *Anomalous diffusion and charge on comb model: exact solutions*, Physica A **280**, 304 (2000) .
- [68] V. E. Arkhincheev, *Unified continuum description for sub-diffusion random walks on multi-dimensional comb model*, Physica A **389**, 1 (2010).
- [69] A. Iomin, *Subdiffusion on a fractal comb*, Phys. Rev. E **83**, 052106 (2011).
- [70] E. Baskin, A. Iomin, *Superdiffusion on a Comb Structure*, Phys. Rev. Lett. **93**, 120603 (2004).
- [71] A. Iomin, E. Baskin, *Negative superdiffusion due to inhomogeneous convection*, Phys. Rev. E **71**, 061101 (2005).
- [72] K. Kruse, A. Iomin, *Superdiffusion of morphogens by receptor-mediated transport*, New J. of Phys. **10**, 023019 (2008).
- [73] A. Iomin, *Toy model of fractional transport of cancer cells due to self-entrapping*, Phys. Rev. E **73**, 061918 (2006) .
- [74] A. Iomin, *Superdiffusion of a cancer on a comb structure*, J. Phys.: Conf. Ser. **7**, 57 (2005).
- [75] A. Iomin, *Fractional – time quantum dynamics*, Phys. Rev. E **80**, 022103 (2009).
- [76] A. Iomin, *Fractional – time Schrodinger equation: Fractional dynamics on a comb*, Chaos Solitons & Fractals **44**, 348 (2011).

- [77] A. A. Tateishi, E. K. Lenzi, H. V. Ribeiro, L. R. Evangelista, R. S. Mendes, L. R. da Silva, *Solutions for a diffusion equation with a backbone term*, J. Stat. Mech. P02022 (2011).
- [78] E. K. Lenzi, L. R. da Silva, A. A. Tateishi, M. K. Lenzi, H. V. Ribeiro, *Diffusive process on a backbone structure with drift terms*, Phys. Rev. E **87**, 012121 (2013).
- [79] A. A. Tateishi, F. S. Michels, M. A. F. dos Santos, E. K. Lenzi, H. V. Ribeiro, *First passage time for a diffusive process under a geometric constraint*, J. Stat. Mech. P09017 (2013).
- [80] P. G. de Gennes, *On a relation between percolation theory and the elasticity of gels*, J. Physique Lett. **37**, 1 (1976).
- [81] B. B. Mandelbrot, *The Fractal Geometry of Nature* (W. H. Freeman, San Francisco,1982).
- [82] Y. Gefen, A. Aharony, S. Alexander, *Anomalous Diffusion on Percolating Clusters*, Phys. Rev. Lett. **50**, 77 (1983).
- [83] H. E. Stanley, *Cluster shapes at the percolation threshold: and effective cluster dimensionality and its connection with critical-point exponents*, J. Phys. A: Math. Gen. **10**, L211 (1977).
- [84] A. Bunde *et al.*, *Diffusion in random structure with a topological bias*, Phys. Rev. B **34**, 8130 (1986).
- [85] S. C. Weber, J. A. Theriot, A. J. Spakowitz, *Subdiffusive motion of a polymer composed of subdiffusive monomers*, Phys. Rev. E **82**, 011913 (2010).
- [86] J.-H. Jeon, R. Metzler, *Analysis of short subdiffusive time series: scatter the time-averaged mean-squared displacement*, J. Phys. A: Math. Theor. **43**, 252001 (2010).
- [87] W. F. Marshall *et al.*, *Interphase chromosomes undergo constrained diffusional motion in living cells*, Curr. Biol. **7**, 930 (1997).
- [88] I. Golding, E.C. Cox, *Physical Nature of Bacterial Cytoplasm*, Phys. Rev. Lett. **96** 098102 (2006).
- [89] J.-H. Jeon *et al.*, *In vivo Anomalous Diffusion and Weak Ergodicity Breaking of Lipid Granules*, Phys. Rev. Lett. **106**, 048103 (2011).
- [90] D. Panja, *Anomalous polymer dynamics is non – Markovian: memory effects and the generalized Langevin equation formulation*, J. Stat. Mech. P06011 (2010) .

- [91] D. Panja, *Generalized Langevin Equation Formulation for Anomalous Polymer Dynamics*, J. Stat. Mech. L02001 (2010).
- [92] D. Panja, *Probabilistic phase space trajectory description for anomalous polymer dynamics*, J. Phys.: Condens. Matter **23**, 10510 (2011).
- [93] A. M. Mathai, R. K. Saxena, H. J. Haubold, *The H-Function: Theory and Applications* (Springer, New York, 2009).
- [94] C. W. Gardiner, *Handbook of Stochastic Methods: For Physics, Chemistry and the Natural Sciences, Springer Series in Synergetics* (Springer, New York, 1996).
- [95] A. Pekalski and K. Sznajd-Weron Eds., *Anomalous Diffusion: From Basics to Applications*, Lecture Notes in Physics (Springer, Berlin, 1999).
- [96] R. Muralidhar, D. Ramakrishna, H. Nakanishi, D. Jacobs, *Anomalous Diffusion: A Dynamic Perspective*, Physica A **167**, 539 (1990).
- [97] R. Hilfer, R. Metzler, A. Blumen, J. Klafter (Eds.), *Strange Kinetics*, Chemical Physics **284**, 1 (2002).
- [98] J. Klafter, S. C. Lim, R. Metzler (Eds.), *Fractional Dynamics: Recent Advances* (World Scientific Publishing Company, Singapore, 2011).
- [99] T. D. Frank, *Nonlinear Fokker-Planck Equations: Fundamentals and Applications* (Springer, Heidelberg, 2005).
- [100] G. H. Weiss, *Aspects and Applications of the Random Walk* (North Holland, Amsterdam, 1994).
- [101] B. Dybiec, E. Gudowska-Nowaki, *Discriminating between normal and anomalous random walks*, Phys. Rev. E **80**, 061122 (2009).
- [102] Z. Zhang, Y. Yang, Y. Lin, *Random walks in modular scale-free networks with multiple traps*, Phys. Rev. E **85**, 011106 (2012).
- [103] B. Meyer, E. Agliari, O. Bénichou, R. Voituriez, *Exact calculations of first-passage quantities on recursive networks*, Phys. Rev. E **85**, 026113 (2012).
- [104] Y. Meroz, I. M. Sokolov, J. Klafter, *Distribution of first-passage times to specific targets on compactly explored fractal structures*, Phys. Rev. E **83**, 020104(R) (2011).
- [105] Y. Lin, B. Wu, Z. Zhang, *Determining mean first-passage time on a class of treelike regular fractals*, Phys. Rev. E **82**, 031140 (2010).

- [106] P. Fauchald, T. Tveraa, *Using First-Passage Time in the analysis of area-restricted search and habitat selection*, Ecology **84**, No. 2 (2003).
- [107] F. Bailleul *et al*, *Assessment of scale-dependent foraging behavior in southern elephant seals incorporating the vertical dimension: a development of the First Passage Time method*, Journal of Animal Ecology **77**, 948 (2008).
- [108] M. E. Byrne, M. J. Chamberlain, *Using first-passage time to link behavior and habitat in foraging paths of a terrestrial predator, the racoon*, Animal Behaviour **84**, 593 (2012).
- [109] F. Wei, D. Yang, R. Straube, Jianwei Shuai, *Brownian diffusion of ion channels in different membrane patch geometries*, Phys. Rev. E **83**, 021919 (2011).
- [110] V. J. van Hijkoop, A. J. Dammers, K. Malek, M.-O. Coppens, *Water diffusion through a membrane protein channel: a first passage time approach*, J. Chem. Phys. **127**, 085101 (2007).
- [111] S. Condamin *et al.*, *First passage times in complex scale invariant media*, Nature **450**, 77 (2007).
- [112] C. Carretero-Campos, P. Bernaola-Galván, P. Ch. Ivanov, P. Carpena, *Phase transitions in the first-passage time of scale-invariant correlated processes*, Phys. Rev. E **85**, 011139 (2012).
- [113] R. C. Lua, A. Y. Grosberg, *First passage times and asymmetry of DNA translocation*, Phys. Rev. E **72**, 061918 (2005).
- [114] T. Lagache, D. Holcman, *Quantifying intermittent transport in cell cytoplasm*, Phys. Rev. E **77**, 030901(R) (2008).
- [115] D. A. Kenwright *et al.*, *First-passage-probability analysis of active transport in live cells*, Phys. Rev. E **86**, 031910 (2012).
- [116] J. Perell, M. Gutierrez-Roig, J. Masoliver, *Scaling properties and universality of first-passage-time probabilities in financial markets*, Phys. Rev. E **84**, 066110 (2011).
- [117] J. Masoliver, J. Perell, *First-passage and risk evaluation under stochastic volatility*, Phys. Rev. E **80**, 016108 (2009).
- [118] O. Bénichou *et al.*, *Geometry-controlled kinetics*, Nature Chem. **2**, 472-477 (2010).
- [119] C. Loverdo, O. Bénichou, M. Moreau, R. Voituriez, *Enhanced reaction kinetics in biological cells*, Nature Phys. **4**, 134 (2008).

- [120] T. Kosztolowicz, K. D. Lewandowska, *First-passage time for subdiffusion: The non-additive entropy approach versus the fractional model*, Phys. Rev E **86**, 021108 (2012).
- [121] S. Condamin *et al.*, *Probing microscopic origins of confined subdiffusion by first-passage observables*, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **105**, no.15 (2008).
- [122] V. Méndez, A. Iomin, *Comb-like models for transport along spiny dendrites*, Chaos Solitons Fract **53**, 46 (2013).
- [123] A. Iomin, V. Méndez, *Reaction-subdiffusion front propagation in a comblike model of spiny dendrites*, Phys. Rev. E **88**, 012706 (2013).
- [124] H. W. Wyld, *Mathematical Methods for Physics* (Westview Press, 1999).
- [125] V. E. Arkhincheev, *Random walk on hierarchical comb structures*, JETP **88**, 710 (1999).
- [126] P. L. Krapivsky, S. Redner, E. Ben-Naim, *A Kinect View of Statistical Physics* (Cambridge: Cambridge University Press, 2010)
- [127] S. Redner, P.L. Krapivsky, *Diffusive escape in a nonlinear shear flow: Life and death at the edge of a windy cliff*, J. Stat. Phys. **82**, 999 (1996).
- [128] J.-H. Jeon, R. Metzler, *Inequivalence of time and ensemble averages in ergodic systems: exponential versus power-law relaxation in confinement*, Phys. Rev. E **85**, 021147 (2012).
- [129] J.-H. Jeon, N. Leijnse, L. B. Oddershede, R. Metzler, *Anomalous diffusion and power-law relaxation in wormlike micellar solution*, New J. Phys. **15**, 045011 (2013).
- [130] R. Metzler and T. F. Nonnenmacher, *Space- and time-fractional diffusion and wave equations, fractional Fokker-Planck equations, and physical motivation*, Chem. Phys. **284**, 67 (2002).
- [131] H. Johansen-Berg, T. E. J. Behrens (Eds.), *Diffusion MRI – From Quantitative Measurement to In vivo Neuroanatomy* (Elsevier, 2009).
- [132] M. Palombo *et al.*, *Structural disorder and anomalous diffusion in random packing of spheres*, Sci. Rep. **3**, 2631 (2013).
- [133] R. L. Magin *et al.*, *Characterization of anomalous diffusion in porous biological tissues using fractional order derivatives and entropy*, Microporous Mesoporous Mater **178** 39 (2013).