



UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales
Departamento de Física

Difusión anómala: Estudio de la dinámica
irreversible de una partícula Browniana inmersa
en un entorno complejo y gobernada por la
ecuación de Langevin generalizada

Trabajo de Tesis para optar por el título de
Doctor de la Universidad de Buenos Aires en el área de Ciencias Físicas

por Angel Daniel Viñales

Director de Tesis : Dr. Marcelo A. Desósito
Lugar de trabajo: Departamento de Física

Julio de 2008

Resumen

En la presente Tesis investigamos los procesos de difusión anómala que se originan en la dinámica disipativa de una partícula Browniana clásica libre y sometida a un potencial armónico cuando esta interactúa con un medio fractal o un fluido complejo. Partiendo de una ecuación de Langevin generalizada, y mediante el análisis de Laplace derivamos expresiones exactas para los valores medios, varianzas y función de autocorrelación de la velocidad de la partícula en términos de funciones de Mittag-Leffler generalizadas y sus derivadas. Investigamos el comportamiento a tiempos largos de estas cantidades, y analizamos la presencia del denominado efecto whip-back. Asimismo mostramos que la dinámica asintótica del oscilador armónico puede ser obtenida mediante la utilización de teoremas Tauberianos, tanto para el caso de ruido interno como externo. Finalmente, introducimos un nuevo modelo de entorno complejo a través de un núcleo de memoria disipativo caracterizado por una función de Mittag-Leffler. Para el caso de una partícula libre y en el marco de ruido interno mostramos que puede ser obtenida una solución analítica completa de la ecuación de Langevin asociada. De este modo se han derivado ciertos comportamientos novedosos respecto de los obtenidos con un ruido del tipo ley de potencias puro.

Palabras clave:

Procesos Estocásticos - Difusión Anómala - Ecuación de Langevin Generalizada - Entornos Fractales y Fluidos Complejos - Ruido Mittag-Leffler

Anomalous diffusion: Study of the irreversible dynamics of a Brownian particle immerse in a complex environment and governed by the generalized Langevin equation

Abstract

In the present Thesis we investigate the anomalous diffusion process, that have been originated in the dissipative dynamics of a free classical Brownian particle and subjected to an harmonic potential; when the particle interacts with a fractal environment or a complex fluid. Starting from a generalized Langevin equation and by using Laplace analysis, we derive exact expressions for the mean values, variances, and velocity autocorrelation function of the particle in terms of generalized Mittag-Leffler functions and its derivatives. The long-time behaviors of these quantities are obtained and the presence of the whip-back effect is investigated. Also, we show that the asymptotic dynamics of the harmonic oscillator in the cases of internal or external noise, can be obtained through Tauberian theorems. Finally, we introduce a new model of complex environment through a dissipative memory kernel characterized by a Mittag-Leffler function. For the free particle case and in the frame of internal noise we show that a complete analytic solution of the generalized Langevin equation associated can be obtained. In this way, have been derived certain novel behaviors respect to those obtained with a pure power-law noise.

Keywords:

Stochastic Process - Anomalous Diffusion - Generalized Langevin Equation - Fractal Environments and Complex Fluids - Mittag-Leffler Noise

Índice general

1. Introducción	1
2. Ecuación de Langevin generalizada	9
2.1. Ecuación de Langevin Generalizada para una partícula libre	9
2.1.1. Solución formal de la ecuación de Langevin generalizada	10
2.2. Ecuación de Langevin generalizada para una partícula confinada ar- mónicamente	15
2.2.1. Solución formal de la ecuación de Langevin generalizada	15
2.2.2. Comportamientos de las varianzas a tiempos cortos	17
2.2.3. Comportamiento de las varianzas en el límite $t \rightarrow \infty$	19
2.3. Expresiones alternativas para las varianzas	21
3. Difusión anómala de una partícula libre	23
3.1. Modelos de entorno fractal	23
3.2. Partícula libre en un entorno fractal	27
3.2.1. Varianzas y efecto whip-back en el caso de ruido interno	36
3.2.2. Varianzas en el caso de ruido externo	41
4. Difusión anómala de un oscilador armónico	47
4.1. Oscilador armónico en un medio fractal	47
4.1.1. Varianzas y efecto whip-back en el caso de ruido interno	57

4.1.2. Varianzas en el caso de ruido externo	61
4.2. Derivación alternativa de la dinámica asintótica	65
5. Difusión anómala inducida por un ruido Mittag-Leffler correlacionado	71
5.1. Ruido Mittag-Leffler correlacionado	72
5.2. Expresiones analíticas de las funciones de relajación	78
5.3. Comportamiento asintótico de las funciones de relajación	81
5.4. Origen microscópico del ruido Mittag-Leffler correlacionado	84
6. Conclusiones	87
A. Funciones especiales	93
A.1. Función Gamma	93
A.2. Funciones de tipo Mittag-Leffler	94
B. Códigos para la implementación numérica de funciones	99
B.1. Código para implementar la función de Mittag-Leffler de uno y dos parámetros	99
B.2. Código para implementar las funciones de relajación del oscilador armónico	101
Índice de figuras	103
Bibliografía	109
Agradecimientos	117

Capítulo 1

Introducción

El movimiento Browniano es el movimiento errático descrito por algunas partículas que se encuentran en un medio fluido. Una de las primeras observaciones científicas reportadas sobre este fenómeno fue realizada en 1785 por el físico holandés Jan Ingenhousz quien investigaba pequeñas partículas de carbón pulverizado sobre una superficie de alcohol.

No obstante, el descubrimiento del movimiento Browniano se atribuye en general al botánico escocés Robert Brown. De ahí que el fenómeno haya heredado su nombre. En 1827, Brown [1] observó bajo el microscopio el movimiento zigzagueante sobre el agua de pequeñas partículas derivadas de granos de polen. Para comprobar que no se trataba de un fenómeno restringido a partículas provenientes de materiales orgánicos, realizó varios experimentos sistemáticos con materiales inorgánicos y concluyó que el movimiento de las partículas no era característico de la materia viviente. De este modo, especuló que este comportamiento era una característica general de las partículas, vinculada a la estructura molecular de la materia.

En 1877, Delsaux fue el primero que explicó el fenómeno de movimiento Browniano

argumentando que el mismo era una consecuencia de las incesantes colisiones de las moléculas del fluido.

Sin embargo, una de las primeras investigaciones precisas sobre el movimiento Browniano fue realizada por Leon Gouy en 1888. En dicha investigación, Gouy mostró que el movimiento era una propiedad intrínseca del fluido [2, 3, 4]. Gouy también descubrió que el movimiento de la partícula se acentuaba a medida que disminuía el tamaño de la misma y también cuando la viscosidad del fluido disminuía, por lo que supuso que estas características tenían su origen en los movimientos térmicos de las moléculas del fluido [2].

Años mas tarde, el matemático francés Louis Bachelier en su Tesis Doctoral [5] presentada en 1900, expuso un marco teórico del movimiento Browniano en términos del mercado financiero en vez de cantidades físicas. No obstante, este trabajo es considerado uno de los primeros estudios teóricos sobre movimiento Browniano.

Cinco años después, en su famoso trabajo publicado en 1905 [6], Einstein formuló una exitosa explicación teórica del movimiento Browniano. De ese modo, puso punto final al debate sobre la estructura atómica de la materia que en esa época aún era un tema de profunda discusión y controversia. En dicha publicación, Einstein propuso la siguiente expresión para el desplazamiento medio cuadrático de una partícula Browniana que difunde en un medio

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle X^2(t) \rangle}{2t}, \quad (1.1)$$

donde $\langle \dots \rangle$ indica el valor medio estadístico y D es la denominada constante de difusión, dada por

$$D = \frac{k_B T}{m\gamma}, \quad (1.2)$$

siendo T la temperatura absoluta, k_B la constante de Boltzmann y γ el denominado coeficiente de fricción.

Una importante aplicación de la formulación de Einstein fue llevada a cabo en 1908 por Jean Baptiste Perrin, quien realizó una medición independiente del número

de Avogadro [7, 8]. Asimismo, los precisos experimentos realizados por Perrin y sus colaboradores corroboraron la teoría propuesta por Einstein [6, 9]. Las relaciones de Einstein corresponden a la denominada difusión normal y pueden ser derivadas a partir de una ecuación de Langevin para la partícula difusiva [10].

La denominada ecuación de Langevin clásica unidimensional

$$\ddot{X}(t) + \gamma \dot{X}(t) + f(X) = F(t), \quad (1.3)$$

es una ecuación diferencial estocástica que permite describir la posición $X(t)$ de una partícula Browniana a tiempo t bajo la acción de una fuerza externa $f(X)$. La interacción de la partícula con su entorno se divide en una contribución dada por el término de fricción $\gamma \dot{X}(t)$, y una contribución fluctuante (ruido) dada por la fuerza aleatoria $F(t)$. Por simplicidad, hemos considerado que la masa m de la partícula Browniana es $m = 1$.

Cabe destacar que, a pesar de las dificultades técnicas, han sido hallados en forma explícita diversos resultados exactos y aproximados de la ecuación (1.3) [11, 12, 13, 14, 15]. En particular, si se considera la ecuación de Langevin (1.3) en ausencia de fuerza externa, con una fuerza estocástica Gaussiana de valor medio cero y con una función de correlación proporcional a la función delta de Dirac

$$\langle F(t)F(t') \rangle = q \delta(t - t'), \quad (1.4)$$

donde $q = 2\gamma k_B T$, puede obtenerse la relación de Einstein y derivar la constante de difusión [16].

Una fuerza estocástica con una correlación δ es denominada *ruido blanco* [16] debido a que su distribución espectral, la cual es dada por la transformada de Fourier de la ecuación (1.4), es independiente de la frecuencia ω . Por otra parte, si la fuerza estocástica $F(t)$ no es δ correlacionada; es decir si la densidad espectral depende de la frecuencia, se suele utilizar el término *ruido coloreado* [16].

Cabe aclarar que el proceso estocástico descrito por la ecuación de Langevin (1.3), a veces denominada ecuación de Langevin normal, es de tipo markoviano debido

a que la misma no incluye efectos de memoria. Sin embargo, a fin de describir el movimiento de una partícula en entornos complejos tales como fluidos densos, fluidos con grados de libertad internos o medios fractales, se hace necesario incluir los efectos de memoria a través de la dependencia temporal del coeficiente de fricción debido a las características no markovianas del proceso.

Actualmente, el estudio de los procesos estocásticos que ocurren en sistemas que interactúan con entornos complejos y no homogéneos es un tema de sumo interés en el campo de la física estadística del no-equilibrio. En particular, el estudio de la denominada difusión anómala atrajo considerable atención durante las últimas dos décadas [17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24].

En sistemas simples se asume que la correlación temporal correspondiente a las interacciones sistema-entorno puede ser descrita mediante una función exponencial con un tiempo característico constante. Sin embargo, los fenómenos de relajación en entornos complejos se caracterizan por la presencia de una dinámica lenta, esto es, procesos de decaimiento que se extienden por varios órdenes de magnitud con la presencia de leyes de potencias en regiones de tiempo intermedias. Ejemplos de este tipo de comportamientos pueden encontrarse en una gran variedad de sistemas físicos y biológicos. Entre ellos podemos citar la dinámica de polímeros [25], el transporte de carga en semiconductores amorfos [26], los procesos de decorrelación en microemulsiones [27], la difusión en fractales [28], el fenómeno de fluorescencia intermitente en enzimas [29], la dinámica de migración de células [30] y los fenómenos de transporte de partículas a través del medio intracelular [31, 32, 33, 34, 35].

En una dimensión y en ausencia de una fuerza externa, se dice que el proceso estocástico exhibe una difusión anómala cuando el valor medio cuadrático de su desplazamiento después de un tiempo t tiene la forma asintótica

$$\langle X^2(t) \rangle \sim t^\lambda.$$

El proceso se denomina *subdifusivo* cuando $\lambda < 1$ y *superdifusivo* cuando $\lambda > 1$; mientras que el caso $\lambda = 1$ corresponde a la denominada difusión normal.

El análisis de los procesos estocásticos que presentan difusión anómala ha sido realizado principalmente utilizando dos métodos: el de las ecuaciones cinéticas fraccionales [22, 23, 24, 36, 37], y el de las ecuaciones de Langevin generalizadas (ELG) [38, 39]. Este último método ha sido usado recientemente con éxito en la descripción y análisis de diversos fenómenos, entre los que podemos mencionar a las fluctuaciones conformacionales dentro de proteínas [40, 41], reacciones cinéticas en enzimas [42] y reacciones de fusión nuclear [43].

En este contexto, la descripción de la dinámica de la partícula debe realizarse mediante una ecuación diferencial estocástica no local en el tiempo, de modo tal que la ecuación de Langevin (1.3) debe modificarse como

$$\ddot{X}(t) + \int_0^t dt' \gamma(t-t') \dot{X}(t') + f(X) = F(t). \quad (1.5)$$

Esta ecuación, denominada ecuación de Langevin generalizada [44, 45, 46, 47], permite describir el movimiento de una partícula bajo la influencia de un campo externo $f(X)$ y de una fuerza aleatoria $F(t)$ modelada como un ruido coloreado gaussiano. En este caso, la disipación generada por la interacción de la partícula con el entorno está caracterizada por el núcleo de memoria disipativo $\gamma(t)$, mientras que las fluctuaciones estadísticas del medio son incorporadas a través del término correspondiente a la fuerza estocástica $F(t)$. Aquí $F(t)$ es una fuerza aleatoria gaussiana y estacionaria, con valor medio cero

$$\langle F(t) \rangle = 0, \quad (1.6)$$

y una función de autocorrelación arbitraria dada por :

$$\langle F(t)F(t') \rangle = C(|t-t'|) = C(\tau). \quad (1.7)$$

Debido a que estamos considerando una fuerza estocástica $F(t)$ estacionaria; su función de correlación solo dependerá de la diferencia de tiempos $\tau = |t-t'|$.

En el desarrollo de este trabajo investigaremos la ecuación de Langevin generalizada (1.5) cuando el campo externo $f(X)$ es nulo y el correspondiente a una partícula sometida a un potencial armónico, esto es $f(X) = \omega^2 X$, los cuales corresponden a los casos de partícula libre y al oscilador armónico, respectivamente.

En este marco, consideraremos dos orígenes distintos de la fuerza estocástica $F(t)$. En el caso del denominado *ruido interno*, las fluctuaciones y la disipación provienen de la misma fuente y el sistema finalmente alcanza su estado de equilibrio termodinámico [50]. En este caso, el núcleo de memoria y la función de correlación del ruido están relacionados a través del segundo teorema de fluctuación-disipación [48, 49]

$$C(t) = k_B T \gamma(t), \quad (1.8)$$

donde T es la temperatura absoluta del entorno, y k_B es la constante de Boltzmann.

Por otro lado, en el caso de *ruido externo* las fluctuaciones y la disipación poseen distintos orígenes, de modo tal que el núcleo de memoria disipativo $\gamma(t)$ y la función de correlación del ruido $C(t)$ son independientes. Por consiguiente, el teorema de fluctuación-disipación no es válido, y el sistema no relaja a su estado de equilibrio termodinámico [50].

Si la función de correlación $C(t)$ es una función delta de Dirac, el proceso estocástico es Markoviano y la dinámica correspondiente puede ser fácilmente obtenida [16]. Sin embargo, a fin de describir la dinámica no-Markoviana de una partícula que presente difusión anómala, se deben tener en cuenta los efectos de memoria a través de un ruido con correlaciones a tiempos largos. En particular, han sido empleadas correlaciones de forma de ley de potencias para modelar procesos de difusión anómala utilizando diversos métodos y aproximaciones [18, 20, 39, 51].

Si bien puede observarse en los últimos años un creciente avance en el estudio de la difusión anómala, diversas cuestiones permanecen aún hoy abiertas. En este sentido, esta Tesis pretende contribuir a un mayor esclarecimiento y entendimiento de la descripción de ciertos fenómenos difusivos de tipo anómalo.

La presente Tesis se halla estructurada como indicamos a continuación. En el Capítulo 2 introducimos la ecuación de Langevin generalizada y mostramos como puede ser resuelta formalmente mediante transformadas de Laplace, para el caso de una partícula libre y para el oscilador armónico clásico. Basándonos en la solución formal obtenida realizamos un análisis general de ambos casos. En el Capítulo 3 introducimos un modelo para estudiar medios fractales o complejos y derivamos las soluciones exactas para una partícula libre. Utilizando el modelo de entorno complejo introducido en el capítulo 3, en el Capítulo 4 estudiamos las soluciones analíticas exactas de la ecuación de Langevin generalizada para un oscilador armónico. En particular, analizamos el comportamiento temporal de los valores medios y las varianzas en términos de los parámetros involucrados. Mediante el análisis de Laplace y teoremas Tauberianos encontramos la dinámica asintótica del oscilador armónico gobernado por la ecuación de Langevin. En el capítulo 5 introducimos un nuevo tipo de ruido a través de un núcleo de memoria modelado como una función del tipo Mittag-Leffler de un parámetro, y resolvemos en forma exacta y completa la ecuación de Langevin generalizada correspondiente al caso de partícula libre. Por último, en el capítulo 6 se presenta un resumen de las conclusiones obtenidas en esta Tesis.

Capítulo 2

Ecuación de Langevin generalizada

En este capítulo investigaremos las soluciones formales de ecuación de Langevin generalizada (1.5) para el caso de campo externo nulo (partícula libre) y el correspondiente a una partícula sometida a un potencial armónico, es decir $f(X) = \omega^2 X$. En ambos casos consideraremos las situaciones de ruido interno y externo. A tal fin, analizaremos la dinámica de una partícula bajo la influencia de una fuerza estocástica Gaussiana, estacionaria y de valor medio cero, con una función de correlación arbitraria.

2.1. Ecuación de Langevin Generalizada para una partícula libre

En esta sección analizaremos el caso de una partícula libre, el cual corresponde a considerar un campo externo nulo. En esta situación, la ecuación de Langevin generalizada (1.5) se reduce a la expresión

$$\ddot{X}(t) + \int_0^t dt' \gamma(t-t') \dot{X}(t') = F(t). \quad (2.1)$$

Como veremos a continuación, la solución formal de esta ecuación puede ser encontrada mediante la aplicación del análisis de Laplace. En general, para una dada función $f(t)$, su transformada de Laplace $\widehat{f}(s)$ se define como [52]:

$$\widehat{f}(s) = \int_0^{\infty} dt e^{-st} f(t). \quad (2.2)$$

Por otra parte, una de las propiedades fundamentales de la transformada de Laplace es la correspondiente a la transformación de una convolución de funciones. Dada la convolución de dos funciones $f(t)$ y $h(t)$, definida como

$$(f * h)(t) = \int_0^t dt' f(t-t') h(t'), \quad (2.3)$$

su transformada de Laplace viene dada por [52]

$$\widehat{f * h}(s) = \widehat{f}(s) \widehat{h}(s), \quad (2.4)$$

donde $\widehat{f}(s)$ y $\widehat{h}(s)$ son las transformadas de Laplace de $f(t)$ y $h(t)$ respectivamente.

2.1.1. Solución formal de la ecuación de Langevin generalizada

Aplicando la transformación de Laplace a la ecuación (2.1), y usando las propiedades para la transformada de derivadas y convolución de funciones [52], se obtiene que

$$(s^2 + s\widehat{\gamma}(s)) \widehat{X}(s) = (s + \widehat{\gamma}(s))x_0 + v_0 + \widehat{F}(s), \quad (2.5)$$

donde

$$x_0 = X(0), \quad v_0 = \dot{X}(0) \quad (2.6)$$

son los valores deterministas correspondientes a la posición y velocidad inicial de la partícula, respectivamente. Despejando $\widehat{X}(s)$ de esta última ecuación se tiene que

$$\widehat{X}(s) = \frac{x_0}{s} + v_0 \widehat{G}(s) + \widehat{F}(s) \widehat{G}(s), \quad (2.7)$$

donde

$$\widehat{G}(s) = \frac{1}{s^2 + s\widehat{\gamma}(s)}, \quad (2.8)$$

y

$$\widehat{\gamma}(s) = \int_0^\infty dt e^{-st} \gamma(t) \quad (2.9)$$

es la transformada de Laplace del núcleo de memoria $\gamma(t)$.

Llevando a cabo la inversión de Laplace en la ecuación (2.7), vemos que la solución formal de la ecuación (2.1) puede ser escrita como

$$X(t) = \langle X(t) \rangle + \int_0^t dt' G(t-t') F(t'), \quad (2.10)$$

donde

$$\langle X(t) \rangle = x_0 + v_0 G(t) \quad (2.11)$$

es el valor medio de la posición, y la función $G(t)$ es la transformada inversa de Laplace de la función $\widehat{G}(s)$ dada por la expresión (2.8).

Por otro lado, aplicando la derivada temporal en la ecuación (2.10), la expresión para la velocidad de la partícula se escribe como

$$\dot{X}(t) = \langle \dot{X}(t) \rangle + \int_0^t dt' g(t-t') F(t'), \quad (2.12)$$

donde

$$\langle \dot{X}(t) \rangle = v_0 g(t) \quad (2.13)$$

es el valor medio de la velocidad. La función de relajación $g(t)$ es la derivada temporal de $G(t)$, es decir

$$g(t) = G'(t), \quad (2.14)$$

y por consiguiente su transformada de Laplace viene dada por

$$\widehat{g}(s) = \frac{1}{s + \widehat{\gamma}(s)}. \quad (2.15)$$

Notemos que a partir de las ecuaciones (2.11) y (2.13) se deduce que

$$G(0) = 0, \quad (2.16)$$

$$g(0) = 1. \quad (2.17)$$

Para el caso de ruido interno, puede demostrarse que la función de relajación $g(t)$ está relacionada con el comportamiento a tiempos largos de la función de autocorrelación de la velocidad normalizada $C_v(t)$ como [38]

$$C_v(\tau) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle \dot{X}(t) \dot{X}(t + \tau) \rangle}{\langle \dot{X}(t) \dot{X}(t) \rangle} = g(\tau). \quad (2.18)$$

A continuación derivaremos expresiones formales para las varianzas de la posición, velocidad, y posición-velocidad de la partícula, cuya dinámica es descrita por la ecuación (2.1). En general, las varianzas respectivas se definen a través de las siguientes ecuaciones

$$\sigma_{xx}(t) = \langle [X(t) - \langle X(t) \rangle]^2 \rangle, \quad (2.19)$$

$$\sigma_{vv}(t) = \langle [\dot{X}(t) - \langle \dot{X}(t) \rangle]^2 \rangle, \quad (2.20)$$

$$\sigma_{xv}(t) = \langle [X(t) - \langle X(t) \rangle] [\dot{X}(t) - \langle \dot{X}(t) \rangle] \rangle. \quad (2.21)$$

Notemos que de las ecuaciones (2.19) y (2.21), se deduce que

$$\sigma_{xv}(t) = \frac{1}{2} \dot{\sigma}_{xx}(t). \quad (2.22)$$

A partir de las Ecs. (2.10) y (2.12), tomando en cuenta la propiedad de simetría de la función de correlación

$$C(t - t') = C(t' - t), \quad (2.23)$$

y usando la propiedad de intercambio del orden de integración y cambio de variables en integrales dobles [53]

$$\int_0^t dx \int_0^x f(x, y) dy = \int_0^t dy \int_y^t f(x, y) dx, \quad (2.24)$$

pueden obtenerse las expresiones explícitas para las varianzas del proceso (2.1):

$$\sigma_{xx}(t) = 2 \int_0^t G(t_1) dt_1 \int_0^{t_1} G(t_2) C(t_1 - t_2) dt_2, \quad (2.25)$$

$$\sigma_{vv}(t) = 2 \int_0^t g(t_1) dt_1 \int_0^{t_1} g(t_2) C(t_1 - t_2) dt_2, \quad (2.26)$$

$$\sigma_{xv}(t) = \int_0^t G(t_1) dt_1 \int_0^{t_1} g(t_2) C(t_1 - t_2) dt_2. \quad (2.27)$$

Cabe destacar que las ecuaciones (2.25) a (2.27) son válidas tanto para el caso de ruido interno como externo. Sin embargo, en el caso de ruido interno, tomando la transformada de Laplace en las ecuaciones (2.25) a (2.27) vemos que las expresiones resultantes pueden ser manipuladas algebraicamente en el dominio de Laplace con la ayuda de la relación de fluctuación-disipación (1.8). De este modo, luego de realizar la inversión de Laplace correspondiente a las expresiones obtenidas, encontramos que en el dominio del tiempo las varianzas pueden ser convenientemente escritas como [38]

$$\beta \sigma_{xx}(t) = 2 I(t) - G^2(t), \quad (2.28)$$

$$\beta \sigma_{vv}(t) = 1 - g^2(t), \quad (2.29)$$

$$\beta \sigma_{xv}(t) = G(t) \{1 - g(t)\}, \quad (2.30)$$

donde $\beta = 1/k_B T$.

La función de relajación $I(t)$ está dada por

$$I(t) = \int_0^t dt' G(t'), \quad (2.31)$$

y por consiguiente se tiene que

$$I(0) = 0. \quad (2.32)$$

Asimismo, de acuerdo a la definición de $I(t)$ dada en (2.31) y mediante el uso de la ecuación (2.8) se deduce que su transformada de Laplace se escribe como

$$\hat{I}(s) = \frac{s^{-1}}{s^2 + s\hat{\gamma}(s)}. \quad (2.33)$$

De manera similar, a partir de las ecuaciones para los primeros momentos (2.11) y (2.13) junto con las correspondientes a las varianzas (2.28) y (2.29) es posible obtener las expresiones explícitas para los segundos momentos de la posición y la velocidad de la partícula para el caso de ruido interno. Estas expresiones son

$$\begin{aligned} \langle X^2(t) \rangle &= x_0^2 + (v_0^2 - k_B T)G^2(t) \\ &\quad + 2k_B T I(t) + 2x_0 v_0 G(t), \end{aligned} \quad (2.34)$$

$$\langle \dot{X}^2(t) \rangle = k_B T + (v_0^2 - k_B T)g^2(t). \quad (2.35)$$

2.2. Ecuación de Langevin generalizada para una partícula confinada armónicamente

En este apartado consideraremos que la partícula se halla sometida a un campo externo armónico; es decir $f(X) = \omega^2 X$, donde ω es la frecuencia natural del oscilador. En esta situación, la ecuación de Langevin generalizada (1.5) para la partícula difusiva puede ser escrita como:

$$\ddot{X}(t) + \int_0^t dt' \gamma(t-t') \dot{X}(t') + \omega^2 X = F(t). \quad (2.36)$$

2.2.1. Solución formal de la ecuación de Langevin generalizada

Considerando las condiciones iniciales determinísticas

$$x_0 = X(0), \quad v_0 = \dot{X}(0), \quad (2.37)$$

y mediante un procedimiento similar al empleado en la sección anterior para el caso de partícula libre, puede obtenerse una expresión formal para el desplazamiento $X(t)$ y la velocidad $\dot{X}(t)$ de la partícula. Mediante la aplicación de la transformación de Laplace a la ecuación (2.36), se obtiene que el desplazamiento $X(t)$ satisface la ecuación

$$X(t) = \langle X(t) \rangle + \int_0^t dt' G(t-t') F(t'), \quad (2.38)$$

donde

$$\langle X(t) \rangle = v_0 G(t) + x_0(1 - \omega^2 I(t)). \quad (2.39)$$

En este caso, la función de relajación $G(t)$ es la transformada de Laplace inversa de

$$\hat{G}(s) = \frac{1}{s^2 + \hat{\gamma}(s)s + \omega^2}, \quad (2.40)$$

donde $\widehat{\gamma}(s)$ es la transformada de Laplace del núcleo de memoria dado por la ecuación (2.9), e

$$I(t) = \int_0^t dt' G(t'). \quad (2.41)$$

Por otro lado, la velocidad $\dot{X}(t)$ satisface la ecuación

$$\dot{X}(t) = \langle \dot{X}(t) \rangle + \int_0^t dt' g(t-t') F(t'), \quad (2.42)$$

donde

$$\langle \dot{X}(t) \rangle = v_0 g(t) - \omega^2 x_0 G(t), \quad (2.43)$$

y la función de relajación $g(t)$ es la derivada de $G(t)$, es decir

$$g(t) = G'(t). \quad (2.44)$$

Como las Ecs. (2.38) y (2.42) son formalmente idénticas a las (2.10) y (2.12), mediante un procedimiento completamente análogo al descrito para el caso de partícula libre, pueden derivarse las expresiones explícitas para las varianzas del proceso (2.36):

$$\sigma_{xx}(t) = 2 \int_0^t G(t_1) dt_1 \int_0^{t_1} G(t_2) C(t_1 - t_2) dt_2, \quad (2.45)$$

$$\sigma_{vv}(t) = 2 \int_0^t g(t_1) dt_1 \int_0^{t_1} g(t_2) C(t_1 - t_2) dt_2, \quad (2.46)$$

$$\sigma_{xv}(t) = \int_0^t G(t_1) dt_1 \int_0^{t_1} g(t_2) C(t_1 - t_2) dt_2, \quad (2.47)$$

donde ahora las funciones $G(t)$ y $g(t)$ vienen dadas por las expresiones (2.40) y (2.44), respectivamente. Asimismo, de las ecuaciones (2.45) y (2.47), se deduce que

$$\sigma_{xv}(t) = \frac{1}{2} \dot{\sigma}_{xx}(t), \quad (2.48)$$

En particular, para el caso de ruido interno las expresiones de las varianzas pueden ser convenientemente simplificadas [50, 51, 54]

$$\beta \sigma_{xx}(t) = 2I(t) - G^2(t) - \omega^2 I^2(t), \quad (2.49)$$

$$\beta \sigma_{vv}(t) = 1 - g^2(t) - \omega^2 G^2(t), \quad (2.50)$$

$$\beta \sigma_{xv}(t) = G(t) \{1 - g(t) - \omega^2 I(t)\}. \quad (2.51)$$

Por otro lado, a partir de las ecuaciones (2.39) y (2.43) para los primeros momentos junto con las correspondientes a las varianzas (2.49) y (2.50), deducimos que en el caso de ruido interno los segundos momentos se escriben como

$$\langle X^2(t) \rangle = x_0^2 + (v_0^2 - k_B T) G^2(t) \quad (2.52)$$

$$+ (x_0^2 \omega^2 - k_B T) I(t) (\omega^2 I(t) - 2) + 2x_0 v_0 G(t) (1 - \omega^2 I(t)).$$

$$\langle \dot{X}^2(t) \rangle = k_B T + (v_0^2 - k_B T) g^2(t) \quad (2.53)$$

$$+ (x_0^2 \omega^2 - k_B T) \omega^2 G^2(t) - 2x_0 v_0 \omega^2 G(t) g(t).$$

Finalmente, puede demostrarse que en el marco de ruido interno la función de relajación $g(t)$, dada por (2.44), está relacionada con el comportamiento a tiempos largos de la función de autocorrelación de la velocidad normalizada $C_v(t)$ como [54, 55]

$$C_v(\tau) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle \dot{X}(t) \dot{X}(t + \tau) \rangle}{\langle \dot{X}(t) \dot{X}(t) \rangle} = g(\tau). \quad (2.54)$$

2.2.2. Comportamientos de las varianzas a tiempos cortos

En este apartado analizaremos los comportamientos de las varianzas a tiempos cortos. Para ello, notando que los valores medios de la posición y la velocidad en $t = 0$

cumplen que $\langle X(0) \rangle = x_0$ y $\langle \dot{X}(0) \rangle = v_0$, a partir de las ecuaciones (2.39), (2.41) y (2.43) se deduce que $I(0) = 0$, $G(0) = 0$ y $g(0) = 1$. Usando la expansión en serie de Taylor en la ecuación (2.45) y los valores de $G(0)$ y $g(0)$, obtenemos después de algo de álgebra el comportamiento a tiempos cortos de $\sigma_{xx}(t)$

$$\sigma_{xx}(t) \approx \frac{C(0)}{4} t^4 \quad (t \rightarrow 0), \quad (2.55)$$

donde $C(0) = \langle F^2(t) \rangle$ es la varianza del ruido. Un cálculo análogo a partir de la ecuación (2.46) muestra que

$$\sigma_{vv}(t) \approx C(0)t^2 \quad (t \rightarrow 0). \quad (2.56)$$

Estas dos ecuaciones muestran que el oscilador armónico, manejado tanto por ruido interno como externo, experimenta un movimiento balístico cuando el tiempo es muy pequeño [56].

Los resultados precedentes pueden ser obtenidos de una manera alternativa. De la ecuación (2.36) vemos que cuando $t \rightarrow 0$, el término inercial claramente domina sobre el correspondiente a la fuerza armónica y el término de fricción, por consiguiente la ecuación (2.36) puede ser aproximada por

$$\ddot{X}(t) \approx F(t). \quad (2.57)$$

Por otra parte, ya que t es mucho más pequeño que cualquier escala de tiempo podemos asumir que a tiempo t la probabilidad de que el ruido varíe es muy baja; dicho de otro modo $F(t) = F(0)$ (en probabilidad). Por lo tanto

$$X(t) \approx X(0) + \dot{X}(0)t + \frac{1}{2}F(0)t^2, \quad (2.58)$$

y por consiguiente

$$\dot{X}(t) \approx \dot{X}(0) + F(0)t. \quad (2.59)$$

Introduciendo estas aproximaciones para $X(t)$ y $\dot{X}(t)$ en las definiciones de las varianzas (2.19) y (2.20), y recordando que el valor medio del ruido es cero (ver

ecuación (1.6)); se derivan las ecuaciones (2.55) y (2.56).

Finalmente, de las ecuaciones (2.48) y (2.55) encontramos

$$\sigma_{xv}(t) \approx \frac{C(0)}{2} t^3 \quad (t \rightarrow 0), \quad (2.60)$$

lo cual prueba que a tiempos cortos existe una correlación finita entre la posición y la velocidad.

Es importante notar que las ecuaciones (2.55) y (2.56) no son válidas cuando $C(0)$ no existe, como por ejemplo en el caso de ruido blanco. En dicho caso, usando la relación $C(t_1 - t_2) = \delta(t_1 - t_2)$ y expandiendo las ecuaciones (2.45) y (2.46) encontramos que las varianzas de la posición y la velocidad para tiempos cortos se comportan como

$$\sigma_{xx}(t) \approx \frac{2}{3} t^3 \quad (t \rightarrow 0), \quad (2.61)$$

y

$$\sigma_{vv}(t) \approx 2t \quad (t \rightarrow 0). \quad (2.62)$$

Estas últimas ecuaciones muestran que el comportamiento del oscilador armónico cuando $t \rightarrow 0$ depende del color del ruido pero es independiente de si el ruido es interno o externo. En otras palabras, una vez que la clase de ruido ha sido determinada (coloreado o blanco), luego el comportamiento a tiempos cortos del oscilador armónico es universal tanto para ruido interno como externo [56].

2.2.3. Comportamiento de las varianzas en el límite $t \rightarrow \infty$

A continuación discutiremos las propiedades límites de las varianzas cuando el tiempo t tiende a infinito. Considerando que el valor medio de la velocidad del oscilador amortiguado es cero cuando $t \rightarrow \infty$, deducimos de la ecuación (2.43) que los valores de $G(t)$ y $g(t)$ deben ser cero cuando $t \rightarrow \infty$. Por otro lado, dado que el valor

medio de la posición se anula para tiempo infinito, de la ecuación (2.39) vemos que el valor estacionario de $I(t)$ es igual a $1/\omega^2$, es decir

$$I(\infty) = \int_0^\infty dt' G(t') = \widehat{G}(0) = \frac{1}{\omega^2}. \quad (2.63)$$

Por lo tanto introduciendo los valores en infinito de las funciones involucradas en las ecuaciones (2.49) y (2.50), encontramos que para ruido interno se tiene

$$\sigma_{xx}(\infty) = \frac{k_B T}{\omega^2}, \quad (2.64)$$

y

$$\sigma_{vv}(\infty) = k_B T. \quad (2.65)$$

Es importante notar que estos valores estacionarios no están relacionados con la intensidad o correlación temporal del ruido interno.

Por otra parte, en el caso de ruido externo puede deducirse, mediante el uso de la transformada de Laplace en las ecuaciones (2.45) y (2.46), que si $\widehat{C}(0)$ existe, los valores estacionarios de las varianzas de la posición y velocidad son también constantes. Sin embargo, estos valores ahora están relacionados con la intensidad y correlación temporal del ruido externo [56, 57]. Finalmente, de la ecuación (2.48) puede observarse que el valor estacionario de $\sigma_{xv}(\infty) = 0$ es universal para ambos tipos de ruidos, lo cual significa que la correlación entre la posición y la velocidad se anula cuando el tiempo es muy grande.

2.3. Expresiones alternativas para las varianzas

En esta sección obtendremos expresiones alternativas para las varianzas, las cuales nos resultarán útiles para realizar cálculos específicos con un ruido externo. En principio, notemos que a partir de la ecuación (2.45) podemos escribir la varianza de la posición como:

$$\sigma_{xx}(t) = 2 \int_0^t dt_1 G(t_1) \rho(t_1), \quad (2.66)$$

donde la función $\rho(t_1)$ viene dada por

$$\rho(t_1) = \int_0^{t_1} dt_2 G(t_2) C(t_1 - t_2). \quad (2.67)$$

Por lo tanto, la función $\rho(t)$ está definida como la convolución de la función $G(t)$ con la función de correlación del ruido $C(t)$ y en consecuencia su transformada de Laplace se escribe como

$$\widehat{\rho}(s) = \widehat{G}(s) \widehat{C}(s). \quad (2.68)$$

Derivando respecto del tiempo la ecuación (2.67) y usando que $\rho(0) = 0$, se deduce que la derivada temporal de $\rho(t)$ viene dada por

$$\dot{\rho}(t_1) = \int_0^{t_1} dt_2 g(t_2) C(t_1 - t_2). \quad (2.69)$$

Usando esta última ecuación, deducimos inmediatamente que la ecuación (2.46) para la varianza de la velocidad puede ser escrita como

$$\sigma_{vv}(t) = 2 \int_0^t dt_1 g(t_1) \dot{\rho}(t_1). \quad (2.70)$$

Como veremos en análisis posteriores, para realizar los cálculos correspondientes al caso de ruido externo resulta conveniente usar las expresiones para las derivadas de las varianzas de la posición y velocidad de la partícula. Estas expresiones pueden

ser obtenidas diferenciando respecto al tiempo las ecuaciones (2.66) y (2.70), con lo cual se tiene

$$\dot{\sigma}_{xx}(t) = 2\dot{\sigma}_{xv}(t) = 2\dot{G}(t)\rho(t), \quad (2.71)$$

$$\dot{\sigma}_{vv}(t) = 2\dot{G}(t)\dot{\rho}(t) = 2g(t)\dot{\rho}(t), \quad (2.72)$$

donde hemos usado la ecuación (2.48) para escribir la primera igualdad en la ecuación (2.71).

Es importante notar que las expresiones para las varianzas y sus derivadas obtenidas en esta sección son válidas para el caso de la partícula libre como para el oscilador armónico. Solo debemos recordar introducir las funciones de relajación involucradas correspondientes a cada caso.

Capítulo 3

Difusión anómala de una partícula libre

En este capítulo analizaremos la manera de modelar un entorno fractal, tanto desde un punto de vista fenomenológico como microscópico. A continuación, estudiaremos la difusión anómala de una partícula libre inmersa en un medio fractal y cuya dinámica es regida por la ecuación de Langevin generalizada (1.5), tanto para el caso de ruido interno como externo.

3.1. Modelos de entorno fractal

Podemos observar en la literatura que existen esencialmente dos maneras de modelar entornos disipativos. Una de ellas se realiza desde un punto de vista fenomenológico, mientras que la otra se deriva a partir de un marco microscópico. En lo que sigue expondremos dos modelos de entornos complejos que se derivan de ambos enfoques y mostraremos las diferencias que presentan, así como también la relación entre los mismos.

La ecuación de Langevin generalizada (1.5), introducida en el capítulo 1, puede ser derivada a partir de un modelo microscópico de osciladores independientes para el entorno disipativo [58, 59, 60, 61, 62, 63]. En este contexto, la función de correlación de la fuerza aleatoria en un reservorio clásico puede ser escrita como [39, 64],

$$C(t - t') = \frac{2}{\pi} k_B T \int_0^\infty \frac{J(\omega)}{\omega} \cos \omega(t - t') d\omega, \quad (3.1)$$

donde $J(\omega)$ es la denominada densidad espectral que caracteriza al reservorio [39, 58]. Por otra lado, la densidad espectral del ruido $D(\omega) = J(\omega)/\omega$, puede ser expresada como

$$D(\omega) = \eta_\lambda (\omega/\tilde{\omega})^{\lambda-1} f_c \left(\frac{\omega}{\omega_c} \right). \quad (3.2)$$

donde ω_c es esencialmente el ancho de banda del reservorio y f_c es una función de corte de ancho típico ω_c , que vale uno para $\omega = 0$ y se anula para $\omega \rightarrow \infty$. Aquí $\tilde{\omega} \ll \omega_c$ denota una frecuencia de referencia que permite a la constante de amortiguamiento η_λ tener las dimensiones de una viscosidad para cualquier valor de λ . Por consiguiente, el comportamiento de $D(\omega)$ para bajas frecuencias es del tipo ley de potencias caracterizada por el exponente λ , es decir $D(\omega) \approx \eta_\lambda (\omega/\tilde{\omega})^{\lambda-1}$.

En particular, para $\lambda = 1$ la densidad espectral del ruido es una constante, al menos en el rango de frecuencias $\omega \ll \omega_c$. Luego, la fuerza estocástica es delta correlacionada y la ecuación de Langevin es no retardada. El caso de ruido blanco corresponde a la denominada fricción Ohmica, mientras que los casos $0 < \lambda < 1$ y $\lambda > 1$ son conocidos como modelos sub-Ohmico y super-Ohmico, respectivamente [65, 66, 67]. Por razones que serán explicadas en el desarrollo de esta sección, a continuación asumiremos que $0 < \lambda < 2$.

Tomando la transformada de Laplace de la ecuación (3.1) en $t - t'$, e introduciendo la expresión para $D(\omega)$ dada en (3.2) vemos que

$$\widehat{C}(s) = \frac{2}{\pi} k_B T \int_0^\infty \eta_\lambda (\omega/\tilde{\omega})^{\lambda-1} f_c \left(\frac{\omega}{\omega_c} \right) \frac{s}{s^2 + \omega^2} d\omega. \quad (3.3)$$

Los entornos fractales como los fluidos complejos son caracterizados por una ausencia de longitudes características, la cual conduce a una ausencia de tiempos característicos. De modo que podemos tomar el límite de tiempo de relajación cero, el cual corresponde a frecuencias bajas, y por lo tanto al límite $\omega_c \rightarrow \infty$.

Dado que $0 < \lambda < 2$, puede tomarse el límite $\omega_c \rightarrow \infty$ en la ecuación (3.3) para obtener

$$\widehat{C}(s) = \frac{2}{\pi} k_B T \int_0^\infty \eta_\lambda(\omega/\tilde{\omega})^{\lambda-1} \frac{s}{s^2 + \omega^2} d\omega, \quad (3.4)$$

y realizando la integración en frecuencias, encontramos que

$$\widehat{C}(s) = C_\lambda s^{\lambda-1}, \quad (3.5)$$

donde hemos definido

$$C_\lambda = k_B T \eta_\lambda \frac{\tilde{\omega}^{1-\lambda}}{\sin(\lambda\pi/2)}. \quad (3.6)$$

Por consiguiente, en el caso de ruido interno y en el límite de frecuencia de corte infinita, la transformada de Laplace del núcleo de memoria puede ser escrita como

$$\widehat{\gamma}(s) = \gamma_\lambda s^{\lambda-1}, \quad (3.7)$$

donde γ_λ esta dado por

$$\gamma_\lambda = \frac{C_\lambda}{k_B T} = \eta_\lambda \frac{\tilde{\omega}^{1-\lambda}}{\sin(\lambda\pi/2)}. \quad (3.8)$$

Alternativamente, para modelar entornos fractales o fluidos complejos puede utilizarse un enfoque expuesto por otros autores [18, 29, 38, 51, 68]. Debido a que para este tipo de entornos los efectos de memoria son importantes, es común modelar la función de correlación de la fuerza aleatoria mediante una función de correlación con una cola de decaimiento a tiempos largos del tipo ley de potencias, es decir

$$C(t) = C_\lambda \frac{t^{-\lambda}}{\Gamma(1-\lambda)}, \quad (3.9)$$

donde $\Gamma(x)$ es la función Gamma [53, 69], cuyas propiedades se exhiben en el Apéndice A.1.

El exponente λ puede ser tomado en el intervalo $0 < \lambda < 2$, el cual es determinado por el mecanismo dinámico del proceso físico considerado [18]. El factor C_λ es un coeficiente positivo independiente del tiempo pero dependiente del exponente λ .

Es importante mencionar que este tipo de ruido ha sido utilizado recientemente en biofísica para modelos de transferencia de electrones en proteínas, fluctuaciones conformacionales y fluorescencia en enzimas [41, 42, 70]. Asimismo, es de notar que este tipo de correlaciones ha sido observada experimentalmente en reacciones bioquímicas [71] y en dinámica de migración de células [30].

Notemos que, a diferencia de otros modelos como el utilizado en la Referencia [18], para $\lambda = 1$ la correlación del ruido definida a través de la ecuación (3.9) no reproduce un ruido algebraico, es decir $C(t) \neq C_1/t$. De hecho, tomando el límite $\lambda \rightarrow 1$ en la ecuación (3.9) y usando la definición de la delta generalizada [72] se obtiene una función delta correlacionada que corresponde al límite de memoria corta y al caso markoviano.

Por otra parte, para $\lambda \neq 1$ se reobtienen los casos sub-Ohmicos y super-Ohmicos correspondientes al modelo microscópico de osciladores independientes expuesto anteriormente, en el límite de frecuencia de corte infinita (o tiempo de relajación cero).

Cabe señalar que una correlación de la fuerza aleatoria como la dada en la ecuación (3.9), también corresponde a la correlación del llamado ruido gaussiano fraccional introducido en la Referencia [73]. En este caso, el exponente λ pertenece al intervalo $0 < \lambda < 1$. Usualmente se escribe la correlación del ruido gaussiano fraccional en términos de un exponente H llamado índice de Hurst; el cual es un número real que puede tomar valores entre $1/2$ y 1 , y es una medida del grado de correlación temporal en el ruido [70].

A partir de la ecuación (3.9) y el uso del segundo teorema de fluctuación-disipación,

deducimos que para un reservorio clásico no-Ohmico y en la situación de ruido interno la transformada de Laplace del núcleo disipativo es

$$\hat{\gamma}(s) = \hat{C}(s)/k_B T = \gamma_\lambda s^{\lambda-1}, \quad (3.10)$$

donde $\gamma_\lambda = C_\lambda/k_B T$. De este modo se observa una correspondencia directa entre las ecuaciones (3.10) y (3.7) para la transformada de Laplace del núcleo de memoria.

A pesar de las similitudes y la correspondencia que existe entre el modelo microscópico y el fenomenológico presentados aquí para el caso de ruido interno, ambos modelos difieren sustancialmente en su origen, enfoque, y fundamento; así como también en su aplicabilidad. En este capítulo adoptamos el marco fenomenológico debido a que, como veremos en la sección 3.2.1, este enfoque nos permitirá extender fácilmente el modelo descrito aquí al caso de ruido externo y ampliar el campo de aplicación de los resultados obtenidos en el marco de dicho enfoque.

Una vez introducido el modelo para el reservorio fractal, en lo que sigue resolveremos la ecuación de Langevin generalizada para el caso de una partícula libre basándonos en el análisis general expuesto en el Capítulo 2.

3.2. Partícula libre en un entorno fractal

En esta sección estudiaremos la dinámica de una partícula libre en un entorno fractal o fluido complejo. Este sistema ha sido investigado previamente mediante distintos enfoques y métodos tales como el formalismo de integrales de camino [74], ecuaciones de Fokker-Plank fraccionales [24], ecuaciones de Langevin generalizadas con correlaciones de largo tiempo [18, 38, 39, 51], modelo microscópico de matriz aleatoria con su correspondiente ecuación de Langevin fraccional [20], o más recientemente a través de una ecuación de Langevin generalizada con derivada fraccional [75].

Con el propósito de derivar expresiones explícitas para las funciones de relajación

correspondientes a la partícula libre, en el marco del modelo descrito en la sección precedente; sustituimos la siguiente expresión de la transformada de Laplace del núcleo de memoria

$$\widehat{\gamma}(s) = \gamma_\lambda s^{\lambda-1}, \quad (3.11)$$

en la expresión de $\widehat{G}(s)$ dada por (2.8). De esta manera vemos que la función integral $I(t)$ definida en (2.31) es la inversión de Laplace de

$$\widehat{I}(s) = \frac{\widehat{G}(s)}{s} = \frac{s^{-1}}{s^2 + \gamma_\lambda s^\lambda}. \quad (3.12)$$

A fin de obtener una expresión analítica de la función integral $I(t)$ es necesario realizar la inversión de Laplace de la ecuación (3.12). Esto puede llevarse a cabo haciendo uso de la denominada función de Mittag-Leffler generalizada $E_{\alpha,\beta}(y)$, la cual se define mediante la expansión en series [76]

$$E_{\alpha,\beta}(y) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{y^j}{\Gamma(\alpha j + \beta)}, \quad \alpha > 0, \quad \beta > 0. \quad (3.13)$$

La función de Mittag-Leffler generalizada satisface la propiedad [77]

$$\int_0^\infty e^{-st} t^{\beta-1} E_{\alpha,\beta}(-\gamma t^\alpha) dt = \frac{s^{\alpha-\beta}}{s^\alpha + \gamma}, \quad (3.14)$$

la cual corresponde al caso particular $k = 0$ de la ecuación (A.24), que permite obtener la transformada de Laplace de un conjunto de funciones introducidas en el apéndice A.2.

Reescribiendo la ecuación (3.12) como

$$\widehat{I}(s) = \frac{s^{-1-\lambda}}{s^{2-\lambda} + \gamma_\lambda}, \quad (3.15)$$

y utilizando la propiedad (3.14), vemos que la la función integral $I(t)$ puede ser escrita como

$$I(t) = t^2 E_{2-\lambda,3}(-(\omega_\lambda t)^{2-\lambda}), \quad (3.16)$$

donde hemos introducido la frecuencia ω_λ definida como

$$\omega_\lambda^{2-\lambda} = \gamma_\lambda. \quad (3.17)$$

A partir de la ecuación (3.16) y mediante el uso de la relación ¹

$$\frac{d}{dt}(t^{\beta-1}E_{\alpha,\beta}(-\gamma t^\alpha)) = t^{\beta-2}E_{\alpha,\beta-1}(-\gamma t^\alpha), \quad (3.18)$$

se obtienen las siguientes expresiones para las funciones de relajación $G(t)$ y $g(t)$

$$G(t) = t E_{2-\lambda,2}(-(\omega_\lambda t)^{2-\lambda}), \quad (3.19)$$

$$g(t) = E_{2-\lambda}(-(\omega_\lambda t)^{2-\lambda}), \quad (3.20)$$

donde $E_\alpha(y) = E_{\alpha,1}(y)$ es la denominada función de Mittag-Leffler de un parámetro, definida por la expansión en serie

$$E_\alpha(y) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{y^j}{\Gamma(\alpha j + 1)}, \quad \alpha > 0. \quad (3.21)$$

Nótese que la función de Mittag-Leffler de un parámetro se reduce a la función exponencial para el caso $\alpha = 1$; esto es

$$E_1(y) = \exp(y). \quad (3.22)$$

Cabe aclarar que las expresiones (3.16), (3.19) y (3.20) han sido previamente obtenidas mediante un procedimiento similar en las referencias [20, 39, 51].

A continuación, derivaremos los comportamientos a tiempos largos de las funciones de relajación para valores de $\lambda \neq 1$. A tal fin, e introduciendo el comportamiento asintótico de $E_{\alpha,\beta}(-y)$, dado por ²

$$E_{\alpha,\beta}(-y) \sim \frac{1}{y \Gamma(\beta - \alpha)}, \quad y > 0, \quad (3.23)$$

¹ver ecuación (A.26) en el apéndice A

²ver ecuación (A.23) en el apéndice A

en las expresiones de las funciones de relajación (3.16), (3.19) y (3.20), se obtiene que para $\omega_\lambda t \gg 1$ vale que

$$I(t) \approx \frac{1}{\omega_\lambda^2 \Gamma(\lambda + 1)} (\omega_\lambda t)^\lambda, \quad (3.24)$$

$$G(t) \approx \frac{1}{\omega_\lambda \Gamma(\lambda)} (\omega_\lambda t)^{\lambda-1}, \quad (3.25)$$

$$g(t) \approx \frac{1}{\Gamma(\lambda - 1)} (\omega_\lambda t)^{(\lambda-2)}. \quad (3.26)$$

Estas ecuaciones muestran que las funciones de relajación para la partícula libre tienen un comportamiento asintótico del tipo ley de potencias.

Es importante notar que las expresiones asintóticas (3.24) a (3.26) han sido obtenidas utilizando la ecuación (3.23), la cual corresponde a tomar el primer término en la expansión asintótica (A.22) de la función de Mittag-Leffler. En consecuencia, los comportamientos obtenidos son en general válidos como comportamientos límites. Si en vez de esta aproximación, tomamos un término más en el desarrollo asintótico (A.22), esto es

$$E_{\alpha,\beta}(-y) \sim \frac{1}{y \Gamma(\beta - \alpha)} - \frac{1}{y^2 \Gamma(\beta - 2\alpha)}, \quad y > 0, \quad (3.27)$$

e introducimos esta expresión en la ecuación (3.16), se obtiene que para tiempos $\omega_\lambda t \gg 1$ es

$$I(t) \approx \frac{(\omega_\lambda t)^\lambda}{\omega_\lambda^2 \Gamma(\lambda + 1)} - \frac{1}{\omega_\lambda^2} \frac{(\omega_\lambda t)^{2(\lambda-1)}}{\Gamma(2(\lambda - 1) + 1)}. \quad (3.28)$$

Como es de esperar, esta expresión asintótica se reduce a la dada en ecuación (3.24) para tiempos suficientemente largos. Asimismo, puede observarse de (3.28) que para valores de λ en el intervalo (0,1) el segundo término del lado derecho de esta ecuación es despreciable frente al primero, aun para valores de t tales que $\omega_\lambda t \gg 1$. Sin embargo, para el intervalo $1 < \lambda < 2$ el segundo término se vuelve importante y su influencia será mayor para el rango de tiempos intermedios tales que $\omega_\lambda t \gg 1$.

En las figuras 3.1 y 3.2 se muestran los gráficos de la función $I(t)$ y su comportamiento asintótico para valores de $\lambda = 1/3$ y $4/3$ respectivamente. Como puede observarse en la figura 3.1, para $\lambda < 1$ la función $I(t)$ se aproxima rápidamente a su comportamiento asintótico dado por (3.24), si bien no reproduce las oscilaciones iniciales. Por otra parte, de la figura 3.2 vemos que $I(t)$ y su comportamiento asintótico (3.24) difieren en forma apreciable para $\lambda > 1$. No obstante, de dicha figura también observamos que en el mismo rango de tiempos $I(t)$ y su expresión asintótica (3.28) tienen un excelente acuerdo. Estos resultados son consistentes con nuestra discusión previa sobre las diferencias entre las expresiones asintóticas (3.24) y (3.28) en el régimen de tiempos intermedios.

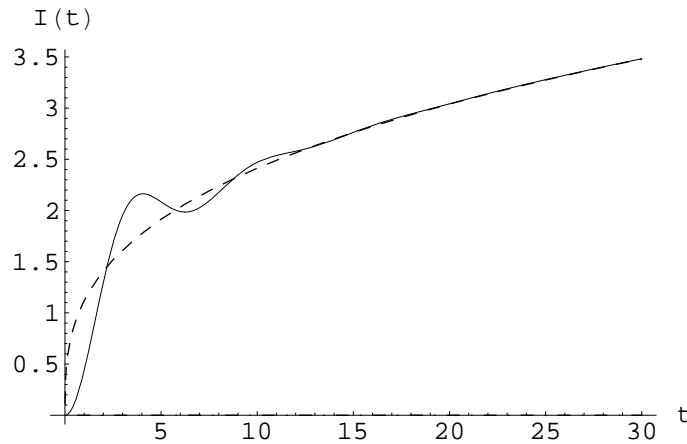


Figura 3.1: Gráfico de $I(t)$ dada por la Ec.(3.16) (línea sólida) y su comportamiento asintótico (3.24) (línea rayada) en función del tiempo para $\lambda = 1/3$. En todos los casos hemos puesto $\omega_\lambda = 1$.

Cabe aclarar que para realizar las figuras 3.1 y 3.2, y en general todos los gráficos de este capítulo correspondientes a funciones que se expresan en términos de las funciones de Mittag-Leffler, se utilizó un código desarrollado con el programa Mathematica 5.1, el cual se muestra en el apéndice B.

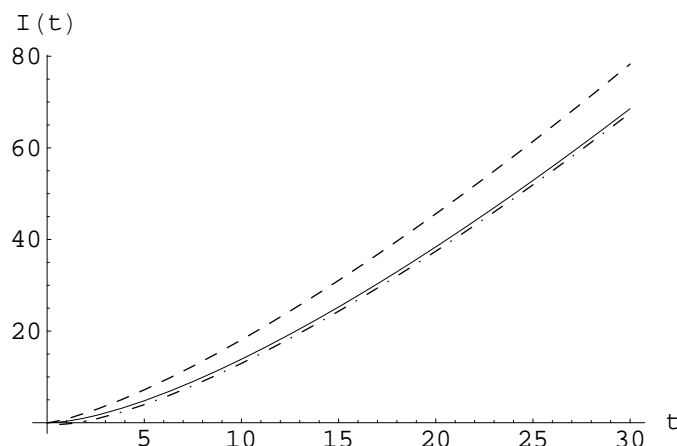


Figura 3.2: Gráfico de $I(t)$ dada por la Ec.(3.16) (línea sólida), su expresión asintótica (3.24) (línea rayada), y su expresión asintótica (3.28) (línea rayada y punteada) en función del tiempo para $\lambda = 4/3$. En todos los casos hemos puesto $\omega_\lambda = 1$.

En las figuras 3.3 a 3.8 hemos graficado las funciones de relajación exactas $I(t)$, $G(t)$ y $g(t)$ dadas por (3.16), (3.19) y (3.20) para distintos valores de λ en el intervalo $(0, 2)$. En particular, como puede observarse de las figuras 3.3 y 3.4, la función $I(t)$ diverge a medida que aumenta el tiempo t y esa divergencia se acentúa con el incremento del valor de λ . Por otro lado, notemos que la curva diverge en forma cóncava en el intervalo $0 < \lambda < 1$ (correspondiente a subdifusión) mientras que en el rango $1 < \lambda < 2$ (correspondiente a superdifusión) toma una forma convexa; este comportamiento es consistente con la expresión asintótica dada en la ecuación (3.24) puesto que, de acuerdo a dicha expresión, en un caso la función $I(t)$ diverge con una ley de potencias de exponente $\lambda < 1$, y en el otro con $\lambda > 1$. Por otra parte, de las figuras 3.5 y 3.6 se observa que la función $G(t)$ converge a su valor cero para $0 < \lambda < 1$ y diverge cuando $1 < \lambda < 2$. Esta característica puede ser deducida de la expresión asintótica de $G(t)$ provista por la ecuación (3.25). Finalmente, a partir de las figuras 3.7 y 3.8 vemos que la función $g(t)$ se comporta de modo muy diferente en cada rango de λ . Siendo más precisos, $g(t)$ presenta oscilaciones para $0 < \lambda < 1$; mientras que

en el intervalo $1 < \lambda < 2$ la función $g(t)$ decrece en forma monótona con el aumento del tiempo y converge más lentamente a su valor cero a medida que el valor de λ incrementa.

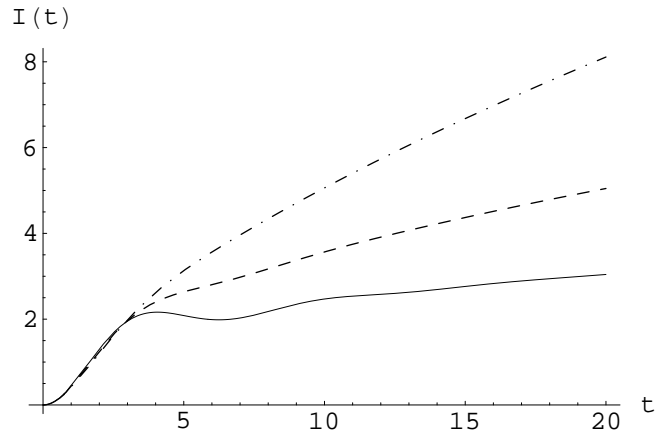


Figura 3.3: Gráfico de $I(t)$ dada por la Ec.(3.16) como una función del tiempo para $\lambda = 1/3$ (línea sólida), $\lambda = 1/2$ (línea rayada), y $\lambda = 2/3$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\omega_\lambda = 1$.

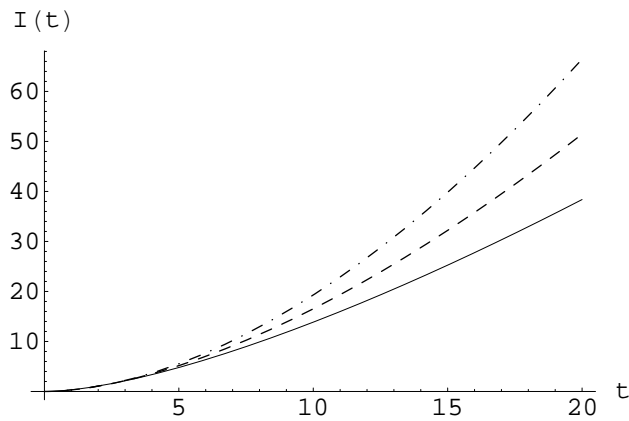


Figura 3.4: Gráfico de $I(t)$ dada por la Ec.(3.16) como una función del tiempo para $\lambda = 4/3$ (línea sólida), $\lambda = 3/2$ (línea rayada), y $\lambda = 5/3$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\omega_\lambda = 1$.

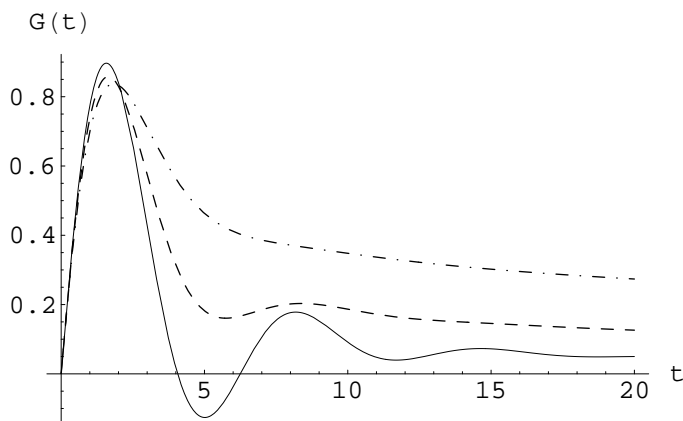


Figura 3.5: Gráfico de $G(t)$ dada por la Ec.(3.19) como una función del tiempo para $\lambda = 1/3$ (línea sólida), $\lambda = 1/2$ (línea rayada), y $\lambda = 2/3$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\omega_\lambda = 1$.

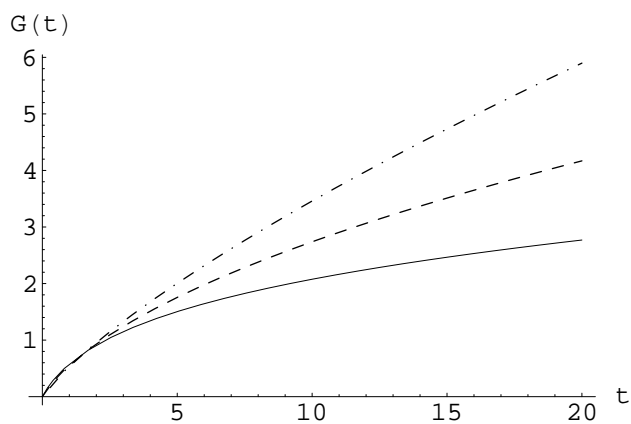


Figura 3.6: Gráfico de $G(t)$ dada por la Ec.(3.19) como una función del tiempo para $\lambda = 4/3$ (línea sólida), $\lambda = 3/2$ (línea rayada), y $\lambda = 5/3$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\omega_\lambda = 1$.

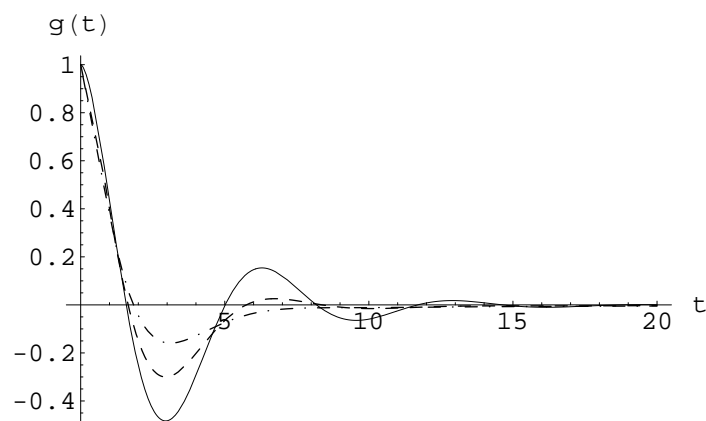


Figura 3.7: Gráfico de $g(t)$ dada por Ec.(3.20) como una función del tiempo para $\lambda = 1/3$ (línea sólida), $\lambda = 1/2$ (línea rayada), y $\lambda = 2/3$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\omega_\lambda = 1$.

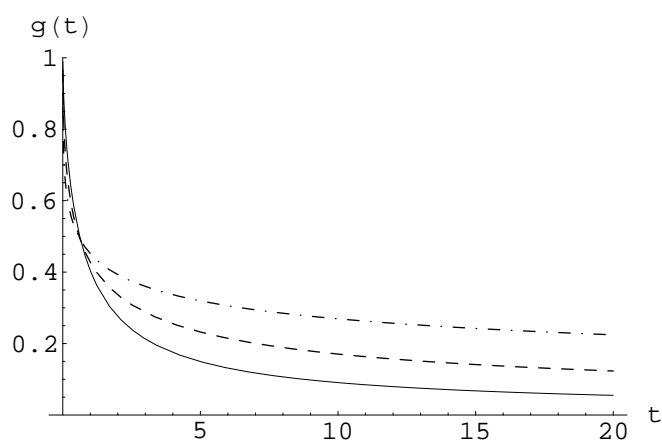


Figura 3.8: Gráfico de $g(t)$ dada por la Ec.(3.20) como una función del tiempo para $\lambda = 4/3$ (línea sólida), $\lambda = 3/2$ (línea rayada), y $\lambda = 5/3$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\omega_\lambda = 1$.

3.2.1. Varianzas y efecto whip-back en el caso de ruido interno

A continuación consideraremos la situación de ruido interno. A partir de la sustitución de las expresiones para las funciones de relajación dadas en (3.16), (3.19) y (3.20) en las ecuaciones para las varianzas (2.28) a (2.30), se obtienen las siguientes expresiones analíticas exactas para las varianzas del proceso

$$\beta \sigma_{xx}(t) = 2t^2 E_{2-\lambda,3}(-(\omega_\lambda t)^{2-\lambda}) - (t E_{2-\lambda,2}(-(\omega_\lambda t)^{2-\lambda}))^2, \quad (3.29)$$

$$\beta \sigma_{vv}(t) = 1 - (E_{2-\lambda}(-(\omega_\lambda t)^{2-\lambda}))^2, \quad (3.30)$$

$$\beta \sigma_{xv}(t) = t E_{2-\lambda,2}(-(\omega_\lambda t)^{2-\lambda}) \{1 - E_{2-\lambda}(-(\omega_\lambda t)^{2-\lambda})\}. \quad (3.31)$$

En particular, para $\lambda = 1$ podemos usar las expresiones de las funciones de Mittag-Leffler dadas en las ecuaciones (A.17) a (A.19) del apéndice A. De este modo, luego de algo de álgebra obtenemos

$$\beta \sigma_{xx}(t) = \frac{2t}{\omega_1} - \frac{2}{\omega_1^2}(1 - 2e^{-\omega_1 t}) - \frac{1}{\omega_1^2}(1 + e^{-2\omega_1 t}), \quad (3.32)$$

$$\beta \sigma_{vv}(t) = 1 - e^{-2\omega_1 t}, \quad (3.33)$$

$$\beta \sigma_{xv}(t) = \frac{1}{\omega_1}(1 - e^{-\omega_1 t})^2, \quad (3.34)$$

las cuales corresponden a las expresiones completas de un régimen difusivo markoviano [16]. En particular, de la ecuación (3.32) deducimos que para tiempos largos tales que $\omega_1 t \gg 1$ se tiene que

$$\sigma_{xx}(t) \approx \frac{2k_B T}{\gamma_1} t, \quad (3.35)$$

donde hemos usado que $\omega_1 = \gamma_1$. Esto muestra que para tiempos largos la varianza de la posición toma la forma de una función linealmente creciente en el tiempo, reobteniéndose la famosa relación de Einstein para el movimiento Browniano [78].

A continuación derivaremos el comportamiento asintótico de las varianzas para valores de $\lambda \neq 1$. Introduciendo la expresión asintótica de la función de Mittag-Leffler dada en (3.23) en las ecuaciones (3.29) a (3.31), vemos que para $\omega_\lambda t \gg 1$ tenemos

$$\beta \sigma_{xx}(t) \approx \frac{2}{\gamma_\lambda \Gamma(\lambda + 1)} t^\lambda, \quad (3.36)$$

$$\beta \sigma_{vv}(t) \approx 1 - \frac{t^{2(\lambda-2)}}{[\gamma_\lambda \Gamma(\lambda - 1)]^2}, \quad (3.37)$$

$$\beta \sigma_{xv}(t) \approx \frac{t^{\lambda-1}}{\gamma_\lambda \Gamma(\lambda)}. \quad (3.38)$$

De la ecuación (3.36) vemos que en el límite $\lambda \rightarrow 1$ la difusión normal es recuperada. Si bien en este caso la varianza de la posición diverge cuando el tiempo incrementa, la divergencia es más rápida para el caso superdifusivo ($1 < \lambda < 2$) que para el subdifusivo ($0 < \lambda < 1$). Por otro lado, de acuerdo a la ecuación (3.37), la varianza de la velocidad tiende a su valor de equilibrio $1/\beta$. Sin embargo, debe notarse que $\sigma_{vv}(t)$ converge de una forma muy lenta en contraste con la relajación exponencial correspondiente a un régimen difusivo normal [51].

En las figuras 3.9 a 3.12 se ilustran los gráficos correspondientes a las varianzas de la posición y la velocidad, dadas por las ecuaciones (3.29) y (3.30) respectivamente, en función del tiempo para distintos valores de λ en el intervalo $(0, 2)$. Como puede observarse de las figuras 3.9 y 3.10, la varianza de la posición diverge cuando el tiempo incrementa y dicha divergencia se hace más pronunciada con el incremento del valor de λ .

Por otra parte, de las figuras 3.11 y 3.12 observamos que cuando λ pertenece al intervalo $(0,1)$ la varianza de la velocidad presenta oscilaciones que se atenúan con el incremento de λ y en consecuencia converge más rápidamente a su valor límite $1/\beta$. Por otro lado para $1 < \lambda < 2$, $\sigma_{vv}(t)$ también se aproxima al valor $1/\beta$ cuando el tiempo aumenta pero en este caso no presenta oscilaciones y su convergencia se hace más rápida con la disminución del valor de λ .

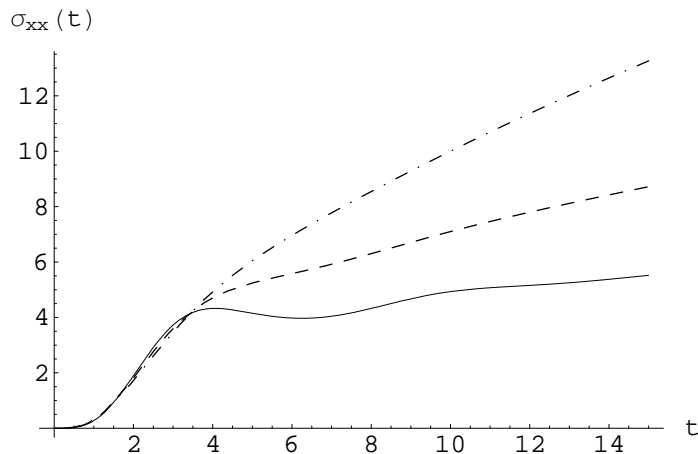


Figura 3.9: Gráfico de $\sigma_{xx}(t)$ dada por la Ec.(3.29) como una función del tiempo para $\lambda = 1/3$ (línea sólida), $\lambda = 1/2$ (línea rayada), y $\lambda = 2/3$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\omega_\lambda = 1$ y $\beta = 1$.

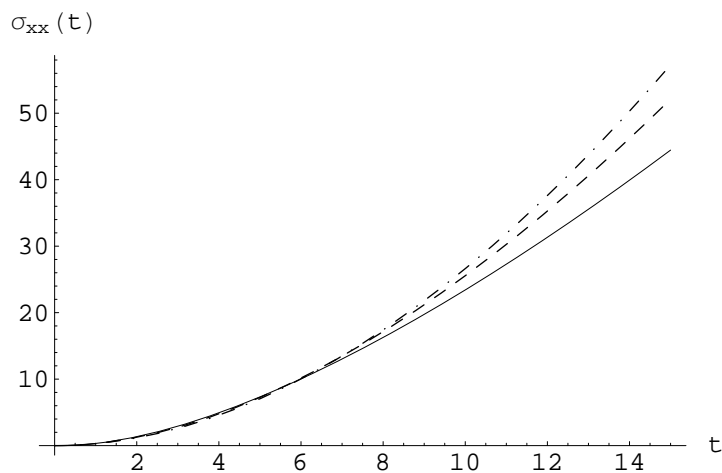


Figura 3.10: Gráfico de $\sigma_{xx}(t)$ dada por la Ec.(3.29) como una función del tiempo para $\lambda = 4/3$ (línea sólida), $\lambda = 3/2$ (línea rayada), y $\lambda = 5/3$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\omega_\lambda = 1$ y $\beta = 1$.

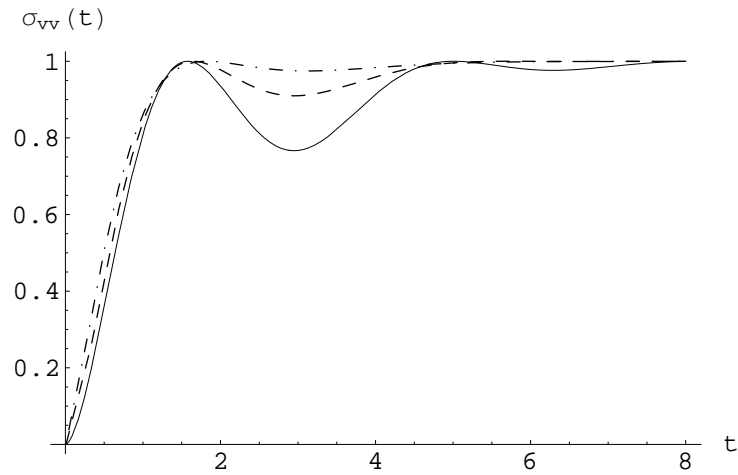


Figura 3.11: Gráfico de $\sigma_{vv}(t)$ dada por la Ec.(3.30) como una función del tiempo para $\lambda = 1/3$ (línea sólida), $\lambda = 1/2$ (línea rayada), y $\lambda = 2/3$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\omega_\lambda = 1$ y $\beta = 1$.

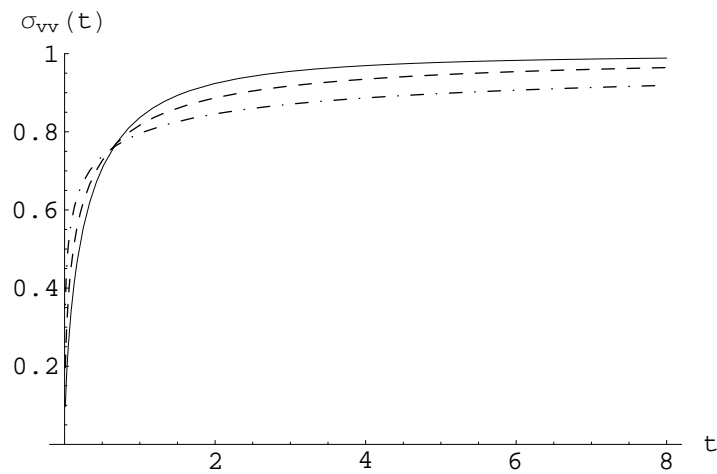


Figura 3.12: Gráfico de $\sigma_{vv}(t)$ dada por la Ec.(3.30) como una función del tiempo para $\lambda = 4/3$ (línea sólida), $\lambda = 3/2$ (línea rayada), y $\lambda = 5/3$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\omega_\lambda = 1$ y $\beta = 1$.

Finalmente, si introducimos la expresión (3.20) para $g(t)$ en la ecuación para la función de autocorrelación de la velocidad (2.18), se obtiene que

$$C_v(t) = E_{2-\lambda}(-(\omega_\lambda t)^{2-\lambda}). \quad (3.39)$$

De acuerdo a la ecuación (2.18), los gráficos de $C_v(t)$ corresponden a los de la función $g(t)$ ilustrados en las figuras 3.7 y 3.8. Por lo tanto, las características de la función de autocorrelación de la velocidad se derivan directamente de las de la función $g(t)$.

En el caso en que $\lambda = 1$ la función de Mittag-Leffler en (3.39) se reduce a la exponencial y por lo tanto la función de autocorrelación de la velocidad es simplemente una función exponencialmente decreciente en el tiempo.

Por otra parte, para $\lambda \neq 1$ y de las ecuaciones (2.18) y (3.26), se obtiene que para $\omega_\lambda t \gg 1$ el comportamiento asintótico de la función de autocorrelación de la velocidad viene dado por

$$C_v(t) \approx \frac{t^{(\lambda-2)}}{\gamma_\lambda \Gamma(\lambda-1)} = (\lambda-1) \frac{t^{(\lambda-2)}}{\gamma_\lambda \Gamma(\lambda)}, \quad (3.40)$$

donde en la última igualdad hemos utilizado la propiedad (A.2) de la función Gamma. De la ecuación (3.40), puede deducirse que la función de autocorrelación de la velocidad decae como una ley de potencias positiva para $1 < \lambda < 2$. Este hecho implica que la partícula tiende a moverse siempre en la misma dirección. Sin embargo, cuando $0 < \lambda < 1$ la función $C_v(t)$ decae con una ley de potencias negativa. Esta correlación negativa fue llamada efecto whip-back [18, 21, 79] e implica que si la partícula se mueve en la dirección positiva en un dado instante, tendrá tendencia a moverse en la dirección negativa en el próximo instante. Este comportamiento es responsable de la difusión mas lenta de la partícula (subdifusión) [20].

3.2.2. Varianzas en el caso de ruido externo

A continuación estudiaremos la dinámica de una partícula libre en el caso de ruido externo. En este caso las fluctuaciones y la disipación son independientes ya que provienen de distintas fuentes y por consiguiente el teorema de fluctuación-disipación no puede ser aplicado en este contexto. En particular, estudiaremos el caso de un núcleo de memoria $\gamma(t)$ y una función de correlación del ruido $C(t)$ descriptos por leyes de potencias, dadas por las siguientes ecuaciones

$$\gamma(t) = \gamma_\lambda \frac{t^{-\lambda}}{\Gamma(1-\lambda)}, \quad (0 < \lambda < 1) \quad , \quad (3.41)$$

$$C(t) = C_\alpha \frac{t^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)}, \quad (0 < \alpha < 1) \quad , \quad (3.42)$$

donde los coeficientes de proporcionalidad γ_λ y C_α son positivos e independientes del tiempo, pero pueden ser funciones dependientes de los exponentes λ y α respectivamente.

De las ecuaciones (3.41) y (3.42) vemos que la transformada de Laplace de la función de correlación y del núcleo de memoria vienen dadas por

$$\widehat{C}(s) = C_\alpha s^{\alpha-1}, \quad (3.43)$$

y

$$\widehat{\gamma}(s) = \gamma_\lambda s^{\lambda-1}. \quad (3.44)$$

Una vez introducido el modelo para el ruido externo, nuestro objetivo será obtener expresiones explícitas para las derivadas temporales de las varianzas de la posición y la velocidad a fin de analizar la difusión de la partícula libre en este marco.

Notemos que, de acuerdo a las ecuaciones (2.71) y (2.72), las derivadas $\dot{\sigma}_{xx}(t)$ y $\dot{\sigma}_{vv}(t)$ se expresan respectivamente como productos de las funciones $G(t)$ y $\rho(t)$ en un caso, y $\dot{\rho}(t)$ y $g(t)$ en el otro. Por lo tanto, para obtener las funciones $\dot{\sigma}_{xx}(t)$ y $\dot{\sigma}_{vv}(t)$ en

forma explícita, es necesario conocer las expresiones de las funciones involucradas en dichos productos. Como en la sección 3.2 obtuvimos formas explícitas de las funciones $G(t)$ y $g(t)$ correspondientes a un núcleo de memoria de la forma (3.41); para proceder con la derivación deseada solo nos resta encontrar las expresiones de las funciones $\rho(t)$ y $\dot{\rho}(t)$.

Con este objetivo, introducimos las expresiones (3.43) y (3.44) en la ecuación (2.68) que da la transformada de Laplace de $\rho(t)$. De este modo se deduce que

$$\widehat{\rho}(s) = \widehat{G}(s)\widehat{C}(s) = C_\alpha \frac{s^{\alpha-1}}{s^2 + \gamma_\lambda s^\lambda}. \quad (3.45)$$

Reescribiendo esta ecuación como

$$\widehat{\rho}(s) = C_\alpha \frac{s^{\alpha-\lambda-1}}{s^{2-\lambda} + \gamma_\lambda}, \quad (3.46)$$

y usando la relación (3.14), vemos que la función $\widehat{\rho}(s)$ puede ser invertida para dar

$$\rho(t) = C_\alpha t^{2-\alpha} E_{2-\lambda, 3-\alpha}(-(\omega_\lambda t)^{2-\lambda}). \quad (3.47)$$

Derivando respecto del tiempo en esta última ecuación y usando la relación (3.18) se tiene

$$\dot{\rho}(t) = C_\alpha t^{1-\alpha} E_{2-\lambda, 2-\alpha}(-(\omega_\lambda t)^{2-\lambda}). \quad (3.48)$$

Introduciendo en la expresión (2.71) de $\dot{\sigma}_{xx}(t)$ las expresiones de $\rho(t)$ y $G(t)$ dadas por (3.47) y (3.19) respectivamente, encontramos que

$$\dot{\sigma}_{xx}(t) = 2 C_\alpha t^{3-\alpha} E_{2-\lambda, 3-\alpha}(-(\omega_\lambda t)^{2-\lambda}) E_{2-\lambda, 2}(-(\omega_\lambda t)^{2-\lambda}). \quad (3.49)$$

En forma análoga, introduciendo la expresión analítica de $\dot{\rho}(t)$ dada por (3.48) y la función $g(t)$ de (3.20) en la ecuación (2.72) para $\dot{\sigma}_{vv}(t)$ encontramos

$$\dot{\sigma}_{vv}(t) = 2 C_\alpha t^{1-\alpha} E_{2-\lambda, 2-\alpha}(-(\omega_\lambda t)^{2-\lambda}) E_{2-\lambda}(-(\omega_\lambda t)^{2-\lambda}). \quad (3.50)$$

Por lo tanto, de (3.49) y (3.50) vemos que las expresiones exactas para las varianzas $\sigma_{xx}(t)$ y $\sigma_{vv}(t)$ se escriben como

$$\sigma_{xx}(t) = 2C_\alpha \int_0^t dx x^{3-\alpha} E_{2-\lambda, 3-\alpha}(-(\omega_\lambda x)^{2-\lambda}) E_{2-\lambda, 2}(-(\omega_\lambda x)^{2-\lambda}), \quad (3.51)$$

$$\sigma_{vv}(t) = 2C_\alpha \int_0^t dx x^{1-\alpha} E_{2-\lambda, 2-\alpha}(-(\omega_\lambda x)^{2-\lambda}) E_{2-\lambda}(-(\omega_\lambda x)^{2-\lambda}). \quad (3.52)$$

Debido a que estas dos integrales no poseen una expresión analítica cerrada, analizaremos a continuación el comportamiento asintótico de las varianzas a fin de obtener expresiones aproximadas de las mismas. Introduciendo el comportamiento a tiempos largos de la función de Mittag-Leffler dado en (3.23) en las ecuaciones (3.49) y (3.50). Por consiguiente, para $\omega_\lambda t \gg 1$ tenemos

$$\dot{\sigma}_{xx}(t) \approx 2 \frac{C_\alpha}{\omega_\lambda^{2(2-\lambda)}} \frac{t^{2\lambda-\alpha-1}}{\Gamma(\lambda) \Gamma(1+\lambda-\alpha)}, \quad (3.53)$$

y

$$\dot{\sigma}_{vv}(t) \approx 2 \frac{C_\alpha}{\omega_\lambda^{2(2-\lambda)}} \frac{t^{2\lambda-\alpha-3}}{\Gamma(\lambda-1) \Gamma(\lambda-\alpha)}. \quad (3.54)$$

La ecuación (3.54) puede ser integrada formalmente teniendo en cuenta que $-3 < 2\lambda - \alpha - 3 < -1$. De esta forma se obtiene el comportamiento a tiempos largos para la varianza de la velocidad, el cual viene dado por

$$\sigma_{vv}(t) \approx 2 \frac{C_\alpha}{\omega_\lambda^{2(2-\lambda)}} \frac{t^{2\lambda-\alpha-2}}{\Gamma(\lambda-1) \Gamma(\lambda-\alpha) (2\lambda-\alpha-2)}, \quad (3.55)$$

La expresión (3.55) muestra que el comportamiento asintótico de la varianza de la velocidad es del tipo ley de potencias y depende de los exponentes del núcleo de memoria y de la función de correlación del ruido.

Por otra parte, integrando formalmente la ecuación (3.53), se tiene que la varianza de la posición cumple que

$$\sigma_{xx}(t) \approx \frac{2C_\alpha}{\omega_\lambda^{2(2-\lambda)} \Gamma(\lambda) \Gamma(1+\lambda-\alpha)} \int^t t^{2\lambda-\alpha-1} dt, \quad (3.56)$$

donde el límite inferior de la integración es irrelevante para la obtención del comportamiento asintótico.

Teniendo en cuenta que $-2 < 2\lambda - \alpha - 1 < 1$, de la ecuación (3.56) vemos que existen diferentes comportamientos límites de la varianza de la posición dado que la integral involucrada se comporta de tres formas distintas dependiendo de la relación entre los exponentes α y λ .

Si $2\lambda < \alpha$ se tiene que $-2 < 2\lambda - \alpha - 1 < -1$, y por lo tanto la integral converge a un valor finito. En este caso $\sigma_{xx}(t)$ alcanza un valor constante y el proceso $X(t)$ se vuelve estacionario.

Cuando $2\lambda > \alpha$ se cumple que $-1 < 2\lambda - \alpha - 1 < 1$. Por consiguiente, de la integración de la ecuación (3.56) se obtiene que

$$\sigma_{xx}(t) \approx 2 \frac{C_\alpha}{\omega_\lambda^{2(2-\lambda)}} \frac{t^{2\lambda-\alpha}}{\Gamma(\lambda) \Gamma(1+\lambda-\alpha)(2\lambda-\alpha)}. \quad (3.57)$$

Por último, existe un comportamiento intermedio cuando $2\lambda = \alpha$. En este caso, el integrando en la ecuación (3.56) decae como t^{-1} para tiempos largos y la integral diverge en forma logarítmica:

$$\sigma_{xx}(t) \approx 2 \frac{C_\alpha}{\omega_\lambda^{2(2-\lambda)}} \frac{\log t}{\Gamma(\lambda) \Gamma(1-\lambda)}. \quad (3.58)$$

En resumen, el comportamiento asintótico de la varianza de la posición es como sigue:

$$\sigma_{xx}(t) \sim \begin{cases} \text{constante,} & 2\lambda < \alpha, & \text{(estacionario)} \\ \frac{2C_\alpha}{\omega_\lambda^{2(2-\lambda)}} \frac{\log t}{\Gamma(\lambda) \Gamma(1-\lambda)}, & 2\lambda = \alpha, & \text{(logarítmica)} \\ \frac{2C_\alpha}{\omega_\lambda^{2(2-\lambda)}} \frac{t^{2\lambda-\alpha}}{\Gamma(\lambda) \Gamma(1+\lambda-\alpha)(2\lambda-\alpha)}, & 2\lambda > \alpha & \text{(difusión anómala)} \end{cases} \quad (3.59)$$

A partir del tercer caso de la ecuación (3.59) puede verse que cuando $2\lambda - \alpha < 1$ la partícula se comporta en forma subdifusiva, cuando $2\lambda - \alpha = 1$ el comportamiento es de tipo normal, mientras que cuando $2\lambda - \alpha > 1$ el comportamiento es superdifusivo.

En la figura 3.13 se muestra el tipo de comportamiento difusivo en función del exponente λ del núcleo de memoria y del exponente α de la función de correlación del ruido [38]. Cabe señalar que cuando $\lambda = \alpha$, el caso de ruido externo se reduce al de ruido interno estudiado previamente.

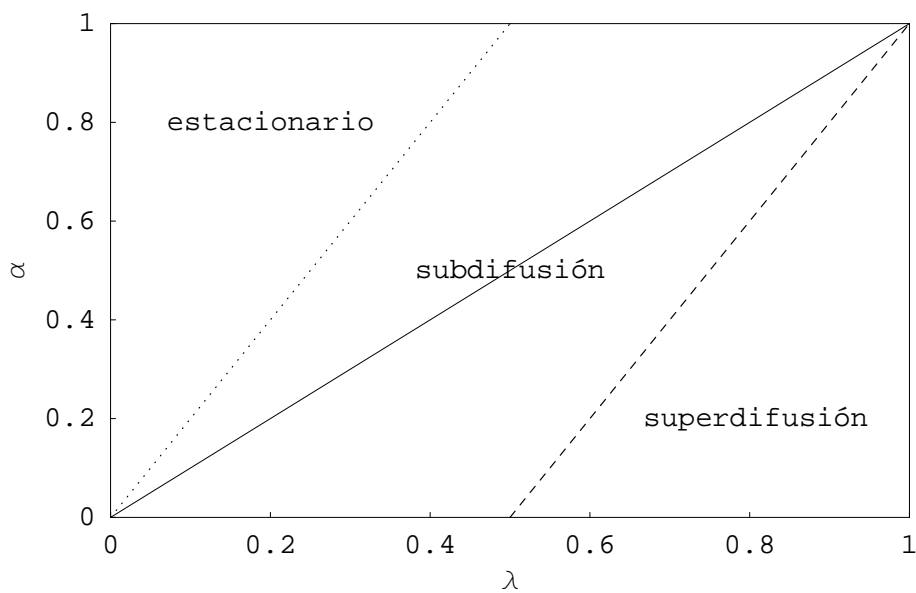


Figura 3.13: Comportamiento asintótico de $\sigma_{xx}(t)$ como una función de los exponentes λ y α para $\gamma(t) \propto t^{-\lambda}$ y $C(t) \propto t^{-\alpha}$. La línea punteada, la línea cortada y la línea sólida representan difusión logarítmica, difusión normal y el caso de ruido interno respectivamente.

Capítulo 4

Difusión anómala de un oscilador armónico

En este capítulo aplicaremos el modelo de entorno complejo introducido en el capítulo anterior al caso de una partícula armónicamente confinada, inmersa en un medio fractal y cuya dinámica disipativa es regida por la ecuación de Langevin generalizada (2.36). En este marco estudiaremos la difusión anómala de la partícula tanto para el caso de ruido interno como externo.

4.1. Oscilador armónico en un medio fractal

A fin de analizar la dinámica de un oscilador armónico en un entorno fractal o complejo, sustituimos la expresión del núcleo de memoria disipativo $\widehat{\gamma}(s)$ dada en (3.11) en la ecuación (2.40). De esta manera vemos que la función integral $I(t)$ definida en (2.41) es la inversión de Laplace de

$$\widehat{I}(s) = \frac{\widehat{G}(s)}{s} = \frac{s^{-1}}{s^2 + \gamma_\lambda s^\lambda + \omega^2}, \quad (4.1)$$

Siguiendo el procedimiento de inversión general dado por Podlubny en la Referencia [77], escribimos $\widehat{I}(s)$ en la siguiente forma

$$\widehat{I}(s) = \frac{s^{-1}}{s^2 + \gamma_\lambda s^\lambda} \frac{1}{1 + \frac{\omega^2}{s^2 + \gamma_\lambda s^\lambda}} = \frac{s^{-1-\lambda}}{s^{2-\lambda} + \gamma_\lambda} \frac{1}{1 + \frac{\omega^2 s^{-\lambda}}{s^{2-\lambda} + \gamma_\lambda}}. \quad (4.2)$$

Tomando en cuenta la identidad

$$\frac{1}{1+z} = \sum_{k=0}^{\infty} (-z)^k, \quad z < 1, \quad (4.3)$$

y asumiendo que $\frac{\omega^2}{s^2 + \gamma_\lambda s^\lambda} < 1$ podemos reescribir la ecuación (4.2) como

$$\widehat{I}(s) = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k (\omega^2)^k \frac{s^{-1-\lambda(k+1)}}{(s^{2-\lambda} + \gamma_\lambda)^{k+1}}. \quad (4.4)$$

La inversión analítica de $\widehat{I}(s)$ puede obtenerse haciendo uso de la siguiente transformada de Laplace

$$\int_0^{\infty} e^{-st} t^{\alpha k + \beta - 1} E_{\alpha, \beta}^{(k)}(-\gamma t^\alpha) dt = \frac{k! s^{\alpha - \beta}}{(s^\alpha + \gamma)^{k+1}}, \quad (4.5)$$

donde $E_{\alpha, \beta}(y)$ es la función de Mittag-Leffler generalizada (3.13) introducida en el capítulo anterior y $E_{\alpha, \beta}^{(k)}(y)$ es la derivada de orden k de la función de Mittag-Leffler dada por

$$E_{\alpha, \beta}^{(k)}(y) = \frac{d^k}{dy^k} E_{\alpha, \beta}(y) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(j+k)! y^j}{j! \Gamma(\alpha(j+k) + \beta)}. \quad (4.6)$$

Utilizando un teorema de expansión general para transformadas de Laplace descrito en la Referencia [80], es posible realizar la inversión término a término de la función $\widehat{I}(s)$ dada en la ecuación (4.4) utilizando la propiedad (4.5). De esta manera, la expresión de la función $I(t)$ puede escribirse como

$$I(t) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} (\omega t)^{2k} t^2 E_{2-\lambda, 3+\lambda k}^{(k)}(-(\omega_\lambda t)^{2-\lambda}), \quad (4.7)$$

donde, al igual que en el caso de la partícula libre, hemos introducido la frecuencia ω_λ definida por la ecuación (3.17).

Por otro lado, las funciones $G(t)$ y $g(t)$ pueden ser calculadas derivando respecto al tiempo la serie presente en la ecuación (4.7) y usando la relación [77]

$$\frac{d}{dt}(t^{\alpha k + \beta - 1} E_{\alpha, \beta}^{(k)}(-\gamma t^\alpha)) = t^{\alpha k + \beta - 2} E_{\alpha, \beta - 1}^{(k)}(-\gamma t^\alpha). \quad (4.8)$$

De este modo obtenemos

$$G(t) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} (\omega t)^{2k} t E_{2-\lambda, 2+\lambda k}^{(k)}(-(\omega_\lambda t)^{2-\lambda}), \quad (4.9)$$

y

$$g(t) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} (\omega t)^{2k} E_{2-\lambda, 1+\lambda k}^{(k)}(-(\omega_\lambda t)^{2-\lambda}). \quad (4.10)$$

Es importante señalar que en el caso de ruido interno, las expresiones exactas (4.7), (4.9) y (4.10) determinan en forma unívoca la evolución temporal para todo tiempo de los valores medios (2.39) y (2.43), de las varianzas (2.49) a (2.51) y de la función de autocorrelación de la velocidad (2.54).

Puede observarse que si se toma el límite $\omega \rightarrow 0$ en las ecuaciones (4.7), (4.9) y (4.10) se encuentra que

$$I(t) = t^2 E_{2-\lambda, 3}(-(\omega_\lambda t)^{2-\lambda}), \quad (4.11)$$

$$G(t) = t E_{2-\lambda, 2}(-(\omega_\lambda t)^{2-\lambda}), \quad (4.12)$$

$$g(t) = E_{2-\lambda}(-(\omega_\lambda t)^{2-\lambda}), \quad (4.13)$$

y de este modo se reobtienen las soluciones correspondientes a la partícula libre dadas en las ecuaciones (3.16), (3.19) y (3.20) derivadas en el capítulo anterior.

A continuación analizaremos el comportamiento de las funciones $I(t)$, $G(t)$ y $g(t)$ a tiempos tales que $\omega_\lambda t \gg 1$. Para ello, introduciendo el comportamiento asintótico de la función de Mittag-Leffler generalizada (3.23) y de su derivada, dado por

$$E_{\alpha, \beta}^{(k)}(-y) \sim \frac{k!}{y^{k+1}} \frac{1}{\Gamma(\beta - \alpha)} \quad y > 0, \quad (4.14)$$

en la ecuación (4.7), se obtiene que

$$\begin{aligned}
 I(t) &\approx \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} (\omega t)^{2k} t^2 k! \frac{(\omega_\lambda t)^{(\lambda-2)(k+1)}}{\Gamma(3 + \lambda k - (2 - \lambda))} \\
 &= \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k (\omega^2)^k t^{2(k+1)} \frac{(\omega_\lambda t)^{-2(k+1)} (\omega_\lambda t)^{\lambda(k+1)}}{\Gamma(\lambda(k+1) + 1)} \\
 &= -\frac{1}{\omega^2} \sum_{k=0}^{\infty} (-\omega^2)^{(k+1)} \frac{((\omega_\lambda)^{-2} (\omega_\lambda t)^\lambda)^{(k+1)}}{\Gamma(\lambda(k+1) + 1)}, \tag{4.15}
 \end{aligned}$$

donde hemos dividido y multiplicado por $-\omega^2$ para obtener la última igualdad. Realizando el cambio de índice $j = k + 1$ en la serie, vemos que la ecuación (4.15) puede ser escrita como

$$\begin{aligned}
 I(t) &\approx -\frac{1}{\omega^2} \sum_{j=1}^{\infty} (-\omega^2)^j \frac{((\omega_\lambda)^{-2} (\omega_\lambda t)^\lambda)^j}{\Gamma(\lambda j + 1)} \\
 &= -\frac{1}{\omega^2} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(-\omega^2 (\omega_\lambda)^{-2} (\omega_\lambda t)^\lambda)^j}{\Gamma(\lambda j + 1)} \\
 &= \frac{1}{\omega^2} \left\{ 1 - \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-\omega^2 (\omega_\lambda)^{-2} (\omega_\lambda t)^\lambda)^j}{\Gamma(\lambda j + 1)} \right\}, \tag{4.16}
 \end{aligned}$$

donde hemos usado que $\Gamma(1) = 1$. Tomando en cuenta la definición de la función de Mittag-Leffler a través de su expansión en serie dada en (3.21), se deduce que para $\omega_\lambda t \gg 1$ el comportamiento de $I(t)$ viene dado por

$$I(t) \approx \frac{1}{\omega^2} \left\{ 1 - E_\lambda \left(- \left(\frac{\omega}{\omega_\lambda} \right)^2 (\omega_\lambda t)^\lambda \right) \right\}. \tag{4.17}$$

Luego, a partir de (2.41) y (2.44) obtenemos

$$G(t) \approx -\frac{1}{\omega^2} \frac{d}{dt} E_\lambda \left(- \left(\frac{\omega}{\omega_\lambda} \right)^2 (\omega_\lambda t)^\lambda \right), \tag{4.18}$$

y

$$g(t) \approx -\frac{1}{\omega^2} \frac{d^2}{d^2 t} E_\lambda \left(- \left(\frac{\omega}{\omega_\lambda} \right)^2 (\omega_\lambda t)^\lambda \right). \tag{4.19}$$

Finalmente, si consideramos que $(\frac{\omega}{\omega_\lambda})^2(\omega_\lambda t)^\lambda \gg 1$, podemos utilizar el comportamiento asintótico de la función de Mittag-Leffler [81]

$$E_\alpha(-y) \sim [y \Gamma(1 - \alpha)]^{-1} \quad y > 0, \quad (4.20)$$

en las ecuaciones (4.17) a (4.19). De modo que para $\lambda \neq 1$ el comportamiento asintótico de las funciones $I(t)$, $G(t)$ y $g(t)$ puede ser escrito como

$$I(t) \approx \frac{1}{\omega^2} - \frac{\omega_\lambda^{2-\lambda}}{\omega^4} \frac{\sin(\lambda \pi)}{\pi} \frac{\Gamma(\lambda)}{t^\lambda}, \quad (4.21)$$

$$G(t) \approx \frac{\omega_\lambda^{2-\lambda}}{\omega^4} \frac{\sin(\lambda \pi)}{\pi} \frac{\Gamma(\lambda + 1)}{t^{\lambda+1}}, \quad (4.22)$$

$$g(t) \approx -\frac{\omega_\lambda^{2-\lambda}}{\omega^4} \frac{\sin(\lambda \pi)}{\pi} \frac{\Gamma(\lambda + 2)}{t^{\lambda+2}}, \quad (4.23)$$

donde se ha usado la identidad [77]

$$\Gamma(\lambda)\Gamma(1 - \lambda) = \frac{\pi}{\sin(\lambda \pi)}, \quad \lambda \neq 0, 1, 2, \dots, \quad (4.24)$$

y la propiedad (A.2) de la función Gamma de Euler.

La sustitución de las expansiones asintóticas (4.21) a (4.23) en las ecuaciones (2.39) y (2.43) permite obtener el comportamiento a tiempos largos de los valores medios del desplazamiento $\langle X(t) \rangle$ y la velocidad $\langle \dot{X}(t) \rangle$, los cuales pueden ser escritos como

$$\langle X(t) \rangle \approx \frac{\omega_\lambda^{2-\lambda}}{\omega^2} \frac{\sin(\lambda \pi)}{\pi} \left\{ x_0 \frac{\Gamma(\lambda)}{t^\lambda} + \frac{v_0}{\omega^2} \frac{\Gamma(\lambda + 1)}{t^{\lambda+1}} \right\}, \quad (4.25)$$

$$\langle \dot{X}(t) \rangle \approx -\frac{\omega_\lambda^{2-\lambda}}{\omega^2} \frac{\sin(\lambda \pi)}{\pi} \left\{ x_0 \frac{\Gamma(\lambda + 1)}{t^{\lambda+1}} + \frac{v_0}{\omega^2} \frac{\Gamma(\lambda + 2)}{t^{\lambda+2}} \right\}. \quad (4.26)$$

Estas ecuaciones muestran que los valores medios de la posición y la velocidad se aproximan a su valor límite nulo mediante una combinación de leyes de potencias.

En las figuras 4.1 a 4.6 se ilustran las funciones de relajación exactas $I(t)$, $G(t)$ y $g(t)$ dadas por (4.7), (4.9) y (4.10) respectivamente, en función del tiempo para

distintos valores de λ en el intervalo $(0,2)$. En particular, como puede observarse de las figuras 4.1 y 4.2, para valores de λ en el intervalo $(0,2)$ la función $I(t)$ presenta oscilaciones y se aproxima a su valor límite $1/\omega^2$ a medida que aumenta el tiempo t . Su convergencia a dicho valor límite se acentúa con el incremento del valor de λ cuando $0 < \lambda < 1$. Asimismo, de la figura 4.1 puede observarse que $I(t)$ siempre se mantiene por debajo de su valor límite $1/\omega^2$ para λ en el intervalo $(0,1)$.

Por otro lado, para $1 < \lambda < 2$ la función $I(t)$ se aproxima más rápidamente a su valor límite a medida que el valor de λ disminuye, como se observa a partir de la atenuación de las oscilaciones de $I(t)$ en la figura 4.2.

Por otra parte, de las figuras 4.3 y 4.4 se observa que la función $G(t)$ converge a su valor cero cuando el tiempo t incrementa, y con el aumento del valor de λ esta convergencia se vuelve más rápida para $0 < \lambda < 1$, y más lenta cuando λ pertenece al intervalo $(1,2)$.

A partir de las figuras 4.5 y 4.6 vemos que la función $g(t)$ presenta oscilaciones que se atenúan con el aumento de λ para el rango $0 < \lambda < 1$; mientras que las mismas incrementan su amplitud en el intervalo $1 < \lambda < 2$. Asimismo, la función $g(t)$ converge a su valor cero con el aumento del tiempo más lentamente a medida que el valor de λ incrementa en el intervalo $(0,1)$, y más lentamente para $1 < \lambda < 2$.

Finalmente, con el propósito de comparar los comportamientos de las funciones de relajación $I(t)$, $G(t)$ y $g(t)$ en el intervalo $0 < \lambda < 1$ y $1 < \lambda < 2$, en las figuras 4.7 a 4.9 hemos graficado dichas funciones, dadas por (4.7), (4.9) y (4.10) respectivamente, en función del tiempo para los valores de $\lambda = 1/2$ y $3/2$. Como se observa de estas figuras, todas las funciones graficadas presentan oscilaciones que se atenúan con el aumento del tiempo t , y la amplitud de dichas oscilaciones para el caso $\lambda = 3/2$ es mayor que cuando $\lambda = 1/2$.

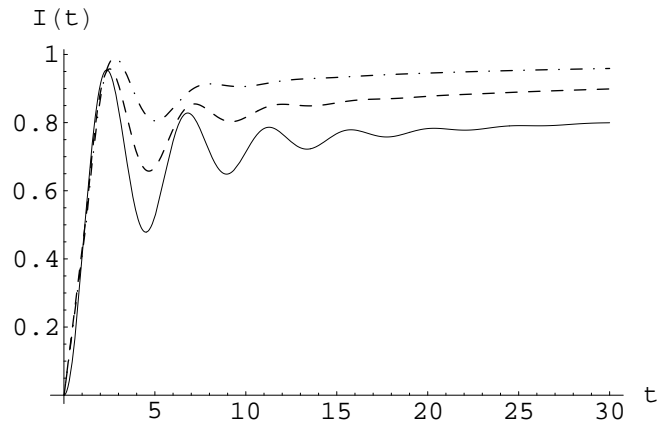


Figura 4.1: Gráfico de $I(t)$ dada por (4.7) como una función del tiempo para $\lambda = 1/3$ (línea sólida), $1/2$ (línea rayada) y $2/3$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\omega = 1$ y $\omega_\lambda = 1$.

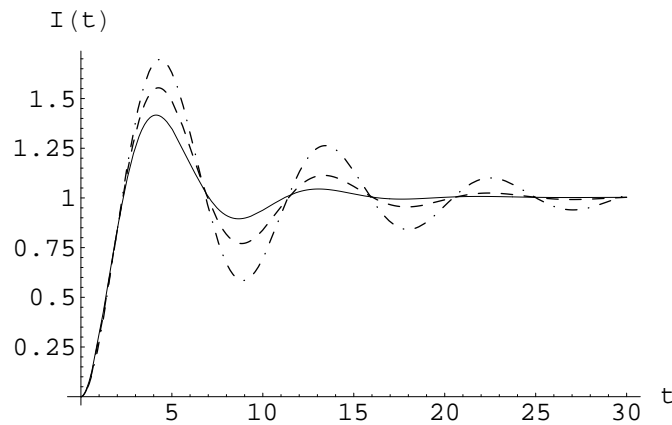


Figura 4.2: Gráfico de $I(t)$ dada por (4.7) como una función del tiempo para $\lambda = 4/3$ (línea sólida), $3/2$ (línea rayada) y $5/3$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\omega = 1$ y $\omega_\lambda = 1$.

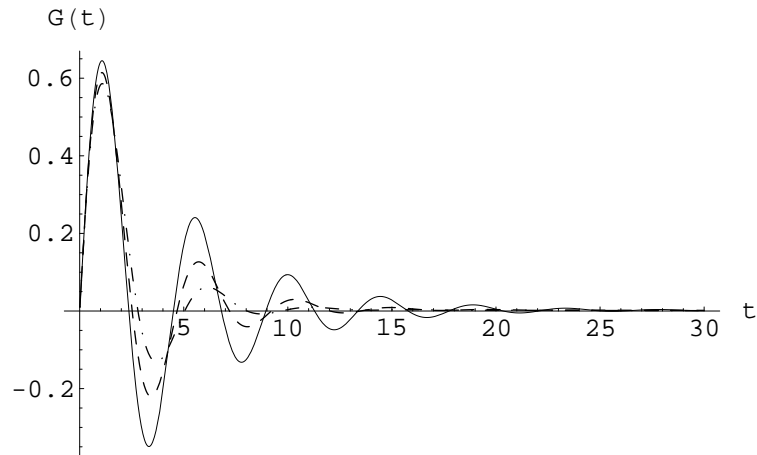


Figura 4.3: Gráfico de $G(t)$ dada por (4.9) como una función del tiempo para $\lambda = 1/3$ (línea sólida), $1/2$ (línea rayada) y $2/3$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\omega = 1$ y $\omega_\lambda = 1$.

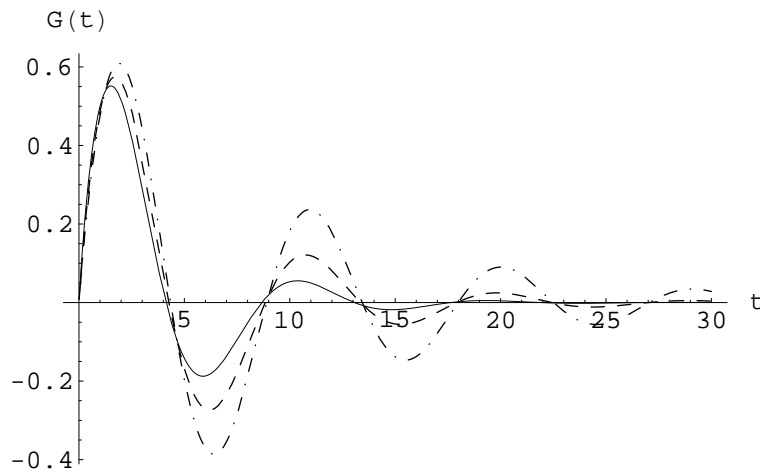


Figura 4.4: Gráfico de $G(t)$ dada por (4.9) como una función del tiempo para $\lambda = 4/3$ (línea sólida), $3/2$ (línea rayada) y $5/3$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\omega = 1$ y $\omega_\lambda = 1$.

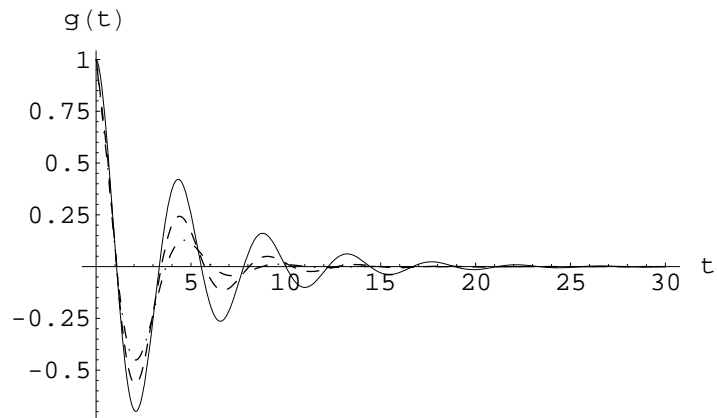


Figura 4.5: Gráfico de $g(t)$ dada por (4.10) como una función del tiempo para $\lambda = 1/3$ (línea sólida), $1/2$ (línea rayada) y $2/3$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\omega = 1$ y $\omega_\lambda = 1$.

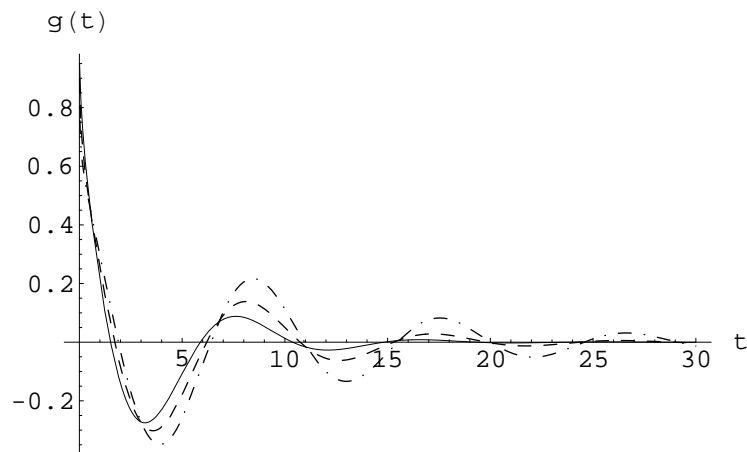


Figura 4.6: Gráfico de $g(t)$ dada por (4.10) como una función del tiempo para $\lambda = 4/3$ (línea sólida), $3/2$ (línea rayada) y $5/3$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\omega = 1$ y $\omega_\lambda = 1$.

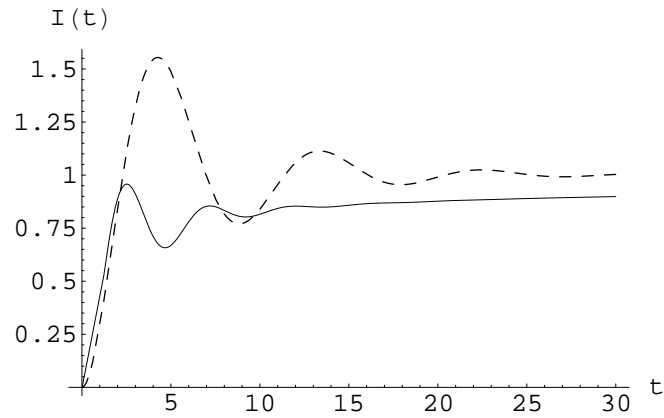


Figura 4.7: Gráfico de $I(t)$ dada por (4.7) como una función del tiempo para $\lambda = 1/2$ (línea sólida) y $3/2$ (línea rayada). En todos los casos hemos puesto $\omega = 1$ y $\omega_\lambda = 1$.

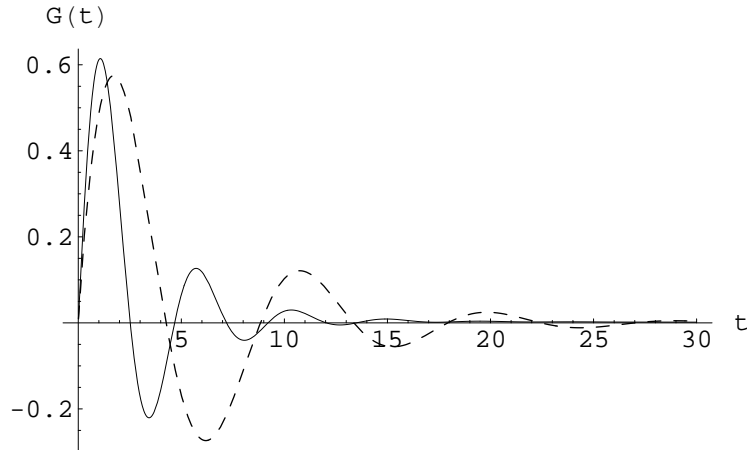


Figura 4.8: Gráfico de $G(t)$ dada por (4.9) como una función del tiempo para $\lambda = 1/2$ (línea sólida) y $3/2$ (línea rayada). En todos los casos hemos puesto $\omega = 1$ y $\omega_\lambda = 1$.

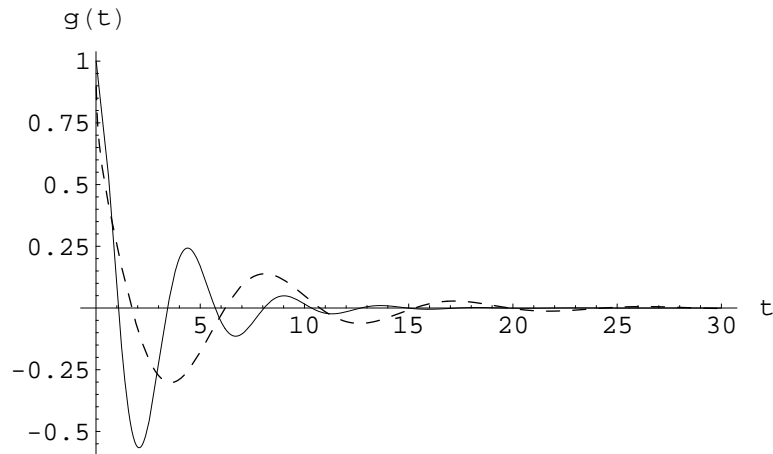


Figura 4.9: Gráfico de $g(t)$ (4.10) como una función del tiempo para $\lambda = 1/2$ (línea sólida) y $3/2$ (línea rayada). En todos los casos hemos puesto $\omega = 1$ y $\omega_\lambda = 1$.

4.1.1. Varianzas y efecto whip-back en el caso de ruido interno

Hemos visto en la sección precedente que para el caso de ruido interno las expresiones analíticas de $I(t)$, $G(t)$ y $g(t)$ determinan completamente la evolución temporal para todo tiempo de las varianzas (2.49) a (2.51) y de la función de autocorrelación de la velocidad (2.54).

En particular, mediante la sustitución de las funciones dadas por (4.7), (4.9) y (4.10) en las ecuaciones (2.49) y (2.50) se obtienen las expresiones analíticas para las varianzas de la posición y la velocidad.

En las figuras 4.10 a 4.13 se muestran los gráficos de las expresiones analíticas obtenidas correspondientes a las varianzas de la posición y la velocidad en función del tiempo para distintos valores de λ en el intervalo $(0, 2)$.

Como puede observarse de las figuras 4.10 y 4.11, para valores de λ en el intervalo $(0, 2)$ la varianza de la posición presenta oscilaciones y tiende a su valor límite

$1/\beta\omega^2$ cuando el tiempo t incrementa. No obstante, notemos que para $0 < \lambda < 1$ la convergencia de $\sigma_{xx}(t)$ a $1/\beta\omega^2$ se hace más pronunciada con el aumento del valor de λ ; mientras que cuando $1 < \lambda < 2$ la función $\sigma_{xx}(t)$ se aproxima más lentamente a su valor límite a medida que el valor de λ aumenta.

Por otra parte, de las figuras 4.12 y 4.13 observamos que para λ en el intervalo $(0,1)$ la varianza de la velocidad presenta oscilaciones que se atenúan con el incremento del valor de λ y por lo tanto tiende a su valor límite $1/\beta$ más rápidamente. Por otro lado para $1 < \lambda < 2$, $\sigma_{vv}(t)$ también se aproxima al valor $1/\beta$ cuando el tiempo aumenta pero su convergencia se hace más rápida con la disminución del valor de λ .

Por último, cabe mencionar que para realizar las gráficas de las figuras 4.10 a 4.13 hemos utilizado la implementación numérica de las funciones de relajación $I(t)$, $G(t)$ y $g(t)$ expuesta en el apéndice B, y las ecuaciones (2.49) y (2.50).

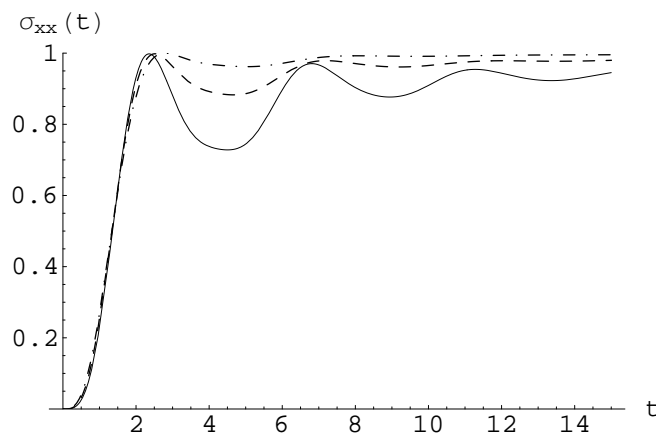


Figura 4.10: Gráfico de $\sigma_{xx}(t)$ Ec.(2.49) (con $I(t)$ y $G(t)$ dadas por (4.7) y (4.9) respectivamente) como una función del tiempo para $\lambda = 1/3$ (línea sólida), $1/2$ (línea rayada) y $2/3$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\omega = 1$, $\omega_\lambda = 1$ y $\beta = 1$.

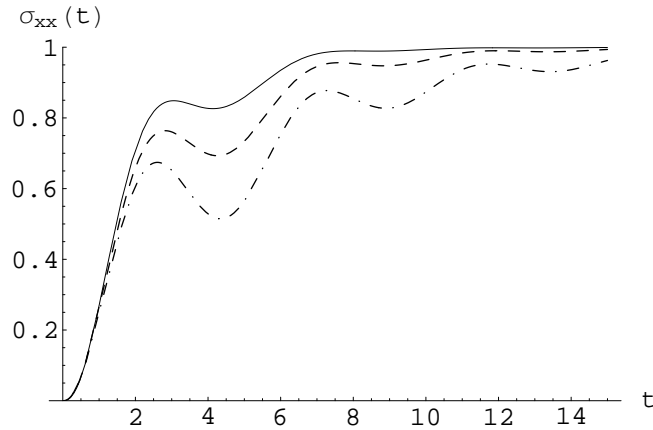


Figura 4.11: Gráfico de $\sigma_{xx}(t)$ Ec.(2.49) (con $I(t)$ y $G(t)$ dadas por (4.7) y (4.9) respectivamente) como una función del tiempo para $\lambda = 4/3$ (línea sólida), $3/2$ (línea rayada) y $5/3$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\omega = 1$, $\omega_\lambda = 1$ y $\beta = 1$.

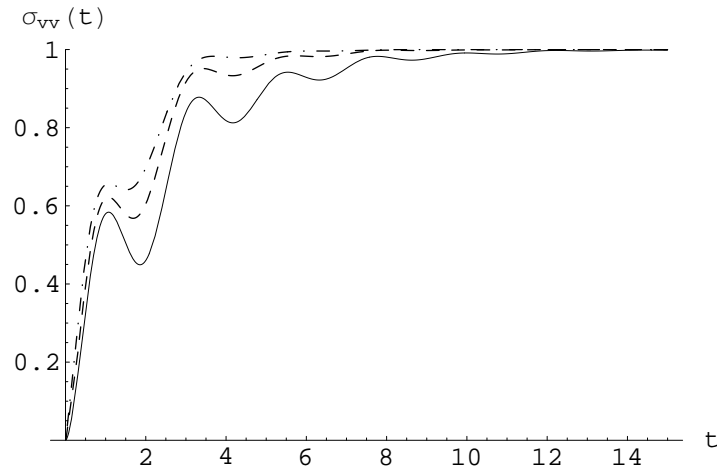


Figura 4.12: Gráfico de $\sigma_{vv}(t)$ Ec.(2.50) (con $G(t)$ y $g(t)$ dadas por (4.9) y (4.10) respectivamente) como una función del tiempo para $\lambda = 1/3$ (línea sólida), $1/2$ (línea rayada) y $2/3$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\omega = 1$, $\omega_\lambda = 1$ y $\beta = 1$.

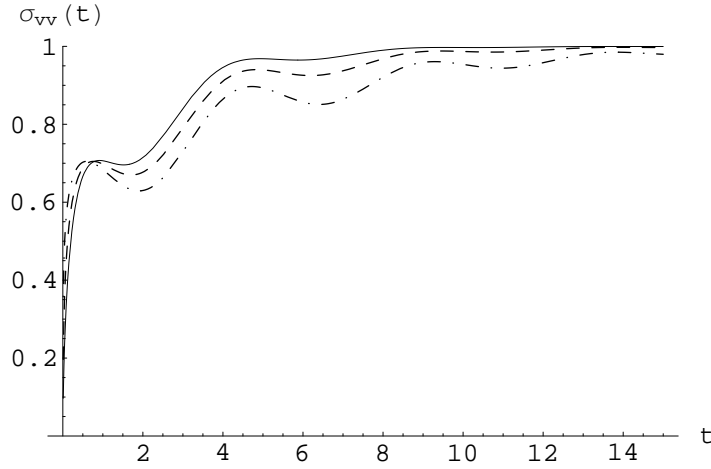


Figura 4.13: Gráfico de $\sigma_{vv}(t)$ Ec.(2.50) (con $G(t)$ y $g(t)$ dadas por (4.9) y (4.10) respectivamente) como una función del tiempo para $\lambda = 4/3$ (línea sólida), $3/2$ (línea rayada) y $5/3$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\omega = 1$, $\omega_\lambda = 1$ y $\beta = 1$.

A continuación analizaremos los comportamientos a tiempos largos de las varianzas y la función de autocorrelación de la velocidad en el caso de ruido interno. En principio, notemos que la sustitución de las expansiones asintóticas (4.21) a (4.23) en las ecuaciones (2.49) a (2.51) da el comportamiento a tiempos largos de las varianzas del proceso. Por consiguiente

$$\beta \sigma_{xx}(t) \approx \frac{1}{\omega^2} - \frac{\omega_\lambda^{2(2-\lambda)}}{\omega^6} \frac{\sin^2(\lambda\pi)}{\pi^2} \frac{\Gamma(\lambda)^2}{t^{2\lambda}}, \quad (4.27)$$

$$\beta \sigma_{vv}(t) \approx 1 - \frac{\omega_\lambda^{2(2-\lambda)}}{\omega^6} \frac{\sin^2(\lambda\pi)}{\pi^2} \frac{\Gamma(\lambda+1)^2}{t^{2(\lambda+1)}}, \quad (4.28)$$

$$\beta \sigma_{xv}(t) \approx \frac{\omega_\lambda^{2(2-\lambda)}}{\omega^6} \frac{\sin^2(\lambda\pi)}{\pi^2} \frac{\Gamma(\lambda)\Gamma(\lambda+1)}{t^{2\lambda+1}}. \quad (4.29)$$

Las varianzas decaen como una ley de potencia en contraste con la tasa de equilibrio exponencial en un régimen difusivo normal. Asimismo, en contraste con la difusión de una partícula libre, la varianza del desplazamiento aproxima a su valor de equilibrio debido al confinamiento potencial.

Finalmente, tomando en cuenta las ecuaciones (2.54) y (4.23), el comportamiento a tiempos largos de la función de autocorrelación de la velocidad viene dado por

$$C_v(t) \approx -\frac{\omega_\lambda^{2-\lambda}}{\omega^4} \frac{\sin(\lambda\pi)}{\pi} \frac{\Gamma(\lambda+2)}{t^{\lambda+2}}. \quad (4.30)$$

A partir de la Ec. (4.30) puede deducirse que la función de autocorrelación de la velocidad decae con una cola de ley de potencias positiva para $1 < \lambda < 2$. Esto implica que la partícula tiene tendencia a moverse en la misma dirección. No obstante, cuando el exponente λ está en el intervalo $0 < \lambda < 1$, la función $C_v(t)$ tiene una cola de decaimiento negativa. Como ya mencionamos en el capítulo 3 esta correlación negativa fue denominada efecto whip-back [21, 50, 79] en el marco de partícula libre. De este modo hemos mostrado que en una partícula confinada armónicamente el efecto whip-back también está presente. Este comportamiento de la función de autocorrelación de la velocidad implica que si la partícula se mueve en la dirección positiva en un determinado instante, tenderá a moverse en la dirección negativa en el próximo instante.

4.1.2. Varianzas en el caso de ruido externo

A continuación analizaremos el comportamiento de las varianzas en el caso de ruido externo. A tal fin utilizaremos las expresiones alternativas para las varianzas obtenidas en el capítulo 2 y el modelo de ruido externo expuesto en el capítulo 3.

Usando las expresiones (3.43) y (3.44) y las ecuaciones (2.40) y (2.68), se tiene que

$$\hat{\rho}(s) = \hat{G}(s)\hat{C}(s) = C_\alpha \frac{s^{\alpha-1}}{s^2 + \gamma_\lambda s^\lambda + \omega^2}. \quad (4.31)$$

Siguiendo el mismo tipo de procedimiento descrito para la derivación de $I(t)$ en

la sección 4.1; reescribimos $\widehat{\rho}(s)$ como

$$\begin{aligned}
\widehat{\rho}(s) &= C_\alpha \frac{s^{\alpha-1}}{s^2 + \gamma_\lambda s^\lambda} \frac{1}{1 + \frac{\omega^2}{s^2 + \gamma_\lambda s^\lambda}} \\
&= C_\alpha \frac{s^{\alpha-\lambda-1}}{s^{2-\lambda} + \gamma_\lambda} \frac{1}{1 + \frac{\omega^2 s^{-\lambda}}{s^{2-\lambda} + \gamma_\lambda}} \\
&= C_\alpha \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k (\omega^2)^k \frac{s^{\alpha-1-\lambda k-\lambda}}{(s^{2-\lambda} + \gamma_\lambda)^{k+1}}, \tag{4.32}
\end{aligned}$$

donde, para obtener la última igualdad, hemos asumido que $\frac{\omega^2}{s^2 + \gamma_\lambda s^\lambda} < 1$, y usado la identidad (4.3).

Utilizando la relación (4.5), la inversión término a término de $\widehat{\rho}(s)$ en la ecuación (4.32) permite escribir que

$$\rho(t) = C_\alpha t^{2-\alpha} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} (\omega t)^{2k} E_{2-\lambda, 3-\alpha+\lambda k}^{(k)}(-(\omega_\lambda t)^{2-\lambda}). \tag{4.33}$$

Derivando esta ecuación respecto del tiempo y usando la relación (4.8), encontramos una expresión analítica para la derivada de $\rho(t)$, la cual se escribe como

$$\dot{\rho}(t) = C_\alpha t^{1-\alpha} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} (\omega t)^{2k} E_{2-\lambda, 2-\alpha+\lambda k}^{(k)}(-(\omega_\lambda t)^{2-\lambda}). \tag{4.34}$$

Es importante señalar que la sustitución de las expresiones para $\rho(t)$, $\dot{\rho}(t)$, $G(t)$ y $g(t)$ dadas por (4.33), (4.34), (4.9) y (4.10) respectivamente; en las ecuaciones (2.71) y (2.72) conducen a expresiones analíticas completas de la evolución de las derivadas de las varianzas de la velocidad y la posición de la partícula Browniana, en el caso de ruido externo. Como una consecuencia de la ecuación (2.71), la evolución temporal completa de la varianza $\sigma_{xv}(t)$ también ha sido obtenida.

A fin de obtener el comportamiento asintótico de la función $\rho(t)$, introducimos el comportamiento a tiempos largos de la función de Mittag-Leffler generalizada y sus derivadas dado por la ecuación (4.14) en la ecuación (4.33). De este modo se

encuentra que

$$\begin{aligned}
 \rho(t) &\approx C_\alpha t^{2-\alpha} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} (\omega t)^{2k} k! \frac{(\omega_\lambda t)^{(\lambda-2)(k+1)}}{\Gamma(3-\alpha+\lambda k-(2-\lambda))} \\
 &= C_\alpha t^{-\alpha} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k (\omega t)^{2k} t^2 \frac{(\omega_\lambda t)^{(\lambda-2)(k+1)}}{\Gamma(1-\alpha+\lambda k+\lambda)} \\
 &= C_\alpha t^{-\alpha} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k (\omega^2)^k t^{2(k+1)} \frac{(\omega_\lambda t)^{-2(k+1)} (\omega_\lambda t)^\lambda}{\Gamma(\lambda(k+1)+1-\alpha)} \\
 &= -\frac{C_\alpha t^{-\alpha}}{\omega^2} \sum_{k=0}^{\infty} (-\omega^2)^{(k+1)} \frac{((\omega_\lambda)^{-2} (\omega_\lambda t)^\lambda)^{(k+1)}}{\Gamma(\lambda(k+1)+1-\alpha)}. \tag{4.35}
 \end{aligned}$$

y haciendo el cambio de índice $j = k + 1$, se tiene que

$$\begin{aligned}
 \rho(t) &\approx -\frac{C_\alpha t^{-\alpha}}{\omega^2} \sum_{j=1}^{\infty} (-\omega^2)^j \frac{((\omega_\lambda)^{-2} (\omega_\lambda t)^\lambda)^j}{\Gamma(\lambda j + 1 - \alpha)} \\
 &= -\frac{C_\alpha t^{-\alpha}}{\omega^2} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(-\omega^2 (\omega_\lambda)^{-2} (\omega_\lambda t)^\lambda)^j}{\Gamma(\lambda j + 1 - \alpha)} \\
 &= -\frac{C_\alpha t^{-\alpha}}{\omega^2} \left\{ \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-\omega^2 (\omega_\lambda)^{-2} (\omega_\lambda t)^\lambda)^j}{\Gamma(\lambda j + 1 - \alpha)} - \frac{1}{\Gamma(1 - \alpha)} \right\}. \tag{4.36}
 \end{aligned}$$

Identificando la serie que aparece en la última igualdad con la expansión correspondiente a la función de Mittag-Leffler generalizada (3.13), vemos que para tiempos largos tales que $\omega_\lambda t \gg 1$ el comportamiento de $\rho(t)$ viene dado por

$$\begin{aligned}
 \rho(t) &\approx -\frac{C_\alpha t^{-\alpha}}{\omega^2} \left\{ E_{\lambda, 1-\alpha} \left(-\left(\frac{\omega}{\omega_\lambda} \right)^2 (\omega_\lambda t)^\lambda \right) - \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \right\} \\
 &= \frac{C_\alpha t^{-\alpha}}{\omega^2 \Gamma(1-\alpha)} - \frac{C_\alpha t^{-\alpha}}{\omega^2} E_{\lambda, 1-\alpha} \left(-\left(\frac{\omega}{\omega_\lambda} \right)^2 (\omega_\lambda t)^\lambda \right). \tag{4.37}
 \end{aligned}$$

Si ahora consideramos que $\left(\frac{\omega}{\omega_\lambda} \right)^2 (\omega_\lambda t)^\lambda \gg 1$ podemos usar el comportamiento

asintótico de la función de Mittag-Leffler generalizada (3.23) para deducir que

$$\begin{aligned}\rho(t) &\approx \frac{C_\alpha}{\omega^2} \frac{t^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)} - \frac{C_\alpha \omega_\lambda^{2-\lambda}}{\omega^2} \frac{t^{-(\alpha+\lambda)}}{\Gamma(1-(\alpha+\lambda))} \\ &\approx \frac{C_\alpha}{\omega^2} \frac{t^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)},\end{aligned}\quad (4.38)$$

y por lo tanto

$$\dot{\rho}(t) \approx -\alpha \frac{C_\alpha}{\omega^2} \frac{t^{-\alpha-1}}{\Gamma(1-\alpha)}.\quad (4.39)$$

Introduciendo las expresiones a tiempos largos de $\rho(t)$, $\dot{\rho}(t)$, $G(t)$ y $g(t)$ dadas por (4.38), (4.39), (4.22) y (4.23) respectivamente; en las ecuaciones (2.71) y (2.72) obtenemos el comportamiento asintótico de las derivadas de las varianzas

$$\dot{\sigma}_{xx}(t) \approx 2\omega_\lambda^{2-\lambda} \frac{\sin(\lambda\pi)\Gamma(\lambda+1)}{\pi\omega^6\Gamma(1-\alpha)} C_\alpha t^{-(\lambda+\alpha+1)},\quad (4.40)$$

$$\dot{\sigma}_{vv}(t) \approx 2\omega_\lambda^{2-\lambda} \frac{\sin(\lambda\pi)\Gamma(\lambda+2)}{\pi\omega^6\Gamma(1-\alpha)} \alpha C_\alpha t^{-(\lambda+\alpha+3)}.\quad (4.41)$$

Como el parámetro $\lambda + \alpha$ es mayor que cero, integrando formalmente estas ecuaciones encontramos, a menos de constantes, los siguientes comportamientos asintóticos para las varianzas

$$\sigma_{xx}(t) \approx -2\omega_\lambda^{2-\lambda} \frac{\sin(\lambda\pi)\Gamma(\lambda+1)}{\pi\omega^6\Gamma(1-\alpha)} \frac{C_\alpha t^{-(\lambda+\alpha)}}{(\lambda+\alpha)},\quad (4.42)$$

$$\sigma_{vv}(t) \approx -2\omega_\lambda^{2-\lambda} \frac{\sin(\lambda\pi)\Gamma(\lambda+2)}{\pi\omega^6\Gamma(1-\alpha)} \frac{\alpha C_\alpha t^{-(\lambda+\alpha+2)}}{(\lambda+\alpha+2)}.\quad (4.43)$$

Estas ecuaciones muestran que las varianzas de la posición y la velocidad convergen a sendas constantes a través de leyes de potencias con exponentes negativos dependientes de los parámetros λ y α , los cuales corresponden a los exponentes del núcleo de memoria y de la función de correlación del ruido respectivamente.

Finalmente, notemos que en el caso de ruido interno se tiene $\alpha = \lambda$ y $\beta C_\lambda = \gamma_\lambda$ y por lo tanto, de las ecuaciones (4.42) y (4.43), se reobtienen las expresiones correspondientes a ruido interno dadas en las ecuaciones (4.27) y (4.28).

4.2. Derivación alternativa de la dinámica asintótica

Si bien en la sección anterior hemos mostrado un modelo analíticamente resoluble y hemos derivado los comportamientos asintóticos de las cantidades de interés a partir de la solución completa para la evolución del sistema, en muchas situaciones es de utilidad conocer el comportamiento asintótico de las variables involucradas sin necesidad de hallar la solución exacta correspondiente al problema. De hecho, en una gran cantidad de problemas físicos es importante disponer de un método alternativo para derivar los comportamientos asintóticos de las magnitudes de interés.

En este capítulo mostramos como este objetivo puede ser llevado a cabo con éxito a través de la utilización de teoremas Tauberianos [52, 82, 83]; los cuales son una colección de resultados que dan aproximadamente el comportamiento asintótico de una función $f(t)$ para $t \rightarrow \infty$ si se conoce el comportamiento de su transformada de laplace $\widehat{f}(s)$ para s pequeño. Esta técnica es de suma importancia en el marco del estudio de la difusión anómala debido a que en este contexto generalmente aparecen magnitudes relevantes en el límite de tiempos extremadamente largos. Asimismo, este método de derivación alternativo de los comportamientos asintóticos también resulta útil a la hora de corroborar los resultados asintóticos obtenidos directamente a partir de la solución exacta.

A continuación, mediante el uso de teoremas Tauberianos derivaremos los comportamientos asintóticos correspondientes a las funciones de relajación del oscilador armónico con un núcleo de memoria y una función de correlación dados por las expresiones (3.41) y (3.42) respectivamente. Mediante el mismo procedimiento también encontraremos la expresión asintótica de la función $\rho(t)$ que aparece en las expresiones generales de las varianzas para el caso de ruido externo. De acuerdo a lo visto anteriormente, solo necesitamos derivar los comportamientos de $I(t)$ y $\rho(t)$, ya que

de estas funciones se derivan $G(t)$, $g(t)$ y demás magnitudes involucradas tales como valores medios, función de autocorrelación de la velocidad y varianzas del proceso. Para este caso, la transformada de Laplace de la función integral $I(t)$ (2.41) viene dada por

$$\widehat{I}(s) = \frac{s^{-1}}{s^2 + \gamma_\lambda s^\lambda + \omega^2}. \quad (4.44)$$

Para derivar el comportamiento asintótico de la función $I(t)$, reescribimos la expresión (4.44) para la transformada de Laplace de $I(t)$ como

$$\widehat{I}(s) = s^{-1} \omega_\lambda^{-2} \frac{1}{\left(\frac{s}{\omega_\lambda}\right)^2 + \left(\frac{s}{\omega_\lambda}\right)^\lambda + \left(\frac{\omega}{\omega_\lambda}\right)^2}. \quad (4.45)$$

Dado que $\lambda < 2$, y suponiendo que $\frac{s}{\omega_\lambda} \ll 1$ podemos escribir

$$\begin{aligned} \widehat{I}(s) &\approx s^{-1} \omega_\lambda^{-2} \frac{1}{\left(\frac{s}{\omega_\lambda}\right)^\lambda + \left(\frac{\omega}{\omega_\lambda}\right)^2} = s^{-1} \frac{1}{\gamma_\lambda s^\lambda + \omega^2} \\ &= s^{-1} \left\{ \frac{1}{\omega^2} + \frac{1}{\gamma_\lambda s^\lambda + \omega^2} - \frac{1}{\omega^2} \right\} \\ &= \frac{1}{\omega^2} \left\{ s^{-1} - \frac{s^{\lambda-1}}{s^\lambda + \frac{\omega^2}{\gamma_\lambda}} \right\}. \end{aligned} \quad (4.46)$$

Tomando en cuenta que la transformada de Laplace de la función de Mittag-Leffler $E_\alpha(-at^\alpha)$ dada en (3.21) es

$$\int_0^\infty e^{-st} E_\alpha(-at^\alpha) dt = \frac{s^{\alpha-1}}{s^\alpha + a}, \quad (4.47)$$

y de acuerdo a teoremas Tauberianos [52], la inversión de Laplace de la ecuación (4.46) permite escribir el comportamiento de $I(t)$ para $\omega_\lambda t \gg 1$ como

$$I(t) \approx \frac{1}{\omega^2} - \frac{1}{\omega^2} E_\lambda \left(- \left(\frac{\omega}{\omega_\lambda} \right)^2 (\omega_\lambda t)^\lambda \right). \quad (4.48)$$

Este resultado coincide con el encontrado en la ecuación (4.17) derivado a partir de la expresión exacta de la función $I(t)$ en la sección correspondiente. Como ya

vimos en dicha sección, a partir de esta expresión pueden derivarse inmediatamente los comportamientos de las funciones $G(t)$ y $g(t)$ para $\omega_\lambda t \gg 1$, y luego usando el comportamiento asintótico de la función de Mittag-Leffler de un parámetro mostrar que las funciones de relajación del oscilador armónico se comportan asintóticamente como leyes de potencias. En vez de derivar este resultado a partir de la ecuación (4.48), alternativamente podemos usar teoremas Tauberianos para arribar directamente a la misma expresión asintótica de $I(t)$. Para mostrar esto escribimos nuevamente la ecuación (4.46) como

$$\begin{aligned}\widehat{I}(s) &= \frac{s^{-1}}{s^2 + \gamma_\lambda s^\lambda + \omega^2} \approx s^{-1} \frac{1}{\gamma_\lambda s^\lambda + \omega^2} \\ &= \frac{s^{-1}}{\omega^2} \frac{1}{1 + \frac{\gamma_\lambda s^\lambda}{\omega^2}}\end{aligned}\tag{4.49}$$

y usando la aproximación

$$\frac{1}{1+z} \approx 1-z \quad ; \quad \text{para } z \ll 1\tag{4.50}$$

podemos deducir que para $s \rightarrow 0$, $\widehat{I}(s)$ se escribe como

$$\begin{aligned}\widehat{I}(s) &\approx \frac{s^{-1}}{\omega^2} \left\{ 1 - \frac{\gamma_\lambda s^\lambda}{\omega^2} \right\} \\ &= \frac{s^{-1}}{\omega^2} - \frac{\gamma_\lambda s^{\lambda-1}}{\omega^4} \quad s \rightarrow 0\end{aligned}\tag{4.51}$$

Nuevamente utilizando teoremas Tauberianos [82], de la inversión de Laplace en esta última ecuación obtenemos que

$$I(t) \approx \frac{1}{\omega^2} - \frac{\gamma_\lambda t^{-\lambda}}{\omega^4 \Gamma(1-\lambda)} \quad t \rightarrow \infty\tag{4.52}$$

lo cual corresponde al comportamiento asintótico límite de $I(t)$ encontrado en la ecuación (4.21) en la sección 4.1.

Por otro lado, a fin de obtener el comportamiento asintótico de $\rho(t)$, escribimos su transformada de Laplace ¹

$$\widehat{\rho}(s) = C_\alpha \frac{s^{\alpha-1}}{s^2 + \gamma_\lambda s^\lambda + \omega^2}, \quad (4.53)$$

la cual puede ser reescrita en términos de la frecuencia ω_λ como

$$\widehat{\rho}(s) = C_\alpha s^{\alpha-1} \omega_\lambda^{-2} \frac{1}{\left(\frac{s}{\omega_\lambda}\right)^2 + \left(\frac{s}{\omega_\lambda}\right)^\lambda + \left(\frac{\omega}{\omega_\lambda}\right)^2}. \quad (4.54)$$

Suponiendo que $\frac{s}{\omega_\lambda} \ll 1$ y dado que $\lambda < 2$, podemos escribir

$$\begin{aligned} \widehat{\rho}(s) &\approx C_\alpha s^{\alpha-1} \omega_\lambda^{-2} \frac{1}{\left(\frac{s}{\omega_\lambda}\right)^\lambda + \left(\frac{\omega}{\omega_\lambda}\right)^2} = s^{\alpha-1} \frac{1}{\gamma_\lambda s^\lambda + \omega^2} \\ &= C_\alpha s^{\alpha-1} \left\{ \frac{1}{\omega^2} + \frac{1}{\gamma_\lambda s^\lambda + \omega^2} - \frac{1}{\omega^2} \right\} \\ &= \frac{C_\alpha}{\omega^2} \left\{ s^{\alpha-1} - \frac{s^{\alpha+\lambda-1}}{s^\lambda + \frac{\omega^2}{\gamma_\lambda}} \right\}. \end{aligned} \quad (4.55)$$

De acuerdo a teoremas Tauberianos [52], la inversión de $\widehat{\rho}(s)$ para $\frac{s}{\omega_\lambda} \ll 1$ en la ecuación (4.55) permite obtener el comportamiento de $\rho(t)$ a tiempos largos tales que $\omega_\lambda t \gg 1$. Por consiguiente, invirtiendo Laplace en la ecuación (4.55) y usando la relación (4.5), encontramos que la función $\rho(t)$ para $\omega_\lambda t \gg 1$ viene dada por

$$\rho(t) \approx \frac{C_\alpha t^{-\alpha}}{\omega^2 \Gamma(1-\alpha)} - \frac{C_\alpha t^{-\alpha}}{\omega^2} E_{\lambda, 1-\alpha} \left(- \left(\frac{\omega}{\omega_\lambda} \right)^2 (\omega_\lambda t)^\lambda \right), \quad (4.56)$$

la cual coincide con la ecuación (4.37) obtenida previamente.

Por último, derivaremos el comportamiento asintótico de $\rho(t)$ en el límite $t \rightarrow \infty$. A partir de la ecuación (4.53) vemos que el comportamiento de la transformada de Laplace de $\rho(t)$ para $s \rightarrow 0$ viene dado por

$$\widehat{\rho}(s) = C_\alpha \frac{s^{\alpha-1}}{s^2 + \gamma_\lambda s^\lambda + \omega^2} \approx C_\alpha \frac{s^{\alpha-1}}{\omega^2} \quad s \rightarrow 0. \quad (4.57)$$

¹ver ecuación (4.31)

y por lo tanto, de acuerdo a teoremas Tauberianos [83], la inversión de Laplace de esta última ecuación nos permite escribir que

$$\rho(t) \approx C_\alpha \frac{t^{-\alpha}}{\omega^2 \Gamma(1-\alpha)} \quad t \rightarrow \infty. \quad (4.58)$$

Notemos que esta expresión asintótica de $\rho(t)$ coincide con la dada en (4.38) obtenida a partir de la expresión analítica completa de la función $\rho(t)$. Asimismo, cabe señalar que los resultados asintóticos para las funciones $I(t)$ y $\rho(t)$ dados en las ecuaciones (4.52) y (4.58) respectivamente, han sido derivados como un caso particular en la Referencia [84]. En dicho trabajo hemos demostrado que, dados un núcleo de memoria y una función de correlación arbitrarios, los comportamientos asintóticos de las funciones $I(t)$ y $\rho(t)$ (así como sus funciones derivadas) pueden ser escritos en términos del comportamiento a tiempos largos del núcleo de memoria y la función de correlación del ruido.

Capítulo 5

Difusión anómala inducida por un ruido Mittag-Leffler correlacionado

En el capítulo 1 hemos mencionado que si la función de correlación de la fuerza fluctuante dada en (1.7) es una función delta de Dirac, el proceso estocástico resultante es Markoviano y su dinámica puede ser obtenida en forma directa [16]. No obstante, a efectos de describir la dinámica no markoviana de un proceso con difusión anómala deben tomarse en cuenta los efectos de memoria a través de una cola de tiempos largos en el ruido. En particular, como mencionamos en el capítulo 3, para modelar procesos de difusión anómala usualmente se emplea una función de correlación del tipo ley potencias [20, 39, 50, 51, 54].

Sin embargo, pueden encontrarse en la literatura otros modelos desarrollados con el propósito de obtener una función de correlación con valor finito en $t = 0$. Un ejemplo de estos modelos es la denominada la ley de potencias asintótica [85, 86, 87], definida como

$$C(t) = C_0 \frac{1}{1 + (t/\tau_0)^\alpha} \quad (5.1)$$

donde $\alpha < 1$. Es fácil ver que en este caso

$$C(t) \sim t^{-\alpha}. \quad (5.2)$$

para tiempos $(t/\tau_0) \gg 1$.

En este capítulo introduciremos una nueva función de correlación temporal del ruido que permite modelar entornos complejos o fractales de una forma más general y analizaremos sus propiedades.

5.1. Ruido Mittag-Leffler correlacionado

A continuación analizaremos las propiedades de la función de correlación temporal del ruido definida como [88]

$$C(t) = \frac{C_\lambda}{\tau^\lambda} E_\lambda(-(|t|/\tau)^\lambda), \quad (5.3)$$

donde la función $E_\lambda(y)$ denota la función de Mittag-Leffler [76] definida a través de la serie dada en (3.21). El parámetro τ actúa como un tiempo de memoria característico mientras que C_λ es un coeficiente de proporcionalidad positivo dependiente del exponente λ e independiente del tiempo. El exponente λ puede ser tomado en el intervalo $0 < \lambda < 2$, el cual es determinado por el mecanismo dinámico del proceso físico considerado.

En lo que sigue solo trataremos con tiempos $t \geq 0$ de modo que omitiremos el modulo en el argumento de las funciones por conveniencia notacional.

Para $\lambda = 1$, la función de Mittag-Leffler se reduce a una función exponencial y por lo tanto la función de correlación (5.3) toma la forma

$$C(t) = \frac{C_1}{\tau} e^{-t/\tau}, \quad (5.4)$$

la cual describe un proceso de Ornstein-Uhlenbeck estándar [16].

Tomando el límite $\tau \rightarrow 0$ en la ecuación (5.4) y usando la representación límite de la delta de Dirac [89] encontramos que

$$C(t) = C_1 \delta(t), \quad (5.5)$$

lo cual corresponde al caso de ruido blanco, característico del movimiento Browniano estándar [16].

Asimismo, para $\lambda \neq 1$ y tomando el límite $\tau \rightarrow 0$, la función de correlación propuesta (5.3) reproduce una función de correlación del tipo ley de potencias

$$C(t) = C_\lambda \frac{t^{-\lambda}}{\Gamma(1-\lambda)}, \quad (5.6)$$

la cual ha sido obtenida introduciendo en la expresión (5.3) el comportamiento asintótico de la función de Mittag- Leffler dado por la ecuación (4.20).

Por otro lado, para $\tau \neq 0$, y a partir de los comportamientos asintóticos de la función de Mittag-Leffler [81]

$$E_\lambda(-y) \sim \begin{cases} \frac{y^{-1}}{\Gamma(1-\lambda)} & y \rightarrow \infty, \\ \exp(-y/\Gamma(1+\lambda)) & y \rightarrow 0, \end{cases} \quad (5.7)$$

puede verse que la función de correlación (5.3) se comporta como una exponencial extendida para tiempos cortos y como una ley de potencias inversa en el régimen de tiempos largos; esto es

$$C(t) \approx \begin{cases} C_\lambda \frac{t^{-\lambda}}{\Gamma(1-\lambda)} & t \gg \tau, \\ \frac{C_\lambda}{\tau^\lambda} \exp(-(t/\tau)^\lambda/\Gamma(1+\lambda)) & t \ll \tau. \end{cases} \quad (5.8)$$

Dado que para $t = 0$ la función de Mittag-Leffler (3.21) toma el valor uno, de acuerdo a (5.3) encontramos que

$$C(0) = \frac{C_\lambda}{\tau^\lambda}. \quad (5.9)$$

Es decir que para $\tau \neq 0$ la función de correlación propuesta tiene un valor finito en $t = 0$; y por consiguiente podemos definir la función $C_\lambda(t)$ como

$$C_\lambda(t) = \frac{C(t)}{C(0)} = E_\lambda(-(t/\tau)^\lambda). \quad (5.10)$$

Sin pérdida de generalidad y para mayor claridad, de aquí hasta el final de esta sección utilizaremos $\tau = 1$.

En las figuras 5.1 y 5.2 se muestran los gráficos de la función de correlación dada en la ecuación (5.10) para distintos valores del parámetro λ en el intervalo $(0,2)$, los cuales fueron realizados con un código desarrollado con el programa `Mathematica 5.1` (ver apéndice B). Como puede observarse de dichas figuras, en el intervalo $0 < \lambda < 1$ la función de correlación decae más rápidamente a medida que aumenta el valor de λ . Por otro lado, en el intervalo $1 < \lambda < 2$ la función $C_\lambda(t)$ tiende a su valor límite cero más lentamente cuando el valor de λ se incrementa. Asimismo, notemos que para $0 < \lambda < 1$ la función $C_\lambda(t)$ no presenta oscilaciones, mientras que las mismas sí aparecen en la zona correspondiente al intervalo $1 < \lambda < 2$. Este comportamiento no se debe a la elección de los parámetros para los cuales se realizaron los gráficos, sino que tiene su origen en una característica de la función de Mittag-Leffler $E_\lambda(-t^\lambda)$ que explicaremos a continuación.

Se ha demostrado que la función $E_\lambda(-t^\lambda)$ exhibe diferentes comportamientos dependiendo del valor de λ [81, 90, 91]. Si $0 < \lambda < 1$, $E_\lambda(-t^\lambda)$ es una función completamente monótona y tiende a cero desde arriba cuando t tiende a infinito. Por otra parte, si $1 < \lambda < 2$, la función $E_\lambda(-t^\lambda)$ puede ser descompuesta en una función completamente monótona la cual tiende a cero desde abajo cuando t tiende a infinito más una contribución oscilatoria con una amplitud exponencialmente decreciente. Más precisamente, puede mostrarse que la función $E_\lambda(-t^\lambda) \equiv C_\lambda(t)$ puede ser escrita como la suma de dos funciones de acuerdo a [81, 90, 91]

$$C_\lambda(t) = f_\lambda(t) + g_\lambda(t), \quad (5.11)$$

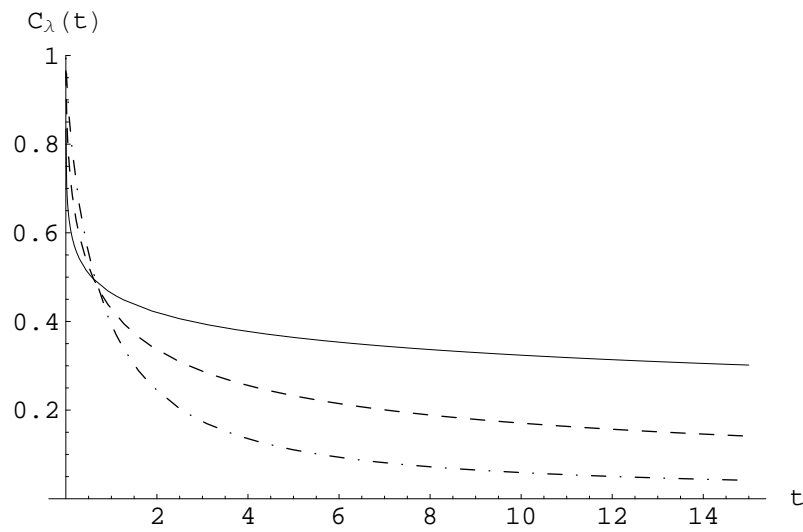


Figura 5.1: Función de correlación $C_\lambda(t)$ Ec.(5.10) en función del tiempo para $\lambda = 0,25$ (línea sólida), $0,5$ (línea rayada) y $0,75$ (línea rayada y punteada).

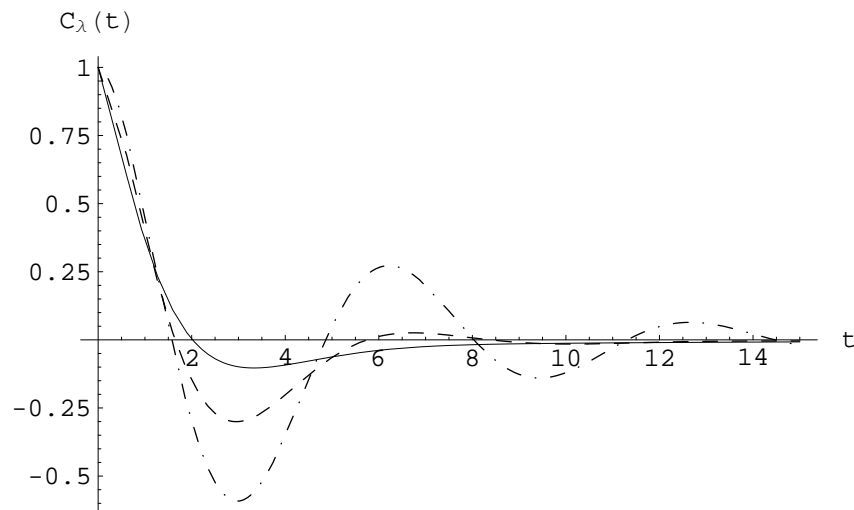


Figura 5.2: Función de correlación $C_\lambda(t)$ Ec.(5.10) en función del tiempo para $\lambda = 1,25$ (línea sólida), $1,5$ (línea rayada) y $1,75$ (línea rayada y punteada).

donde $f_\lambda(t)$ es una función completamente monótona, la cual tiende a cero para t tendiendo a infinito de acuerdo a la siguiente forma asintótica

$$f_\lambda(t) \sim \frac{t^{-\lambda}}{\Gamma(1-\lambda)} \quad t \rightarrow \infty. \quad (5.12)$$

Esta función puede ser expresada como

$$f_\lambda(t) = \int_0^\infty e^{-rt} K_\lambda(r) dr, \quad (5.13)$$

donde

$$K_\lambda(r) = \frac{1}{\pi} \frac{r^{\lambda-1} \sin(\lambda\pi)}{r^{2\lambda} + 2r^\lambda \cos(\lambda\pi) + 1} \quad (5.14)$$

es una función positiva para todo $r > 0$ si $0 < \lambda < 1$, y negativa para todo $r > 0$ si $1 < \lambda < 2$ [81, 90, 91].

Por otra parte, $g_\lambda(t)$ es una función que también decae a cero, pero tiene carácter oscilatorio con una amplitud exponencialmente decreciente, y viene dada por la siguiente expresión

$$g_\lambda(t) = \begin{cases} 0 & 0 < \lambda < 1, \\ \frac{2}{\lambda} e^{t \cos(\pi/\lambda)} \cos[t \sin(\pi/\lambda)] & 1 < \lambda < 2. \end{cases} \quad (5.15)$$

En las figuras 5.3 a 5.5 hemos graficado la función de correlación $C_\lambda(t)$ para distintos valores de λ en el intervalo $1 < \lambda < 2$ junto con sus componentes $f_\lambda(t)$ y $g_\lambda(t)$. Como se observa de dichas figuras, el decaimiento algebraico de $C_\lambda(t)$ puede ser reconocido y comparado con las dos contribuciones provistas por $f_\lambda(t)$ (comportamiento monótono) y $g_\lambda(t)$ (oscilaciones amortiguadas exponencialmente).

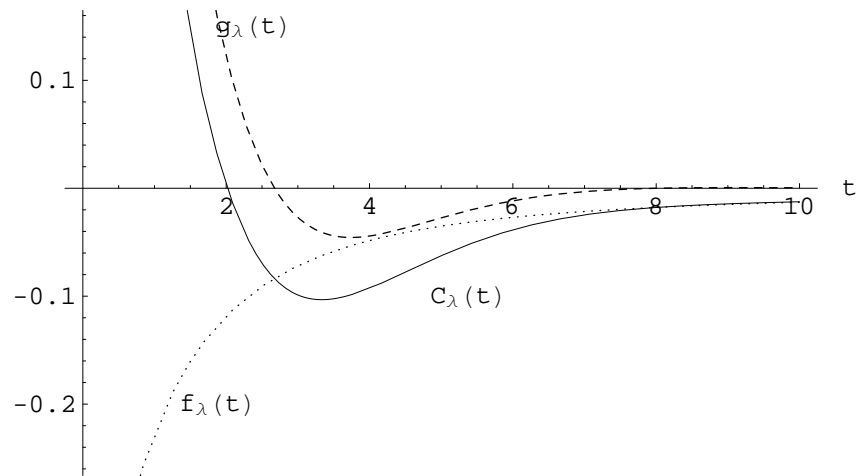


Figura 5.3: Función de correlación $C_\lambda(t)$ Ec.(5.11) (línea sólida), $g_\lambda(t)$ Ec.(5.15) (línea rayada) y $f_\lambda(t)$ Ec.(5.13) (línea punteada) en función del tiempo para $\lambda = 1,25$.

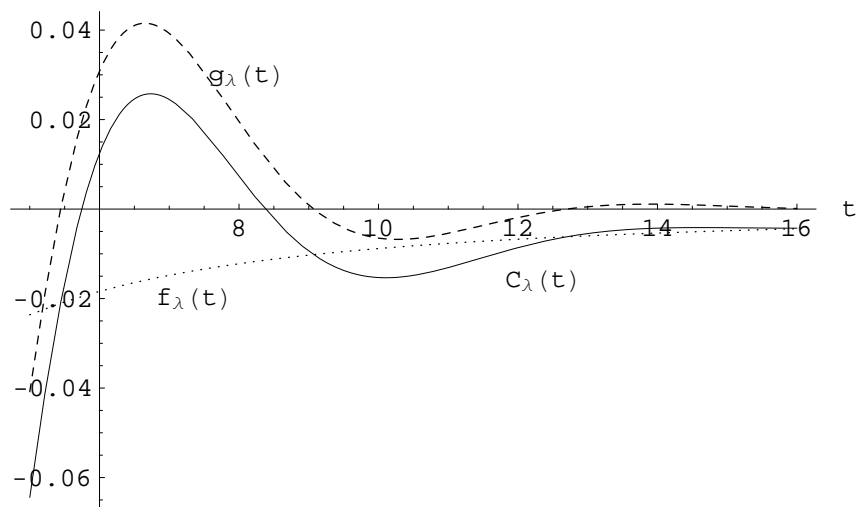


Figura 5.4: Función de correlación $C_\lambda(t)$ Ec.(5.11) (línea sólida), $g_\lambda(t)$ Ec.(5.15) (línea rayada) y $f_\lambda(t)$ Ec.(5.13) (línea punteada) en función del tiempo para $\lambda = 1,50$.

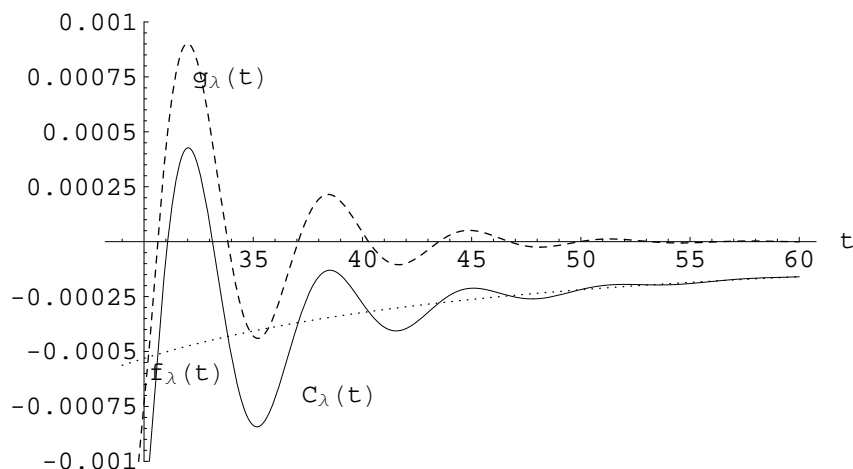


Figura 5.5: Función de correlación $C_\lambda(t)$ Ec.(5.11) (línea sólida), $g_\lambda(t)$ Ec.(5.15) (línea rayada) y $f_\lambda(t)$ Ec.(5.13) (línea punteada) en función del tiempo para $\lambda = 1,75$.

5.2. Expresiones analíticas de las funciones de relajación

A continuación, obtendremos expresiones analíticas de las funciones $I(t)$, $G(t)$ y $g(t)$ para el caso de una partícula libre cuya dinámica es regida por la ecuación de Langevin generalizada (2.1), asumiendo que la función de correlación es de la forma (5.3) con $\lambda \neq 1$. A partir de la expresión (1.7) y la relación de fluctuación-disipación (1.8) deducimos que el núcleo de memoria $\gamma(t)$ puede ser escrito como

$$\gamma(t) = \frac{\gamma_\lambda}{\tau^\lambda} E_\lambda(-(t/\tau)^\lambda), \quad (5.16)$$

donde $\gamma_\lambda = C_\lambda/k_B T$. Por consiguiente, su transformada de Laplace tiene la siguiente expresión [81]

$$\hat{\gamma}(s) = \frac{\gamma_\lambda s^{\lambda-1}}{1 + s^\lambda \tau^\lambda}. \quad (5.17)$$

Sustituyendo la expresión de $\widehat{\gamma}(s)$ dada por (5.17) en la ecuación (2.8), vemos que la función integral $I(t)$ definida en (2.31) es la inversión de Laplace de

$$\begin{aligned}\widehat{I}(s) &= \frac{\widehat{G}(s)}{s} = \frac{s^{-1}}{s^2 + \frac{\gamma_\lambda s^\lambda}{1+s^\lambda \tau^\lambda}} = \frac{s^{-1}(1+s^\lambda \tau^\lambda)}{s^2 + s^{2+\lambda} \tau^\lambda + \gamma_\lambda s^\lambda} \\ &= \frac{s^{-\lambda-1}(1+s^\lambda \tau^\lambda)}{s^{2-\lambda} + s^2 \tau^\lambda + \gamma_\lambda} = \frac{s^{-\lambda-1} + s^{-1} \tau^\lambda}{s^2 \tau^\lambda + s^{2-\lambda} + \gamma_\lambda}.\end{aligned}\quad (5.18)$$

Por lo tanto, $\widehat{I}(s)$ puede ser escrita como la suma de dos contribuciones

$$\widehat{I}(s) = \widehat{I}_0(s) + \widehat{I}_1(s), \quad (5.19)$$

donde

$$\widehat{I}_0(s) = \frac{s^{-1} \tau^\lambda}{\tau^\lambda s^2 + s^{2-\lambda} + \gamma_\lambda}, \quad (5.20)$$

$$\widehat{I}_1(s) = \tau^{-\lambda} s^{-\lambda} \widehat{I}_0(s). \quad (5.21)$$

La inversión de Laplace de $\widehat{I}_0(s)$ puede ser llevada a cabo mediante un procedimiento similar al descrito para la inversión de la función $\widehat{I}(s)$ dada en la ecuación (4.1). De la misma manera, la inversión de Laplace de $\widehat{I}_1(s)$ puede ser realizada en forma análoga al caso de la función $\widehat{\rho}(s)$ dada en la ecuación (4.31).

De este modo, se deduce que

$$I_0(t) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} \left(\frac{\gamma_\lambda}{\tau^\lambda}\right)^k t^{2(k+1)} E_{\lambda, 3+(2-\lambda)k}^{(k)}(-t/\tau)^\lambda, \quad (5.22)$$

$$I_1(t) = (t/\tau)^\lambda \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} \left(\frac{\gamma_\lambda}{\tau^\lambda}\right)^k t^{2(k+1)} E_{\lambda, 3+\lambda+(2-\lambda)k}^{(k)}(-t/\tau)^\lambda, \quad (5.23)$$

donde $E_{\alpha, \beta}(y)$ es la función de Mittag-Leffler generalizada [76] definida por la expansión en series (3.13) y $E_{\alpha, \beta}^{(k)}(y)$ es la derivada de la función de Mittag-Leffler dada por la ecuación (4.6).

Por consiguiente, la función $I(t)$ se escribe como

$$I(t) = I_0(t) + I_1(t), \quad (5.24)$$

con $I_0(t)$ e $I_1(t)$ dados por (5.22) y (5.23) respectivamente.

Las funciones $G(t)$ y $g(t)$ pueden ser calculadas derivando respecto al tiempo las series en las ecuaciones (5.22) a (5.23), y usando la relación (4.8).

Por lo tanto

$$G(t) = G_0(t) + G_1(t), \quad (5.25)$$

donde

$$G_0(t) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} \left(\frac{\gamma\lambda}{\tau^\lambda}\right)^k t^{2k+1} E_{\lambda, 2+(2-\lambda)k}^{(k)}(-t/\tau)^\lambda, \quad (5.26)$$

$$G_1(t) = (t/\tau)^\lambda \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} \left(\frac{\gamma\lambda}{\tau^\lambda}\right)^k t^{2k+1} E_{\lambda, 2+\lambda+(2-\lambda)k}^{(k)}(-t/\tau)^\lambda, \quad (5.27)$$

y

$$g(t) = g_0(t) + g_1(t), \quad (5.28)$$

donde

$$g_0(t) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} \left(\frac{\gamma\lambda}{\tau^\lambda}\right)^k t^{2k} E_{\lambda, 1+(2-\lambda)k}^{(k)}(-t/\tau)^\lambda, \quad (5.29)$$

$$g_1(t) = (t/\tau)^\lambda \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} \left(\frac{\gamma\lambda}{\tau^\lambda}\right)^k t^{2k} E_{\lambda, 1+\lambda+(2-\lambda)k}^{(k)}(-t/\tau)^\lambda. \quad (5.30)$$

Como puede observarse, en esta situación las expresiones para $I(t)$, $G(t)$ y $g(t)$ son mas complejas que las correspondientes al caso de una correlación del tipo ley de potencias pura (5.6). Sin embargo, de acuerdo a (5.20) y (5.21) puede verificarse que

en el límite $\tau \rightarrow 0$ las mismas se reducen a las expresiones de $I(t)$, $G(t)$ y $g(t)$ dadas en las ecuaciones (3.16), (3.19) y (3.20) respectivamente.

Las expresiones analíticas (5.24), (5.25) y (5.28) constituyen los principales resultados de este capítulo. Los mismos determinan completamente la evolución temporal de los valores medios (2.11) y (2.13), así como también las varianzas (2.28) a (2.30) en el caso de ruido interno; para la difusión anómala de una partícula libre gobernada por una ecuación de Langevin generalizada con un ruido Mittag-Leffler correlacionado.

5.3. Comportamiento asintótico de las funciones de relajación

A continuación analizaremos el comportamiento de las funciones de relajación $I(t)$, $G(t)$ y $g(t)$ a tiempos mayores que el tiempo característico τ del ruido. Esto puede ser realizado introduciendo los comportamientos asintóticos de la función de Mittag-Leffler generalizada y de sus derivadas dados por (4.14) en las ecuaciones (5.22) y (5.23). Después de algo de álgebra, deducimos que para $t \gg \tau$ la función $I(t)$ de (5.24) puede ser expresada como

$$I(t) \approx t^2 E_{2-\lambda,3}(-(\omega_\lambda t)^{2-\lambda}) + \frac{\tau^\lambda}{\gamma_\lambda} \{1 - E_{2-\lambda}(-(\omega_\lambda t)^{2-\lambda})\}, \quad (5.31)$$

donde $(\omega_\lambda)^{2-\lambda} = \gamma_\lambda$. Derivando esta última ecuación y usando la relación (4.8), encontramos que las expresiones asintóticas para las funciones $G(t)$ y $g(t)$ son dadas por

$$G(t) \approx t E_{2-\lambda,2}(-(\omega_\lambda t)^{2-\lambda}) - \frac{\tau^\lambda}{\gamma_\lambda} \frac{d}{dt} E_{2-\lambda}(-(\omega_\lambda t)^{2-\lambda}), \quad (5.32)$$

$$g(t) \approx E_{2-\lambda}(-(\omega_\lambda t)^{2-\lambda}) - \frac{\tau^\lambda}{\gamma_\lambda} \frac{d^2}{d^2 t} E_{2-\lambda}(-(\omega_\lambda t)^{2-\lambda}). \quad (5.33)$$

Es importante puntualizar que la expansión usada para obtener las ecuaciones (5.31) a (5.33) introduce naturalmente el tiempo característico ω_λ^{-1} . Notemos que

los primeros tres términos del lado derecho de las ecuaciones (5.31) a (5.33), los cuales provienen de $I_1(t)$, $G_1(t)$ y $g_1(t)$ respectivamente, corresponden a las expresiones exactas para las funciones de relajación obtenidas en el caso de una función de correlación del tipo ley de potencia pura [20, 39, 51, 54, 75]. Estas expresiones han sido derivadas en el capítulo 3, y corresponden a las ecuaciones (3.16), (3.19) y (3.20). Por otra parte, los otros tres términos provienen de las funciones $I_0(t)$, $G_0(t)$ y $g_0(t)$ respectivamente, y corresponden a las correcciones debidas a la presencia del tiempo característico τ .

Ahora consideraremos la evolución del segundo momento de la posición dado por (2.34) en el intervalo de tiempos intermedios $\tau \ll t \lesssim \omega_\lambda^{-1}$. Sin pérdida de generalidad, suponemos que $x_0 = 0$ y la condición de equilibrio térmico $v_0^2 = k_B T$. En este caso, a partir de la ecuación (2.34) obtenemos

$$\langle X^2(t) \rangle = 2k_B T I(t). \quad (5.34)$$

Luego, el comportamiento difusivo se halla completamente determinado por el comportamiento temporal de la función de relajación $I(t)$. Insertando en la ecuación (5.34) la expresión para la función $I(t)$ dada por (5.31), encontramos que para tiempos $t \gg \tau$

$$\begin{aligned} \langle X^2(t) \rangle &\approx 2k_B T t^2 E_{2-\lambda,3}(-(\omega_\lambda t)^{2-\lambda}) \\ &+ 2k_B T \frac{\tau^\lambda}{\gamma_\lambda} \{1 - E_{2-\lambda}(-(\omega_\lambda t)^{2-\lambda})\}, \end{aligned} \quad (5.35)$$

En esta situación, el coeficiente de difusión dependiente del tiempo, definido por [39]

$$D(t) = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \langle X^2(t) \rangle, \quad (5.36)$$

puede ser escrito como

$$\begin{aligned}
 D(t) &\approx k_B T t E_{2-\lambda,2}(-(\omega_\lambda t)^{2-\lambda}) \\
 &- k_B T \frac{\tau^\lambda}{\gamma_\lambda} \frac{d}{dt} E_{2-\lambda}(-(\omega_\lambda t)^{2-\lambda}). \quad (5.37)
 \end{aligned}$$

Cabe señalar que en el intervalo de tiempos intermedios ($\tau \ll t \lesssim \omega_\lambda^{-1}$), el coeficiente de difusión exhibe un término adicional en relación a la expresión dada en Referencia [39] para una función de correlación del tipo ley de potencias pura.

A continuación analizaremos el comportamiento de las funciones de relajación a tiempos mucho más grandes que el tiempo característico ω_λ^{-1} . Tomando en cuenta que $E_\alpha(y) = E_{\alpha,1}(y)$ y utilizando el comportamiento asintótico de la función de Mittag-Leffler generalizada (3.23) en las ecuaciones (5.31) a (5.33), se obtiene que para $\omega_\lambda t \gg 1$ se cumple que

$$I(t) \approx \frac{1}{\gamma_\lambda \Gamma(\lambda + 1)} t^\lambda, \quad (5.38)$$

$$G(t) \approx \frac{t^{\lambda-1}}{\gamma_\lambda \Gamma(\lambda)}, \quad (5.39)$$

$$g(t) \approx \frac{t^{(\lambda-2)}}{\gamma_\lambda \Gamma(\lambda - 1)}. \quad (5.40)$$

Introduciendo estos comportamientos asintóticos en las ecuaciones (2.28) a (2.30), puede observarse que las expresiones resultantes corresponden a las varianzas asintóticas obtenidas con la función de correlación (5.6), previamente derivadas en el capítulo 3. En particular, insertando la expresión (5.38) en la ecuación (5.34) deducimos que para $\omega_\lambda t \gg 1$ el segundo momento de la posición se escribe como

$$\langle X^2(t) \rangle \approx k_B T \frac{2}{\gamma_\lambda \Gamma(\lambda + 1)} t^\lambda, \quad (5.41)$$

Por lo tanto, de acuerdo a (5.36) el coeficiente de difusión viene dado por

$$D(t) \approx k_B T \frac{1}{\gamma_\lambda \Gamma(\lambda)} t^{\lambda-1}, \quad (5.42)$$

lo cual muestra que para $\omega_\lambda t \gg 1$, el movimiento de la partícula es subdifusivo en el intervalo $0 < \lambda < 1$ y superdifusivo para $1 < \lambda < 2$.

Estos resultados están en concordancia con los obtenidos en la Referencia [64], donde se ha demostrado que para cualquier núcleo de memoria con una cola de decaimiento del tipo $t^{-\lambda}$ para tiempos largos, el coeficiente de difusión se comporta como $t^{\lambda-1}$ cuando $t \rightarrow \infty$.

5.4. Origen microscópico del ruido Mittag-Leffler correlacionado

Finalmente, discutiremos a continuación algunas cuestiones vinculadas al origen microscópico del ruido propuesto. Con este propósito en mente, supondremos que la fuerza aleatoria $F(t)$ tiene su origen en un baño térmico compuesto de osciladores armónicos. En esta situación, el núcleo de memoria disipativo es usualmente descrito en el límite continuo por la densidad espectral del reservorio $J(\omega)$ [58]

$$\gamma(t) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{J(\omega)}{\omega} \cos(\omega t) d\omega. \quad (5.43)$$

Insertando la representación integral [92]

$$\begin{aligned} E_\lambda(-x^\lambda) &= \frac{2}{\pi} \sin(\lambda\pi/2) \\ &\times \int_0^\infty \frac{\omega^{\lambda-1} \cos(\omega x)}{1 + 2\omega^\lambda \cos(\lambda\pi/2) + \omega^{2\lambda}} d\omega, \end{aligned} \quad (5.44)$$

en la expresión (5.16) y comparando con la expresión (5.43) se deduce que

$$J(\omega) = \omega^\lambda f_c(\omega\tau), \quad (5.45)$$

donde la denominada función de corte de alta frecuencia f_c , de ancho típico τ^{-1} , está dada por

$$f_c(x) = \gamma_\lambda \frac{\sin(\lambda\pi/2)}{1 + 2x^\lambda \cos(\lambda\pi/2) + x^{2\lambda}}. \quad (5.46)$$

En particular, para el caso $\lambda = 1$ y a partir de (5.46) y (5.45) se reobtiene el bien conocido modelo de disipación Ohmica [58, 65, 66, 67] con una función de corte de Lorentz-Drude, i.e.

$$J(\omega) = \gamma_1 \frac{\omega}{1 + (\omega\tau)^2}. \quad (5.47)$$

Por otro lado, si $\lambda \neq 1$ el ruido propuesto puede ser considerado como un caso especial de los modelos no-Ohmicos [58, 65, 66, 67].

En la figura 5.6 se muestra un gráfico de la función $J(\omega)$ dada por (5.45) para distintos valores de λ en el intervalo $(0,2)$.

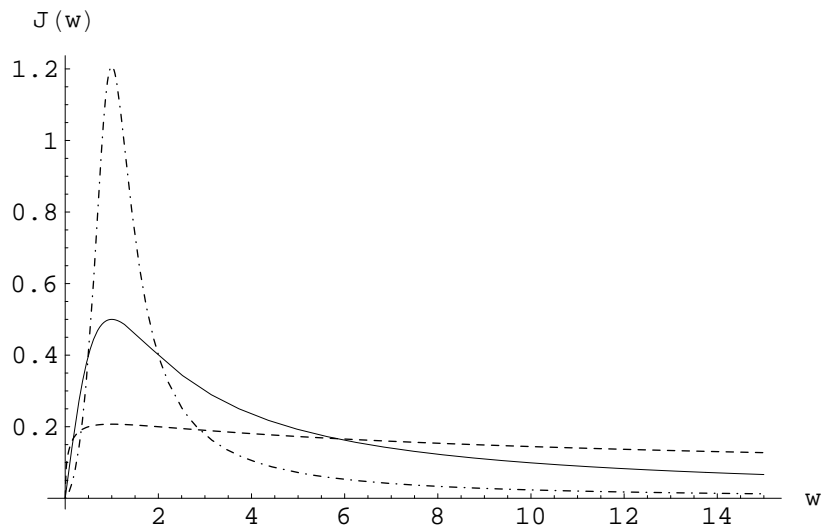


Figura 5.6: Densidad espectral $J(\omega)$ Ec.(5.45) en función de la frecuencia para $\lambda = 1/2$ (línea rayada), $\lambda = 1$ (línea sólida) y $\lambda = 3/2$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\gamma_\lambda = 1$ y $\tau = 1$.

Podemos observar de la figura 5.6 que cuando $1 < \lambda < 2$ (caso superdifusivo) la densidad espectral $J(\omega)$ presenta un pico muy pronunciado y angosto, de modo que en este caso hay un rango estrecho de frecuencias preponderantes. Por otro lado, cuando $0 < \lambda < 1$ (caso subdifusivo) se observa un amplio rango de frecuencias en el cual la densidad espectral $J(\omega)$ toma valores del mismo orden.

En este capítulo hemos propuesto un ruido Mittag-Leffler correlacionado el cual puede conducir a difusión anómala. Para ciertos valores límites de los parámetros que caracterizan a este ruido, puede reproducirse una función de correlación del tipo ley de potencias, una exponencial y un ruido blanco. La dinámica de la partícula puede ser explícitamente obtenida en forma analítica y muestra varios comportamientos diferentes comparados con los resultados previos basados en ruido blanco y otros ruidos coloreados [74, 93, 94].

Capítulo 6

Conclusiones

El objetivo de la presente Tesis ha sido investigar los procesos de difusión anómala originados en la dinámica disipativa de una partícula Browniana clásica inmersa en un entorno complejo. En particular hemos analizado los casos de una partícula libre y de una partícula sometida a un potencial armónico.

Partiendo de una ecuación de Langevin generalizada (ELG) y mediante el análisis de Laplace hemos derivado expresiones analíticas exactas para las funciones de relajación de una partícula inmersa en un medio fractal o complejo, el cual modelamos a través de un núcleo de memoria disipativo y una función de correlación del tipo ley de potencias con exponentes λ y α respectivamente. En el marco de ruido interno se cumple la relación de fluctuación-disipación y en consecuencia $\lambda = \alpha$; mientras que en la situación de ruido externo las fluctuaciones y la disipación poseen distintas fuentes, y por consiguiente los exponentes λ y α son independientes. En el contexto de este modelo obtuvimos las cantidades relevantes y analizamos las varianzas tanto para el caso de ruido interno como externo.

En el Capítulo 3 analizamos la difusión de una partícula libre en un medio complejo, mostrando que las soluciones de la ELG pueden ser escritas en términos de funciones de Mittag-Leffler de dos parámetros. Estas expresiones son válidas tanto para el caso de ruido interno como externo ya que en este último caso solo están vinculadas con el núcleo de memoria disipativo, el cual es independiente de la correlación temporal del ruido.

En el caso de ruido interno, mostramos que para $0 < \lambda < 1$ la autocorrelación de la velocidad es negativa lo cual implica la existencia del denominado efecto whip-back. Por otra parte, las varianzas tienen comportamientos asintóticos de tipo ley de potencias dependientes del exponente λ . En particular, la varianza de la posición diverge como t^λ , lo cual muestra que la partícula tiene un comportamiento subdifusivo para $0 < \lambda < 1$ y superdifusivo en el intervalo $1 < \lambda < 2$. Por otro lado, la varianza de la velocidad tiende a su valor de equilibrio $k_B T$; pero converge a dicho valor de una manera muy lenta de acuerdo a la ley $t^{2(\lambda-2)}$, en contraste con la relajación exponencial correspondiente a un régimen difusivo normal.

Para la situación de ruido externo la varianza de la posición posee diferentes comportamientos asintóticos dependiendo de la relación entre los exponentes λ y α correspondientes al núcleo de memoria y a la función de correlación del ruido respectivamente. Más precisamente, la varianza de la posición se vuelve constante para $2\lambda < \alpha$, diverge en forma logarítmica cuando $2\lambda = \alpha$, y diverge como una ley de potencias $t^{2\lambda-\alpha}$ cuando $2\lambda > \alpha$. En este último caso la partícula se comporta en forma subdifusiva para $2\lambda - \alpha < 1$, difunde normalmente para $2\lambda - \alpha = 1$, y finalmente tiene un comportamiento superdifusivo cuando $2\lambda - \alpha > 1$.

En el Capítulo 4 estudiamos la dinámica difusiva de un oscilador armónico en un medio fractal. Allí hemos demostrado que las soluciones analíticas exactas de la ELG se expresan a través de expansiones en serie en términos de la función de Mittag-Leffler generalizada y sus derivadas. Introduciendo el comportamiento asintótico de

la función de Mittag-Leffler generalizada en las expresiones completas derivamos los comportamientos a tiempos largos de los valores medios, varianzas y función de autocorrelación de la velocidad en el caso de ruido interno. De acuerdo a los resultados obtenidos todas las funciones involucradas muestran un comportamiento asintótico del tipo ley de potencias decrecientes en el tiempo y dependientes del exponente λ . Como consecuencia de esta característica, las varianzas tienden a sus valores de equilibrio de una manera más lenta que para el caso de difusión normal, el cual tiene una convergencia de tipo exponencial.

A diferencia del caso de partícula libre, la varianza de la posición converge a su valor de equilibrio $k_B T / \omega^2$ debido al confinamiento potencial. La convergencia de la varianza de la posición a dicho valor límite esta dada por una ley de potencias del tipo $t^{-2\lambda}$. Por otro lado encontramos que la varianza de la velocidad converge a su valor equilibrio $k_B T$ con una forma asintótica $t^{-2(\lambda+1)}$; y la varianza combinada de la posición y la velocidad converge a cero de acuerdo a $t^{-2\lambda-1}$. Finalmente, de la expresión asintótica obtenida para la función de autocorrelación de la velocidad encontramos que el efecto whip-back también esta presente en el oscilador armónico.

Por otra parte, en el caso de ruido externo encontramos que el comportamiento asintótico de las varianzas correspondientes a la posición y la velocidad, viene dado por leyes de potencias decrecientes en el tiempo con exponentes que se expresan como la suma de los parámetros λ y α . De este modo, las varianzas de la posición y la velocidad tienden a sendos valores estacionarios constantes; y la varianza combinada de la posición y la velocidad converge al valor límite cero para tiempo infinito. En particular, la varianza de la posición tiende asintóticamente a su valor constante como $t^{-(\lambda+\alpha)}$, y la varianza de la velocidad tiende a su valor estacionario de acuerdo a la forma asintótica $t^{-(\lambda+\alpha+2)}$. Finalmente, la varianza combinada de la posición y la velocidad se comporta en el límite asintótico como $t^{-(\lambda+\alpha+1)}$, y por lo tanto tiende a cero cuando $t \rightarrow \infty$.

A continuación mostramos que la dinámica asintótica del oscilador armónico en un entorno fractal puede ser estudiada en forma alternativa a través de teoremas Tauberianos. Mediante este procedimiento derivamos los comportamientos asintóticos de las funciones de interés y también corroboramos los resultados asintóticos obtenidos a partir de la solución analítica completa para el oscilador armónico.

Por último, en el Capítulo 5 proponemos un modelo más general para la función de correlación del ruido. Con este propósito introducimos un ruido Mittag-Leffler correlacionado, el cual permite modelar procesos de difusión anómala. Para ciertos valores límites de los parámetros λ y τ que caracterizan a este ruido; puede reproducirse una función de correlación del tipo ley de potencias, una exponencial correspondiente al proceso de Ornstein-Uhlenbeck, y un ruido blanco. La dinámica de la partícula libre puede ser explícitamente obtenida en forma analítica y muestra algunos comportamientos nuevos comparados con los resultados previos basados en ruido blanco y otros ruidos coloreados. En particular, la expresión analítica obtenida para el coeficiente de difusión dependiente del tiempo en el intervalo de tiempos intermedios ($\tau \ll t \lesssim \omega\lambda^{-1}$) presenta un término adicional respecto de la misma cantidad calculada para el caso de una función de correlación del tipo ley de potencias pura.

En relación con el origen microscópico del ruido propuesto, mostramos que el ruido Mittag-Leffler correlacionado puede ser expresado en términos de una densidad espectral particular en el contexto de los conocidos modelos de reservorios térmicos. De modo que para $\lambda \neq 1$ este ruido puede ser considerado como un caso especial de los modelos no-Ohmicos.

De esta manera, y a modo de cierre de nuestras conclusiones, podemos decir que el estudio realizado en esta Tesis permite una mayor comprensión del proceso de difusión anómala, fundamentalmente en el caso de un oscilador armónico inmerso en un entorno fractal. El hecho de haber encontrado la solución analítica completa para

este problema es un importante aporte al campo de investigación y representa un incentivo para estudiar las funciones de relajación y magnitudes relevantes en el rango completo de tiempos; a fin de analizar diversos comportamientos y fenómenos interesantes que pueden aparecer en otros intervalos temporales vinculados a la naturaleza fractal del entorno.

Apéndice A

Funciones especiales

A.1. Función Gamma

La función Gamma $\Gamma(z)$ se define como

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} u^{z-1} e^{-u} du, \quad (\text{A.1})$$

para $\text{Re}(z) > 0$. No obstante, la función Gamma se puede extender en forma analítica a todo el plano complejo mediante su representación como una integral de contorno en dicho plano [77].

Una de las propiedades básicas de la función Gamma es que satisface la siguiente ecuación funcional:

$$\Gamma(z + 1) = z \Gamma(z) \quad (\text{A.2})$$

la cual puede ser fácilmente probada a partir de la definición mediante integración por partes. De acuerdo a (A.1) se tiene $\Gamma(1) = 1$, y usando esta propiedad uno deduce

inmediatamente que para un número natural n se cumple:

$$\Gamma(n + 1) = n! \tag{A.3}$$

Otra importante propiedad de la función $\Gamma(z)$ es que tiene polos simples en los puntos $z = -n$ con $n = 0, 1, 2, \dots$

$$1/\Gamma(-n) = 0 \tag{A.4}$$

Asimismo, la función Gamma cumple la siguiente relación [77]

$$\Gamma(z)\Gamma(1 - z) = \frac{\pi}{\sin(z\pi)}, \quad z \neq 0, \pm 1, \pm 2, \dots \tag{A.5}$$

Para $z = 1/2$, de esta última ecuación se obtiene inmediatamente un útil valor particular de la función Gamma:

$$\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi} \tag{A.6}$$

Finalmente, describimos los intervalos de positividad y negatividad de la función $\Gamma(x)$ para valores del argumento x sobre el eje Real.

Cuando x toma valores positivos sobre el eje Real (es decir $x > 0$), se tiene que $\Gamma(x) > 0$.

Por otro lado, cuando el argumento $x < 0$ se encuentra en los intervalos $(-k, -(k - 1))$ con $k = 1, 2, 3, \dots$; puede verse que la función $\Gamma(x)$ es negativa en los intervalos correspondientes a valores de k impares y positiva para los pares [69].

A.2. Funciones de tipo Mittag-Leffler

La función de Mittag-Leffler de un parámetro $E_\alpha(y)$ es una generalización natural de la función exponencial. Se trata de función entera, la cual puede ser definida

mediante la siguiente expansión en series [76]:

$$E_\alpha(y) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{y^j}{\Gamma(\alpha j + 1)}, \quad \alpha > 0. \quad (\text{A.7})$$

siendo $\Gamma(x)$ la función Gamma definida en la sección anterior.

Para valores enteros la función de Mittag-Leffler reduce a funciones conocidas, algunos ejemplos son:

$$E_1(y) = \exp(y) \quad (\text{A.8})$$

$$E_2(y) = \cosh(\sqrt{y}). \quad (\text{A.9})$$

Para $0 < \alpha < 1$ y $1 < \alpha < 2$, su expansión asintótica viene dada por [81]:

$$E_\alpha(-y) \approx - \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(-y)^{-j}}{\Gamma(1 - \alpha j)}, \quad y \rightarrow \infty. \quad (\text{A.10})$$

con $y > 0$.

Como ha sido mostrado en la Ref.[81], resulta útil introducir una función del tipo Mittag-Leffler definida como:

$$e_\alpha(t) := E_\alpha(-t^\alpha), \quad (\text{A.11})$$

de modo que su transformada de Laplace es

$$\hat{e}_\alpha(s) = \frac{s^{\alpha-1}}{s^\alpha + 1}. \quad (\text{A.12})$$

Se ha demostrado [81] (a partir de la expresión de la función $e_\alpha(t)$ como una integral en un contorno de Bromwich en el plano complejo) que $e_\alpha(t)$ puede ser descompuesta en dos partes de acuerdo a:

$$e_\alpha(t) = f_\alpha(t) + g_\alpha(t)$$

donde $f_\alpha(t)$ es una función completamente monótona, la cual tiende a cero para t tendiendo a infinito. Esta función puede ser expresada como

$$f_\alpha(t) = \int_0^\infty e^{-rt} K_\alpha(r) dr. \quad (\text{A.13})$$

con

$$K_\alpha(r) = \frac{1}{\pi} \frac{r^{\alpha-1} \sin(\alpha\pi)}{r^{2\alpha} + 2r^\alpha \cos(\alpha\pi) + 1}. \quad (\text{A.14})$$

y $g_\alpha(t)$ es una función que también decae a cero, pero tiene carácter oscilatorio con una amplitud exponencialmente decreciente, su expresión es:

$$g_\alpha(t) = \begin{cases} 0 & \text{para } 0 < \alpha < 1, \\ \frac{2}{\alpha} e^{t \cos(\pi/\alpha)} \cos[t \sin(\pi/\alpha)] & \text{para } 1 < \alpha < 2. \end{cases} \quad (\text{A.15})$$

Por otra parte, la función de Mittag-Leffler de dos parámetros $E_{\alpha,\beta}(y)$ o función de Mittag-Leffler generalizada [76], puede ser definida mediante la expansión en series:

$$E_{\alpha,\beta}(y) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{y^j}{\Gamma(\alpha j + \beta)}, \quad \alpha > 0, \quad \beta > 0. \quad (\text{A.16})$$

En particular, para $\beta = 1$ $E_{\alpha,\beta}(y)$ se reduce a la función de Mittag-Leffler de un parámetro. Es decir que

$$E_{\alpha,1}(y) = E_\alpha(y)$$

Para valores específicos de los parámetros α y β , la función de Mittag-Leffler

generalizada reduce a funciones conocidas, como por ejemplo:

$$E_{1,1}(y) = e^y, \quad (\text{A.17})$$

$$E_{1,2}(y) = \frac{e^y - 1}{y} \quad (\text{A.18})$$

$$E_{1,3}(y) = \frac{e^y - 1 - y}{y^2} \quad (\text{A.19})$$

$$E_{2,1}(y^2) = \cosh(y) \quad (\text{A.20})$$

$$E_{2,2}(y^2) = \frac{\sinh(y)}{y} \quad (\text{A.21})$$

Si $0 < \alpha < 2$ y p es un número entero tal que $p \geq 1$, la expansión asintótica de la función de Mittag-Leffler generalizada viene dada por [77, 95]

$$E_{\alpha,\beta}(-y) \simeq - \sum_{j=1}^p \frac{(-y)^{-j}}{\Gamma(\beta - \alpha j)} + \mathcal{O}(y^{-1-p}), \quad y \rightarrow \infty, \quad (\text{A.22})$$

con $y > 0$.

En la mayor parte de las aplicaciones, en general se utiliza el primer orden de la expansión asintótica y por consiguiente se tiene

$$E_{\alpha,\beta}(-y) \sim \frac{y^{-1}}{\Gamma(\beta - \alpha)}, \quad y \rightarrow \infty. \quad (\text{A.23})$$

Cabe señalar que la función $t^{\alpha k + \beta - 1} E_{\alpha,\beta}^{(k)}(-\gamma t^\alpha)$, donde $E_{\alpha,\beta}^{(k)}(y) \equiv \frac{d^k}{dy^k} E_{\alpha,\beta}(y)$; es muy importante en la resolución de ecuaciones de difusión fraccionales y sistemas de control de orden fraccional [77, 96, 97]. Su transformada de Laplace es

$$\int_0^\infty e^{-st} t^{\alpha k + \beta - 1} E_{\alpha,\beta}^{(k)}(-\gamma t^\alpha) dt = \frac{k! s^{\alpha - \beta}}{(s^\alpha + \gamma)^{k+1}}. \quad (\text{A.24})$$

Esta función tiene una fórmula de derivación sencilla

$$\frac{d}{dt} (t^{\alpha k + \beta - 1} E_{\alpha,\beta}^{(k)}(-\gamma t^\alpha)) = t^{\alpha k + \beta - 2} E_{\alpha,\beta-1}^{(k)}(-\gamma t^\alpha), \quad (\text{A.25})$$

En particular para $k = 0$ se tiene

$$\frac{d}{dt}(t^{\beta-1}E_{\alpha,\beta}(-\gamma t^\alpha)) = t^{\beta-2}E_{\alpha,\beta-1}(-\gamma t^\alpha), \quad (\text{A.26})$$

donde esta última ecuación da la derivada temporal de la función $t^{\beta-1}E_{\alpha,\beta}(-\gamma t^\alpha)$.

Apéndice B

Códigos para la implementación numérica de funciones

En este apéndice presentamos los códigos utilizados para la implementación numérica de las funciones de relajación y varianzas de esta Tesis que se expresan en términos de las funciones de Mittag-Leffler generalizadas y sus derivadas.

B.1. Código para implementar la función de Mittag-Leffler de uno y dos parámetros

La función de Mittag-Leffler de un parámetro $E_\alpha(-x^\alpha)$ (con $x \geq 0$), fue implementada mediante el siguiente código realizado en el `Mathematica 5.1`:

```

Clear[workpsi, kmin, kmax, resulpres];
workpsi = 50;
kmin = 0;
kmax = 5000;
resulpres = 10^-8;

Fpresmlunp[k_, α_, x_] := (x)^k / Gamma[α * k + 1]
Coefpresml[k_, λ_, x_, pres_] :=
  Fpresmlunp[SetPrecision[k, pres], SetPrecision[λ, pres], SetPrecision[-(x^λ), pres]]

aescoefml[k_, λ_, t_] := Coefpresml[k, λ, t, workpsi];
Sesml[k_, λ_, t_] := Sum[aescoefml[j, λ, t], {j, kmin, k}];

FuncionMittagLeffler1p[λ_, t_] :=
Do[
  Do[If[Abs[(Sesml[k, λ, t] - Sesml[k - 1, λ, t])] < resulpres, Return[], kcorde = k],
    {k, kmin + 1, kmax}]; fmlgreen[λ, t] = Sesml[kcorde, λ, t];
  Clear[kcorde]; Return[fmlgreen[λ, t]], {i, 1, 1}]

```

De manera similar La función de Mittag-Leffler de dos parámetros $E_{\alpha, \beta}(-x^\alpha)$ (con $x \geq 0$), fue implementada mediante el siguiente código realizado en el Mathematica 5.1:

```

Clear[workpsi, kmin, kmax, resulpres];
workpsi = 50;
kmin = 0;
kmax = 5000;
resulpres = 10^-8;

Fpresmldosp[k_, α_, β_, x_] := ((x)^k) / Gamma[α * k + β]
Coefpresmldosp[k_, λ_, β_, x_, pres_] := Fpresmldosp[SetPrecision[k, pres],
  SetPrecision[λ, pres], SetPrecision[β, pres], SetPrecision[-(x)^λ, pres]]

aescoefmldosp[k_, λ_, β_, t_] := Coefpresmldosp[k, λ, β, t, workpsi];
Sesmldos[k_, λ_, β_, t_] := Sum[Re[aescoefmldosp[j, λ, β, t]], {j, kmin, k}];

FuncionMittagLeffler2p[λ_, β_, t_] :=
Do[Do[If[Abs[(Sesmldos[k, λ, β, t] - Sesmldos[k - 1, λ, β, t])] < resulpres,
  Return[], kcorde = k], {k, kmin + 1, kmax}];
  fmlDOSgreen[λ, β, t] = Sesmldos[kcorde, λ, β, t]; Clear[kcorde];
  Return[fmlDOSgreen[λ, β, t]], {i, 1, 1}]

```

B.2. Código para implementar las funciones de relajación del oscilador armónico

La función de relajación $I(t)$ del oscilador armónico dada por Ec.(4.7), fue implementada mediante el siguiente código realizado en el Mathematica 5.1:

```

Clear[workpsi, kmin, kmax, resulpres];
workpsi = 50;
kmin = 0;
kmax = 5000;
resulpres = 10^-8;

Fpres[α_, β_, k_, x_, pres_] :=
  NSum[((j + k)! (x)^j) / (Gamma[α (j + k) + β] * (j!)), {j, 0, Infinity},
  NSumTerms → 50, NSumExtraTerms → 60, WorkingPrecision → pres, Method → Fit]

DerivadakMittagLeffler2pNu[α_, β_, k_, x_, pres_] := Fpres[SetPrecision[α, pres],
  SetPrecision[β, pres], SetPrecision[k, pres], SetPrecision[x, pres], pres]

CoefpresI[k_, λ_, x_, pres_] := Re[(-1)^k * (x^(2*k + 2)) *
  DerivadakMittagLeffler2pNu[2 - λ, 3 + λ*k, k, -x^(2-λ), pres] / (k)!]

CoeficienteI[k_, λ_, x_, pres_] :=
  CoefpresI[SetPrecision[k, pres], SetPrecision[λ, pres], SetPrecision[x, pres], pres]

FuncionGreenI[λ_, t_] :=
  Do[a[kmin] = Evaluate[CoeficienteI[kmin, λ, t, workpsi]];
  Do[a[k] = Evaluate[CoeficienteI[k, λ, t, workpsi]];
  SI[k, λ, t] = Sum[a[j], {j, kmin, k}]; If[k < 2, kcorte = 2];
  If[Abs[(SI[k, λ, t] - SI[k - 1, λ, t])] < resulpres, Return[], kcorte = k],
  {k, kmin + 1, kmax}];
  gsalida[λ, t] = SI[kcorte, λ, t]; Clear[kcorte]; Return[gsalida[λ, t]], {i, 1, 1}

```

De manera similar fueron implementadas las funciones $G(t)$ y $g(t)$ dadas por las ecuaciones (4.9) y (4.10) respectivamente.

Índice de figuras

3.1. Gráfico de $I(t)$ dada por la Ec.(3.16) (línea sólida) y su comportamiento asintótico (3.24) (línea rayada) en función del tiempo para $\lambda = 1/3$. En todos los casos hemos puesto $\omega_\lambda = 1$	31
3.2. Gráfico de $I(t)$ dada por la Ec.(3.16) (línea sólida), su expresión asintótica (3.24) (línea rayada), y su expresión asintótica (3.28) (línea rayada y punteada) en función del tiempo para $\lambda = 4/3$. En todos los casos hemos puesto $\omega_\lambda = 1$	32
3.3. Gráfico de $I(t)$ dada por la Ec.(3.16) como una función del tiempo para $\lambda = 1/3$ (línea sólida), $\lambda = 1/2$ (línea rayada), y $\lambda = 2/3$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\omega_\lambda = 1$	33
3.4. Gráfico de $I(t)$ dada por la Ec.(3.16) como una función del tiempo para $\lambda = 4/3$ (línea sólida), $\lambda = 3/2$ (línea rayada), y $\lambda = 5/3$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\omega_\lambda = 1$	33
3.5. Gráfico de $G(t)$ dada por la Ec.(3.19) como una función del tiempo para $\lambda = 1/3$ (línea sólida), $\lambda = 1/2$ (línea rayada), y $\lambda = 2/3$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\omega_\lambda = 1$	34
3.6. Gráfico de $G(t)$ dada por la Ec.(3.19) como una función del tiempo para $\lambda = 4/3$ (línea sólida), $\lambda = 3/2$ (línea rayada), y $\lambda = 5/3$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\omega_\lambda = 1$	34

3.7. Gráfico de $g(t)$ dada por Ec.(3.20) como una función del tiempo para $\lambda = 1/3$ (línea sólida), $\lambda = 1/2$ (línea rayada), y $\lambda = 2/3$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\omega_\lambda = 1$	35
3.8. Gráfico de $g(t)$ dada por la Ec.(3.20) como una función del tiempo para $\lambda = 4/3$ (línea sólida), $\lambda = 3/2$ (línea rayada), y $\lambda = 5/3$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\omega_\lambda = 1$	35
3.9. Gráfico de $\sigma_{xx}(t)$ dada por la Ec.(3.29) como una función del tiempo para $\lambda = 1/3$ (línea sólida), $\lambda = 1/2$ (línea rayada), y $\lambda = 2/3$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\omega_\lambda = 1$ y $\beta = 1$	38
3.10. Gráfico de $\sigma_{xx}(t)$ dada por la Ec.(3.29) como una función del tiempo para $\lambda = 4/3$ (línea sólida), $\lambda = 3/2$ (línea rayada), y $\lambda = 5/3$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\omega_\lambda = 1$ y $\beta = 1$	38
3.11. Gráfico de $\sigma_{vv}(t)$ dada por la Ec.(3.30) como una función del tiempo para $\lambda = 1/3$ (línea sólida), $\lambda = 1/2$ (línea rayada), y $\lambda = 2/3$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\omega_\lambda = 1$ y $\beta = 1$	39
3.12. Gráfico de $\sigma_{vv}(t)$ dada por la Ec.(3.30) como una función del tiempo para $\lambda = 4/3$ (línea sólida), $\lambda = 3/2$ (línea rayada), y $\lambda = 5/3$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\omega_\lambda = 1$ y $\beta = 1$	39
3.13. Comportamiento asintótico de $\sigma_{xx}(t)$ como una función de los exponentes λ y α para $\gamma(t) \propto t^{-\lambda}$ y $C(t) \propto t^{-\alpha}$. La línea punteada, la línea cortada y la línea sólida representan difusión logarítmica, difusión normal y el caso de ruido interno respectivamente.	45
4.1. Gráfico de $I(t)$ dada por (4.7) como una función del tiempo para $\lambda = 1/3$ (línea sólida), $1/2$ (línea rayada) y $2/3$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\omega = 1$ y $\omega_\lambda = 1$	53

4.2.	Gráfico de $I(t)$ dada por (4.7) como una función del tiempo para $\lambda = 4/3$ (línea sólida), $3/2$ (línea rayada) y $5/3$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\omega = 1$ y $\omega_\lambda = 1$	53
4.3.	Gráfico de $G(t)$ dada por (4.9) como una función del tiempo para $\lambda = 1/3$ (línea sólida), $1/2$ (línea rayada) y $2/3$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\omega = 1$ y $\omega_\lambda = 1$	54
4.4.	Gráfico de $G(t)$ dada por (4.9) como una función del tiempo para $\lambda = 4/3$ (línea sólida), $3/2$ (línea rayada) y $5/3$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\omega = 1$ y $\omega_\lambda = 1$	54
4.5.	Gráfico de $g(t)$ dada por (4.10) como una función del tiempo para $\lambda = 1/3$ (línea sólida), $1/2$ (línea rayada) y $2/3$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\omega = 1$ y $\omega_\lambda = 1$	55
4.6.	Gráfico de $g(t)$ dada por (4.10) como una función del tiempo para $\lambda = 4/3$ (línea sólida), $3/2$ (línea rayada) y $5/3$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\omega = 1$ y $\omega_\lambda = 1$	55
4.7.	Gráfico de $I(t)$ dada por (4.7) como una función del tiempo para $\lambda = 1/2$ (línea sólida) y $3/2$ (línea rayada). En todos los casos hemos puesto $\omega = 1$ y $\omega_\lambda = 1$	56
4.8.	Gráfico de $G(t)$ dada por (4.9) como una función del tiempo para $\lambda = 1/2$ (línea sólida) y $3/2$ (línea rayada). En todos los casos hemos puesto $\omega = 1$ y $\omega_\lambda = 1$	56
4.9.	Gráfico de $g(t)$ (4.10) como una función del tiempo para $\lambda = 1/2$ (línea sólida) y $3/2$ (línea rayada). En todos los casos hemos puesto $\omega = 1$ y $\omega_\lambda = 1$	57

4.10. Gráfico de $\sigma_{xx}(t)$ Ec.(2.49) (con $I(t)$ y $G(t)$ dadas por (4.7) y (4.9) respectivamente) como una función del tiempo para $\lambda = 1/3$ (línea sólida), $1/2$ (línea rayada) y $2/3$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\omega = 1$, $\omega_\lambda = 1$ y $\beta = 1$	58
4.11. Gráfico de $\sigma_{xx}(t)$ Ec.(2.49) (con $I(t)$ y $G(t)$ dadas por (4.7) y (4.9) respectivamente) como una función del tiempo para $\lambda = 4/3$ (línea sólida), $3/2$ (línea rayada) y $5/3$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\omega = 1$, $\omega_\lambda = 1$ y $\beta = 1$	59
4.12. Gráfico de $\sigma_{vv}(t)$ Ec.(2.50) (con $G(t)$ y $g(t)$ dadas por (4.9) y (4.10) respectivamente) como una función del tiempo para $\lambda = 1/3$ (línea sólida), $1/2$ (línea rayada) y $2/3$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\omega = 1$, $\omega_\lambda = 1$ y $\beta = 1$	59
4.13. Gráfico de $\sigma_{vv}(t)$ Ec.(2.50) (con $G(t)$ y $g(t)$ dadas por (4.9) y (4.10) respectivamente) como una función del tiempo para $\lambda = 4/3$ (línea sólida), $3/2$ (línea rayada) y $5/3$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\omega = 1$, $\omega_\lambda = 1$ y $\beta = 1$	60
5.1. Función de correlación $C_\lambda(t)$ Ec.(5.10) en función del tiempo para $\lambda = 0,25$ (línea sólida), $0,5$ (línea rayada) y $0,75$ (línea rayada y punteada).	75
5.2. Función de correlación $C_\lambda(t)$ Ec.(5.10) en función del tiempo para $\lambda = 1,25$ (línea sólida), $1,5$ (línea rayada) y $1,75$ (línea rayada y punteada).	75
5.3. Función de correlación $C_\lambda(t)$ Ec.(5.11) (línea sólida), $g_\lambda(t)$ Ec.(5.15) (línea rayada) y $f_\lambda(t)$ Ec.(5.13) (línea punteada) en función del tiempo para $\lambda = 1,25$	77
5.4. Función de correlación $C_\lambda(t)$ Ec.(5.11) (línea sólida), $g_\lambda(t)$ Ec.(5.15) (línea rayada) y $f_\lambda(t)$ Ec.(5.13) (línea punteada) en función del tiempo para $\lambda = 1,50$	77

5.5. Función de correlación $C_\lambda(t)$ Ec.(5.11) (línea sólida), $g_\lambda(t)$ Ec.(5.15) (línea rayada) y $f_\lambda(t)$ Ec.(5.13) (línea punteada) en función del tiempo para $\lambda = 1,75$	78
5.6. Densidad espectral $J(\omega)$ Ec.(5.45) en función de la frecuencia para $\lambda = 1/2$ (línea rayada), $\lambda = 1$ (línea sólida) y $\lambda = 3/2$ (línea rayada y punteada). En todos los casos hemos puesto $\gamma_\lambda = 1$ y $\tau = 1$	85

Bibliografía

- [1] R. Brown, *Phil. Mag.* **4**, (1828) 161; *Ann. phys Chem.* **14** (1828) 294.
- [2] G. Gouy, *J. Physique* **7**, 561 (1888).
- [3] G. Gouy, *C. R. Acad. Sci., Pais* **109**, 102 (1889).
- [4] G. Gouy, *Rev. Gén. Sci.*, **6**, 1 (1895).
- [5] L. Bachelier, *Ann. scientif de l'École norm.* **17** (1900) 21.
- [6] A. Einstein, *Ann. d. physics*, **17**, 549 (1905).
- [7] J. Perrin, *Comptes Rendus (Paris)* **146**, p. 967, (1908).
- [8] J. Perrin, *Ann. Chim. Phys.* **18**, 1 (1909).
- [9] A. Einstein, *Ann. d. physics*, **19** , 371-381 (1906).
- [10] P. Langevin, *Comptes Rendus (Paris)* **146**, p. 530, (1908).
- [11] J. Masoliver, *Phys. Rev. A* **45**, 706 (1992).
- [12] J. Masoliver, *Phys. Rev. E* **48**, 121 (1993).
- [13] J. Masoliver and K. G. Wang, *Phys. Rev. E* **51**, 2987 (1995).
- [14] J. M. Porra, J. Masoliver and K. Linderberg, *Phys. Rev. E* **50**, 1985 (1994).

- [15] J. Heinrichs, Phys. Rev. E **47**, 3007 (1993).
- [16] H. Risken, *The Fokker-Plank Equation*, (Springer-Verlag, Berlin, 1989).
- [17] J. P. Bouchard and A. Georges, Phys. Rep. **195**, 127 (1990).
- [18] K. G. Wang, Phys. Rev. A **45**, 833 (1992).
- [19] A. Bunde, S. Havlin, J. Klafter, G. Graff, A. Shehter, Phys. Rev. Lett. **78**, 3338 (1997).
- [20] E. Lutz, Phys. Rev. E **64** 051106 (2001).
- [21] E. Lutz, Europhys. Lett. **54**, 293 (2001).
- [22] R. Metzler and J. Klafter, Phys. Rep. **339**, 1 (2000).
- [23] R. Metzler and J. Klafter, Journal of Physics A: Mathematical and General, Volume 37, Issue 31, pp. R161-R208 (2004).
- [24] R. Metzler, E. Barkai, J. Klafter, Phys. Rev. Lett. **82**, 3563 (1999).
- [25] F. Amblard, A. C. Maggs, B. Yurke, A. N. Pargellis, S. Leibler, Phys. Rev. Lett. **77**, 4470 (1996).
- [26] Q. Gu, E. A. Schiff, S. Grebner, F. Wang, R. Schwarz, Phys. Rev. Lett. **76**, 3196 (1996).
- [27] F. Sciortino and P. Tartaglia, Physica A **236**, 140 (1997).
- [28] J. Stephenson, Physica A **222**, 234 (1995).
- [29] S. Chaudhury, S. C. Kou, and B. J. Cherayil, J. Phys. Chem. B, **111**, 2377-2384 (2007).

- [30] P. Dieterich, R. Klages, R. Preuss and A. Schwab, Proc Natl Acad Sci U S A 105, 459-63 (2008).
- [31] C. Metzner et al., Phys. Rev. E **76** 021925 (2007).
- [32] M. Weiss et al., Biophys. J. **87**, 3518 (2004).
- [33] I. M. Tolic-Norrelykke et al., Phys. Rev. Lett. **93**, 078102 (2004).
- [34] A. Caspi, R. Granek, and M. Elbaum., Phys. Rev. Lett. **85**, 5655 (2000).
- [35] I.Y. Wong ,M. L. Gardel, D. R. Reichman, E. R. Weeks, M. T. Valentine, A. R. Bausch, and D. A. Weitz, Phys. Rev. Lett. **92**, 178101 (2004).
- [36] E. Barkai, Phys. Rev. E **63**, 046118 (2001).
- [37] E. Barkai and R. J. Silbey, J. Phys.Chem. B **104**, 3866 (2000).
- [38] J. M. Porra, K. G. Wang and J. Masoliver, Phys. Rev. E **53**, 5872 (1996).
- [39] N. Pottier, Physica A **317**, 371 (2003).
- [40] S.C. Kou and X. Sunney Xie, Phys. Rev. Lett. **93**, 180603 (2004).
- [41] Wei Min *et al.*, Phys. Rev. Lett. **94**, 198302 (2005).
- [42] S. Chaudhury and B. J. Cherayil, J. Chem. Phys. **125**, 024904 (2006).
- [43] J.D. Bao and Y. Z. Zhuo, Phys. Rev. C **67**, 064606 (2003).
- [44] H. Mori,Prog. Theor. Phys. **34**, 399 (1965).
- [45] R. Kubo, Rep. Prog. Phys. **29**, 265 (1966).
- [46] M. H. Lee, Phys. Rev. B **26**, 2547 (1982).

- [47] R. Zwangzig, *Non-equilibrium statistical mechanics* (New York, Oxford University Press, 2001).
- [48] R. Kubo, M. Toda, N. Hashitsume, *Statistical Physics II. Non-equilibrium statistical mechanics* (Springer, Berlin, 1985).
- [49] I. V. L. Costa, R. Morgado, M. V. B. T. Lima and F. A. Oliveira, *Europhys. Lett* **63** (2), pp 173-179 (2003).
- [50] K. G. Wang and M. Tokuyama, *Physica A* **265**, 341 (1999).
- [51] R. Kupferman, *J.Stat.Phys* **114**, 291 (2004).
- [52] M. R. Spiguel, *Theory and Problems of Laplace Transform* (McGraw-Hill , New York, 1965).
- [53] I. S. Gradshteyn y I. M. Ryshik, *Table of Integrals, Series and Products*, (Academic, N.Y., 1965).
- [54] A. D. Viñales and M. A. Despósito, *Phys. Rev. E* **73**, 016111 (2006).
- [55] M. A. Despósito and A. D. Viñales, en preparación.
- [56] K. G. Wang and J. Masoliver, *Physica A* **231**, 615 (1996).
- [57] J. R. Chaudhuri et al, *Phys. Rev. E* **63**, 061111 (2001).
- [58] U. Weiss, *Quantum Dissipative Systems* (World Scientific, 1993).
- [59] A.O.Caldeira y A.J.Leggett, *Phys.Rev.Lett.***46** (1981).
- [60] A.O. Caldeira and A.J. Leggett, *Ann. Phys.* 149, 374 (1983).
- [61] A.O.Caldeira y A.J.Leggett, *Physica A***121** 587,(1983).
- [62] G. W. Ford, and R. F. O'Connell, *Phys. Rev. D* **64**, 105020 (2001).

- [63] G.W. Ford and M. Kac, J. Stat. Phys. **45**, 803 (1987).
- [64] R. Morgado, F. A. Oliveira, G. G. Batrouni and A. Hansen, Phys. Rev. Lett **89**, 100601 (2002).
- [65] A.J. Leggett *et al.*, Rev. Mod. Phys. **59**, 1 (1987).
- [66] B. L. Hu, J. P. Paz and Y. Zhang, Phys. Rev. D **45** (8), 2843 (1992).
- [67] D. Cohen, Phys. Rev. E **55**, 1422 (1997).
- [68] S. Chaudhury and B. J. Cherayil, J. Chem. Phys. 125, 0184505 (2006).
- [69] M. Abramowitz and I. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables* US Government Printing Office, 1964. 10th Printing December 1972.
- [70] S. Chaudhury, S. C. Kou, and B. J. Cherayil, J. Phys. Chem. B, 111,2377-2384 (2007).
- [71] Wei Min and X. Sunney Xie, Phys. Rev. E. **73**, 010902(R) (2006).
- [72] F. Mainardi *et al.*, Physica A **287** , 468 (2000).
- [73] B. Mandelbrot, and J. van Ness, SIAM Rev **10**, 422 (1968).
- [74] H. Grabert, P. Schramm y G. Ingold, Phys. Rev. Lett **58**, 1285 (1987).
- [75] K. S. Fa, Phys. Rev. E **73**, 061104 (2006).
- [76] A. Erdelyi et al, *Higher Transcendental Functions* , (Krieger, Malabar, 1981), Vol.3.
- [77] I. Podlubny, *Fractional Differential Equations* (Academic Press , London,1999).

- [78] A. Einstein, *Investigations on the Theory of Brownian Movement*, (Dover, London, 1985).
- [79] R. Muralidhar *et al.*, *Physica A* **167**, 539(1990).
- [80] G. Doesch, *Anleitung Zum Praktischen Gebrauch der Laplace Transformation* (Oldenbourg, Munich, 1956).
- [81] F. Mainardi and R. Gorenflo, *J. Comput. and Appl. Mathematics* **118** (2000) 283-299.
- [82] W. Feller, *An Introduction to Probability Theory and its Applications* (Wiley, New York, 1971), Vol. II.
- [83] D. W. Widder, *The Laplace Transform* (Princeton University Press, Princeton, 1946).
- [84] M. A. Despósito and A. D. Viñales, *Phys. Rev. E* **77**, 031123 (2008).
- [85] A. Plonka, J. Kroh and Y.A. Berlin, *Chem. Phys. Lett.* 153 (1988) 433.
- [86] R. Metzler, J. Klafter, J. Jortner and M. Volk, *Chem. Phys. Lett.* 293 (1998) 477.
- [87] M. N. Berberan-Santos, *Journal of Mathematical Chemistry* **38** (2005) 165.
- [88] A. D. Viñales and M. A. Despósito, *Phys. Rev. E* **75**, 042102 (2007).
- [89] C. Cohen-Tannoudji *et al.*, *Quantum Mechanics*, Vol. II, (1977).
- [90] R. Gorenflo and F. Mainardi: Fractional oscillations and Mittag-Leffler functions. International Workshop on the Recent Advances in Applied Mathematics (RAAM '96), State of Kuwait, May 4 - 7, 1996. Proceedings, Kuwait University, Department of Mathematics and Computer Science. 1996. pp. 193 - 208.

- [91] R. Gorenflo and F. Mainardi: Fractional calculus: integral and differential equations of fractional order. In: A. Carpinteri and F. Mainardi (editors): *Fractals and Fractional Calculus in Continuum Mechanics*. Springer Verlag, Wien and New York, 1997, pp. 223- 276.
- [92] M. N. Berberan-Santos, *J. Math. Chem.* **38** (2005) 629.
- [93] G. W. Ford and R. F. O'Connell, *Phys. Rev. A* **73**, 032103 (2006).
- [94] J.D. Bao and Y. Z. Zhuo, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 138104 (2003).
- [95] Takahiro Ohkuma and Takao Ohta, *J. Stat. Mech.* Issue 10, pp. 10010 (2007)
- [96] B. I. Henry and T. A. M. Langlands, *Phys. Rev. E* **74**, 031116 (2006).
- [97] T. A. M. Langlands, *Physica A* **367**, 136 (2006).

Agradecimientos

Deseo manifestar mi agradecimiento a Marcelo Despósito por confiar en mi y saber generar un espacio de libertad para discutir, desarrollar y plasmar ideas. Así como también por darme la posibilidad de incursionar en el universo de la investigación científica, y guiarme en el incierto y atractivo camino del descubrimiento.

Asimismo agradezco a mi familia por apoyarme pacientemente en diferentes aspectos durante todos estos años de doctorado.

Quiero agradecer profundamente a Inés con quien comparto cada día. Su amor y calidez han transformado mi vida en muchos sentidos. Por eso, de distintas formas, ella está en todas y cada una de las páginas de esta Tesis.

Del mismo modo, deseo expresar mi gratitud a mis amigos y compañeros que han sido fundamentales para llevar a cabo este trabajo de diversas maneras:

A Mario Camuyrano, por estar cerca, aun a la distancia. A mi compañero de oficina Miguel Monteverde que me brindó su valiosa experiencia profesional y don de gente en varias situaciones. A Gabriel Paissan por su apoyo y motivación constante. A Pablo Do Campo, por sus valiosos consejos y reflexiones. A Federico Bottesi por las ricas charlas sobre física. A Carlos Vigh por su predisposición a colaborar. A Néstor Alvarez quisiera agradecerle entre otras cosas la oportunidad laboral con la que pude sostener financieramente los últimos años de mi doctorado. A Ariel Abelar por recomendarme el libro de Podlubny, cuya lectura fue crucial para el desarrollo de los aspectos matemáticos de esta Tesis; y a German Bertossa por las charlas en el bar.

Finalmente agradezco a la gente del grupo de Física Estadística, y en particular a Dora Jezek por sus atinadas sugerencias y observaciones.