

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

*Estudo de Equações de Fokker-Planck
Não-Lineares e Aplicações*

Mauricio de Souza Ribeiro

Orientado por Fernando Dantas Nobre

Dissertação apresentada ao Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas como requisito para a obtenção do título de mestre em Ciências Físicas.

Rio de Janeiro
22 de Março de 2012

Aos meus alicerces,
que continuam a me sustentar.

Agradecimentos

À minha mãe, Conceição, meu pai, Paulo César e minhas irmãs, Izadora e Lara, por sustentarem os sonhos e os compartilharem.

A Fernando Nobre, pela orientação e paciência durante estes dois anos.

Aos professores Constantino Tsallis, Evaldo Curado e Ivan de Oliveira pelos exemplos e pelas ajudas.

Aos funcionários da TEO, Almério e Elisabete, do INCT, Cláudia; da CFC, Ricardo e Elisabete por facilitarem as burocracias e sempre se mostrarem prestativos.

A Mário César, por abrir a casa a dois desconhecidos (e ingratos). Um grande abraço e um pedido de desculpas. A Armando Takeuchi pelo apartamento.

Em especial a Fabrício Borghi e Rodrigo Sacramento por serem irmãos, com tudo que a definição traz.

Aos amigos Aline Viol, Alvaro Teixeira, Angélica Mata, Camila Faria, Diego Peçanha, Douglas de Almeida, Francisco Neto, Felipe de Castro, Gislene Cruz, Jackson Andrade, Jader Moreira, João Paulo Corrêa, Lucas Fernandes, Luisa Scudeller, Marielle Lage, Marina Corrêa, Paula Millani, Zaira Hoffmam (com qualquer permutação entre os nomes). Aos amigos do Rio, Júnior Toniato, Bruno de Paula, Katianne Alcântara, Lucas e Tabata Sigaud. Aos outros amigos de Muriaé e Viçosa que merecem destaque na minha vida.

Aos amigos do CBPF: Cinthia Pascueto, Fernanda Deus, Jefferson Moraes, Kim Veiga, Leonardo Cirto, Leonardo Lima, Luciana Rios, Mariana Georges, Max Jáuregui, Paulo Soledad, Roberta Dutra, Rodrigo Turcati, Tatiana Marcondes, Thadeu Almeida, Thiago Carneiro.

À família do Guanabara Rugby por estes dois anos. Pelos treinos, viagens, jogos, terceiros tempos e amizade.

Ao CNPq e a FAPERJ, pelo apoio financeiro.

Aos desenvolvedores dos softwares livres.

*E na sua meninice
Ele um dia me disse
Que chegava lá
Olha aí! Olha aí!*

O meu guri
CHICO BUARQUE

Resumo

As equações de Fokker-Planck não-lineares são grandes candidatas à descrição dos processos difusivos anômalos. Introduzidas, inicialmente, no estudo da difusão em meios porosos, estas equações foram generalizadas para diversas aplicações, geralmente de maneiras fenomenológicas. Trabalhos recentes propuseram uma extensão da derivação das equações de Fokker-Planck, partindo da equação mestra, para o caso não-linear. Outro resultado importante foi a prova do Teorema H neste contexto, permitindo que essas equações sejam associadas diretamente com formas entrópicas generalizadas, ou seja, que descrevem sistemas não-boltzmannianos. Neste trabalho, estendemos os desenvolvimentos anteriores, derivando equações de Fokker-Planck não-lineares multi-difusivas a partir de aproximações da equação mestra. Propomos que estas equações são capazes de reproduzir sistemas complexos que apresentam diferentes regimes de difusão, mesclando entre difusões lineares e anômalas. Após caracterizá-las, resolvemos alguns exemplos teóricos ilustrativos, sempre conectados à entropias generalizadas. Mostramos que um caso especial das equações anteriores é capaz de descrever a dinâmica de partículas interagentes em movimento superamortecido. A solução para este caso é conhecida analiticamente e, comparando com os resultados obtidos por simulações de dinâmica molecular, mostramos a validade da descrição.

Abstract

The non-linear Fokker-Planck equations are good candidates for describing anomalous diffusive processes. Introduced, initially, for diffusion in porous media studies, these equations have been generalized for different applications, usually in phenomenological ways. Recent studies have proposed an extension of the derivation of Fokker-Planck equations, starting from the master equation, for nonlinear cases. Another important result was the proof of the H-Theorem in this context, allowing these equations to be directly associated with generalized entropic forms, *i.e.*, those that describe non-Boltzmann-Gibbs systems. In this work, we follow previous developments, deriving multi-diffusive non-linear Fokker-Planck equations from approximations to the master equation. We propose that these equations are appropriate to describe complex systems that present different diffusion regimes, mixing linear and anomalous diffusions. After characterizing those, we solve a few illustrative theoretical examples, always connected to generalized entropies. We show that a special case of these equations can describe the dynamics of interacting particles under overdamped motion. The solution for this case is known analytically and, comparing with the results obtained from molecular dynamics simulations, we show the validity of the description.

Conteúdo

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | Introdução | 1 |
| 2 | Aspectos das dinâmicas estocástica e molecular | 4 |
| 2.1 | Equação de Fokker-Planck linear | 5 |
| 2.1.1 | Difusão linear | 5 |
| 2.1.2 | Equação Mestra | 7 |
| 2.2 | Equações de Fokker-Planck não-lineares | 9 |
| 2.2.1 | Mecânica estatística não-extensiva | 9 |
| 2.2.2 | Aproximações da equação mestra para a EFPNL | 11 |
| 2.2.3 | Teorema H | 12 |
| 2.3 | Dinâmica molecular | 15 |
| 3 | Equações de Fokker-Planck não-lineares multi-difusivas | 19 |
| 3.1 | Equação Mestra | 20 |
| 3.1.1 | EM discreta para o caso bi-difusivo | 20 |
| 3.1.2 | EM contínua para o caso bi-difusivo | 22 |
| 3.1.3 | Forma Geral | 25 |
| 3.1.4 | EM para o caso multi-difusivo | 26 |
| 3.2 | Entropia associada | 28 |
| 3.3 | Estado estacionário | 31 |
| 3.3.1 | Exemplos | 34 |
| 3.3.2 | W-Lambert generalizada | 46 |
| 3.4 | Conclusões e perspectivas | 49 |
| 4 | Estudo da dinâmica de partículas interagentes em movimento super-amortecido | 50 |
| 4.1 | Sistema de partículas | 51 |
| 4.2 | Dinâmica Molecular | 54 |
| 4.3 | Distribuições de posições e velocidades | 56 |
| 4.4 | Conclusões e Perspectivas | 62 |
| 5 | Conclusão e perspectivas | 64 |

Lista de Figuras

| | | |
|-----|--|----|
| 2.1 | Condições de contorno periódicas. Figura obtida em http://www.fz-juelich.de/nic-series/volume23 | 17 |
| 3.1 | Distribuição de probabilidades para diferentes constantes D_1 e a do potencial harmônico. | 36 |
| 3.2 | Distribuição de probabilidades para $q = 0.5$, $a = 1.0$ e diferentes constantes D_1 | 38 |
| 3.3 | Distribuição de probabilidades para diferentes expoentes q | 39 |
| 3.4 | Distribuição de probabilidades para diferentes constantes de difusão. | 41 |
| 3.5 | Distribuição de probabilidades para diferentes expoentes não-lineares. | 42 |
| 3.6 | Distribuição de probabilidades para diferentes expoentes não-lineares q_1 | 43 |
| 3.7 | Distribuição de probabilidades para expoentes não-lineares q_1 e q_2 | 44 |
| 3.8 | Distribuição de probabilidades para diferentes expoentes não-lineares q_1 , q_2 e q_3 | 45 |
| 3.9 | Distribuição de probabilidades para um caso contínuo de difusões e valores típicos dos parâmetros a e b | 47 |
| 4.1 | Representação da evolução de uma cópia do sistema de partículas, com $N = 1000$ e dimensões $L_x = 280\lambda$ e $L_y = 20\lambda$, para diferentes tempos. | 56 |
| 4.2 | Perfis de densidades para diferentes tempos t | 57 |
| 4.3 | (a) Colapso dos perfis de densidade em uma curva universal. (b) Evolução temporal do coeficiente $C(t)$ | 58 |
| 4.4 | Representações dos perfis de densidade em termos do q -logaritmo ($q = 0$). | 59 |
| 4.5 | Segundo momento da distribuição. | 60 |
| 4.6 | Distribuição de probabilidades de velocidades $P(v_x, t)$ para diferentes tempos. | 61 |
| 4.7 | Representações das distribuições de velocidades em termos do q -logaritmo ($q = 0$). | 62 |
| 4.8 | Evolução temporal do coeficiente $\lambda^3 B_v(t) \beta_v(t)$ | 63 |

Capítulo 1

Introdução

A física estatística representa uma das teorias de maior sucesso com inúmeras aplicações em Física; juntamente com a mecânica quântica, estas formam um grupo de teorias de probabilidades de grande abrangência. A partir da conexão estabelecida entre a mecânica estatística e a termodinâmica, tem-se uma descrição macroscópica de diversos sistemas físicos, tais como: gases de partículas não-interagentes, sistemas de spins, oscilações em redes, entre outros. Estes sistemas são descritos por leis mecânicas, quânticas ou clássicas, e possuem propriedades microscópicas definidas, permitindo à mecânica estatística fazer previsões macroscópicas baseadas nessas propriedades, propiciando interpretações a nível atômico de quantidades termodinâmicas, como calor específico, energia livre e entropia.

Devido ao caráter histórico, a entropia de Boltzmann-Gibbs, S_{BG} , proposta por Ludwig Boltzmann (1844-1906) em 1872 e explorada por Josiah Gibbs (1839-1903) em 1902, é considerada atualmente como a entropia termodinâmica e pode ser relacionada diretamente com as possíveis configurações do sistema. Porém, como citado nos trabalhos fundamentais, esta forma entrópica só pode ser considerada apropriada sob estritas condições, como: homogeneidade, interações de curto alcance entre os componentes e, principalmente, ergodicidade dos sistemas, os quais são descritos, usualmente, por equações lineares e distribuições estacionárias gaussianas. Durante todo o desenvolvimento da mecânica estatística a forma da entropia foi considerada válida e apenas pequenas mudanças foram incorporadas (como na descrição de sistemas quânticos via matriz de densidade) enquanto outros funcionais termodinâmicos puderam ter sua forma modificada para adequar-se a novos problemas. Entretanto, desde a sua introdução em 1870, a mecânica estatística vem acumulando exemplos que encontram-se fora do alcance da teoria.

Pensando numa expansão da mecânica estatística usual que permita a descrição de sistemas complexos, diversos autores postularam generalizações para o funcional entrópico

(veja, por exemplo, a seção 3.9 da referência [1]). Destas, destaque-se a teoria apresentada por Constantino Tsallis (1943-) em 1988 [2] conhecida por mecânica estatística não-extensiva, que em mais de 20 anos, transformou-se numa teoria promissora e com diversas aplicações à sistemas físicos, que vão desde distribuição de velocidades em partículas subatômicas à distribuição de matéria escura no universo. O nome não-extensiva surge da propriedade apresentada por algumas grandezas termodinâmicas, como por exemplo, a energia interna. Quando tratamos de sistemas cujos elementos são fortemente correlacionadas, a entropia de Tsallis, que é sempre não-aditiva, torna-se extensiva para o valor apropriado do parâmetro q , também chamado de índice entrópico. Diversos sistemas naturais, artificiais e sociais apresentam estados estacionários, ou quase-estacionários, que não são bem descritos pela estatística de Boltzmann. Estes sistemas são geralmente caracterizados por correlações de longo alcance, espaciais e temporais; processos não-markovianos; interações de longo alcance; equações não-lineares e distribuições não-gaussianas.

No contexto desta dissertação, o trabalho de Albert Einstein (1879-1955) em 1905 traz para a física o movimento browniano, cuja compreensão é creditada a Robert Brown (1773-1858). A explicação do movimento difusivo das partículas em suspensão coloidal através do efeito coletivo dos átomos do fluido, que contribuiu para a corrente atomista do início do século XX, pode ser considerada uma das grandes aplicações da mecânica estatística ou da dinâmica estocástica. As equações lineares que surgem neste problema podem ser usadas na descrição de alguns sistemas que apresentam difusão linear, destacando-se entre elas a equação de Fokker-Planck (EFP) (sistemas contínuos) e a equação mestra (sistemas discretos ou quantizados). O fato da EFP apresentar como solução temporal uma distribuição gaussiana, a qual maximiza a entropia S_{BG} , sugere uma conexão entre a mecânica estatística e as equações de Fokker-Planck lineares [3].

Entretanto, é sabido que muitos sistemas complexos não são descritos por equações lineares, de tal forma que a introdução de não-linearidades nas equações é considerada como possível alternativa de adequação. Para a EFP, que descreve a evolução temporal da distribuição de probabilidades no espaço de fases, diversas generalizações foram propostas, permitindo a descrição de sistemas caracterizados por difusões anômalas e dinâmicas no equilíbrio e fora do equilíbrio. As distribuições de probabilidades em leis de potência que maximizam a entropia de Tsallis são, também, encontradas como soluções dessas equações não-lineares, sugerindo que a mecânica estatística não-extensiva emerge como a teoria estatística das difusões anômalas e outros sistemas descritos por tais equações.

As equações de Fokker-Planck, sejam na forma linear ou não-linear, tem encontrado aplicações na descrição de uma variedade de campos, tais como: física de plasmas, física de superfícies, astrofísica, hidrodinâmica não-linear, biofísica, dinâmica de populações,

neurofísica, econofísica entre outros [4]. O principal objetivo deste trabalho é apresentar uma generalização da EFP, na tentativa de torná-la mais abrangente, aplicável à sistemas que apresentem diversos regimes de difusão. A transição entre um regime difusivo anômalo para um regime linear é conhecido para algumas formas da EFP [5] mas, estudamos o caso geral, onde dois, ou mais, regimes não-lineares possam ser encontrados.

Este trabalho é dividido em cinco capítulos, separados entre introdução, breve revisão, resultados e conclusão. No capítulo 2 apresentamos uma breve revisão de alguns resultados conhecidos, versando sobre difusão linear e anômala. A partir do movimento browniano, introduzimos as formas lineares da equação de Langevin, da equação de Fokker-Planck e da equação mestra. Devido as aplicações restritas destas formas, mostramos uma possível generalização da EFP para descrever difusões anômalas, obtida através de aproximações da equação mestra. Além disso, apresentamos alguns tópicos em dinâmica molecular e mecânica estatística não-extensiva.

No capítulo 3 introduzimos equações de Fokker-Planck não-lineares (EFPNLs) bi-difusivas e multi-difusivas, na tentativa de descrever processos difusivos complexos, onde diferentes regimes podem ser encontrados, cada qual sendo representado por seu termo difusivo, caracterizado por um expoente. Com o intuito de caracterizar essas equações, derivamo-as a partir de aproximações da equação mestra; provamos o teorema H neste contexto, assim, encontrando uma relação que associa a forma entrópica e os funcionais das equações de Fokker-Planck; resolvemos alguns exemplos ilustrativos.

Na busca de uma aplicação física para as equações do capítulo 3, no capítulo 4, aprofundamos alguns resultados para os sistemas de partículas interagentes em movimento superamortecido, mostrando sua conexão com a mecânica estatística não-extensiva. Derivamos a partir das equações de movimento, utilizando uma aproximação do tipo “*coarse-graining*”, uma equação de Fokker-Planck não-linear (EFPNL), cuja solução analítica é conhecida. A fim de validar a descrição do sistema pela equação citada, comparamos os resultados analíticos com os obtidos através de simulações de dinâmica molecular. A dissertação é finalizada no capítulo 5, onde apresentamos nossos conclusões, como também, algumas perspectivas de continuidade de investigações dos temas apresentados.

Capítulo 2

Aspectos das dinâmicas estocástica e molecular

Este capítulo discute aspectos da teoria de probabilidades, mais especificamente em dinâmica estocástica, mecânica estatística não-extensiva e dinâmica molecular, relevantes para o trabalho. Apresentamos algumas definições, demonstrações e resultados que se farão necessários para o entendimento do restante da dissertação. Para revisões mais detalhadas, recomendamos os livros da Reichl [6] e Van Kampen [7] em mecânica estatística e processos estocásticos e, também, para tópicos recentes em mecânica estatística não-extensiva, o livro do Tsallis [1]; para as equações de Fokker-Planck sugerimos os livros do Risken [3] e Frank [4] (casos linear e não-linear, respectivamente), enquanto que tópicos avançados em dinâmica molecular podem ser obtidos no Rapaport [8].

Esta dissertação versa sobre generalizações e aplicações de equações de Fokker-Planck não-lineares e simulações computacionais do tipo dinâmica molecular. Desta forma, apresentamos aqui a EFP relacionada ao movimento browniano; as definições das equações mestra e de Langevin; a derivação da EFP a partir de aproximações da equação mestra. Na segunda seção, mostramos como EFPNLs podem ser obtidas de maneira semelhante ao caso linear. Reproduzimos, também, provas dos resultados usados durante o trabalho: o teorema H, a extremização da entropia e o conceito de família de equações. O trabalho de Plastino e Plastino [9] mostrou inicialmente a ligação entre uma EFPNL e a mecânica estatística não-extensiva, sendo a solução para a distribuição de probabilidades a mesma que extremiza a entropia de Tsallis; por esta razão, apresentamos algumas definições importantes da mecânica estatística não-extensiva que serão usadas no contexto da difusão não-linear. Na terceira parte discutiremos sumariamente alguns tópicos de simulações computacionais do tipo dinâmica molecular.

2.1 Equação de Fokker-Planck linear

A teoria de difusão linear, que engloba o formalismo de Langevin, da equação mestra e das equações de Fokker-Planck, é uma das aplicações da física estatística de Boltzmann-Gibbs. A ideia principal desta seção é apresentar uma das abordagens possíveis para a introdução da EFP, como uma equação para descrever tal processo.

De acordo com a mecânica clássica, conhecendo-se o hamiltoniano que define um sistema de muitos corpos e as condições iniciais, as equações de movimento são completamente determinadas. Porém, a resolução destas equações, considerando a interação entre todos os componentes do sistema, pode ser uma tarefa difícil. Uma alternativa consiste em passar de uma descrição microscópica para uma descrição mesoscópica do sistema, olhando-se para a evolução probabilística de apenas um elemento. A equação passa, então, a ser a combinação de uma contribuição determinista, proveniente de uma força externa conhecida, geralmente associada a um potencial externo, com uma parte estocástica, representando o efeito médio das interações internas.

A EFP é usada para descrever a evolução desses sistemas, que tem como exemplos, o movimento de pequenas partículas imersas em um fluido, as flutuações na intensidade de um laser, a distribuição de velocidades das partículas em fluxos turbulentos, entre outros. A vantagem desta abordagem consiste no fato das equações poderem ser aplicadas a sistemas no equilíbrio (ou em estados estacionários), ou fora do equilíbrio (longe do equilíbrio térmico) [4].

2.1.1 Difusão linear

A representação matemática do que chamamos de movimento browniano foi apresentada por Einstein em um dos seus trabalhos do seu ano miraculoso (1905). Usaremos este exemplo para definir a difusão linear e relacioná-la com a equação de Fokker-Planck. Consideremos uma partícula massiva, por exemplo um grão de pólen, imersa em um fluido, como água. Ao observar microscopicamente a partícula, nota-se um movimento rápido e aparentemente aleatório, de constante agitação. Esta experiência foi utilizada por Einstein na tentativa de comprovar a existência dos átomos, explicando que o carácter discreto da matéria seria responsável pelos efeitos observados.

A partícula browniana apresenta um movimento muito mais lento que os átomos, resultado de choques rápidos e aleatórios devido às flutuações do fluido. Desta forma, podemos reconhecer duas escalas de tempo no problema: uma relativa à partícula massiva e outra ligada às partículas atômicas. Define-se, assim, uma abordagem mesoscópica do problema, onde consideramos os efeitos do fluido na partícula como a composição de uma

força aleatória com uma componente de fricção (ou atrito). A equação do movimento da partícula é

$$\frac{dv(t)}{dt} = -\frac{\gamma}{m}v(t) + \frac{1}{m}\xi(t), \quad (2.1)$$

sendo $v(t)$ a velocidade da partícula no tempo t , $v(t) = dx(t)/dt$, m a sua massa e γ o coeficiente de fricção. O termo $\xi(t)$ corresponde a uma força aleatória, geralmente escolhida como um ruído branco (que possui média nula e correlação temporal do tipo delta) [7]. A equação acima é chamada de equação de Langevin e os detalhes sobre a sua solução podem ser encontradas nas referências [6, 7].

A equação (2.1) pode fornecer informações do movimento da partícula quando avaliada sobre uma média de realizações e condições iniciais. Desta forma, obtém-se a evolução temporal da distribuição de probabilidades, $P(x, t)$ (veja a seção S5.C.3 da referência [6]). A equação básica que representa tal dinâmica é chamada equação de difusão (ou equação do calor)

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2}, \quad (2.2)$$

onde D é a constante de difusão.

Considerando a condição inicial $P(x, 0) = \delta(x)$, onde $\delta(x)$ é a função delta de Dirac, tem-se como solução

$$P(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}, \quad (2.3)$$

sendo esta normalizada. Para o segundo momento da distribuição, obtém-se

$$\langle x^2(t) \rangle = 2Dt. \quad (2.4)$$

Pode-se daí perceber a origem do termo difusão linear (ou normal), a dispersão escala linearmente com t . O mesmo resultado poderia ser obtido através da equação (2.1) considerando que a partícula encontra-se em equilíbrio térmico com o fluido de modo que o princípio de equipartição da energia pudesse ser aplicado, neste caso $D = k_B T / \gamma$ (conhecida como relação de Einstein) fornece a conexão entre a difusão e o equilíbrio termodinâmico [10].

De uma maneira geral, pode-se encontrar comportamentos diferentes para a dispersão, como

$$\langle x^2(t) \rangle \propto t^\mu, \quad (2.5)$$

sendo μ o expoente de difusão usado na caracterização dos processos difusivos. Para $\mu = 1$ tem-se a difusão normal; para $\mu < 1$ o sistema dispersa mais lentamente, sendo chamado de subdifusivo; para $\mu > 1$ temos a superdifusão. Os casos diferentes da difusão linear são

conhecidos como difusão anômala e serão discutidos na próxima seção.

A solução (2.3) é imediatamente identificada como uma distribuição de probabilidades gaussianas. Caso a variável x possua média nula ($\langle x \rangle = 0$), pode-se impor como conhecido o valor médio do quadrado da variável e otimizar a entropia sobre estes vínculos. Sendo

$$S[P] = -k_B \int_{-\infty}^{\infty} dx P(x, t) \ln P(x, t) \quad (2.6)$$

o funcional entrópico, obtém-se que a distribuição (2.3) é a solução que o extremiza. A forma (2.6) corresponde a importante entropia de Boltzmann-Gibbs, S_{BG} e, desta forma, verificamos a associação desta ao processo de difusão linear [10].

2.1.2 Equação Mestra

A equação que governa a dinâmica estocástica de processos Markovianos (memória temporal curta) é conhecida como equação mestra, sendo importante em física estatística devido à sua vasta aplicação. A mesma tem sido aplicada a diversos problemas em química, biologia, dinâmica de populações, semicondutores, entre outros casos. Uma vez que estes sistemas estocásticos evoluem no tempo, a probabilidade de encontrar o sistema em um dado estado muda até o mesmo atingir um estado estacionário, dinâmica esta incorporada na equação mestra.

Derivações formais de tal equação podem ser encontradas nas referências [6, 7]; optaremos por introduzi-la da seguinte maneira: seja $P(n, t)$ a probabilidade de encontrar o sistema em um estado definido por um número quântico n no instante t ; a variação da probabilidade será governada por

$$\frac{\partial}{\partial t} P(n, t) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} [P(m, t)w_{m,n}(t) - P(n, t)w_{n,m}(t)], \quad (2.7)$$

isto é, será a soma das probabilidades de encontrar o sistema em estados quaisquer no instante t , multiplicado pela probabilidade de transição de m para n , $w_{m,n}(t)$, subtraído da probabilidade de estar em n multiplicado pela probabilidade de sair de n para qualquer outro estado m , $w_{n,m}(t)$, também somados sobre todos os estados possíveis m . A equação (2.7) é a forma discreta da equação mestra; para o caso contínuo escreve-se

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = \int dx' \{P(x', t)w(x'|x) - P(x, t)w(x|x')\}, \quad (2.8)$$

com interpretação análoga ao caso anterior.

Aproximações da equação mestra para a EFP

A derivação da equação de Fokker-Planck a partir de aproximações na equação mestra é uma das maneiras utilizadas. Outra abordagem possível seria o uso de operadores não-locais levando à EFP com derivadas fracionárias [5]. Neste trabalho usaremos a primeira alternativa mas, uma derivação a partir de primeiros princípios pode ser obtida na referência [11].

Consideremos o problema do caminhante aleatório (uma simplificação do movimento browniano), onde uma partícula pode dar passos de tamanho Δ para direita ou para esquerda, com igual probabilidade. A equação mestra é então escrita como

$$\frac{\partial}{\partial t} P(n\Delta, t) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} [P(m\Delta, t)w_{m,n}(\Delta, t) - P(n\Delta, t)w_{n,m}(\Delta, t)], \quad (2.9)$$

onde $P(n\Delta, t)$ é a probabilidade de encontrar o caminhante no ponto $x = n\Delta$ no tempo t . Para este caso, a taxa de transição será

$$w_{k,l}(\Delta, t) = \frac{D}{\Delta^2}(\delta_{k,l+1} + \delta_{k,l-1}). \quad (2.10)$$

Substituindo esta taxa na equação (2.9) tem-se

$$\frac{\partial}{\partial t} P(n\Delta, t) = \frac{D}{\Delta^2} [P((n+1)\Delta, t) + P((n-1)\Delta, t) - 2P(n\Delta, t)].$$

Fazendo $x = n\Delta$ e considerando o limite $\Delta \rightarrow 0$, pode-se expandir o lado direito em séries de Taylor [6] e então,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} P(x, t) &= \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{D}{\Delta^2} [P(x + \Delta, t) + P(x - \Delta, t) - 2P(x, t)] \\ &= D \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2}, \end{aligned} \quad (2.11)$$

ou seja, no limite de passos infinitesimais a caminhada aleatória é descrita por uma equação de difusão simples. Este resultado é semelhante ao apresentado para a equação de Langevin.

Como veremos, formas mais gerais da EFP podem ser obtidas também via aproximações da equação mestra. Seja

$$w_{k,l}(\Delta, t) = -\frac{1}{\Delta} \delta_{k,l+1} A(k\Delta) + \frac{D}{\Delta^2} (\delta_{k,l+1} + \delta_{k,l-1}) \quad (2.12)$$

a taxa de probabilidades de transição de um caminhante aleatório com preferência, por

exemplo, um bêbado caminhando em uma rua inclinada. Repetindo o mesmo procedimento, obtém-se a seguinte equação,

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial[A(x)P(x, t)]}{\partial x} + D\frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2}. \quad (2.13)$$

A equação acima representa a forma geral de uma EFP linear, sendo que a força externa $A(x)$ pode ser escolhida de acordo com o sistema a ser reproduzido.

2.2 Equações de Fokker-Planck não-lineares

Generalizações da equação de Fokker-Planck linear vem sendo propostas como alternativas na formulação estatística da difusão anômala (ou não-linear). Como pode ser visto nos trabalhos [9] a [21], as equações podem ser generalizadas de diferentes formas, seja através de derivadas fracionárias [13], com dependência espaço-temporal nos coeficientes [12, 10], ou outras. Uma característica comum em diversas generalizações é a relação com a mecânica estatística não-extensiva, sendo o formalismo de Tsallis uma escolha natural para a descrição de processos com difusão anômala. O trabalho pioneiro de Plastino e Plastino [9] mostrou a conexão entre uma equação de Fokker-Planck não-linear e a mecânica estatística não-extensiva, iniciando uma nova área de investigação, encontrando como soluções estacionárias destas equações as distribuições que maximizam a entropia de Tsallis.

2.2.1 Mecânica estatística não-extensiva

O carácter anômalo da difusão pode ser interpretado como causado pelos efeitos coletivos das partículas constituintes, pelas distribuições largas, ou pelas correlações de longo alcance. Estas características fogem da região de validade da estatística de Boltzmann-Gibbs. A generalização proposta por Tsallis [2] tem-se mostrado a melhor candidata na descrição dos processos físicos fora da região boltzmanniana, onde encontra-se a difusão anômala.

A mecânica estatística não-extensiva está baseada na generalização do funcional entrópico da entropia de BG, a qual é definida como

$$S_{BG} = -k_B \sum_i p_i \ln p_i, \quad (2.14)$$

onde k_B é a constante de Boltzmann e p_i é a probabilidade associada ao estado i . Para o

caso onde todos os estados são igualmente prováveis,

$$S_{\text{BG}} = k_B \ln W,$$

sendo W é o número de microestados acessíveis ao sistema. Nota-se que as funções logaritmo e sua inversa, a exponencial, são fundamentais na definição desta entropia. Uma propriedade importante desta equação é a aditividade, que se mantém nas formulações para sistemas contínuos e quânticos [6].

Podemos propor uma generalização das funções exponencial e de sua inversa a fim de redefinir a forma da entropia S_{BG} . Seja a q -exponencial definida como

$$e_q^x = [1 + (1 - q)x]_+^{\frac{1}{1-q}} \quad (e_1^x = e^x), \quad (2.15)$$

para q real, onde $[y]_+ = y$ para $y > 0$ e zero para $y \leq 0$; a exponencial usual é recuperada no limite $q \rightarrow 1$. A inversa, nomeada q -logaritmo, é definida como

$$\ln_q x = \frac{x^{1-q} - 1}{1 - q} \quad (x > 0; \ln_1 x = \ln x), \quad (2.16)$$

válida somente para $x > 0$ e tendo como caso particular a função logaritmo no limite $q \rightarrow 1$.

A entropia não-aditiva, S_q , pode então ser definida como

$$S_q = k \frac{1 - \sum_i p_i^q}{q - 1}, \quad (2.17)$$

onde k é uma constante com dimensões de entropia. Para o caso onde as probabilidades p_i 's são iguais, $p_i = 1/W$, pode-se escrever

$$S_q = k \ln_q W,$$

ficando evidente a semelhança com a forma de BG, justificando, assim, a introdução das q -funções. Neste trabalho utilizaremos a versão contínua da entropia S_q ,

$$S_q = k \frac{1 - \int_{-\infty}^{\infty} p^q(x) dx}{1 - q}. \quad (2.18)$$

O método dos multiplicadores de Lagrange pode, igualmente, ser utilizado para extremizar o funcional entrópico (2.18) sob vínculos escolhidos. Impondo um vínculo sobre a média do quadrado da variável x , $\langle x^2 \rangle$, pode-se obter a q -generalização da gaussiana [1]

como solução da otimização. Tem-se,

$$p(x) = ce_q^{-\beta x^2} \quad (2.19)$$

como a q -gaussiana, sendo c a constante de normalização e β o parâmetro de Lagrange correspondente.

q -Álgebra

Durante os mais de 20 anos de estudo da q -estatística, desenvolveu-se uma álgebra própria [1, 22, 23], que visa facilitar o tratamento das definições e tornar visualmente reconhecível as generalizações, sendo possível recuperar a estatística de BG no limite $q \rightarrow 1$. Além da q -exponencial e do q -logaritmo definiremos as operações de soma e produto generalizado.

Define-se como q -produto a operação [23],

$$x \otimes_q y \equiv [x^{1-q} + y^{1-q} - 1]^{\frac{1}{1-q}}, \quad (2.20)$$

ou equivalentemente,

$$x \otimes_q y \equiv e_q^{\ln_q x + \ln_q y}.$$

Para a generalização da soma tem-se a q -soma,

$$x \oplus_q y \equiv x + y + (1 - q)xy. \quad (2.21)$$

Estas duas operações possuem uma série de propriedades, interessantes e úteis durante os cálculos, que serão apresentadas no texto, quando necessário.

2.2.2 Aproximações da equação mestra para a EFPNL

As proposições das EFPNLs são, geralmente, feitas de maneira fenomenológica, com o intuito de reproduzir um determinado comportamento do sistema [17]. Faremos, aqui, uma derivação de EFPNLs utilizando aproximações na equação mestra, semelhantemente ao procedimento aplicado ao caso linear. Como visto anteriormente, a equação mestra para um espectro discreto pode ser escrita como

$$\frac{\partial P(n, t)}{\partial t} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} [P(m, t)w_{m,n}(t) - P(n, t)w_{n,m}(t)]. \quad (2.22)$$

Ao modificar a taxa de probabilidades de transição $w_{m,n}$, pode-se derivar uma equação de Fokker-Planck não-linear a partir de aproximações na equação mestra [14, 15]. A não-linearidade será introduzida no sistema através da taxa [16, 18]

$$w_{k,l}(\Delta, t) = -\frac{1}{\Delta}\delta_{k,l+1}A(k\Delta)a[P(k\Delta, t)] + \frac{1}{\Delta^2}(\delta_{k,l+1} + \delta_{k,l-1})\Gamma[P(k\Delta, t), R(l\Delta, t)]. \quad (2.23)$$

Na equação acima, $A(k\Delta)$ representa uma força externa, que deve ser assimétrica e como veremos confinante, $a[P]$ um funcional da probabilidade $P(n, t)$ e $\Gamma[P, R]$ outro funcional associado às probabilidades P e R de estados k e l diferentes. Comparando com (2.10) nota-se que os funcionais modificam as taxas, antes lineares.

Substituindo a taxa (2.23) na equação (2.22), considerando $x = k\Delta$ e posteriormente aplicando o limite $\Delta \rightarrow 0$ obtém-se a seguinte equação

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial\{A(x)\Psi[P(x, t)]\}}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \Omega[P(x, t)] \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} \right\}, \quad (2.24)$$

onde

$$\Psi[P(x, t)] = P(x, t)a[P(x, t)], \quad (2.25)$$

$$\Omega[P(x, t)] = \left[\Gamma[P, R] + P(x, t) \left(\frac{\partial\Gamma[P, R]}{\partial P} - \frac{\partial\Gamma[P, R]}{\partial R} \right) \right]_{R=P} \quad (2.26)$$

Na equação (2.24), $A(x)$ é uma força externa associada com o potencial confinante $\phi(x)$, $A(x) = -d\phi(x)/dx$. Os funcionais $\Psi[P(x, t)]$ e $\Omega[P(x, t)]$ devem obedecer $\{\Omega[P], \Psi[P] \in C^1\}$, isto é, serem contínuos com derivadas de primeira ordem contínuas.

A equação de Fokker-Planck (2.24) apresenta uma forma geral, onde os funcionais podem ser escolhidos de acordo com os requisitos do sistema em estudo e desta maneira reproduz formas conhecidas das equações não-lineares da literatura. Durante todo o trabalho, adotaremos a equação (2.24) como a forma geral das EFPNLs.

2.2.3 Teorema H

A equação de Boltzmann descreve a evolução temporal da distribuição de partículas para um gás diluído com inhomogeneidades [6]. Se nenhuma força externa atua sobre o sistema, de modo a criar soluções estacionárias, este deve tender ao equilíbrio após um tempo suficientemente longo. Este resultado foi mostrado por Boltzmann para o sistema acima e é conhecido como teorema H.

De uma maneira mais ampla, podemos considerar uma função $f(t)$, contínua e dife-

renciável no intervalo $[t_0, \infty]$ [4]. Assumindo que $f(t)$ satisfaça

$$f(t) \geq f_{min}, \quad \frac{df}{dt} \leq 0,$$

para $t \geq t_0$, ou seja, que $f(t)$ seja limitada inferiormente, sem mínimos locais, e monotona-mente decrescente, então para $t \rightarrow \infty$,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} f(t) = f_{\infty}.$$

Em resumo, toda função monotona-mente decrescente que é limitada inferiormente torna-se estacionária no limite $t \rightarrow \infty$. A função H de Boltzmann é um caso da função anterior.

Pode-se, desta forma, definir um funcional semelhante para sistemas fora do equilíbrio, na presença de um campo potencial. O teorema H, para sistemas que trocam energia com o exterior, corresponde a um sinal bem definido na derivada temporal do funcional energia livre [18]. A generalização do teorema para EFPNLs tem sido elaborada recentemente e reproduziremos aqui os resultados das referências [16, 18, 19].

Considere a forma entrópica generalizada

$$S[P] = \int_{-\infty}^{\infty} dx g[P(x, t)]; \quad g(0) = g(1) = 0; \quad \frac{d^2 g}{dP^2} \leq 0, \quad (2.27)$$

onde a desigualdade define a concavidade da entropia e impomos sobre o funcional interno $g[P]$ a condição $g[P(x, t)] \in C^2$. Devido a interação entre o sistema e o exterior, define-se o funcional de energia livre F e a energia interna U ,

$$F = U - \frac{1}{\beta} S; \quad U = \int_{-\infty}^{\infty} dx \phi(x) P(x, t), \quad (2.28)$$

onde β é um multiplicador de Lagrange.

Procura-se mostrar que $dF/dt \leq 0$ derivando a definição acima,

$$\begin{aligned} \frac{dF}{dt} &= \frac{d}{dt} \left(\int_{-\infty}^{\infty} dx \phi(x) P(x, t) - \frac{1}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} dx g[P(x, t)] \right) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\phi(x) - \frac{1}{\beta} \frac{dg[P]}{dP} \right) \frac{\partial P}{\partial t}. \end{aligned}$$

Substituindo a equação (2.24) na derivada temporal da equação acima e integrando por

partes, obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{dF}{dt} = & - \int_{-\infty}^{\infty} dx \left\{ \Psi[P] \frac{d\phi(x)}{dx} + \Omega[P] \frac{\partial P}{\partial x} \right\} \\ & \times \left\{ \frac{d\phi(x)}{dx} - \frac{1}{\beta} \frac{d^2 g[P]}{dP^2} \frac{\partial P}{\partial x} \right\}. \end{aligned}$$

Note que a condição para a derivada temporal pode ser obtida assumindo a relação entre a forma entrópica (2.27) e os termos da EFPNL (2.24),

$$-\frac{1}{\beta} \frac{d^2 g[P]}{dP^2} = \frac{\Omega[P]}{\Psi[P]}, \quad (2.29)$$

indicando uma condição suficiente para a prova do teorema H. Com isto,

$$\frac{dF}{dt} = - \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi[P] \left(\frac{d\phi(x)}{dx} + \frac{\Omega[P]}{\Psi[P]} \frac{\partial P}{\partial x} \right)^2 \leq 0. \quad (2.30)$$

Veja que a equação (2.29) foi demonstrada para a equação de Fokker-Planck geral (2.24), criando uma relação entre a dinâmica macroscópica, definida pela EFPNL, e a dinâmica microscópica, ditada pela mecânica estatística representada pelo funcional de entropia (2.27). Esta relação é um resultado importante e será usada durante o trabalho para encontrar a entropia associada a uma dada EFPNL.

Entropia máxima

Para corroborar com a relação (2.29), mostra-se, que no equilíbrio, ela é equivalente ao princípio de entropia máxima, ou MaxEnt. Introduzindo o funcional

$$I[P(x, t)] = S[P] + \alpha \left(1 - \int_{-\infty}^{\infty} dx P(x, t) \right) + \beta \left(U - \int_{-\infty}^{\infty} dx \phi(x) P(x, t) \right), \quad (2.31)$$

onde α e β são multiplicadores de Lagrange, e impondo a condição $dI[P]/dP = 0$ com $P = P_{est}(x)$ obtém-se

$$\left. \frac{dg[P]}{dP} \right|_{P=P_{est}(x)} = \alpha + \beta\phi(x), \quad (2.32)$$

sendo P_{est} a representação para a distribuição de probabilidades no estado estacionário ou também chamado equilíbrio. Para a EFP geral (2.24) tem-se, no equilíbrio,

$$A(x) = \frac{\Omega[P_{est}]}{\Psi[P_{est}]} \frac{dP_{est}(x)}{dx},$$

a qual, após uma integração, é escrita como

$$\phi_0 - \phi(x) = \int_{P_{est}(x_0)}^{P_{est}(x)} \frac{\Omega[P_{est}(x')]}{\Psi[P_{est}(x')]} dP_{est}(x').$$

Integrando a equação (2.29) e utilizando a equação acima encontra-se,

$$\left. \frac{dg[P]}{dP} \right|_{P=P_{est}(x)} = C_1 + \beta\phi(x), \quad (2.33)$$

onde C_1 é uma constante da integração. Pode-se notar que a equação acima é equivalente àquela obtida pela princípio de MaxEnt, equação (2.32), tomando $C_1 = \alpha$.

Para complementar a prova do teorema H, deve-se mostrar que o funcional energia livre é limitado por baixo para todo tempo t , isto é

$$F(P(x, t)) \geq F(P_{est}(x)). \quad (2.34)$$

Desta forma, juntamente com o decaimento temporal de F e a suposição de um único mínimo, garante-se que o sistema atingirá o mínimo após um longo tempo de evolução. Tal prova pode ser encontrada nas referências [16, 18, 20].

Família de equações

Um último comentário relevante sobre a relação (2.29) é relacionado com a existência de famílias de EFP. Note que a equação relaciona a razão $\Omega[P]/\Psi[P]$ com o funcional de entropia $g[P]$ e não os funcionais da EFP separadamente. Assim, qualquer equação cuja razão seja, por exemplo, $qD[P(x, t)]^{q-2}$, corresponderá à entropia de Tsallis [1] e consequentemente à mecânica estatística não-extensiva. Define-se como família de EFP as equações que possuem a mesma razão na equação (2.29) e, desta forma, a mesma entropia associada.

2.3 Dinâmica molecular

Problemas físicos envolvendo muitos corpos, normalmente chamados problemas de N corpos, têm sua origem na dinâmica do sistema solar mas, com o advento da teoria atômica no início do século XX, tornaram-se centrais no entendimento de sistemas no nível microscópico. Apesar da natureza atômica ser inerentemente quântica (devendo, portanto, ser tratada pela mecânica quântica), o comportamento da matéria em diversos níveis pode ser entendido de maneira clássica, tornando a técnica computacional de dinâmica

molecular uma ferramenta importante.

Com o advento dos computadores modernos, uma nova caracterização das ciências físicas teve de ser incorporada: o experimento computacional. Além da teoria e da experiência, podemos contar com a ferramenta computacional para a investigação dos sistemas físicos. Localizando-se entre os dois pólos (teoria e experimento), a simulação computacional carrega um pouco de cada, adquirindo um aspecto próprio e devendo, assim, ser interpretada convenientemente. Como teoria, as hipóteses precisam ser validadas, explicar observações existentes e predizer novos fenômenos. Como experimento, permite o estudo de sistemas para os quais experimentos físicos são difíceis tecnicamente, com raros eventos ou até inacessíveis. Assim, o experimento computacional tornou-se para a física moderna uma ferramenta útil, acessível e abrangente.

A dinâmica molecular consiste em uma técnica de simulação computacional onde a evolução temporal de um conjunto de partículas interagindo pode ser visualizada pela integração das equações de movimento (lei de Newton, equações de Lagrange ou equações de Hamilton). Neste trabalho, adotaremos

$$\vec{F}_i = m_i \vec{a}_i \quad (i = 1, 2, \dots, N), \quad (2.35)$$

para cada partícula i do sistema de N partículas. Acima temos m_i representando a massa da partícula, $\vec{a}_i = d^2\vec{r}_i/dt^2$ sua aceleração e \vec{F}_i a força total atuando sobre a partícula i , somando as contribuições externas e a interação com as outras partículas. Apesar de tratar-se de um problema determinista, a dinâmica molecular é um método de mecânica estatística que permite gerar um “ensemble” estatístico e portanto, as quantidades físicas podem ser definidas como médias sobre configurações.

A seguir, comentaremos sobre algumas propriedades que definem a dinâmica molecular. Os livros da referência [8] apresentam detalhes sobre as simulações e diferentes aplicações da técnica.

Condições de contorno periódicas

A primeira preocupação que surge durante a simulação é a respeito das bordas do sistema. Quando estamos interessados em um sistema fechado, podemos pensar em bordas rígidas, que impedem a passagem das partículas para o exterior da amostra. Porém, os efeitos de borda serão sempre superestimados, uma vez que, o número de partículas existentes numa amostra são ordens de grandeza maiores do que a simulação, criando o efeito chamado de tamanho finito.

Outras vezes, entretanto, queremos um sistema livre dos efeitos de borda e usamos

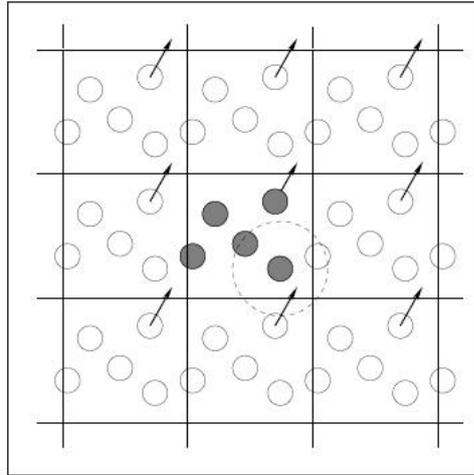


Figura 2.1: Condições de contorno periódicas. Figura obtida em <http://www.fz-juelich.de/nic-series/volume23>.

as condições de contorno periódicas. O uso destas condições procura simular um sistema infinito e o que fazemos consiste em replicar a região de simulação. A figura 2.1 mostra a região de simulação, onde as partículas encontram-se em cinza, e as cópias em torno da mesma.

Na prática, o que fazemos é reintroduzir as partículas que deixam a caixa de simulação no ponto correspondente de sua entrada na caixa cópia. Para o cálculo das interações, adotamos o critério da imagem mínima. Por exemplo: ao calcularmos a força sobre a partícula vetorizada na figura 2.1, consideraremos que essa interage com as partículas mais próximas, sejam elas reais ou imagens [8]. Além desta convenção e mesmo utilizado as condições de contorno periódicas, efeitos de tamanho finito podem ser encontrados durante as simulações e o tamanho dos sistemas devem ser escolhidos de maneira a minimizá-los.

Estado inicial

Quando estamos interessados em sistemas em equilíbrio é esperado que os resultados das simulações sejam independentes das condições iniciais. Assim, qualquer escolha para a distribuição inicial de partículas é aceitável e usualmente escolhe-se uma distribuição uniforme. Para as velocidades, podemos utilizar uma distribuição baseada na temperatura do sistema, definindo aleatoriamente suas direções.

Porém, para sistemas fora do equilíbrio as configurações iniciais têm importância na evolução do sistema. Veremos no capítulo 4 que é possível fazer a escolha das configurações iniciais a fim de reproduzir um determinado estado inicial da equação que descreve o

sistema.

Integradores

Sendo a dinâmica molecular baseada na integração das equações (2.35), o algoritmo usado na integração deve ser capaz de resolvê-las em cada instante de tempo. Existem diferentes métodos utilizados na literatura, dentre os quais podemos citar: *Leapfrog*, *Verlet*, *velocity Verlet*, cada um apresentando vantagens e desvantagens. Neste trabalho adotamos o esquema chamado de *velocity Verlet*, cuja descrição pode ser encontrada em [8].

Capítulo 3

Equações de Fokker-Planck não-lineares multi-difusivas

O caráter não-linear das equações de Fokker-Planck está, geralmente, relacionado com a heterogeneidade do meio, auto-organização, interações cooperativas dos componentes internos do sistema, entre outros [4]. Neste capítulo, propomos que estes efeitos podem ocorrer de maneira simultânea, cada qual contribuindo com seu expoente não-linear para a equação que descreve o sistema. Derivaremos equações de Fokker-Planck não-lineares, com N termos difusivos, como aproximações da equação mestra [14, 15, 20], sendo que as equações podem ser obtidas de diferentes formas, seja através dos princípios da termodinâmica de não-equilíbrio [4] ou como simples generalizações do caso linear.

Propomos que as equações, que denominaremos como multi-difusivas, podem ser usadas para descrever difusões em sistema complexos e meios heterogêneos, englobando difusões anômalas e lineares numa mesma equação. A fim de caracterizá-las, encontraremos a entropia associada à equação de Fokker-Planck [16, 18] e obtendo a distribuição de probabilidades estacionária mostraremos a equivalência com a distribuição que maximiza a entropia associada.

Estudaremos, inicialmente, o caso especial com dois termos difusivos; a equação de Fokker-Planck neste caso corresponde a

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial[A(x)P(x, t)]}{\partial x} + D_1 \frac{\partial^2 P^{\alpha_1}(x, t)}{\partial x^2} + D_2 \frac{\partial^2 P^{\alpha_2}(x, t)}{\partial x^2}, \quad (3.1)$$

onde D_1 e D_2 são constantes de difusão, os expoentes α_1 e α_2 são característicos do sistema a ser estudado e $A(x)$ é a força externa associada a um potencial $\phi(x)$ confinante,

$$A(x) = -\frac{d\phi(x)}{dx},$$

que é responsável por guiar o sistema para um estado estacionário. Usaremos principalmente esta equação nos cálculos e simulações apresentadas durante o capítulo.

Em geral, para N termos difusivos, temos

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial[A(x)P(x, t)]}{\partial x} + \sum_{i=1}^N D_i \frac{\partial^2 P^{\alpha_i}(x, t)}{\partial x^2}, \quad (3.2)$$

onde D_i é a constante de difusão relacionada com o expoente α_i . No limite $N \rightarrow \infty$ podemos imaginar uma versão contínua da forma (3.2),

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial[A(x)P(x, t)]}{\partial x} + \int d\alpha D(\alpha) \frac{\partial^2 P^\alpha(x, t)}{\partial x^2}, \quad (3.3)$$

que para $D(\alpha) = \sum_{i=1}^N \delta(\alpha - \alpha_i) D_i$ recupera-se a forma (3.2). Os resultados para estes casos serão apresentados como generalizações do caso bi-difusivo.

No final do capítulo, apresentamos alguns exemplos das equações (3.1), (3.2) e (3.3), as equações de Fokker-Planck não-lineares multi-difusivas.

3.1 Equação Mestra

A não-linearidade das equações de Fokker-Planck pode estar ligada à heterogeneidade do meio como, também, às interações entre as partículas. No contexto da difusão, podemos pensar em um meio poroso não-homogêneo ou com partículas difusoras que apresentam uma distribuição de tamanhos, que a modificam de uma maneira própria. Lembremos que a Equação Mestra é responsável por descrever a variação temporal da probabilidade de encontrarmos uma partícula em um determinado estado. Nela, a maneira como as partículas difundem entre os estados é controlada pela taxa de probabilidades de transição, onde os efeitos não-lineares serão introduzidos. Faremos uma aproximação desta equação, para o caso discreto e contínuo, a fim de obter a EFPNL proposta.

3.1.1 EM discreta para o caso bi-difusivo

Consideremos a equação mestra em sua forma discreta,

$$\frac{\partial}{\partial t} P(n\Delta, t) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} [P(m\Delta, t)w_{m,n}(\Delta, t) - P(n\Delta, t)w_{n,m}(\Delta, t)], \quad (3.4)$$

sendo $w_{k,l}$ a taxa de probabilidades de transição do estado k para o estado l e $P(n\Delta, t)$ a probabilidade de encontrarmos a partícula no estado $n\Delta$ no instante t . Seguindo o pro-

cedimento proposto nas referências [6, 14] e mostrado na subseção 2.2.2, aproximaremos a equação (3.4) com o propósito de obtermos a equação (3.1).

O fato de (3.1) possuir dois termos de difusão, nos leva a pensar em probabilidades de transição diferentes associadas ao mesmo sítio. Escolheremos uma taxa de transição geral, da forma

$$\begin{aligned}
w_{k,l}(\Delta, t) = & - \frac{1}{\Delta} \delta_{k,l+1} A(k\Delta) \\
& + \frac{1}{\Delta^2} (\delta_{k,l+1} + \delta_{k,l-1}) [aP^{\mu-1}(k\Delta, t) + bP^{\nu-1}(l\Delta, t)] \\
& + \frac{1}{\Delta^2} (\delta_{k,l+1} + \delta_{k,l-1}) [cP^{\sigma-1}(k\Delta, t) + dP^{\beta-1}(l\Delta, t)]
\end{aligned} \tag{3.5}$$

onde nota-se que o primeiro termo no lado direito da igualdade corresponde a uma força direcionada, enquanto que no segundo termo encontramos as contribuições do estado presente, $P^{\mu-1}(k\Delta, t)$, antes da transição e do estado futuro, $P^{\nu-1}(l\Delta, t)$, próximo ao estado k . O terceiro termo é uma segunda contribuição não-linear para a transição e pode ser associado às diferentes propriedades do meio.

Desconsideraremos, inicialmente, a dependência da transição no estado futuro e levaremos em conta somente o estado atual da partícula, o resultado explicará esta escolha. Adotando $b = d = 0$, $a = D_1$, $b = D_2$, $\mu = \alpha_1$ e $\sigma = \alpha_2$ podemos substituir a taxa (3.5) na equação (3.4) e obter

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} P(n\Delta, t) = & \sum_{m=-\infty}^{+\infty} P(m\Delta, t) \left\{ -\frac{1}{\Delta} \delta_{m,n+1} A(m\Delta) \right. \\
& + \frac{1}{\Delta^2} (\delta_{m,n+1} + \delta_{m,n-1}) [D_1 P^{\alpha_1-1}(m\Delta, t) + D_2 P^{\alpha_2-1}(m\Delta, t)] \left. \right\} \\
& - P(n\Delta, t) \left\{ -\frac{1}{\Delta} \delta_{n,m+1} A(n\Delta) \right. \\
& + \frac{1}{\Delta^2} (\delta_{n,m+1} + \delta_{n,m-1}) [D_1 P^{\alpha_1-1}(n\Delta, t) + D_2 P^{\alpha_2-1}(n\Delta, t)] \left. \right\}.
\end{aligned}$$

Efetuando o somatório,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} P(n\Delta, t) = & - \frac{1}{\Delta} A((n+1)\Delta) P((n+1)\Delta, t) + \frac{1}{\Delta} A(n\Delta) P(n\Delta, t) \\
& + \frac{1}{\Delta^2} [D_1 P^{\alpha_1}((n+1)\Delta, t) + D_2 P^{\alpha_2}((n+1)\Delta, t)] \\
& + \frac{1}{\Delta^2} [D_1 P^{\alpha_1}((n-1)\Delta, t) + D_2 P^{\alpha_2}((n-1)\Delta, t)] \\
& - 2 \frac{1}{\Delta^2} [D_1 P^{\alpha_1}(n\Delta, t) + D_2 P^{\alpha_2}(n\Delta, t)].
\end{aligned}$$

Escrevendo $x = n\Delta$, com $x + \Delta = (n + 1)\Delta$ e $x - \Delta = (n - 1)\Delta$, a equação acima é levada a

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} P(n\Delta, t) = & - \frac{1}{\Delta} [A(x + \Delta)P(x + \Delta, t) - A(x)P(x\Delta, t)] \\ & + \frac{D_1}{\Delta^2} [P^{\alpha_1}(x + \Delta, t) + P^{\alpha_1}(x - \Delta, t) - 2P^{\alpha_1}(x, t)] \\ & + \frac{D_2}{\Delta^2} [P^{\alpha_2}(x + \Delta, t) + P^{\alpha_2}(x - \Delta, t) - 2P^{\alpha_2}(x, t)], \end{aligned}$$

que no limite $\Delta \rightarrow 0$ pode ser aproximada como,

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = - \frac{\partial [A(x)P(x, t)]}{\partial x} + D_1 \frac{\partial^2 P^{\alpha_1}(x, t)}{\partial x^2} + D_2 \frac{\partial^2 P^{\alpha_2}(x, t)}{\partial x^2}, \quad (3.6)$$

que é a EFPNL que pretendemos estudar. Note que podemos recuperar formas conhecidas a partir desta equação, como por exemplo: (i) para $A(x) = 0$, $D_1 = 0$ e $\alpha_2 = 1$ (ou $A(x) = 0$, $D_2 = 0$ e $\alpha_1 = 1$) temos a equação de difusão linear sem o termo de força ou equação do calor [6]; (ii) para $D_1 = 0$ e $\alpha_2 = 1$ (ou $D_2 = 0$ e $\alpha_1 = 1$) temos a equação de Fokker-Planck linear [3]; (iii) para $D_1 = 0$ e $\alpha_2 = \nu$ ($D_2 = 0$ e $\alpha_1 = \nu$) temos a equação proposta por Plastino e Plastino [9]; (iv) para o caso $\alpha_1 = 1$ e $\alpha_2 = 2$ (ou $\alpha_1 = 2$ e $\alpha_2 = 1$) temos uma realização física da entropia não-extensiva para o sistema de vórtices interagentes [26]. Voltaremos nestes exemplos durante o capítulo.

3.1.2 EM contínua para o caso bi-difusivo

Para variáveis contínuas, a equação mestra toma a seguinte forma [14]

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dy \left\{ \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-y)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial x^n} [P(x, t)\tau(x, y)] \right\}. \quad (3.7)$$

Para derivar a EFP a partir da equação acima, definiremos a taxa de transição

$$\begin{aligned} \tau(x, y) = & \gamma_1(x, y) + \gamma_2(x, y)[aP^{\mu-1}(x, t) + bP^{\nu-1}(x + y, t)], \\ & + \gamma_2(x, y)[cP^{\sigma-1}(x, t) + dP^{\beta-1}(x + y, t)], \end{aligned} \quad (3.8)$$

sendo

$$\begin{aligned} \gamma_1(x, y) &= \frac{A(x)}{\Delta^2}; \text{ para } 0 \leq y \leq \sqrt{2}\Delta, \\ \gamma_2(x, y) &= \frac{1}{2\sqrt{6}\Delta^3}; \text{ para } -\sqrt{6}\Delta \leq y \leq \sqrt{6}\Delta, \end{aligned} \quad (3.9)$$

que atuam em determinadas regiões do espaço. Em analogia ao caso discreto, nota-se uma força direcionada, isto é, não-simétrica e termos que dependem não-linearmente tanto do estado atual, x , como do estado futuro do sistema, $x + y$.

Adotaremos, da mesma maneira, $b = d = 0$, $a = D_1$, $b = D_2$, $\mu = \alpha_1$ e $\sigma = \alpha_2$, a fim de obtermos o mesmo resultado do caso discreto. Substituindo $\tau(x, y)$ na equação mestra (3.7), podemos inverter a ordem dos operadores e escrevê-la em uma forma conveniente

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial x^n} I(x, t), \quad (3.10)$$

onde

$$I(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dy y^n P(x, t) \{ \gamma_1(x, y) + \gamma_2(x, y) [D_1 P^{\alpha_1-1}(x, t) + D_2 P^{\alpha_2-1}(x, t)] \}.$$

Os termos da integral podem ser resolvidos separadamente substituindo $\gamma_1(x, y)$ e $\gamma_2(x, y)$ acima. Teremos

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} dy y^n P(x, t) \{ \gamma_1(x, y) + \gamma_2(x, y) [D_1 P^{\alpha_1-1}(x, t) + D_2 P^{\alpha_2-1}(x, t)] \} = \\ \int_{-\sqrt{6}\Delta}^0 dy y^n \left\{ \frac{1}{2\sqrt{6}\Delta^3} [D_1 P^{\alpha_1}(x, t) + D_2 P^{\alpha_2}(x, t)] \right\} \\ + \int_0^{\sqrt{2}} dy y^n \left\{ \frac{A(x)}{\Delta^2} + \frac{1}{2\sqrt{6}\Delta^3} [D_1 P^{\alpha_1}(x, t) + D_2 P^{\alpha_2}(x, t)] \right\} \\ + \int_0^{\sqrt{6}\Delta} dy y^n \left\{ \frac{1}{2\sqrt{6}\Delta^3} [D_1 P^{\alpha_1}(x, t) + D_2 P^{\alpha_2}(x, t)] \right\}. \end{aligned}$$

Nota-se que a dependência em y é a mesma para todas as integrais. De uma forma genérica, a solução da integral é

$$\int_a^b dy y^n = \frac{y^{n+1}}{n+1} \Big|_a^b = \frac{b^{n+1} - a^{n+1}}{n+1}.$$

Aplicando os limites de integração e levando o resultado na equação (3.10) podemos

calcular as derivadas. No intervalo $[-\sqrt{6}\Delta, 0]$

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial x^n} \left[-\frac{1}{2\sqrt{6}\Delta^3} D_i P^{\alpha_i}(x, t) \frac{(-\sqrt{6}\Delta)^{n+1}}{n+1} \right] = \\ \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{2\sqrt{6}\Delta^3} D_i P^{\alpha_i}(x, t) \frac{6\Delta^2}{2} \right] \\ + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[\frac{-1}{2\sqrt{6}\Delta^3} D_i P^{\alpha_i}(x, t) \frac{-6\sqrt{6}\Delta^3}{3} \right] + O(\Delta). \end{aligned}$$

Apenas os dois primeiros termos da soma contribuirão para o resultado final, pois, uma vez que tomaremos o limite $\Delta \rightarrow 0$, os termos com ordem em Δ se anularão. Para o intervalo $[0, \sqrt{2}]$ temos a parte relacionada com a força

$$\sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial x^n} \left[P \frac{A(x)}{\Delta^2} \frac{(\sqrt{2}\Delta)^{n+1}}{n+1} \right] = -\frac{\partial}{\partial x} [P(x, t)A(x)] + O(\Delta)$$

e as contribuições

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial x^n} \left[\frac{1}{2\sqrt{6}\Delta^3} D_i P^{\alpha_i}(x, t) \frac{(\sqrt{2}\Delta)^{n+1}}{n+1} \right] = \\ -\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{2\sqrt{6}\Delta^3} D_i P^{\alpha_i}(x, t) \frac{2\Delta^2}{2} \right] \\ + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[\frac{1}{2\sqrt{6}\Delta^3} D_i P^{\alpha_i}(x, t) \frac{2\sqrt{2}\Delta^3}{3} \right] + O(\Delta). \end{aligned}$$

Para o intervalo restante $[\sqrt{2}, \sqrt{6}\Delta]$

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial x^n} \left\{ \frac{1}{2\sqrt{6}\Delta^3} D_i P^{\alpha_i}(x, t) \left[\frac{(\sqrt{6}\Delta)^{n+1} - (\sqrt{2}\Delta)^{n+1}}{n+1} \right] \right\} = \\ -\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{2\sqrt{6}\Delta^3} D_i P^{\alpha_i} \frac{6\Delta^2}{2} - \frac{1}{2\sqrt{6}\Delta^3} D_i P^{\alpha_i}(x, t) \frac{2\Delta^2}{2} \right] \\ + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[\frac{-1}{2\sqrt{6}\Delta^3} D_i P^{\alpha_i} \frac{-6\sqrt{6}\Delta^3}{3} - \frac{1}{2\sqrt{6}\Delta^3} D_i P^{\alpha_i}(x, t) \frac{2\sqrt{2}\Delta^3}{3} \right] + O(\Delta). \end{aligned}$$

Somando as contribuições, os termos de derivada primeira da probabilidade se cancelam restando somente as derivadas segunda e o termo da derivada primeira da força. O índice i em α_i e D_i , aplica-se a ambos expoentes 1 e 2; assim, os cálculos acima são válidos

para ambos termos. Aplicando o limite $\Delta \rightarrow 0$ e somando os três intervalos, teremos

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial[A(x)P(x, t)]}{\partial x} + D_1 \frac{\partial^2 P^{\alpha_1}(x, t)}{\partial x^2} + D_2 \frac{\partial^2 P^{\alpha_2}(x, t)}{\partial x^2}, \quad (3.11)$$

que é idêntica à equação encontrada para o caso discreto. Desta forma, mostramos que é possível derivar a partir da equação mestra uma equação de Fokker-Planck não-linear com dois termos difusivos.

Poderíamos usar este procedimento e obter formas mais gerais para a EFPNL como as propostas nas referências [16, 20], onde um funcional $\Psi[P(x, t)]$ acompanha a força. Porém, estamos interessados em equações relacionadas com a entropia de Tsallis e, neste caso, apenas a razão $\Psi[P(x, t)]/\Omega[P(x, t)]$ é importante. Discutiremos esta questão nas seções a seguir mas, a título de ilustração, podemos considerar

$$\gamma_1(x, y) = \frac{A(x)}{\Delta^2} \Psi[P(x, t)] P^{-1}(x, t),$$

e procedendo da mesma forma, obtém-se

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \{A(x)\Psi[P(x, t)]\} + D_1 \frac{\partial^2 P^{\alpha_1}(x, t)}{\partial x^2} + D_2 \frac{\partial^2 P^{\alpha_2}(x, t)}{\partial x^2}. \quad (3.12)$$

Usaremos este resultado quando conveniente.

3.1.3 Forma Geral

Como mostrado nas referências [14, 15], os termos da taxa (3.5) com os coeficientes c e d levam a uma forma mais geral. Considerando o funcional $\Psi[P(x, t)]$ no termo de força, podemos chegar à seguinte EFP

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = & -\frac{\partial}{\partial x} \{A(x)\Psi[P(x, t)]\} + D_1 \frac{\partial^2 P(x, t)^{\alpha_1}}{\partial x^2} + D_2 \frac{\partial^2 P(x, t)^{\alpha_2}}{\partial x^2} \\ & + D_3 P(x, t)^{\alpha_3-1} \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2} - D_3 P(x, t) \frac{\partial^2 P(x, t)^{\alpha_3-1}}{\partial x^2} \\ & + D_4 P(x, t)^{\alpha_4-1} \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2} - D_4 P(x, t) \frac{\partial^2 P(x, t)^{\alpha_4-1}}{\partial x^2}, \end{aligned}$$

que pode se escrita de forma compacta em termos dos funcionais $\Psi[P(x, t)]$ e $\Omega[P(x, t)]$.

Para isto, lembremos que

$$D_i \frac{\partial^2 P^{\alpha_i}}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_i \alpha_i P^{\alpha_i-1} \frac{\partial P}{\partial x} \right) = D_i \alpha_i P^{\alpha_i-1} \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \alpha_i (\alpha_i - 1) P^{\alpha_i-2} \left(\frac{\partial P}{\partial x} \right)^2,$$

e então, teremos

$$\begin{aligned} D_i P^{\alpha_i-1} \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} &= -D_i (\alpha_i - 1) P^{\alpha_i-2} \left(\frac{\partial P}{\partial x} \right)^2 + \frac{\partial}{\partial x} \left(D_i P^{\alpha_i-1} \frac{\partial P}{\partial x} \right) \\ -D_i P \frac{\partial^2 P^{\alpha_i-1}}{\partial x^2} &= -D_i \frac{\partial}{\partial x} \left(P^{\alpha_i-1} (\alpha_i - 1) \frac{\partial P}{\partial x} \right) + D_i (\alpha_i - 1) P^{\alpha_i-2} \left(\frac{\partial P}{\partial x} \right)^2, \end{aligned}$$

e desta forma,

$$D_i P^{\alpha_i-1} \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} - D_i P \frac{\partial^2 P^{\alpha_i-1}}{\partial x^2} = -\frac{\partial}{\partial x} \left[(D_i P^{\alpha_i-1} - D_i P^{\alpha_i-1} (\alpha_i - 1)) \frac{\partial P}{\partial x} \right].$$

Usando estes resultados podemos reescrever

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \{A(x) \Psi[P(x, t)]\} + \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \Omega[P(x, t)] \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} \right\}, \quad (3.13)$$

onde

$$\Omega[P(x, t)] = D_1 \alpha_1 P^{\alpha_1-1} + D_2 \alpha_2 P^{\alpha_2-1} + D_3 \alpha_3 P^{\alpha_3-1} - 2D_3 P^{\alpha_3-1} + D_4 \alpha_4 P^{\alpha_4-1} - 2D_4 P^{\alpha_4-1}.$$

A forma da equação (3.13) é similar à proposta por Schwämmle *et al.* [18] e podemos utilizar todo o desenvolvimento obtido para estas equações, ou melhor: a associação com a forma entrópica que relaciona as equações de Fokker-Planck não-lineares com a Mecânica estatística não-extensiva [1] e o conjunto de equações de Fokker-Planck que apresentam a mesma entropia. Usaremos estas propriedades, derivadas no capítulo 2, na próxima seção.

3.1.4 EM para o caso multi-difusivo

Nesta subseção, propomos que vários efeitos não-lineares podem ocorrer simultaneamente e estendemos a derivação da Fokker-Planck para o caso multi-difusivo apresentado na equação (3.2). Dada a equação mestra (3.4), escolheremos a taxa de probabilidades de transição,

$$\begin{aligned} w_{k,l} = & - \frac{1}{\Delta} \delta_{k,l+1} A(k\Delta) \\ & + \frac{1}{\Delta^2} \sum_{i=1}^N (\delta_{k,l+1} + \delta_{k,l-1}) [D_i P^{\mu_i-1}(k\Delta, t) + D'_i P^{\mu_i-1}(l\Delta, t)] \end{aligned} \quad (3.14)$$

e considerando $D'_i = 0$ e $\mu_i = \alpha_i$, a equação pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} P(n\Delta, t) &= \\ &= \sum_{m=-\infty}^{+\infty} P(m\Delta, t) \left\{ -\frac{1}{\Delta} \delta_{m,n+1} A(m\Delta) + \frac{1}{\Delta^2} (\delta_{m,n+1} + \delta_{m,n-1}) \sum_{i=1}^N D_i P^{\alpha_i-1}(m\Delta, t) \right\} \\ &- P(n\Delta, t) \left\{ -\frac{1}{\Delta} \delta_{n,m+1} A(n\Delta) + \frac{1}{\Delta^2} (\delta_{n,m+1} + \delta_{n,m-1}) \sum_{i=1}^N D_i P^{\alpha_i-1}(n\Delta, t) \right\}. \end{aligned}$$

Efetuando o somatório, escrevendo $x = n\Delta$ e considerando o limite onde $\Delta \rightarrow 0$ teremos,

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial[A(x)P(x, t)]}{\partial x} + \sum_{i=1}^N D_i \frac{\partial^2 P^{\alpha_i}(x, t)}{\partial x^2}, \quad (3.15)$$

que é justamente a equação (3.2).

Considerando a taxa (3.14) com todas as dependências, encontraremos uma forma geral também para o caso multi-difusivo.

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial[A(x)P(x, t)]}{\partial x} + \sum_{i=1}^N \left[D_i \frac{\partial^2 P^{\alpha_i}}{\partial x^2} + D'_i \left(P^{\alpha'_i-1} \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 P^{\alpha'_i}}{\partial x^2} \right) \right], \quad (3.16)$$

que pode ser escrita na forma genérica

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \{A(x)\Psi[P(x, t)]\} + \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \Omega[P(x, t)] \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} \right\} \quad (3.17)$$

onde

$$\Psi[P(x, t)] = P(x, t), \quad (3.18)$$

$$\Omega[P(x, t)] = \sum_{i=1}^N \left\{ \alpha_i D_i P^{\alpha_i-1} + D'_i P^{\alpha'_i-1} (\alpha'_i - 2) \right\}, \quad (3.19)$$

mostrando que a representação (3.17) engloba todos os casos que estudaremos.

A derivação para o caso contínuo pode ser feita considerando a equação (3.10) e a taxa

$$\tau(x, y) = \gamma_1(x, y) + \gamma_2(x, y) \sum_{i=1}^N \left[D_i P^{\alpha_i-1}(x, t) + D'_i P^{\alpha'_i-1}(x + y, t) \right], \quad (3.20)$$

para as mesmas escolhas de $\gamma_1(x, y)$ e $\gamma_2(x, y)$ acima.

Vimos, nesta seção, que a EFPNL multi-difusiva pode ser obtida a partir de apro-

ximações na equação mestra. Mostramos o caso particular para dois termos difusivos e como a escolha das constantes pode levá-la aos casos conhecidos. Derivamos o caso com N termos difusivos e uma forma geral dada por (3.13).

3.2 Entropia associada

Conhecer a entropia faz parte da caracterização de um sistema. Como um potencial termodinâmico, informações podem ser obtidas a partir da entropia, como temperatura e grandezas intensivas que caracterizam o sistema [6]. Para sistemas fora do equilíbrio termodinâmico, a entropia é importante na definição da energia livre do sistema e informações à respeito do estado estacionário podem ser obtidas, tais como a tendência a este estado, estabilidade e unicidade das soluções [4].

Como visto no capítulo 2, pode-se encontrar a forma da entropia associada a uma equação de Fokker-Planck provando o teorema-H para o sistema [16, 18]. Seja a EFPNL

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \{A(x)\Psi[P(x, t)]\} + \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \Omega[P(x, t)] \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} \right\} \quad (3.21)$$

e a definição de entropia dada por

$$S = \int_{-\infty}^{\infty} g[P(x, t)] dx, \quad (3.22)$$

$$g[0] = 0; \quad g[1] = 0; \quad \frac{d^2 g}{dP^2} \leq 0$$

onde $g[P(x, t)]$ representa um funcional de entropia possuindo as condições de ser nulo para eventos tidos como certos ($g[0] = g[1] = 0$) e côncavo (segunda derivada negativa). Para que o teorema-H seja válido, devemos garantir a relação

$$\frac{d^2 g}{dP^2} = -\beta \frac{\Omega[P(x, t)]}{\Psi[P(x, t)]}, \quad (3.23)$$

que é a relação que conecta os funcionais da equação de Fokker-Planck com o funcional da entropia, onde β é um parâmetro de Lagrange, conforme definido no capítulo anterior. Vale ressaltar que (3.23) define uma família de equações associadas à mesma forma entrópica [21].

Resolveremos a equação (3.23) para a equação bi-difusiva (3.1). Considerando a relação

entre as derivadas,

$$D_i \frac{\partial^2 P^{\alpha_i}}{\partial x^2} = D_i \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial P^{\alpha_i}}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_i \alpha_i P^{\alpha_i-1} \frac{\partial P}{\partial x} \right),$$

podemos reescrever a equação da seguinte maneira

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial[A(x)P(x, t)]}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(D_1 \alpha_1 P^{\alpha_1-1} + D_2 \alpha_2 P^{\alpha_2-1} \frac{\partial P}{\partial x} \right) \right],$$

onde identificamos

$$\begin{aligned} \Psi[P(x, t)] &= P(x, t) \\ \Omega[P(x, t)] &= D_1 \alpha_1 P^{\alpha_1-1} + D_2 \alpha_2 P^{\alpha_2-1}. \end{aligned}$$

Substituindo $\Psi[P]$ e $\Omega[P]$ na equação (3.23) teremos

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\beta} \frac{d^2 g}{dP^2} &= \frac{d}{dP} \left(-\frac{1}{\beta} \frac{dg}{dP} \right) = \\ &= \frac{D_1 \alpha_1 P^{\alpha_1-1} + D_2 \alpha_2 P^{\alpha_2-1}}{P(x, t)} \\ &= D_1 \alpha_1 P^{\alpha_1-2} + D_2 \alpha_2 P^{\alpha_2-2}. \end{aligned}$$

Note que usando a forma (3.13) da equação, poderíamos pensar em outros funcionais que garantissem $\Omega[P(x, t)]/\Psi[P(x, t)] = D_1 \alpha_1 P^{\alpha_1-2} + D_2 \alpha_2 P^{\alpha_2-2}$ e obteríamos a mesma entropia associada.

Integrando duas vezes a equação acima, podemos encontrar uma forma para o funcional da entropia. Sendo o intervalo de integração $[P_0, P]$, tem-se após a primeira integração

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\beta} \frac{dg}{dP} + \frac{1}{\beta} \frac{dg}{dP} \Big|_{P_0} &= \int_{P_0}^P dP' (D_1 \alpha_1 P'^{\alpha_1-2} + D_2 \alpha_2 P'^{\alpha_2-2}) \\ &= \frac{D_1 \alpha_1}{\alpha_1 - 1} (P^{\alpha_1-1} - P_0^{\alpha_1-1}) + \frac{D_2 \alpha_2}{\alpha_2 - 1} (P^{\alpha_2-1} - P_0^{\alpha_2-1}). \end{aligned}$$

Integrando novamente

$$\begin{aligned} g[P] = g[P_0] + \frac{dg}{dP} \Big|_{P_0} (P - P_0) &- \beta \frac{D_1}{\alpha_1 - 1} (P^{\alpha_1} - P_0^{\alpha_1}) + \beta \frac{D_1 \alpha_1 P_0^{\alpha_1-1}}{\alpha_1 - 1} (P - P_0) \\ &- \beta \frac{D_2}{\alpha_2 - 1} (P^{\alpha_2} - P_0^{\alpha_2}) + \beta \frac{D_2 \alpha_2 P_0^{\alpha_2-1}}{\alpha_2 - 1} (P - P_0). \end{aligned}$$

Aplicaremos as condições impostas ao funcional $g[P]$ e as seguintes condições para a

densidade de probabilidades,

$$\begin{aligned} P(x, t)|_{x \rightarrow \pm\infty} &= 0; \\ \frac{dP}{dx} \Big|_{x \rightarrow \pm\infty} &= 0; \\ A(x)P(x, t)|_{x \rightarrow \pm\infty} &= 0, \end{aligned} \quad (3.24)$$

as quais garantem que a solução $P(x, t)$ preserve a norma para todo tempo t .

Para $g[0] = 0$ devemos ter,

$$g[P_0] - P_0 \frac{dg}{dP} \Big|_{P_0} + \beta \frac{D_1 P_0^{\alpha_1}}{\alpha_1 - 1} + \beta \frac{D_2 P_0^{\alpha_2}}{\alpha_2 - 1} - \beta \frac{D_1 \alpha_1 P_0^{\alpha_1}}{\alpha_1 - 1} - \beta \frac{D_2 \alpha_2 P_0^{\alpha_2}}{\alpha_2 - 1} = 0. \quad (3.25)$$

Como não sabemos as condições iniciais do sistema, não podemos descartar nenhuma das constantes. Considerando a condição (3.25), o funcional se resume a

$$g[P] = \frac{dg}{dP} \Big|_{P_0} P - \beta \frac{D_1}{\alpha_1 - 1} P^{\alpha_1} + \beta \frac{D_1 \alpha_1 P_0^{\alpha_1 - 1}}{\alpha_1 - 1} P - \beta \frac{D_2}{\alpha_2 - 1} P^{\alpha_2} + \beta \frac{D_2 \alpha_2 P_0^{\alpha_2 - 1}}{\alpha_2 - 1} P.$$

Aplicando a segunda condição, $g[1] = 0$, temos que

$$\frac{dg}{dP} \Big|_{P_0} = \beta \frac{D_1}{\alpha_1 - 1} - \beta \frac{D_1 \alpha_1 P_0^{\alpha_1 - 1}}{\alpha_1 - 1} + \beta \frac{D_2}{\alpha_2 - 1} - \beta \frac{D_2 \alpha_2 P_0^{\alpha_2 - 1}}{\alpha_2 - 1},$$

e assim,

$$g[P] = -\beta \left(\frac{D_1}{\alpha_1 - 1} P^{\alpha_1} - \frac{D_1}{\alpha_1 - 1} P + \frac{D_2}{\alpha_2 - 1} P^{\alpha_2} - \frac{D_2}{\alpha_2 - 1} P \right), \quad (3.26)$$

que possui a segunda derivada negativa por construção, garantindo as condições impostas sobre o funcional. Assumindo $\beta D_i = k_i$ e substituindo (3.26) na relação (3.23) teremos

$$S[P] = \int_{-\infty}^{\infty} g[P] dx = \int_{-\infty}^{\infty} k_1 \frac{P - P^{\alpha_1}}{\alpha_1 - 1} dx + \int_{-\infty}^{\infty} k_2 \frac{P - P^{\alpha_2}}{\alpha_2 - 1} dx, \quad (3.27)$$

que é a forma contínua de uma soma de duas entropias do tipo Tsallis [1],

$$S[P] = S_{\alpha_1} + S_{\alpha_2}. \quad (3.28)$$

Mostramos, então, que a entropia associada à EFPNL (3.1) corresponde à soma das entropias correspondentes a cada termo não-linear [21]. De uma maneira análoga, para a

entropia associada à equação (3.2), encontramos

$$S[P] = \sum_{i=1}^N S_{\alpha_i} = \sum_{i=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} k_i \frac{P - P^{\alpha_i}}{\alpha_i - 1} dx, \quad (3.29)$$

generalizando o caso bi-difusivo, para a soma de N entropias. A entropia de Boltzmann surge como um caso especial para o qual $N = 1$ e $\alpha_1 = 1$. As realizações físicas das combinações entre entropias generalizadas precisam ser investigadas a fim de justificar a proposição da teoria. Na próxima seção alguns casos são estudados.

3.3 Estado estacionário

A obtenção de soluções analíticas de equações não-lineares representa uma tarefa difícil, mas algumas informações sobre o sistema podem ser obtidas olhando para a solução estacionária e como o sistema tende a este estado. Define-se como estado estacionário aquele para o qual a distribuição de probabilidades não varia com o tempo, isto é,

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = 0.$$

Resolvendo para o caso bi-difusivo (3.1) temos

$$\frac{d}{dx}[A(x)P_{est}(x)] = \frac{d}{dx} \left[\Omega[P_{est}(x)] \frac{dP_{est}(x)}{dx} \right],$$

onde $P_{est}(x)$ é a distribuição de probabilidades do estado estacionário. Podemos integrar no intervalo $[-\infty, x']$, considerando as condições (3.24), e assim

$$A(x')P_{est}(x') = [D_1\alpha_1 P_{est}^{\alpha_1-1} + D_2\alpha_2 P_{est}^{\alpha_2-1}] \frac{dP_{est}(x')}{dx'}.$$

Integrando novamente, podemos usar a definição do potencial $\phi(x')$

$$\int_{x_0}^x dx' A(x') = \int_{x_0}^x dx' [D_1\alpha_1 P_{est}^{\alpha_1-2} + D_2\alpha_2 P_{est}^{\alpha_2-2}] \frac{dP_{est}(x')}{dx'},$$

de tal forma que considerando $x_0 = -\infty$,

$$[\phi_0 - \phi(x)] = \frac{D_1\alpha_1}{\alpha_1 - 1} P_{est}^{\alpha_1-1}(x) + \frac{D_2\alpha_2}{\alpha_2 - 1} P_{est}^{\alpha_2-1}(x). \quad (3.30)$$

Para um x_0 arbitrário,

$$[\phi_0 - \phi(x)] = \frac{D_1\alpha_1}{\alpha_1 - 1} [P_{est}^{\alpha_1-1}(x) - P_0^{\alpha_1-1}] + \frac{D_2\alpha_2}{\alpha_2 - 1} [P_{est}^{\alpha_2-1}(x) - P_0^{\alpha_2-1}], \quad (3.31)$$

onde $P_0 = P_{est}(x_0)$. Obtemos uma equação transcendental envolvendo a distribuição de probabilidades estacionária, o potencial aplicado ao sistema e constantes. Para encontrar $P_{est}(x)$ é necessário inverter esta equação, que só é possível para alguns casos.

Uma outra maneira de encontrar a solução estacionária seria olhar para a entropia. O princípio conhecido como Entropia Máxima [6] baseia-se na segunda lei da termodinâmica para afirmar que a solução que maximiza a entropia é a solução estacionária do sistema. Sendo a entropia $S = S_{\alpha_1} + S_{\alpha_2}$, usaremos os vínculos padrões, ou seja, normalização da probabilidade e definição (linear) da energia, para encontrar uma distribuição de densidade de probabilidades que maximiza S .

Introduzindo os vínculos

$$\int P(x)dx = 1, \quad (3.32)$$

$$\int U(x)P(x)dx = E, \quad (3.33)$$

definimos o funcional $\Phi[P(x)]$ que deve ser extremizado em relação à probabilidade, $\delta\Phi[P(x)]/\delta(P(x')) = 0$, como

$$\Phi[P] = S[P] - \sum_i \lambda_i (X - \langle X \rangle), \quad (3.34)$$

onde $S[P]$ é a entropia, λ_i é o multiplicador de Lagrange relacionado com o vínculo X e $\langle X \rangle$ o valor esperado de X . Considerando os vínculos (3.32) e (3.33) escrevemos

$$\begin{aligned} \Phi[P] = & k_1 \frac{1 - \int_{-\infty}^{\infty} P^{\alpha_1}(x)dx}{\alpha_1 - 1} + k_2 \frac{1 - \int_{-\infty}^{\infty} P^{\alpha_2}(x)dx}{\alpha_2 - 1} \\ & + \alpha \left(1 - \int_{-\infty}^{\infty} P(x)dx \right) + \beta \left(E - \int_{-\infty}^{\infty} U(x)P(x)dx \right). \end{aligned}$$

Efetuada a derivada funcional obtemos,

$$\begin{aligned}
\frac{\delta\Phi[P(x)]}{\delta(P(x'))} &= 0 \\
&= k_1 \int_{-\infty}^{\infty} -\frac{\alpha_1}{\alpha_1 - 1} P^{\alpha_1-1}(x) \delta(x - x') dx \\
&+ k_2 \int_{-\infty}^{\infty} -\frac{\alpha_2}{\alpha_2 - 1} P^{\alpha_2-1}(x) \delta(x - x') dx \\
&- \alpha \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x') dx \\
&- \beta \int_{-\infty}^{\infty} U(x) \delta(x - x') dx,
\end{aligned}$$

que nos fornece a equação transcendental

$$\alpha + \beta U(x) = -k_1 \frac{\alpha_1}{\alpha_1 - 1} P^{\alpha_1-1}(x) - k_2 \frac{\alpha_2}{\alpha_2 - 1} P^{\alpha_2-1}(x). \quad (3.35)$$

Note que a equação acima é semelhante à (3.30) com as escolhas $U(x) = -\phi(x)$ e $\alpha/\beta = \phi_0$ e lembrando que $\beta D_i = k_i$. Isto significa que a solução estacionária é a mesma que extremiza a entropia. Obtivemos de duas maneiras diferentes a mesma solução, reforçando a ideia inicial da conexão existente entre a entropia e a equação de Fokker-Planck não-linear.

Pensado desta vez na equação multi-difusiva (3.2), podemos resolver o estado estacionário por ambas abordagens. Nos dois casos, obtemos a equação transcendental

$$[\phi_0 - \phi(x)] = \sum_i^N \frac{D_i \alpha_i}{\alpha_i - 1} P_{est}^{\alpha_i-1}(x), \quad (3.36)$$

que tem como caso especial a equação (3.30).

Uma outra maneira de se escrever as equações (3.31) e (3.36) é

$$\begin{aligned}
[\phi_0 - \phi(x)] &= \alpha_1 D_1 P_0^{\alpha_1-1} \ln_{2-\alpha_1} \left(\frac{P_{est}(x)}{P_0} \right) + \alpha_2 D_2 P_0^{\alpha_2-1} \ln_{2-\alpha_2} \left(\frac{P_{est}(x)}{P_0} \right) \\
&= \alpha_1 D_1 P_{est}^{\alpha_1-1}(x) \ln_{\alpha_1} \left(\frac{P_{est}(x)}{P_0} \right) + \alpha_2 D_2 P_{est}^{\alpha_2-1}(x) \ln_{\alpha_2} \left(\frac{P_{est}(x)}{P_0} \right)
\end{aligned} \quad (3.37)$$

onde usamos a propriedade $\ln_{\alpha} x = x^{1-\alpha} \ln_{2-\alpha}$. De uma maneira geral

$$[\phi_0 - \phi(x)] = \sum_{i=1}^N \alpha_i D_i P_{est}^{\alpha_i-1}(x) \ln_{\alpha_i} \left(\frac{P_{est}(x)}{P_0} \right). \quad (3.38)$$

Estas formas permitem determinarmos mais facilmente a solução $P_{est}(x)$ do estado estacionário.

3.3.1 Exemplos

Conhecendo a equação que descreve o sistema a ser estudado podemos encontrar $P_{est}(x)$ do estado estacionário correspondente, seja exatamente ou com ajuda de métodos numéricos, e obter algumas propriedades deste. Como citado, a resolução da equação (3.31) só pode ser obtida exatamente para alguns casos especiais, mas alguns resultados interessantes podem ser obtidos numericamente. Olhando para as equações (3.30) e (3.36), pode-se notar que conhecendo o potencial, ao qual o sistema está sujeito, é possível mapear para cada valor de probabilidade P_{est} , sua posição x , criando assim uma distribuição de posições que pode ser invertida para encontrar a distribuição de probabilidades. Esta é a ideia básica por trás da conhecida função W-Lambert [29] a qual surgirá em exemplos abaixo e que permite resolver algumas equações transcendentais. Apresentaremos nesta subseção casos particulares em uma evolução progressiva na complexidade das equações (3.30) e (3.31) até chegarmos ao caso geral proposto.

Caso $\alpha_1 = 2q - 1$ e $\alpha_2 = q$

O primeiro exemplo que iremos resolver é o caso que a equação (3.30) pode ser transformada em uma equação quadrática em $P_{est}(x)$. Assumindo $\alpha_1 = 2q - 1$ e $\alpha_2 = q$ teremos,

$$[\phi_0 - \phi(x)] = \frac{D_1(2q - 1)P_{est}^{2(q-1)}(x)}{2(q - 1)} + \frac{D_2qP_{est}^{q-1}(x)}{q - 1}.$$

Considerando $u = P_{est}^{q-1}$ escrevemos

$$\frac{D_1(2q - 1)}{2(q - 1)}u^2 + \frac{D_2q}{q - 1}u - [\phi_0 - \phi(x)] = 0,$$

cujas as raízes são encontradas pela fórmula de Bhaskara,

$$u = \left\{ -\frac{D_2q}{(q - 1)} \pm \sqrt{\left[\frac{D_2q}{(q - 1)}\right]^2 + 2\frac{D_1(2q - 1)}{(q - 1)}[\phi_0 - \phi(x)]} \right\} \frac{(q - 1)}{D_1(2q - 1)}.$$

Então encontramos,

$$P_{est}(x) = C [1 \pm (q - 1)\Phi(x)]^{\frac{1}{q-1}}, \quad (3.39)$$

onde

$$C = \left[-\frac{D_2 q}{D_1(2q-1)} \right]^{\frac{1}{q-1}},$$

$$\Phi(x) = \sqrt{\frac{1}{(q-1)^2} + \frac{2D_1(2q-1)}{D_2^2 q^2 (q-1)} [\phi_0 - \phi(x)]},$$

recuperando o resultado apresentado em [16]. Podemos reconhecer a distribuição acima como uma q -exponencial,

$$P_{est}(x) = C e_{2-q}^{\pm\Phi(x)}. \quad (3.40)$$

Sabe-se que equações polinomiais são solúveis analiticamente até o 4º grau, assim, para os seguintes valores dos expoentes

$$\begin{aligned} \alpha_1 = 3q - 2 & \quad \alpha_2 = q \\ \alpha_1 = 3q - 2 & \quad \alpha_2 = 2q - 1 \\ \alpha_1 = 4q - 3 & \quad \alpha_2 = q \\ \alpha_1 = 4q - 3 & \quad \alpha_2 = 2q - 1 \\ \alpha_1 = 4q - 3 & \quad \alpha_2 = 3q - 2 \end{aligned}$$

a equação (3.30) apresenta uma solução fechada. Vale ressaltar que as soluções são distribuições de probabilidades devendo, assim, serem finitas, diferenciáveis e normalizáveis em todo o espaço de configurações e as constantes das soluções devem garantir estes requisitos.

Caso $\alpha_1 = 1$ e $D_2 = 0$

Para $\alpha_1 = 1$ e $D_2 = 0$ temos uma equação de Fokker-Planck linear,

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} [A(x)P(x, t)] + D_1 \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t).$$

A teoria das equações de Fokker-Planck está bem fundamentada, cujas soluções e aplicações podem ser encontradas na referência [3]. A partir da equação (3.38) encontramos diretamente

$$[\phi_0 - \phi(x)] = D_1 \ln \frac{P_{est}(x)}{P_0},$$

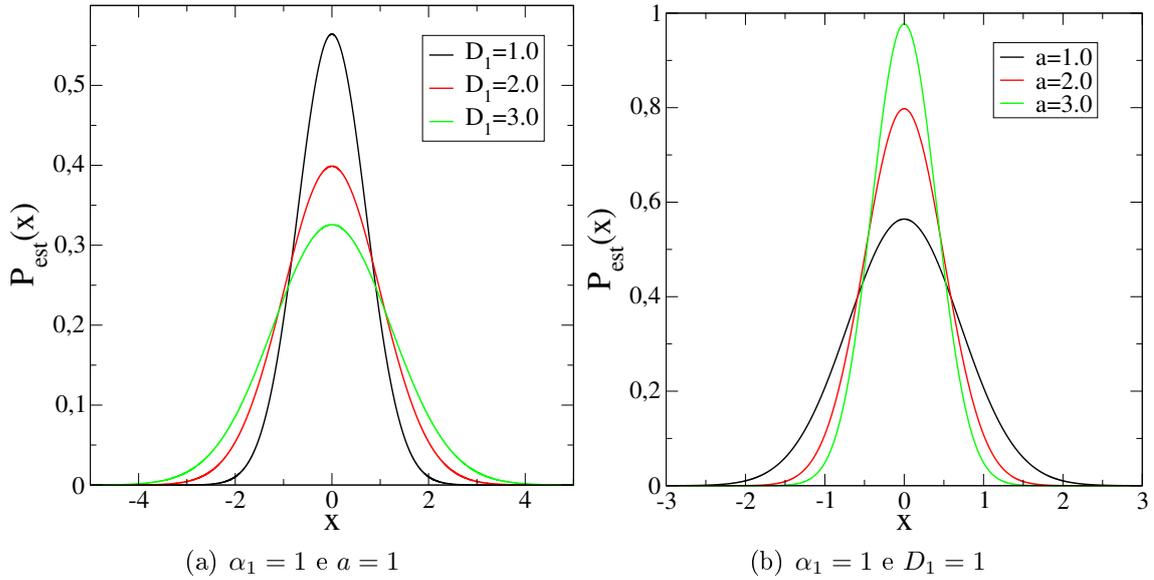


Figura 3.1: Distribuição de probabilidades para diferentes constantes D_1 e a do potencial harmônico.

onde lembramos que para $q \rightarrow 1$, $\ln_q x \rightarrow \ln x$. Aplicando a exponencial em ambos lados da equação acima,

$$P_{est}(x) = P_0 e^{\frac{[\phi_0 - \phi(x)]}{D_1}}. \quad (3.41)$$

A solução estacionária irá depender das condições iniciais e da constante de difusão D_1 , que podem ser ajustadas para cada sistema físico em estudo. Além disto, o potencial definirá a forma da distribuição e adotaremos em nossos exemplos um potencial harmônico $\phi(x) = (ax^2)/2$. O uso deste potencial é justificável principalmente pela possibilidade da implementação experimental, além de permitir a solução exata para alguns exemplos.

As figuras 3.1 ilustram alguns exemplos dos estados estacionários para a solução (3.41). Quanto maior a constante de difusão D_1 , maior será a dispersão da distribuição no estado estacionário, conforme mostrado na figura 3.1(a). A constante de mola (constante de restauração) a controla a intensidade da força confinante e possui um efeito contrário à constante de difusão D_1 , como mostrado na figura 3.1(b).

Como estamos tratando de uma equação de difusão linear, sabemos que entropia relacionada é a de Boltzmann-Gibbs. Isto pode ser visto considerando que $D_2 = 0$, usando $\alpha_1 = 1$ na equação (3.28) e lembrando que, pela definição da q -entropia, $S_1 = S_{BG}$.

Caso $\alpha_1 = q$ e $D_2 = 0$

A relação entre a mecânica estatística não-extensiva e as equações de Fokker-Planck não-lineares foram inicialmente propostas por Plastino e Plastino [9]. Neste caso particu-

lar, recuperamos a equação usada na referência citada,

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}[A(x)P(x, t)] + D_1 \frac{\partial^2}{\partial x^2} P^q(x, t).$$

Esta equação possui uma solução com dependência temporal exata para uma força restauradora harmônica [9, 24], enquanto que para tempos infinitos a solução estacionária pode ser determinada facilmente para um potencial $\phi(x)$ confinante arbitrário. No estado estacionário

$$A(x)P_{est}(x) = D_1 q P_{est}^{q-1}(x) \frac{dP_{est}(x)}{dx},$$

e integrando novamente no intervalo $[x_0, x]$

$$\int_{x_0}^x dx' A(x') = \int_{x_0}^x dx' [D_1 q P_{est}^{q-2}(x')] \frac{dP_{est}(x')}{dx'},$$

$$[\phi_0 - \phi(x)] = \frac{qD_1}{q-1} (P_{est}^{q-1}(x) - P_0^{q-1}).$$

Isolando o termo procurado,

$$P_{est}(x) = \left\{ P_0^{q-1} + \frac{(q-1)[\phi_0 - \phi(x)]}{qD_1} \right\}^{\frac{1}{q-1}}. \quad (3.42)$$

Colocando o termo P_0^{q-1} em evidência podemos recuperar a expressão para uma q -exponencial,

$$P_{est}(x) = P_0 e^{\frac{[\phi_0 - \phi(x)]}{qD_1 P_0^{q-1}}}, \quad (3.43)$$

a qual coincide com a solução de Tsallis e Bukman [24] no limite assintótico $t \rightarrow \infty$. Usando $\alpha_1 = q$ e $D_2 = 0$ na equação (3.28) encontramos

$$S_q = \int_{-\infty}^{\infty} k_1 \frac{P - P^q}{q-1} dx, \quad (3.44)$$

como esperado para a entropia associada [16].

Faremos uma breve digressão para ressaltar a questão da dualidade $q \leftrightarrow 2 - q$, conhecida da mecânica estatística não-extensiva [1]. Escolhemos o expoente $\alpha_1 = q$, pois, este é o expoente para a entropia de Tsallis (3.44) relacionada com a EFPNL. Se ao invés do vínculo linear de energia (3.33) fosse possível provar o teorema-H para o vínculo de energia com a distribuição generalizada normalizada (distribuição “escort”) a conexão seria direta, ou seja, os expoentes não-lineares do vínculo e da distribuição seriam iguais ao expoente entrópico. Porém, como discutido em alguns trabalhos [20, 19] a prova para este vínculo

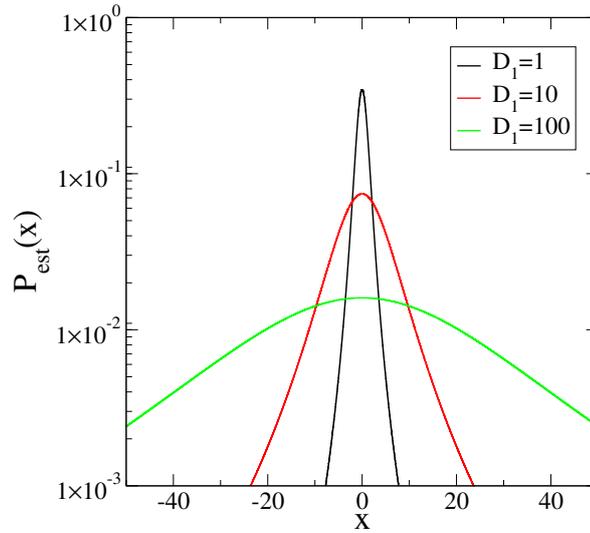


Figura 3.2: Distribuição de probabilidades para $q = 0.5$, $a = 1.0$ e diferentes constantes D_1 .

ainda permanece em aberto, mas a equivalência entre as distribuições nos permite afirmar que os resultados são equivalentes para ambos vínculos [28]. Por esta razão, costuma-se utilizar a escolha do expoente $\alpha = 2 - q$ para a equação, evitando o uso da dualidade e assim, a solução (3.43) torna-se uma q -exponencial.

O fator de normalização P_0 em (3.43) pode ser obtido de forma analítica no intervalo $q = (-1, 2)$, que na dualidade corresponde ao intervalo de $q_t = (0, 3)$, onde definimos q_t como o expoente da entropia de Tsallis (3.44). Para o caso do potencial harmônico,

$$\phi_0 - \phi(x) = a_0 - \frac{a}{2}x^2,$$

$$P_0 = \begin{cases} \left\{ \frac{1}{qD_1} \left[\left(\frac{\Gamma(\frac{1}{1-q})}{\Gamma(\frac{1}{1-q} - \frac{1}{2})} \sqrt{\frac{a(1-q)}{2\pi}} \right)^{\frac{2(q-1)}{1+q}} + a_0(1-q) \right] \right\}^{\frac{1}{q-1}} & \text{se } q \in [-1, 1), \\ \left\{ \frac{1}{qD_1} \left[\left(\frac{\Gamma(\frac{1}{2} + \frac{q}{q-1})}{\Gamma(\frac{q}{q-1})} \sqrt{\frac{a(q-1)}{2\pi}} \right)^{\frac{2(q-1)}{1+q}} + a_0(1-q) \right] \right\}^{\frac{1}{q-1}} & \text{se } q \in (1, 2]. \end{cases}$$

Na figura 3.2 exibimos, para o caso $q = 0.5$, o efeito esperado da constante de difusão, ou seja, ao aumentar seu valor a distribuição deve alargar, atingindo valores maiores de x . O efeito contrário é obtido para o aumento da constante da força a .

Para as figuras 3.3(a) e 3.3(b) mantemos fixos a e D_1 . Para $q \in [-1, 1)$ vemos distribuições de probabilidades que apresentam caudas longas, sendo que o peso das caudas aumenta ao diminuir q , isto é equivalente a aumentar o valor de q_t . Para $q \in (1, 2]$ temos distribuições de suporte compacto, que ao contrário das distribuições de cauda longa, não

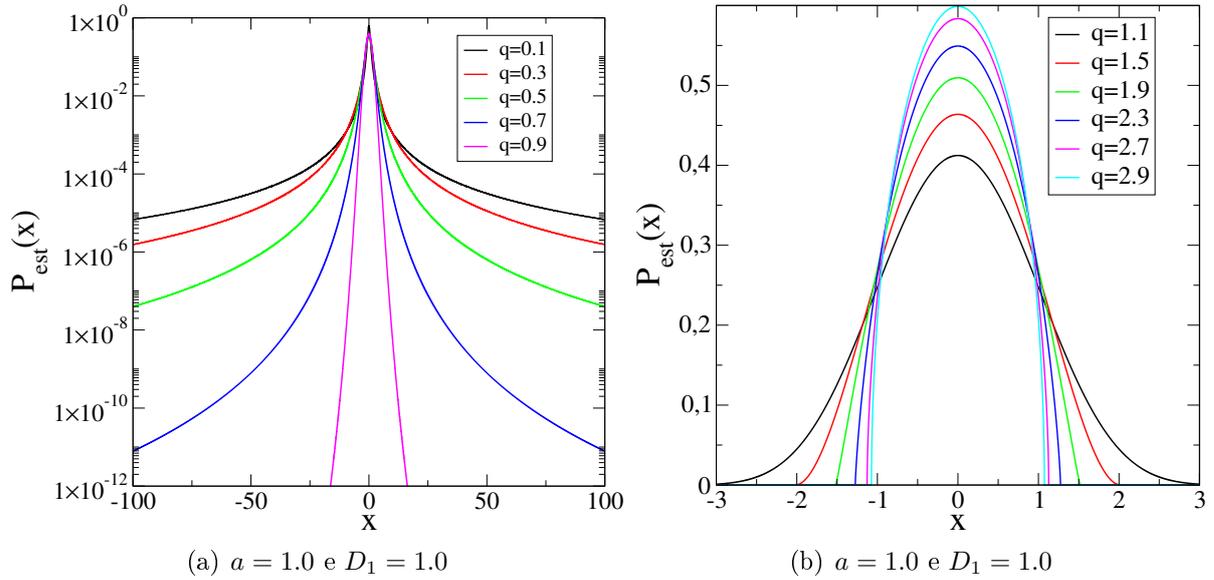


Figura 3.3: Distribuição de probabilidades para diferentes expoentes q .

vão a zero para valores infinitos da variável e sim para um valor finito. Podemos calcular estes valores considerando $P_{est}(x) = 0$ e encontramos

$$x = \pm \sqrt{\frac{2}{a} \left[a_0 + \frac{qD_1 P_0^{q-1}}{(q-1)} \right]}.$$

Caso $\alpha_1 = 2$ e $\alpha_2 = 1$

O uso de equações de Fokker-Planck não-lineares para descrever sistemas físicos costuma levar em consideração apenas um termo de difusão não-linear [4]. Em um trabalho recente, Andrade *et al.* mostraram a aplicação de uma equação com dois termos, um linear que é dominante para altas temperaturas e outro não-linear que predomina em baixas temperaturas. Estes termos correspondem à $\alpha_1 = 2$ e $\alpha_2 = 1$ em (3.1) e a equação passa a descrever a dinâmica de partículas interagentes em movimento superamortecido [26]. No capítulo 4, voltaremos a tratar desta EFP e apresentaremos alguns resultados para este sistema. Aqui verificaremos seu estado estacionário.

Resolveremos novamente a equação (3.1) neste caso particular,

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = 0,$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx}[A(x)P_{est}(x)] &= D_1 \frac{d^2 P_{est}^2(x)}{dx^2} + D_2 \frac{d^2 P_{est}(x)}{dx^2} \\ &= \frac{d}{dx} \left[2D_1 P_{est}(x) \frac{dP_{est}(x)}{dx} + D_2 \frac{dP_{est}(x)}{dx} \right]. \end{aligned}$$

Integrando no intervalo $[-\infty, x']$ e usando as condições físicas para a densidade de probabilidades (3.24), encontramos,

$$A(x')P_{est}(x') = 2D_1 P_{est}(x') \frac{dP_{est}(x')}{dx'} + D_2 \frac{dP_{est}(x')}{dx'}.$$

Integrando novamente no intervalo $[x_0, x]$,

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^x dx' A(x') &= \int_{x_0}^x [2D_1 P_{est}(x') + D_2] \frac{dP_{est}(x')}{dx'} dx' = 2D_1 P_{est}(x') \Big|_{x_0}^x + D_2 \ln P_{est}(x') \Big|_{x_0}^x \\ [\phi_0 - \phi(x)] &= 2D_1 [P_{est}(x) - P_0] + D_2 \ln \frac{P_{est}(x)}{P_0}. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Poderíamos obter a equação (3.45) de uma maneira mais fácil, apenas substituindo $\alpha_1 = 2$ e $\alpha_2 = 1$ na equação (3.31) e recordando que $\ln_1 x = \ln x$.

Queremos escrever esta equação transcendental na forma $Y = Xe^X$, cuja solução pode ser escrita em termos de uma função W-Lambert, $X = W(Y)$. Assim,

$$\frac{[\phi_0 - \phi(x)]}{D_2} + \frac{2D_1 P_0}{D_2} = \frac{2D_1 P_{est}(x)}{D_2} + \ln \frac{P_{est}(x)}{P_0},$$

aplicando a função exponencial em ambos os lados

$$\begin{aligned} e^{\frac{[\phi_0 - \phi(x)]}{D_2} + \frac{2D_1 P_0}{D_2}} &= e^{\frac{2D_1 P_{est}(x)}{D_2}} \frac{P_{est}(x)}{P_0}, \\ \frac{2P_0 D_1}{D_2} e^{\frac{[\phi_0 - \phi(x)]}{D_2} + \frac{2D_1 P_0}{D_2}} &= \frac{2D_1 P_{est}(x)}{D_2} e^{\frac{2D_1 P_{est}(x)}{D_2}}, \\ \frac{2D_1 P_{est}(x)}{D_2} &= W \left(\frac{2P_0 D_1}{D_2} e^{\frac{[\phi_0 - \phi(x)]}{D_2} + \frac{2D_1 P_0}{D_2}} \right), \end{aligned}$$

ou seja,

$$P_{est}(x) = \frac{D_2}{2D_1} W \left(\frac{2P_0 D_1}{D_2} e^{\frac{[\phi_0 - \phi(x)]}{D_2} + \frac{2D_1 P_0}{D_2}} \right). \quad (3.46)$$

Para $\phi_0 - \phi(x) = a_0 - (a/2)x^2$ recuperamos o resultado apresentado em [26]. A constante de normalização P_0 pode ser obtida através de um método recursivo. Adotamos um valor inicial para a constante e calculamos a integral da probabilidade. Variando o valor de P_0 podemos encontrar o valor que normaliza a probabilidade a ser utilizado.

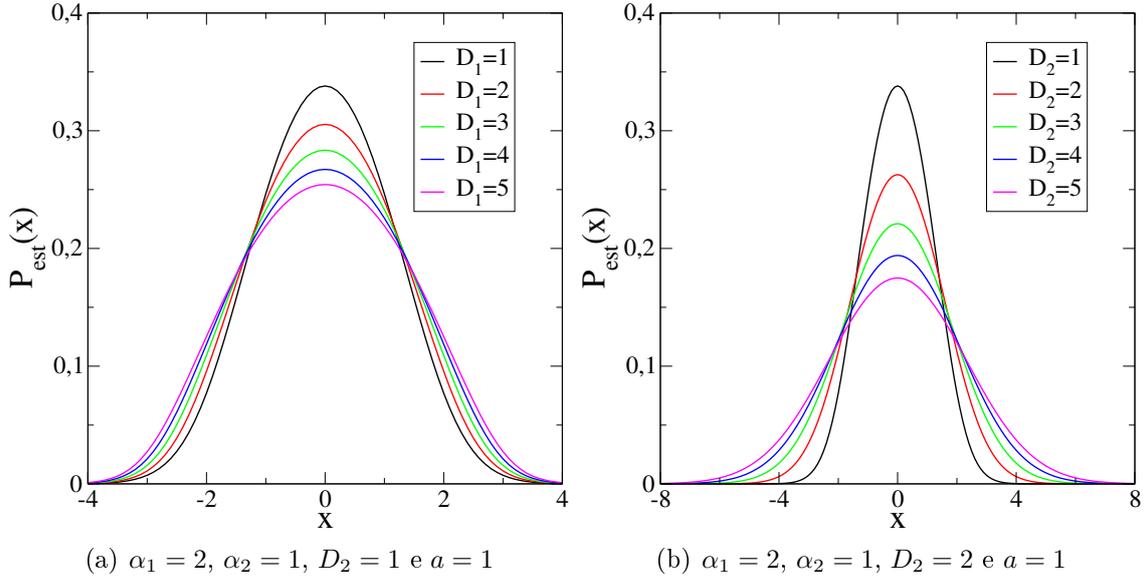


Figura 3.4: Distribuição de probabilidades para diferentes constantes de difusão.

As figuras 3.4 mostram as distribuições de probabilidades para diferentes constantes difusivas D_1 e D_2 . Se olharmos separadamente para cada termo difusivo esperaríamos uma distribuição do tipo Boltzmann para o termo $q = 1$ e uma distribuição de suporte compacto para o termo $q = 2$. O estado estacionário corresponde a uma soma de ambos comportamentos pesados por seus expoentes.

Um resultado bastante interessante é a entropia associada à esta equação. Aos substituímos os valores $\alpha_1 = 2$ e $\alpha_2 = 1$ na equação (3.28) encontraremos a soma de uma entropia de Boltzmann com uma q -entropia com $q_t = 0$.

Caso $\alpha_1 = q$ e $\alpha_2 = 1$

Com o intuito de obter uma forma geral para a solução da equação (3.30), vamos estudar generalizações progressivas. Consideremos aqui, o termo não-linear genérico, com o expoente $\alpha_1 = q$ e o termo $\alpha_2 = 1$. A equação (3.31) torna-se,

$$[\phi_0 - \phi(x)] = \frac{qD_1}{(q-1)} [P_{est}(x)^{q-1} - P_0^{q-1}] + D_2 \ln \frac{P_{est}(x)}{P_0}$$

$$\frac{[\phi_0 - \phi(x)]}{D_2} + \frac{qD_1}{D_2(q-1)} P_0^{q-1} = \frac{qD_1}{D_2(q-1)} P_{est}(x)^{q-1} + \ln \frac{P_{est}(x)}{P_0}.$$

Como foi possível obter a solução em termos de uma função W-Lambert no exemplo anterior, procederemos da mesma maneira. Aplicando a exponencial em ambos os lados da equação acima e igualando o coeficiente da exponencial com seu expoente, podemos

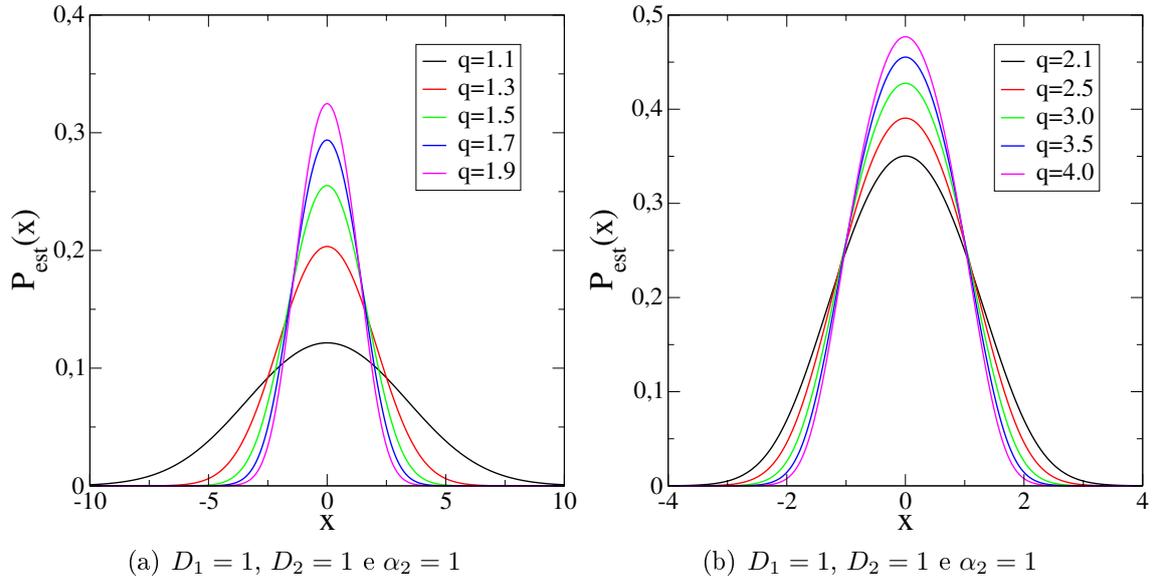


Figura 3.5: Distribuição de probabilidades para diferentes expoentes não-lineares.

utilizar uma função do tipo W-Lambert. Para isto, elevaremos toda a equação ao expoente $(q - 1)$ e multiplicaremos por $\frac{qD_1}{D_2}$. Teremos,

$$\frac{qD_1}{D_2} \left\{ P_0 e^{\frac{[\phi_0 - \phi(x)]}{D_2} + \frac{qD_1}{D_2(q-1)} P_0^{q-1}} \right\}^{q-1} = \frac{qD_1}{D_2} P_{est}(x)^{q-1} e^{\frac{qD_1}{D_2} P_{est}(x)^{q-1}},$$

que podemos resumir como

$$P_{est}(x) = \frac{D_2}{qD_1} W \left(\frac{qD_1}{D_2} \left\{ P_0 e^{\frac{[\phi_0 - \phi(x)]}{D_2} + \frac{qD_1}{D_2(q-1)} P_0^{q-1}} \right\}^{q-1} \right). \quad (3.47)$$

Assim, mostramos que mesmo para um caso mais geral, $\alpha_1 = q$ e $\alpha_2 = 1$, uma solução em termos da W-Lambert pode ser encontrada. A expressão (3.47) permite encontrar a solução estacionária para qualquer valor de q usando um “software” matemático (como por exemplo, Mathematica 7®). Na figura 3.5 mostramos distribuições para diferentes expoentes. Nota-se que q controla a dispersão da distribuição, quanto maior o valor de q , mais o comportamento compacto é evidenciado. O cálculo para $q < 1$ é um pouco mais complicado e apresentaremos no próximo exemplo uma maneira mais fácil de obter estas distribuições.

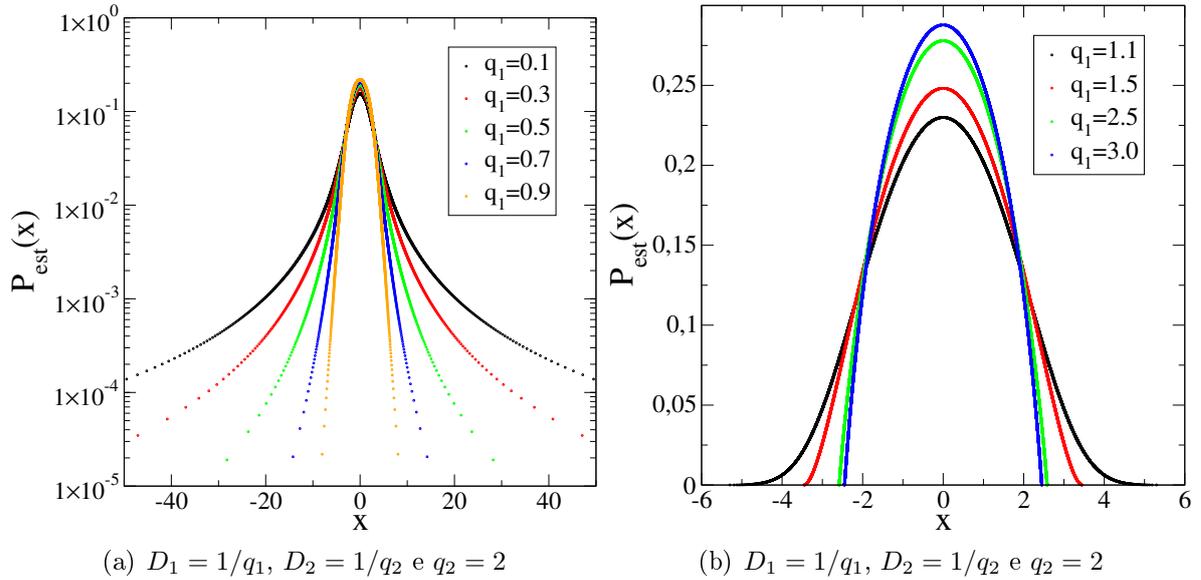


Figura 3.6: Distribuição de probabilidades para diferentes expoentes não-lineares q_1 .

Caso $\alpha_1 = q_1$ e $\alpha_2 = q_2$

O termo linear que aparece na equação transcendental permite que esta seja escrita em termos de uma função W-Lambert. Para dois termos não-lineares este procedimento não é mais possível e recorreremos ao cálculo numérico para obter a forma da distribuição de probabilidades. A ideia é bem simples: escolhemos um valor para P no intervalo $[0, 1]$ e substituímos na equação (3.30) ou (3.36) encontrando o valor de x correspondente. Desta maneira, teremos uma distribuição de posições pela probabilidade e basta inverter para obter a distribuição esperada $P_{est}(x)$ versus x . O resultado será uma distribuição não normalizada, devido as parâmetros não considerados, e devemos, então, calcular a constante de normalização para cada caso; para isto, basta dividir toda a função pelo valor de sua integral.

Substituindo os expoentes $\alpha_1 = q_1$ e $\alpha_2 = 2$ na equação (3.31) teremos,

$$[\phi_0 - \phi(x)] = \frac{q_1 D_1}{(q_1 - 1)} (P^{q_1-1} - P_0^{q_1-1}) + 2D_2 [P(x) - P_0]. \quad (3.48)$$

A figura 3.6 mostra as distribuições de probabilidades geradas para diferentes expoentes q_1 . Lembrando que temos um termo de suporte compacto competindo com um termo de cauda longa, podemos explicar o motivo das distribuições apresentarem caudas menores que as da figura 3.3.

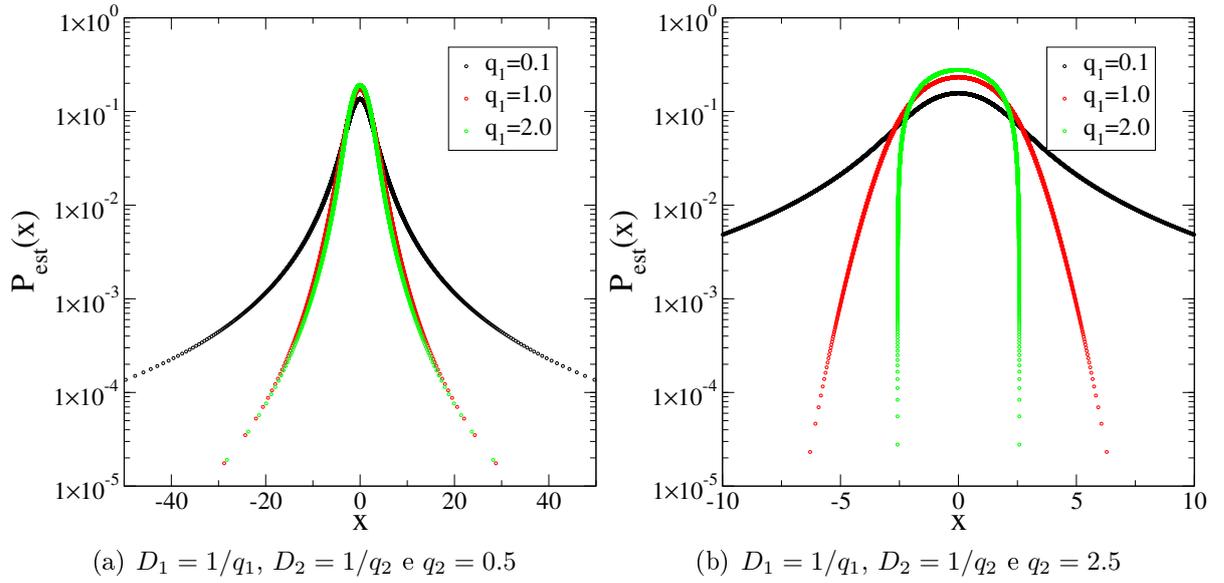


Figura 3.7: Distribuição de probabilidades para expoentes não-lineares q_1 e q_2 .

De uma maneira geral,

$$[\phi_0 - \phi(x)] = \frac{q_1 D_1}{(q_1 - 1)} (P^{q_1-1} - P_0^{q_1-1}) + \frac{q_2 D_2}{(q_2 - 1)} (P^{q_2-1} - P_0^{q_2-1}). \quad (3.49)$$

Para ambos exemplos nesta subseção, escolhemos as constante difusivas como $D_i = 1/q_i$, e desta forma, os termos contribuem com o mesmo peso para a distribuição final. A figura 3.7 mostra algumas distribuições possíveis para a equação (3.49).

Nota-se que na figura 3.7(a) o termo de caudas longas leva à distribuições com valores maiores em x e conserva esta forma mesmo para expoentes q_1 maiores que 1. Na figura 3.7(b) temos distribuições restritas no espaço, devido ao termo de suporte compacto $q_2 = 2.5$.

Caso $\alpha_1 = q_1$, $\alpha_2 = q_2$ e $\alpha_3 = q_3$

A fim de exemplificar a aplicação das equações multi-difusivas, mostramos na figura 3.8 as distribuições obtidas a partir da equação (3.38) para o caso $N = 3$.

Diversas formas para a distribuição de probabilidades podem ser obtidas combinando os três expoentes. Além disto, sabendo a origem dos termos não-lineares poderemos interpretar melhor os resultados fornecidos, assim, o estudo da aplicação destas equações é de grande importância para este trabalho.

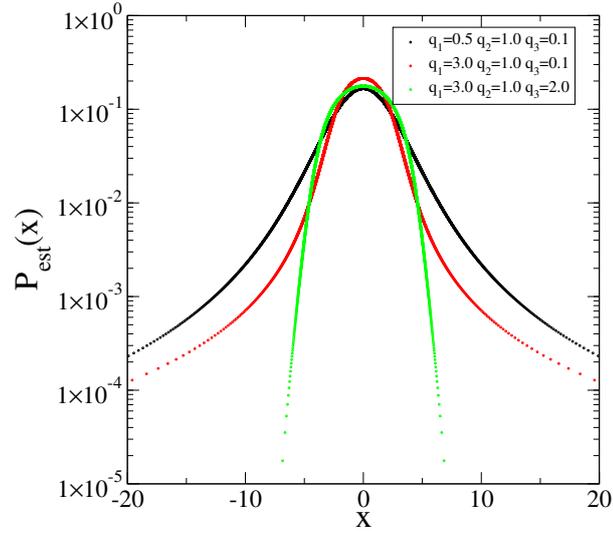


Figura 3.8: Distribuição de probabilidades para diferentes expoentes não-lineares q_1 , q_2 e q_3 .

Caso contínuo

O último exemplo que apresentaremos corresponde a uma realização da equação contínua (3.3). Escolhendo a distribuição de coeficientes como uma função degrau no intervalo $[a, b]$,

$$D(\alpha) = D[\Theta(\alpha - a) - \Theta(\alpha - b)], \quad (3.50)$$

podemos calcular a integral dos termos difusivos,

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha D(\alpha) \frac{\partial^2 P^\alpha}{\partial x^2} &= \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha D[\Theta(x - a) - \Theta(x - b)] \frac{\partial^2 P^\alpha}{\partial x^2} \\ &= \int_a^b d\alpha \frac{\partial^2 P^\alpha}{\partial x^2} \\ &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\frac{P^b - P^a}{\ln P} \right), \end{aligned}$$

e a equação (3.3) torna-se

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial[A(x)P(x, t)]}{\partial x} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\frac{P^b - P^a}{\ln P} \right). \quad (3.51)$$

Uma suposição é que equações desta forma possam descrever processos de difusão de fluidos em meios complexos, como petróleo em rochas e água nos lençóis freáticos. Novamente, olharemos para o estado estacionário par obter alguma informação sobre a

solução dessa equação. Temos,

$$A(x)P_{est}(x) = \frac{d}{dx} \left[\frac{P_{est}^b(x) - P_{est}^a(x)}{\ln P_{est}(x)} \right],$$

e integrando no intervalo $[-\infty, x']$

$$A(x') = \frac{P_{est}^{b-2}(x')[b \ln P_{est}(x') - 1] + P_{est}^{a-2}(x')[1 - a \ln P_{est}(x')]}{\ln^2 P_{est}(x')},$$

que integrando no intervalo $[x_0, x]$ pode ser escrita na forma transcendental

$$\phi_0 - \phi(x) = Ei[(b-1) \ln P_{est}(x)] - Ei[(a-1) \ln P_{est}(x)] + \frac{P_{est}^{b-1}(x) - P_{est}^{a-1}(x)}{\ln P_{est}(x)} + C[P_0] \quad (3.52)$$

onde $C[P_0]$ é uma constante relacionada com a distribuição inicial de probabilidades. A função $Ei[z]$ é chamada exponencial integral e é definida por

$$Ei[z] = \int_{-z}^{\infty} \frac{e^{-t}}{t} dt .$$

Encontramos a distribuição $P_{est}(x)$ que resolve a equação transcendental acima numericamente. A figura 3.9 mostra duas distribuições para diferentes intervalos da função degrau que agora passam a controlar as difusões. Escolhas diferentes para a distribuição de coeficientes podem ser pensadas a fim de possibilitar a reprodução de sistemas físicos reais, tais como os propostos acima.

3.3.2 W-Lambert generalizada

O fato de existir uma representação para a equação transcendental $Y = Xe^X$ na forma de uma função, $X = W(Y)$ e esta ser solução do estado estacionário para um caso especial da equação (3.1), com os expoentes $\alpha_1 = 2$ e $\alpha_2 = 1$, nos leva a questionar sobre a existência de uma forma generalizada da função W-Lambert que seja capaz de descrever a solução estacionária para a EFPNL (3.1) em geral. A função que leva seu nome, foi proposta por Johann Lambert (1728-1777) em 1758 sendo redescoberta para aplicações físicas no final do século XX. Uma pequena revisão sobre suas propriedades e aplicações pode ser encontrada na referência [29].

Nesta seção propomos uma maneira de representar a equação transcendental (3.49) em termos das constantes e do potencial. Acreditamos que este seja o caminho para uma generalização da função W-Lambert, porém, o ferramental matemática correspondente

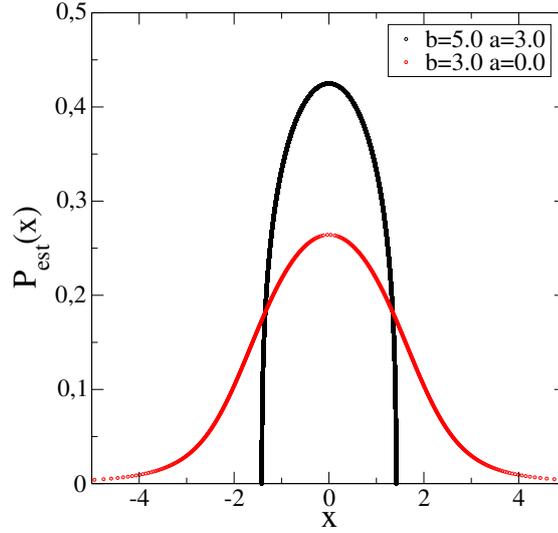


Figura 3.9: Distribuição de probabilidades para um caso contínuo de difusões e valores típicos dos parâmetros a e b .

precisa ser demonstrado. Suponha que possamos escrever a equação transcendental na forma

$$e_{q_1}^{\frac{\phi}{a_1}} = X \otimes_{q_1} e_{q_1}^{\frac{1}{a_1} a_2 \ln_{q_2} X},$$

onde os sub-índices q_1 e q_2 definem o q -produto, a q -exponencial e o q -logaritmo, enquanto que a_1 e a_2 são constantes. A representação da solução em termos da função W-Lambert generalizada, a ser denominada $W_{q_1, q_2}(Y)$, será

$$X = W_{q_1, q_2} \left(\frac{\phi}{a_1}, \frac{a_2}{a_1} \right). \quad (3.53)$$

Por construção, a função é simétrica por troca de índices,

$$W_{q_1, q_2} \left(\frac{\phi}{a_1}, \frac{a_2}{a_1} \right) = W_{q_2, q_1} \left(\frac{\phi}{a_2}, \frac{a_1}{a_2} \right).$$

Nota-se que a ordem dos termos está relacionada com a maneira de escrever a equação transcendental.

Para o caso multi-difusivo da equação (3.36), podemos pensar em algo como

$$e_{q_1}^{\frac{\phi}{a_1}} = X \otimes_{q_1} e_{q_1}^{\frac{1}{a_1} \sum_{i=2}^N a_i \ln_{q_i} X},$$

e a representação será

$$X = W_{\{q_i\}} \left(\frac{\phi}{a_1}, \frac{a_2}{a_1}, \frac{a_3}{a_1}, \dots \right) \quad (3.54)$$

Mostraremos, a seguir, dois exemplos: no primeiro, escreveremos a equação transcendental (3.49) na forma (3.53); no segundo, partiremos da forma (3.53) e chegaremos na expressão da solução estacionária (3.46), escrita como uma função W-Lambert. Seja

$$[\phi_0 - \phi(x)] = q_1 D_1 P_0^{q_1-1} \ln_{2-q_1} \frac{P_{est}(x)}{P_0} + q_2 D_2 P_0^{q_2-1} \ln_{2-q_2} \frac{P_{est}(x)}{P_0},$$

a qual podemos dividir pela constante $q_1 D_1 P_0^{q_1-1}$

$$\frac{[\phi_0 - \phi(x)]}{q_1 D_1 P_0^{q_1-1}} = \ln_{2-q_1} \frac{P_{est}(x)}{P_0} + \frac{q_2 D_2 P_0^{q_2-1}}{q_1 D_1 P_0^{q_1-1}} \ln_{2-q_2} \frac{P_{est}(x)}{P_0}.$$

Usaremos a q -exponencial para $q = 2 - q_1$ e a propriedade $e_q^{a+b} = e_q^a \otimes_q e_q^b$ para escrever

$$e_{2-q_1}^{\frac{[\phi_0 - \phi(x)]}{q_1 D_1 P_0^{q_1-1}}} = \frac{P_{est}(x)}{P_0} \otimes_{2-q_1} e_{2-q_1}^{\frac{q_2 D_2 P_0^{q_2-1}}{q_1 D_1 P_0^{q_1-1}} \ln_{2-q_2} \frac{P_{est}(x)}{P_0}}$$

e assim

$$P_{est} = P_0 W_{2-q_1, 2-q_2} \left\{ \frac{[\phi_0 - \phi(x)]}{q_1 D_1 P_0^{q_1-1}}, \frac{q_2 D_2 P_0^{q_2-1}}{q_1 D_1 P_0^{q_1-1}} \right\}. \quad (3.55)$$

Não podemos considerar a equação (3.55) como uma solução, uma vez que ainda não conhecemos suas propriedades. Enquanto isto consideraremos esta forma como uma forma reduzida, uma representação, da equação (3.37).

Faremos agora o caminho contrário, partindo da representação

$$P_{est} = P_0 W_{1,0} \left\{ \frac{[\phi_0 - \phi(x)]}{D_2}, \frac{2D_1 P_0}{D_2} \right\},$$

chegaremos na solução em termos da W-Lambert usual. Podemos escrever com o auxílio de (3.53)

$$e_1^{\frac{[\phi_0 - \phi(x)]}{D_2}} = \frac{P_{est}(x)}{P_0} \otimes_1 e_1^{\frac{2D_1 P_0}{D_2} \ln_0 \frac{P_{est}(x)}{P_0}},$$

e lembrando que $e_1^x = e^x$, $x \otimes_1 y = xy$ e $\ln_0 x = x - 1$, escrevemos

$$e^{\frac{[\phi_0 - \phi(x)]}{D_2}} = \frac{P_{est}(x)}{P_0} e^{\frac{2D_1 P_0}{D_2} \left[\frac{P_{est}(x)}{P_0} - 1 \right]},$$

$$\frac{2D_1 P_0}{D_2} e^{\frac{[\phi_0 - \phi(x)]}{D_2} + \frac{2D_1 P_0}{D_2}} = \frac{2D_1 P_0}{D_2} \frac{P_{est}(x)}{P_0} e^{\frac{2D_1 P_0}{D_2} \frac{P_{est}(x)}{P_0}},$$

e assim

$$P_{est} = \frac{D_2}{2D_1} W \left[\frac{2D_1 P_0}{D_2} e^{\frac{[\phi_0 - \phi(x)]}{D_2} + \frac{2D_1 P_0}{D_2}} \right], \quad (3.56)$$

que representa a solução para o caso $\alpha_1 = 2$ e $\alpha_2 = 1$. Mostramos, desta forma, que a função W-Lambert é um caso especial da função generalizada W_q -Lambert (3.55).

3.4 Conclusões e perspectivas

Neste capítulo propusemos uma generalização da equação de Fokker-Planck não-linear para casos multi-difusivos, representados pelas equações (3.1), (3.2) e (3.3). Mostramos que é possível obtê-las como aproximações da equação mestra tanto para variáveis discretas, quanto contínuas. Usando a relação entre EFPNL e a forma entrópica, obtida a partir da prova do teorema-H, foi possível encontrar as entropias relacionadas à estas equações, que neste caso, apresentam-se como somas de q -entropias (3.28) e (3.29). A fim de obter informações sobre as equações e suas soluções, encontramos uma equação transcendental que define o estado estacionário do sistema (3.30) que coincide com a solução obtida através do princípio de maximização da entropia. Para finalizar, mostramos alguns exemplos das equações, suas entropias e suas distribuições estacionárias para alguns casos conhecidos e para novos parâmetros. Mostramos que a solução em termos de uma função W-Lambert ainda pode ser encontrada mesmo para a soma de um termo difusivo linear com um termo de difusão anômala geral ($q \neq 1$).

Inspirado na solução (3.46), propomos uma maneira preliminar de representar a equação (3.38) através de uma função W_q -Lambert, ou seja, uma função generalizada. O estudo matemático desta generalização e suas possíveis extensões ficam como questões para investigações futuras. Além disto, para todos os exemplos, exploramos somente a solução estacionária. Para que as equações multi-difusivas possam descrever sistemas físicos é necessário que conheçamos a evolução temporal de suas soluções. Uma alternativa seria o estudo numérico das soluções [25] e algo neste sentido vem sendo implementado. Além do sistema de vórtices interagentes [26], torna-se importante identificar outros sistemas físicos que possam ser descritos por estas equações, como os apresentados em [31, 32, 33].

Capítulo 4

Estudo da dinâmica de partículas interagentes em movimento superamortecido

Este capítulo é dedicado ao estudo da dinâmica de sistemas de partículas interagentes em movimento superamortecido, sistemas os quais são utilizados para descrever fenômenos físicos tais como: fluxo de vórtices em supercondutores desordenados do tipo II; mecanismos físicos dos plasmas empoeirados; partículas carregadas em suspensões coloidais [30, 31]. Recentemente, mostrou-se que o estado estacionário destes sistemas pode ser descrito por uma equação de Fokker-Planck não-linear [26] e assim, os mesmos tornaram-se realizações da mecânica estatística não-extensiva.

Mostraremos que a equação

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial[A(x)P(x, t)]}{\partial x} + D\nu \frac{\partial}{\partial x} \left\{ [L_0 P(x, t)]^{\nu-1} \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} \right\}, \quad (4.1)$$

que é um caso especial das equações do Capítulo 3, pode ser obtida a partir da equação de movimento do sistema através de uma aproximação do tipo “*coarse-graining*”. Esta equação possui uma solução analítica conhecida [9, 24] para toda sua evolução temporal. Como veremos a seguir, L_0 representa um comprimento característico do sistema.

Neste capítulo comparamos os resultados das simulações, usando dinâmica molecular, com a solução da equação (4.1) para o sistema de vórtices interagentes, permitindo avaliar a hipótese de validade da equação de Fokker-Planck na descrição do mesmo. Mostramos que não somente o estado estacionário é reproduzido, mas também toda a solução temporal da EFPNL para a distribuição de probabilidades. Adicionalmente, estudamos a concordância com os resultados analíticos esperados da normalização e segundo momento

da distribuição [24, 21]. Para finalizar, faremos um estudo da distribuição de probabilidades das velocidades, mostrando que esta também é descrita por q -gaussianas. Este capítulo consiste em uma versão mais detalhada da referência [27].

4.1 Sistema de partículas

Podemos definir a dinâmica de um sistema físico escrevendo para este a segunda lei de Newton (ou a equação de Langevin, quando o ruído térmico encontra-se presente). Neste contexto, quando falamos em um movimento superamortecido, podemos desprezar a aceleração, $a_i = 0$, considerando desprezível a contribuição desta na escala de tempo da variação da velocidade. Assim, a força sobre a partícula i será

$$\begin{aligned} \vec{F}_i = m_i \vec{a}_i = 0 &= -\eta \vec{v}_i + \vec{F}_i^{pp} + \vec{F}_i^{ext} \\ \eta \vec{v}_i &= \vec{F}_i^{pp} + \vec{F}_i^{ext}, \quad (i = 1, 2, \dots, N) \end{aligned} \quad (4.2)$$

onde η é a viscosidade efetiva do meio, $\eta \vec{v}_i$ a força de atrito, \vec{F}_i^{pp} a força interna e \vec{F}_i^{ext} uma força externa, todas atuando sobre a partícula i . A força interna leva em conta a interação entre a partícula i e as $(N - 1)$ partículas restantes do sistema,

$$\vec{F}_i^{pp} = \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} B_{ij}^{pp}(r_{ij}) \hat{r}_{ij}, \quad (4.3)$$

onde $r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ é a distância entre as partículas i e j e \hat{r}_{ij} o vetor unitário definido ao longo do eixo que liga as partículas. Para o sistema de vórtices interagentes, $B^{pp}(r) = f_0 K_1(r_{ij}/\lambda)$ sendo K_1 a função de Bessel modificada do tipo 2 de 1ª ordem, f_0 a amplitude da força e λ o comprimento de penetração de London, que define a distância característica do sistema. Sabemos que a interação entre os vórtices é repulsiva, de curto alcance e radialmente simétrica [30], características que permitem a abordagem aqui utilizada; além disso, escolhemos a força externa advinda de um potencial externo confinante, pois, esta força terá o papel de desacelerar as partículas levando-as a um estado estacionário após um tempo longo.

Com o intuito de obter a equação de Fokker-Planck que descreva o sistema, realizaremos um procedimento conhecido como aproximação de “*coarse-graining*”, isto é, olharemos o sistema de uma escala maior que os intervalos discretos, podendo nesta escala considerar as variáveis como contínuas. Começaremos introduzindo a densidade local de partículas

no tempo t , $\rho(\vec{r}, t)$, e definindo a equação de continuidade

$$\frac{\partial \rho(\vec{r}, t)}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot \vec{J}, \quad (4.4)$$

onde $\vec{J} = \rho \vec{v}$ é a densidade de corrente. Supondo que a densidade local varia suavemente na escala da interação, podemos expandir a densidade em série de Taylor, $\rho(\vec{r}, t) \approx \rho(0, t) + \vec{r} \cdot \vec{\nabla} \rho(\vec{r}, t)$, onde mantivemos apenas a derivada de primeira ordem. Usando a densidade de partículas anterior, podemos escrever a equação (4.3) para o caso contínuo como

$$\vec{F}^{pp} = \frac{1}{2} \int d^2r \rho(\vec{r}, t) B^{pp}(r) \hat{r} \approx \frac{1}{2} \int d^2r [\vec{r} \cdot \vec{\nabla} \rho(\vec{r}, t)] B^{pp}(r) \hat{r}, \quad (4.5)$$

onde o somatório foi substituído pela integral da densidade pela força e devido à simetria de $B^{pp}(r)$, a integral de $\rho(0, t)$ sobre todo espaço é nula. Note que ao escrever a equação (4.5) assumimos o espaço como bidimensional, desta forma, poderemos comparar os resultados analíticos com os obtidos através da dinâmica molecular, cujas simulações foram realizadas em $d = 2$.

Sem perda de generalidade, podemos ainda considerar que o gradiente da densidade, $\vec{\nabla} \rho(\vec{r}, t)$, encontra-se ao longo do eixo x ; assim, a força atuará na mesma direção da variação da densidade. Uma vez que a variação da densidade é muito pequena dentro do intervalo característico da força, podemos aproximar a força (4.5) por

$$\vec{F}^{pp} \approx a \vec{\nabla} \rho(\vec{r}, t), \quad (4.6)$$

sendo a constante de força

$$a = \pi \int_0^\infty dr r^2 B^{pp}(r), \quad (4.7)$$

escrita em coordenadas polares.

Substituindo na expressão acima a definição para a força entre as partículas, podemos resolver a integral, que para a força de Bessel fornece $a = 2\pi f_0 \lambda^3$. Considerando a força externa como uma força harmônica $\vec{F}^{ext} = -A(x) \hat{x} = -\alpha x \hat{x}$ e substituindo-a juntamente com (4.6) e (4.2) na equação da continuidade (4.4), escrevemos

$$\begin{aligned} \eta \frac{\partial \rho(\vec{r}, t)}{\partial t} &= \vec{\nabla} \cdot \left\{ \rho(\vec{r}, t) \left[a \vec{\nabla} \rho(\vec{r}, t) + \vec{F}^{ext} \right] \right\} \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \rho(\vec{r}, t) \left[a \frac{\partial \rho(\vec{r}, t)}{\partial x} - A(x) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (4.8)$$

que é uma equação de Fokker-Planck em termos da densidade $\rho(\vec{r}, t) \equiv \rho(x, y, t)$. Como

as derivadas espaciais levam em conta apenas a variável x podemos pensar na equação acima para um y fixo e definir a probabilidade $P(x, t) = (L_y/N)\rho(x, t)$, obtendo

$$\eta \frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial[A(x)P(x, t)]}{\partial x} + 2D \frac{\partial}{\partial x} \left\{ [\lambda P(x, t)] \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} \right\}, \quad (4.9)$$

onde $D = (N\pi f_0 \lambda^2)/L_y$. Note que identificando $L_0 = \lambda$ e assumindo $\eta = 1$ a equação (4.9) torna-se um caso especial da equação (4.1) onde $\nu = 2$. Desta forma, conhecemos a solução analítica para a evolução temporal da distribuição de probabilidades [9, 24],

$$P(x, t) = B(t) [1 - \beta(t)(\nu - 1)x^2]_+^{\frac{1}{\nu-1}}, \quad (4.10)$$

onde $[y]_+ = y$ para $y > 0$, sendo nulo em caso contrário. Identificamos a solução acima como uma q -gaussiana, com $q = 2 - \nu$. Os parâmetros $B(t)$ e $\beta(t)$ se relacionam para garantir a normalização da solução para qualquer tempo t . Temos

$$\frac{\beta(t)}{\beta(t_0)} = \left[\frac{B(t)}{B(t_0)} \right]^2, \quad (4.11)$$

sendo conhecida a forma do parâmetro $B(t)$,

$$B(t) = B(t_0) \left[\frac{1}{K_2} + \left(1 - \frac{1}{K_2} \right) e^{-\frac{t}{\tau}} \right]^{-\frac{1}{1+\nu}}, \quad (4.12)$$

onde

$$K_2 = \frac{\alpha}{2\nu D \beta(t_0) [B(t_0)]^{\nu-1}} \quad (4.13)$$

$$\tau = \frac{1}{\alpha(1+\nu)}. \quad (4.14)$$

Calculando o segundo momento para a distribuição de probabilidades (4.10) [21], encontramos

$$\langle x^2 \rangle \propto \{1 - \exp[-\alpha(1+\nu)t]\}^{\frac{2}{1+\nu}}. \quad (4.15)$$

Como realizado no Capítulo 3, pode-se relacionar uma forma entrópica com a EFPNL. Lembrando da relação

$$-\frac{1}{\beta} \frac{d^2 g[P]}{dP^2} = \frac{\Omega[P]}{P(x, t)}, \quad (4.16)$$

da definição

$$S[P] = \frac{1}{L_0} \int_{-\infty}^{\infty} dx g[L_0 P(x, t)]; \quad g(0) = g(1) = 0; \quad \frac{d^2 g}{d(L_0 P)^2} \leq 0, \quad (4.17)$$

e identificando $\Omega[P] = D\nu [L_0 P(x, t)]^{\nu-1}$ na equação (4.1), obtemos

$$S[P] = k \frac{1 - L_0^{\nu-1} \int_{-\infty}^{\infty} dx [P(x, t)]^{\nu}}{\nu - 1}, \quad (4.18)$$

onde fizemos $D\beta = k$ e levamos $g[P(x, t)] \rightarrow g[L_0 P(x, t)]$.

Reescrevendo para o caso $\nu = 2$, teremos como entropia

$$S[P] = k \left\{ 1 - \lambda \int_{-\infty}^{\infty} dx [P(x, t)]^2 \right\}, \quad (4.19)$$

onde consideramos, $L_0 = \lambda$. A distribuição de probabilidades torna-se uma parábola (q -gaussiana com $q = 0$)

$$P(x, t) = B(t) [1 - \beta(t)x^2]_+, \quad (4.20)$$

onde uma forma conveniente de escrever as constantes $B(t)$ e $\beta(t)$, relacionadas com a norma e a largura da solução, é

$$\begin{aligned} B(t)\beta(t) &= \frac{B(t_0)\beta(t_0)}{K_2} [1 + (K_2 - 1)e^{-3\alpha t}]^{-1} \\ &= a_0 [1 + a_1 e^{-3\alpha t}]^{-1}, \end{aligned} \quad (4.21)$$

sendo

$$a_0 = \frac{\alpha\lambda}{4D}; \quad a_1 = \frac{\alpha\lambda}{4D\beta(t_0)B(t_0)} - 1, \quad (4.22)$$

as constantes que usaremos para ajustar as soluções obtidas através da dinâmica molecular. Para a dispersão,

$$\langle x^2 \rangle \propto \{1 - e^{-3\alpha t}\}^{\frac{2}{3}}, \quad (4.23)$$

que para tempos curtos escala como $t^{2/3}$.

4.2 Dinâmica Molecular

Com o intuito de verificar a hipótese inicial, que a evolução temporal de um sistema de partículas interagentes em movimento superamortecido pode ser descrito pela equação (4.9), investigamos, através da dinâmica molecular, a evolução do sistema de partículas.

Como explicado no Capítulo 2, a DM consiste na integração numérica das equações de movimento, neste caso (4.2), para todas as N partículas interagindo. Compararemos a distribuição de probabilidades das posições e velocidades das partículas com as distribuições obtidas da EFPNL (4.9).

A simulação consiste em uma caixa bidimensional com comprimento $L_x = 280\lambda$ e altura $L_y = 20\lambda$, onde λ é o comprimento característico da força de repulsão entre as partículas. O comprimento L_x é escolhido tal que as partículas nunca encontrem a borda, podendo-se considerar o sistema como infinito nesta direção. A intensidade da força harmônica externa, α , controla dois fatores importantes da evolução: a largura da distribuição (4.20) e o tempo necessário para se atingir o estado estacionário, conforme o comportamento exponencial em (4.21) [21]. Aqui escolhemos $\alpha = 10^{-3}f_0/\lambda$, isto é, três ordens de grandeza menor que a amplitude da força interna. Para a direção y impomos uma condição de contorno periódica, assim, justificando a escolha preferencial do eixo x na equação (4.9). Relacionado diretamente com as dimensões da caixa, temos o número de partículas N ; todas as simulações foram realizadas para $N = 4000$. O limite termodinâmico pode ser obtido considerando $N \rightarrow \infty$ e $L_y \rightarrow \infty$, mas mantendo finita (porém, grande) a razão N/L_y de modo a reduzir as flutuações estatísticas.

Iniciamos a simulação com uma distribuição de probabilidades, P_0 , onde as partículas encontram-se distribuídas aleatoriamente numa região muito pequena do espaço. Esta configuração é normalmente considerada como uma aproximação razoável para uma distribuição tipo delta de Dirac. A escolha desta configuração inicial reside no fato de queremos comparar os resultados entre a simulação e a equação não-linear, onde a solução depende diretamente da condição inicial imposta, $P(x, 0) = \delta(x)$.

Consideramos o tempo como uma variável adimensional, contando-o em termos de passos de integração, δt . Para tempos pequenos ($0 < t < 5$), a unidade de tempo consiste em 10^3 passos de integração, ou seja, temos $\delta t = 10^{-3}$; para tempos intermediários ($5 < t < 150$), $\delta t = 10^{-2}$ e para tempos longos, $\delta t = 10^{-1}$. Esta escolha está relacionada com a velocidade das partículas ao longo da evolução, quanto menor o tempo mais rápidas as partículas e mais rápida é a dinâmica; então, o passo de integração deve ser pequeno o suficiente para acompanhar suavemente as mudanças. A fim de obter uma melhor estatística, para todas as medidas foram realizadas médias sobre 100 amostras, pois, apesar da equação (4.2) ser determinística, pequenas flutuações na configuração inicial levam o sistema à diferentes evoluções temporais.

Mostramos na figura 4.1 uma representação de uma amostra do sistema em diferentes estágios da evolução. Temos na parte superior, $t = 5$, um estado próximo da configuração inicial, onde as partículas encontram-se bem próximas e distribuídas em uma pequena

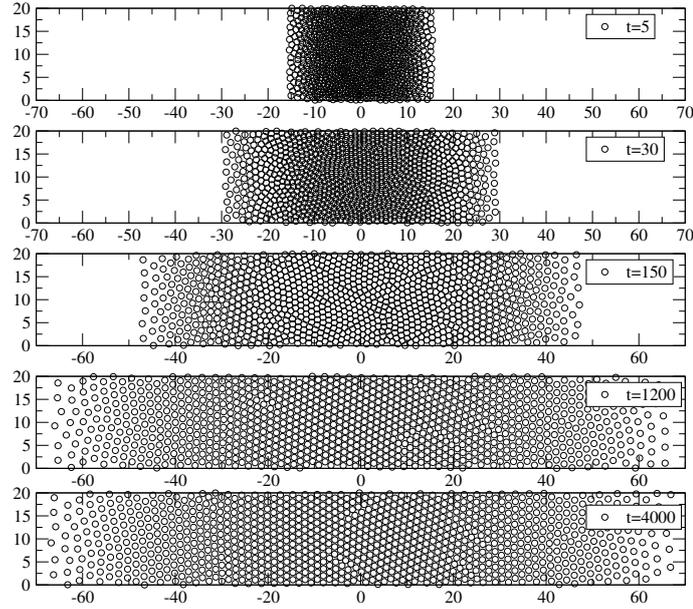


Figura 4.1: Representação da evolução de uma cópia do sistema de partículas, com $N = 1000$ e dimensões $L_x = 280\lambda$ e $L_y = 20\lambda$, para diferentes tempos.

região da caixa. À medida que o tempo aumenta vemos que o sistema muda de um regime rapidamente difusivo (tempos pequenos) para um regime lento (tempos grandes). Para $t > 1200$ consideramos que o sistema encontra-se próximo do estado estacionário, que definimos ser atingido, satisfatoriamente, para o tempo $t = 3000$. Na figura 4.1 utilizamos apenas 1000 partículas para facilitar a visualização; note, também, que apenas a parte de interesse da caixa é representada.

Apresentamos na seção seguinte os resultados obtidos a partir de evoluções semelhantes à da figura 4.1, para as distribuições de probabilidades das posições e velocidades. Para calcularmos tais distribuições, construímos os respectivos histogramas, isto é, dividimos o espaço (seja das posições ou das velocidades) em pequenas regiões e contamos quantas partículas (ou suas velocidades) encontram-se dentro deste intervalo. O tamanho do intervalo torna as distribuições mais ou menos ruidosas, devendo ser refinadas com o número de medições realizadas. Para as posições adotamos λ como intervalo e para as velocidades escolhemos tipicamente a centésima parte da largura da distribuição.

4.3 Distribuições de posições e velocidades

A dinâmica das partículas consiste em uma competição entre as forças de repulsão, devidas às interações entre os vórtices, que tendem a dispersá-los, e a força confinante externa que desacelera os vórtices, criando um estado estacionário onde as partículas encontram-

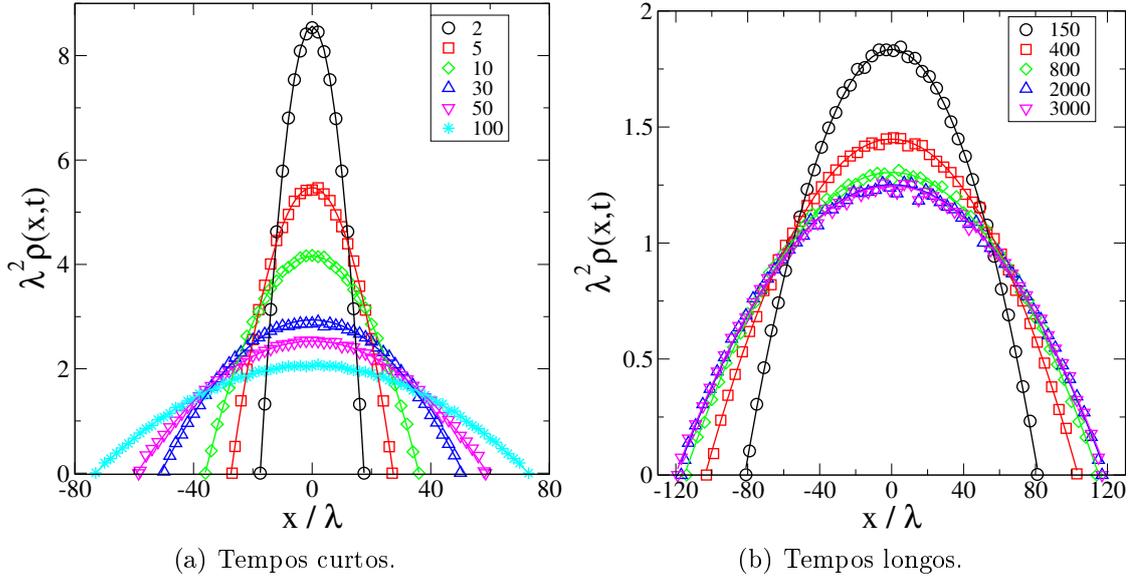


Figura 4.2: Perfis de densidades para diferentes tempos t .

se paradas, um estado de equilíbrio. No trabalho de Andrade *et al.* [26] mostrou-se que a distribuição de probabilidades das posições no estado estacionário era descrito por uma q -gaussiana, do tipo mostrada na equação (4.20). Na figura 4.2 mostramos perfis de densidades (equivalentes à distribuições de probabilidades) em diversos tempos, graficando $\lambda^2 \rho(x, t)$ versus x/λ , onde os fatores surgem para que os eixos sejam adimensionais. Podemos escrever a solução analítica (4.20) da seguinte maneira

$$\rho(x, t) = \frac{NB(t)\beta(t)}{L_y} \left[\frac{1}{\beta(t)} - x^2 \right]_+, \quad (4.24)$$

onde

$$\frac{NB(t)\beta(t)}{L_y} = \frac{\alpha}{2a} [1 + (K_2 - 1)e^{-3\alpha t}]^{-1}, \quad (4.25)$$

usando $P(x, t) = (L_y/N)\rho(x, t)$.

Na figura 4.2 os símbolos representam os dados da simulação e são comparados com a curva teórica, representada pelas linhas, calculadas através da equação (4.24). Na figura 4.2(a) temos os perfis de densidade para os tempos curtos, partículas com altas velocidades, enquanto na figura 4.2(b) temos o regime de baixas velocidades, para o sistema se aproximando do estado estacionário. Lembramos que o valor do parâmetro a na equação (4.7) é $a = 2\pi f_0 \lambda^3$ calculado após o “*coarse-graining*”. As curvas teóricas da figura 4.2 foram obtidas substituindo $a = (5.87 \pm 0.02) f_0 \lambda^3$ nas expressões (4.24) e (4.25), utilizadas na regressão dos dados da dinâmica molecular. Este valor de a foi calculado para os estados estacionários das 100 amostras. Atribuímos a discrepância de 7%, entre o valor

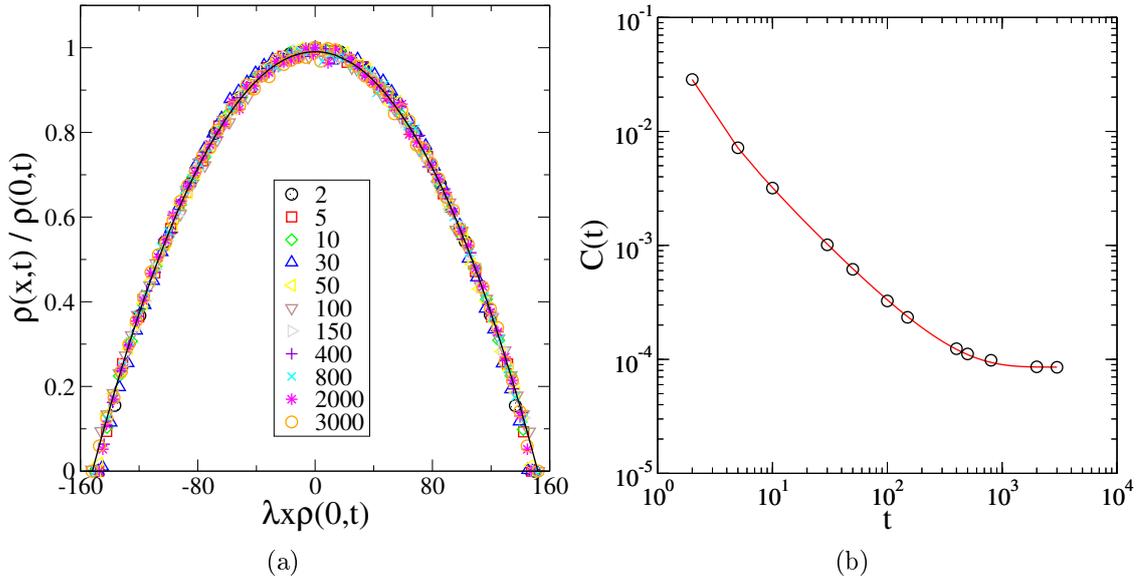


Figura 4.3: (a) Colapso dos perfis de densidade em uma curva universal. (b) Evolução temporal do coeficiente $C(t)$.

calculado analiticamente para o parâmetro a e o valor estimado pelo ajuste, às aproximações realizadas, durante o procedimento do “*coarse-graining*”, para obter a forma (4.6) da força. Assim, a figura 4.2 mostra que os perfis de densidade são descritos por q -gaussianas durante toda a evolução temporal do sistema, como previsto pela solução (4.20) e (4.24) com o parâmetro a recalculado adequadamente.

Na figura 4.3(a) representamos todos os dados da figura 4.2 em um gráfico $\rho(x,t)/\rho(0,t)$ versus $\lambda x \rho(0,t)$. Nesta representação, os perfis não apresentam dependência temporal na largura, resultando em um colapso na parábola universal $(\rho(x,t)/\rho(0,t)) = [1 - b(\lambda x \rho(0,t))^2]_+$, com $b \approx 4.3 \times 10^{-5}$ para todas as curvas. Outro resultado importante, que demonstra o acordo entre os resultados obtidos através das simulações e os resultados analíticos, consiste na curva mostrada na figura 4.3(b), onde a evolução temporal do coeficiente $C(t) = \lambda^4 N B(t) \beta(t) / L_y$ é comparada com a curva esperada (4.25). A linha corresponde à curva (4.25) com $a = 5.85 f_0 \lambda^3$, em concordância com o valor utilizado na figura 4.2. Desta maneira, comparamos o parâmetro a , calculado para os perfis de densidade, com o valor obtido independentemente através da regressão dos coeficientes no tempo, mostrando uma boa concordância entre eles.

É sempre possível questionar se as forma das distribuições da figura 4.2, podem ser ajustadas por uma função diferente da q -gaussiana. A figura 4.4 mostra distribuições de densidades graficados na representação do q -logaritmo, $\ln_q u = (u^{1-q} - 1)/(1 - q)$ ($u > 0$) [1], para alguns tempos da evolução. Na figura 4.4(a), pode-se notar que nesta

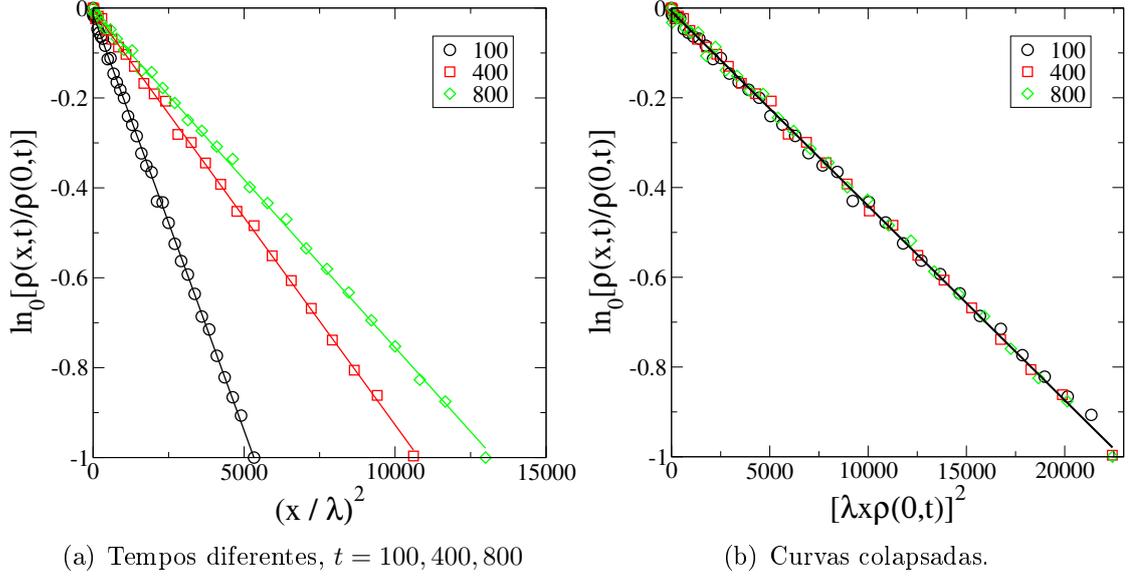


Figura 4.4: Representações dos perfis de densidade em termos do q -logaritmo ($q = 0$).

representação as q -gaussianas, com $q = 0$, tornam-se retas, sendo os símbolos os dados computacionais e as linhas retas ajustadas com diferentes coeficientes angulares. Nas variáveis convenientes, a figura 4.4(a) se transforma na figura 4.4(b), onde as distribuições são retas colapsadas. Note que temos aqui uma evidência da forma das distribuições; nesta representação apenas q -gaussianas com o valor de q apropriado no eixo y são retas, ou seja, as distribuições são realmente q -gaussianas com $q = 0$.

Além da forma das distribuições de probabilidades (ou perfis de densidades) e do comportamento temporal dos coeficientes de normalização, sabemos que para o sistema de vórtices interagentes o comportamento do segundo momento da distribuição é dado pela equação (4.23) [21]. É esperado que para tempos pequenos tenha-se o regime de difusão anômala, $\langle x^2 \rangle \sim t^{2/3}$, onde o expoente é característico do sistema em estudo [30, 26], e para tempos longos tenhamos um tendência para o estado estacionário. Na figura 4.5 mostramos o cálculo da dispersão utilizando as distribuições obtidas pela dinâmica molecular. Os símbolos correspondem aos dados computacionais, enquanto que a linha à regressão fornecida pela equação (4.23). Observe a lei de potência para tempos pequenos, com expoente $\alpha = 2/3$, e o comportamento exponencial para tempos longos, mostrando que a DM reproduz o resultado analítico esperado para toda a evolução.

Mostramos, desta forma, evidências que corroboram com a hipótese de que a dinâmica de partículas interagentes em movimento superamortecido pode ser descrita apropriadamente por uma EFPNL. Especificamente, mostramos que no caso dos vórtices interagentes, a distribuição de probabilidades são q -gaussianas, com $q = 0$, concordando com

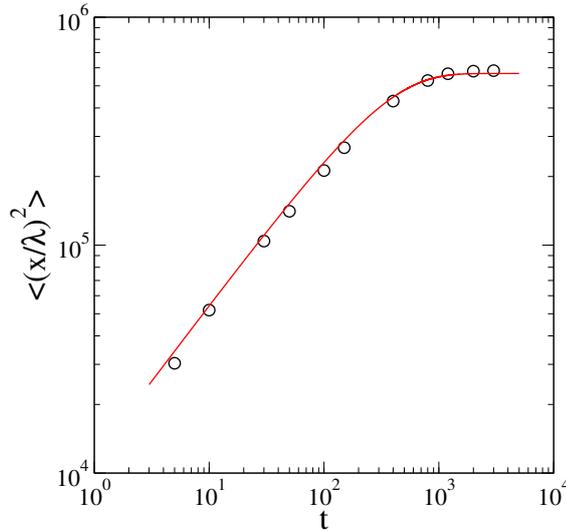


Figura 4.5: Segundo momento da distribuição.

a solução (4.20) da equação (4.9). Os próximos resultados se referem ao comportamento temporal das velocidades das partículas, sendo que para estas nenhum resultado analítico é conhecido, até onde sabemos.

As partículas inicialmente encontram-se localizadas em uma pequena região próxima à origem, onde o potencial harmônico é desprezível, e devido às interações repulsivas fortes, adquirem altas velocidades, levando a uma difusão rápida. Após algum tempo, as partículas ocupam uma região do espaço onde o potencial confinante começa a atuar significativamente, freando as partículas até as mesmas atingirem o estado estacionário da figura 4.1. Na figura 4.6, mostramos os resultados para a evolução temporal da distribuição de probabilidades, $P(v_x, t)$, das velocidades $\{v_x\}$. Uma vez que consideramos o tempo uma variável adimensional, a velocidade possui dimensão de espaço e nas figuras 4.6(a), 4.6(b) e 4.6(c) os eixos são adimensionais. Nestas figuras, as distribuições de probabilidades das velocidades são representadas desde o início da evolução, com grandes valores para a variável $\{v_x\}$, passando por tempos intermediários onde as distribuições se estreitam, à medida que as partículas evoluem, até um estado onde todas as partículas se encontram paradas ($t \approx 3000$). Outra característica da figura 4.6 é a semelhança com as distribuições da figura 4.2 das posições. Verificamos que as velocidades seguem distribuições do tipo q -gaussianas similares às posições,

$$P(v_x, t) = B_v(t) [1 - \beta_v(t)v_x^2]_+ , \quad (4.26)$$

onde $B_v(t)$ e $\beta_v(t)$ são parâmetros de normalização e largura dependentes do tempo, relacionados entre si.

Na figura 4.6, os símbolos correspondem aos dados da dinâmica molecular e as linhas são regressões calculadas utilizando a q -gaussiana (4.26). A concordância entre as curvas reforçam a proposição da forma (4.26) para as distribuições de probabilidades e como no caso das posições, apresentamos na figura 4.6(d) a representação colapsada onde a linha é dado pela parábola $(P(v_x, t)/P(0, t)) = [1 - b(v_x P(0, t))^2]_+$, com $b \approx 1.77$.

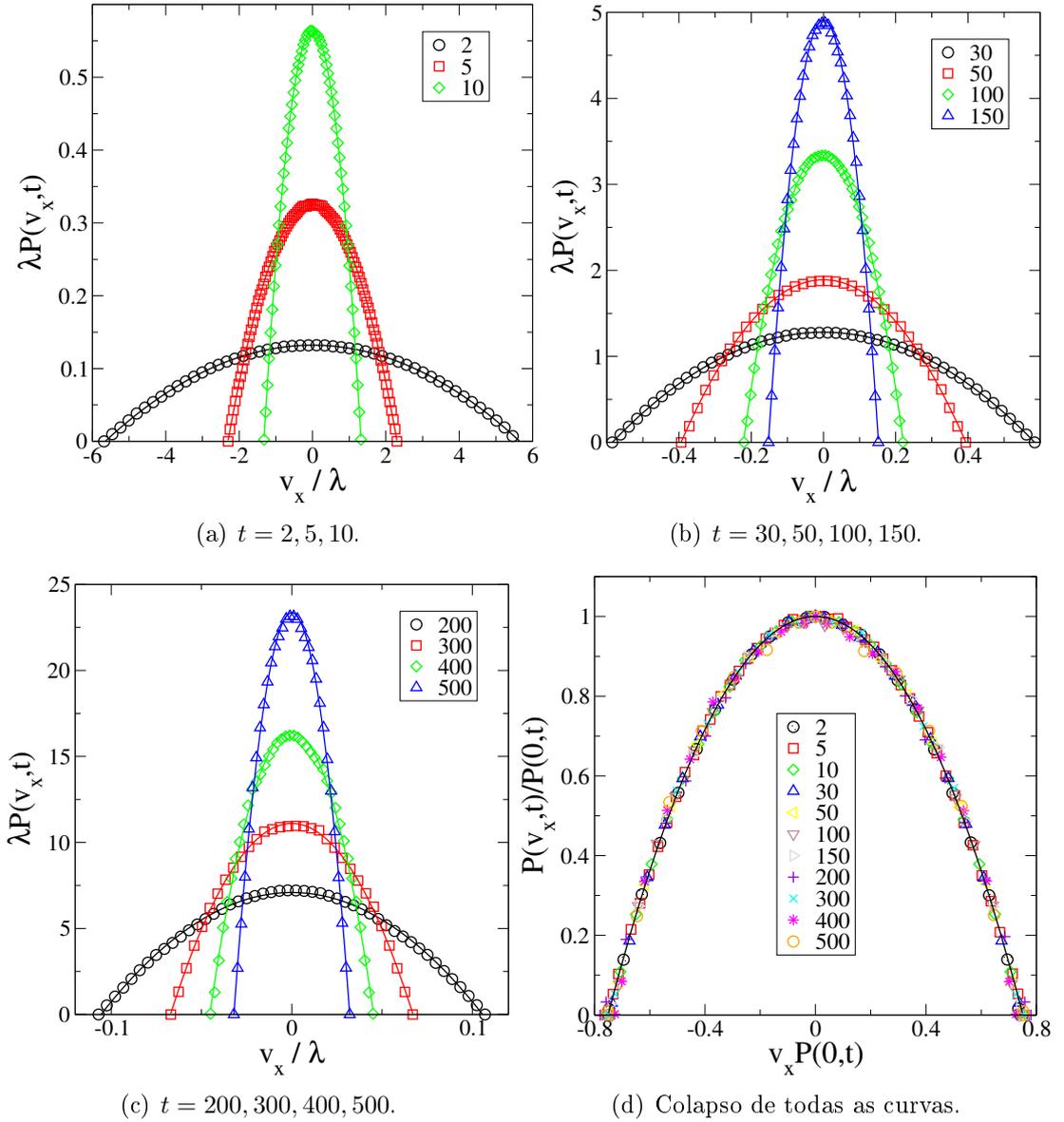


Figura 4.6: Distribuição de probabilidades de velocidades $P(v_x, t)$ para diferentes tempos.

Para reforçar a função (4.26) como a forma correta da distribuição, graficamos na figura 4.7, $\ln_0[P(v_x, t)/P(0, t)]$ versus a respectiva abscissa adimensional. Tempos típicos das curvas da figura 4.6(b) são representados linearmente na figura 4.7(a). Na figura 4.7(b) mostramos algumas curvas em sua representação colapsada, devido à escolha adequada

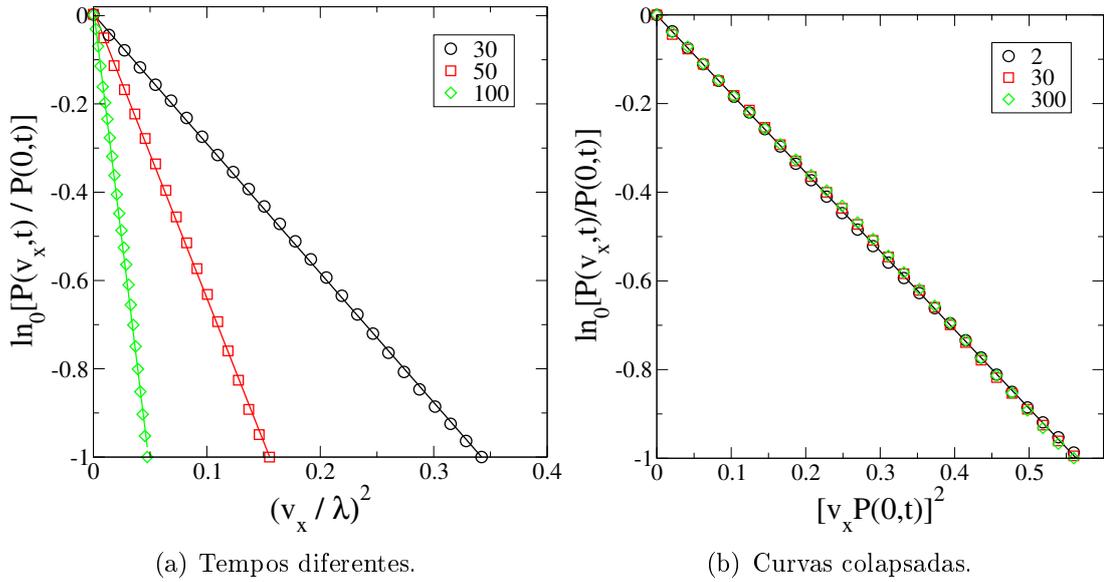


Figura 4.7: Representações das distribuições de velocidades em termos do q -logaritmo ($q = 0$).

das variáveis. Novamente, podemos interpretar a figura 4.7 como uma evidência que tanto as posições, quanto as velocidades, possuem distribuições dadas por q -gaussianas, com $q = 0$, representadas pelas funções (4.24) e (4.26).

De maneira análoga ao efetuado para as posições, apresentamos na figura (4.8) o produto dos coeficientes temporais $B_v(t)$ e $\beta_v(t)$, na verdade do produto adimensional $\lambda^3 B_v(t)\beta_v(t)$. Podemos notar um comportamento parecido com o caso do coeficiente $C(t)$ da figura 4.3(b), ou seja, um regime em lei de potência para tempos curtos, dado por $\lambda^3 B_v(t)\beta_v(t) \sim t^{5/2}$, seguido por uma tendência para o estado estacionário. Devido ao fato de não conhecermos uma equação para as velocidades, não conhecemos, por consequência, a forma analítica dos coeficientes $B_v(t)$ e $\beta_v(t)$.

Para concluir, podemos conectar a equação (4.9) com o sistema de vórtices interagentes. Na referência [26], Andrade *et al.* mostram que a agitação térmica contribui com um termo difusivo linear na equação (4.9), transformando-a numa EFPNL bi-difusiva. Neste capítulo, o estudo foi realizado na ausência de ruído térmico e uma extensão para o caso de temperaturas finitas é uma proposta de estudo futuro.

4.4 Conclusões e Perspectivas

Neste capítulo, apresentamos uma realização da mecânica estatística não-extensiva para o caso de vórtices interagentes que surgem em supercondutores desordenados do

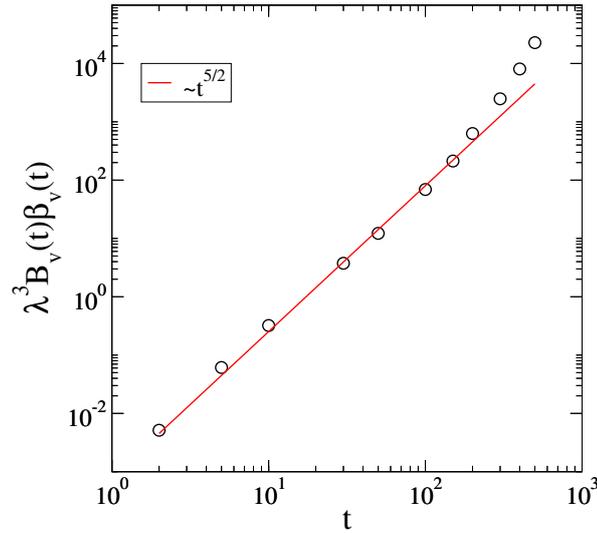


Figura 4.8: Evolução temporal do coeficiente $\lambda^3 B_v(t) \beta_v(t)$.

tipo II. Como mostrado nas referências [26, 30], este sistema pode ser descrito por uma equação de Fokker-Planck não-linear do tipo (4.9), que sabemos estar conectada à entropia de Tsallis (4.19) por meio do Teorema H. Estendendo os resultados apresentadas nestes trabalhos, investigamos a evolução temporal deste sistema através de uma dinâmica molecular, mostrando que a solução (4.24) é válida para todo tempo t [27]. Além da distribuição de densidades, mostramos que os coeficientes da normalização e dispersão (ambos dependentes do tempo) apresentam resultados em concordância com os esperados pela solução analítica da EFPNL.

Estes resultados reforçam a hipótese que equações de Fokker-Planck não-lineares podem ser usadas para representar sistemas de partículas interagentes. Dependendo do sistema a ser estudado, devemos escolher a forma das interações internas e se olharmos para a equação (4.9) e para a integral em (4.7), concluímos que para outros tipos de forças radialmente simétricas e repulsivas, podemos encontrar uma EFPNL semelhante à (4.9) com um valor diferente para o parâmetro a . Assim, diferentes sistemas podem ser estudados variando apenas a forma das interações, \vec{F}_{pp} , que juntamente com o efeito da \vec{F}_{ext} sobre a evolução, compõem trabalhos em desenvolvimento.

O fato das velocidades apresentarem distribuições semelhantes às posições é um resultado curioso e procuramos mostrar que para outros sistemas, estas podem ser descritas, também, por q -gaussianas. Resultados preliminares mostram que as velocidades na direção y possuem distribuições interessantes, possivelmente q -gaussianas com q crescente no tempo. Estes estudos estão em andamento e serão apresentados em um trabalho futuro.

Capítulo 5

Conclusão e perspectivas

Esta dissertação apresenta como principal objetivo a proposição de uma nova classe de equações de Fokker-Planck não-lineares. A transição entre dois regimes difusivos, anômalo para linear, pode ser encontrada em alguns exemplos de equações de Fokker-Planck [5] mas, com a introdução das, aqui nomeadas, equações de Fokker-Planck não-lineares multi-difusivas, buscamos descrever sistemas complexos com diferentes regimes difusivos, onde dois ou mais tipos de difusão podem ocorrer.

Apresentamos no capítulo 2 uma breve revisão dos tópicos e resultados importantes para o entendimento do trabalho. Dividido entre difusão linear e não-linear, o capítulo possui a derivação das equações de Fokker-Planck através de aproximações realizadas na equação mestra. Provamos uma forma do teorema H para a energia livre do sistema, utilizando estas equações, que possui como requisito uma relação importante entre o funcional entrópico e os funcionais da equação de Fokker-Planck não-linear [14, 15]. Desta maneira é possível conectar a entropia S_q às equações de Fokker-Planck não-lineares, da mesma forma que a entropia S_{BG} é relacionada com a difusão linear [1, 6].

No capítulo 3 propusemos a generalização da equação de Fokker-Planck não-linear para casos multi-difusivos. Seguindo o procedimento apresentado nas referências [14, 15, 16], obtemos estas equações a partir de aproximações na equação mestra, tanto para o caso discreto, quanto para o caso contínuo, mostrando que ambos resultados são equivalentes. A forma entrópica obtida, via teorema H, é identificada como a soma de q -entropias. Para o estado estacionário encontramos uma equação transcendental em $P_{est}(x)$ que coincide com a equação obtida através do princípio de maximização da entropia. Esta equação é solúvel para alguns poucos casos analíticos, mostrados durante o capítulo, mas, as distribuições de probabilidades estacionárias podem ser obtidas numericamente para os casos restantes.

Inspirados no trabalho de Andrade *et al.*, propomos uma maneira, ainda preliminar, de representar a equação transcendental obtida para o estado estacionário, através de

uma função W-Lambert [29]. O estudo matemático da função W-Lambert generalizada, ou W_q -Lambert, pode indicar a forma final capaz de resolver essas equações transcendentais, porém, suas possíveis extensões ficam como questões para investigações futuras. No presente trabalho, foi possível estudar somente as soluções estacionárias, uma vez que soluções analíticas não puderam ser obtidas, ficando a evolução temporal para ser estudada numericamente [25]. Outra perspectiva consiste em identificar sistemas físicos, cuja dinâmica possa vir a ser representada pelas equações de Fokker-Planck não-lineares multi-difusivas.

Um primeiro exemplo das equações do capítulo 3 é mostrado no capítulo 4. Neste, apresentamos uma realização da mecânica estatística não-extensiva para o caso de vórtices interagentes que surgem em supercondutores desordenados do tipo II. Como proposto [26, 30], este sistema pode ser descrito por uma equação de Fokker-Planck não-linear, que sabemos estar conectada à entropia de Tsallis por meio do Teorema H. Com o intuito de validar esta descrição, estendemos os resultados apresentados, investigando não somente o estado estacionário da distribuição, mas também a evolução temporal deste sistema, através das simulações por dinâmica molecular, mostrando que a solução analítica é válida para todo tempo t [27].

Os resultados reforçam a hipótese que as equações de Fokker-Planck não-lineares podem ser usadas para representar sistemas de partículas interagentes em movimento superamortecido. Dependendo do sistema a ser estudado, devemos escolher a forma das interações internas; forças radialmente simétricas e repulsivas levam à equações de Fokker-Planck não-lineares semelhantes. Assim, diferentes sistemas podem ser estudados variando apenas a forma das interações entre partículas, como por exemplo: plasmas empoeirados e partículas carregadas em suspensões coloidais [31, 32, 33]. Juntamente com o efeito da força externa sobre a dinâmica, estes sistemas vem sendo estudados em um novo trabalho.

Outro resultado que deve ser aprimorado consiste nas distribuições de velocidades encontradas para estes sistemas. Mostramos que para o exemplo do capítulo 4, as distribuições de velocidades em x são descritas por q -gaussianas, com $q = 0$, de modo semelhante às das posições. Esta ligação ainda não é bem compreendida e parece ser devida a um acoplamento entre estas duas variáveis [27]. Resultados preliminares mostram que as distribuições de velocidades na direção y são, possivelmente, q -gaussianas com o parâmetro q crescente no tempo.

Acreditamos que as equações de Fokker-Planck não-lineares multi-difusivas sejam boas candidatas para a descrição de sistemas que apresentam difusões anômalas com diferentes regimes. Nesta dissertação, apresentamos evidências desta possibilidade e listamos questões em aberto a serem exploradas em trabalhos futuros.

Bibliografia

- [1] C. Tsallis, *Introduction to Nonextensive Statistical Mechanics* (Springer, New York, 2009).
- [2] C. Tsallis, *J. Stat. Phys.* **52**, 479 (1988).
- [3] H. Risken, *The Fokker-Planck Equation* (Springer, Berlin, 1989).
- [4] T. D. Frank, *Nonlinear Fokker-Planck Equations: Fundamentals and Applications* (Springer, Berlin, 2005).
- [5] E. K. Lenzi R. S. Mendes e C. Tsallis, *Phys. Rev. E* **67**, 031104 (2003).
- [6] L. E. Reichl, *A Modern Course in Statistical Physics* (Wiley, New York, 2nd edition, 1998).
- [7] N. G. Van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry* (Elsevier, New York, 3th edition, 2007).
- [8] D. C. Rapaport, *The Art of Molecular Dynamics Simulation* (Cambridge University Press, Cambridge, 2nd edition, 2004); F. Ercolessi, *A molecular dynamics primer*, Spring College in Computational Physics (ICTP, Trieste, 1997).
- [9] A. R. Plastino, A. Plastino, *Physica A* **222**, 347 (1995).
- [10] D. H. Zannete, *Braz. J. Phys.* **29**, 108 (1999).
- [11] M. A. Fuentes, M. O. Cáceres, *Phys. Lett. A* **372**, 1236 (2008).
- [12] I. T. Pedron e R. S. Mendes, *Rev. Bras. Ens.* **27**, 251 (2005).
- [13] L. C. Malacarne, R. S. Mendes, I. T. Pedron, E. K. Lenzi, *Phys. Rev. E* **65**, 052101 (2002).
- [14] E. M. F. Curado, F. D. Nobre, *Phys. Rev. E* **67**, 021107 (2003).

- [15] F. D. Nobre, E. M. F. Curado, G. Rowlands, *Physica A* **334**, 109 (2004).
- [16] V. Schwämmle, E. M. F. Curado and F. D. Nobre, *Eur. Phys. J. B* **58**, 159 (2007).
- [17] L. Borland, *Phys. Rev. E* **57**, 6634 (1998).
- [18] V. Schwämmle, F. D. Nobre, E. M. F. Curado, *Phys. Rev. E* **76**, 041123 (2007).
- [19] M. Shiino, *J. Math. Phys.*, **42**, 2540 (2001).
- [20] M. S. Ribeiro, F. D. Nobre and E. M. F. Curado, *Entropy*, **13**, 1928 (2011).
- [21] V. Schwämmle, E. M. F. Curado, F. D. Nobre, *Eur. Phys. J. B* **70**, 107 (2009).
- [22] E. P. Borges, *J. Phys. A: Math. Gen.* **31**, 5281 (1998).
- [23] E. P. Borges, *Physica A* **340**, 95 (2004).
- [24] C. Tsallis, D. J. Bukman, *Phys. Rev. E* **54**, R2197 (1996).
- [25] D. S. Zhang, G. W. Wei, D. J. Kouri, D. K. Hoffman, *Phys. Rev. E* **56**, 1197 (1997).
- [26] J. S. Andrade, G. F. T. da Silva, A. A. Moreira, F. D. Nobre, E. M. F. Curado, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 260601 (2010).
- [27] M. S. Ribeiro, F. D. Nobre and E. M. F. Curado, *Phys. Rev. E*, **85**, 021146 (2012).
- [28] G.L. Ferri, S. Martinez, A. Plastino, *J. Stat. Mech.*, P04009 (2005).
- [29] R. M. Corless, G. H. Gonnet, D. E. G. Hare and D.M. Jeffrey, *On the Lambert's W Function*, Waterloo University Reports (1993).
- [30] S. Zapperi, A. A. Moreira, and J. S. Andrade, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 3622 (2001).
- [31] P. K. Shukla, *Physics of Plasma*, **8**, 1791, (2001).
- [32] R. T. Farouki e S. Hamaguchi, *J. Chem. Phys* **101**, 9885 (1994).
- [33] B. Liu e J. Goree, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 055003 (2008).