



TESE DE DOUTORADO  
CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS

**TEMPERATURAS EFETIVAS EM SISTEMAS ATÉRMICOS  
SIMPLES**

João Ribeiro Medeiros  
Rio de Janeiro - RJ, Setembro de 2023

*Σαμερον αδιον αδω*

- Teócritο, como citado por S. T. Coleridge

SATOR

AREPO

TENET

OPERA

ROTAS

- Anônimo

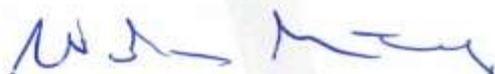
“TEMPERATURAS EFETIVAS EM SISTEMAS ATÉRMICOS SIMPLES”

**JOÃO RIBEIRO MEDEIROS**

Tese de Doutorado em Física apresentada no  
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas do  
Ministério da Ciência Tecnologia e Inovação.  
Fazendo parte da banca examinadora os  
seguintes professores:



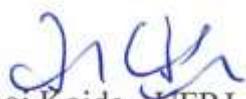
Silvio Manuel Duarte Queirós - Orientador/CBPF



Welles Antônio Martinez Morgado – Coorientador/ PUC-RIO



Luca Roberto Augusto Moriconi - UFRJ



Tomoi Koide - UFRJ



Daniel Gustavo Barci – UERJ



Lucas Mauricio Sigaud – UFF

Rio de Janeiro, 14 de setembro de 2023.

# Agradecimentos

Agradeço:

A Deus por bençãos sem conta que me dá.

A minha mãe Luciana Monteiro por sempre cuidar de mim.

A meu pai Ricardo Medeiros e Cristina Braga por sempre me apoiarem.

Aos meus irmãos Pedro Braga e Antonia Medeiros pela contínua inspiração.

Às minhas avós materna e paterna, Vera Young Monteiro e Maria Nícia de Medeiros pela vida.

Ao meu orientador Sílvio Queirós pelos muitos ensinamentos diretos e indiretos na ciência, no engenho e na arte, assim como por muitos anos tolerando minha inconstância e múltiplos interesses dentro e fora da academia.

À minha companheira Anna Chataignier por amor.

Aos minhas colegas de profissão e amigos preciosos Nahum Sá, Leonardo Cirto e Linneu de Holanda pelos desdobramentos da ciência acadêmica para o trabalho com dados e engenharia.

Aos Amaury de Medeiros pai e filho, pelas lendas que me contam.

Essa tese é dedicada à memória do meu avô Sérgio Augusto Ribeiro, meu primo Daniel Barczinski e a meu padrasto Walter Kalinowsky.

# Resumo

Exploram-se definições alternativas de temperatura efetiva para partículas sujeitas a reservatórios atérmicos, tendo como exemplo paradigmático o reservatório bimodal, caracterizado por assumir apenas dois valores distintos  $\{a, b\}$ , alternando entre ambos segundo taxas de transição  $\{\mu_a, \mu_b\}$ .

Primeiramente explora-se a temperatura canônica, conceito presente na teoria cinética dos gases, referida em trabalhos prévios como temperatura de Marconi  $T_k$ . Analisando a produção entrópica associada à evolução das distribuições da velocidade e da posição no estado estacionário, nomeadamente, o perfil da derivada  $\frac{\partial S}{\partial E}|_{T_k}$ , define-se a temperatura intensiva  $T_i$ . A partir do desenvolvimento de relações de flutuação dissipação efetivas também estuda-se uma terceira definição de temperatura efetiva para o partículas sujeitas a reservatórios atérmicos  $T_r$ .

Na conclusão desse breve percurso, uma discussão acerca de relações de flutuação é desenvolvida em dois contextos: i) no ruído bimodal, em que da sua aplicação espera-se derivar no futuro próximo uma relação análoga a igualdade de Jarzinski (ligando o trabalho efetuado sobre o sistema com a variação de energia livre do mesmo sistema e sua temperatura efetiva). ii) no estudo de propriedades de Turbulência em séries financeiras. Esse segundo estudo é dirigido para aplicações práticas dos métodos computacionais desenvolvidos, que fundamentalmente buscam antecipar anomalias nas séries de preços a partir da avaliação de produção entrópica resultante de suas flutuações.

**Palavras-chave: temperaturas efetivas, termodinâmica não-equilíbrio, reservatórios de calor não-markovianos, langevin generalizado.**

# Abstract

Alternative definitions of effective temperature for particles subject to athermal reservoirs are explored, using the bimodal reservoir as a paradigmatic example, characterized by assuming only two distinct values  $\{a, b\}$ , alternating between them according to transition rates  $\{\mu_a, \mu_b\}$ .

Firstly, the canonical temperature is explored, a concept present in the kinetic theory of gases, referred to in previous works as Marconi temperature  $T_k$ . By analyzing the entropy production associated with the evolution of velocity and position distributions in the steady state, namely the profile of the derivative  $\frac{\partial S}{\partial E}|_{T_k}$ , the intensive temperature  $T_i$  is defined. From the development of effective fluctuation-dissipation relations, a third definition of effective temperature for particles subject to athermal reservoirs  $T_r$  is also studied.

In the conclusion of this brief journey, a discussion about fluctuation relations is developed in two contexts: i) in bimodal noise, where its application is expected to lead in the near future to a relation analogous to the Jarzinski equality (connecting the work performed on the system with the variation of its free energy and its effective temperature). ii) in the study of Turbulence properties in financial time series. This second study is aimed at practical applications of the developed computational methods, which fundamentally seek to anticipate anomalies in price series by evaluating the entropy production resulting from their fluctuations.

**Keywords: effective temperatures, non-equilibrium thermodynamics, non-markovian heat reservoirs, generalized langevin .**

# Sumário

<b>Abstract</b>	<b>1</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>11</b>
1.1 Estrutura desta Tese .....	12
1.2 Motivação .....	12
1.3 Linhas Gerais .....	16
1.4 Definições de temperatura.....	17
<b>2 A natureza interna ou externa de um reservatório em termoestatística</b>	<b>27</b>
2.1 Introdução .....	27
2.2 Caso Reservatório Interno .....	29
2.3 Caso Reservatório Externo .....	30
2.4 Termoestatística Analítica por Cálculo de Resíduo .....	32
2.5 Aplicando análise termoestatística aos casos de reservatório interno e externo.....	35
2.6 Mapeamento de caso reservatório externo em caso efetivo de reservatório interno.....	36
2.7 Fluxos Energéticos e Análise de Grandes Desvios.....	38
<b>3 Partícula sob Ruído Bimodal</b>	<b>43</b>
3.1 Sistema sob ruído Bimodal.....	43
3.1.1 Ruído Bimodal .....	45
3.1.2 Modelos Dinâmicos para uma Partícula sob Reservatório Bimodal .....	47

3.1.3	Cálculo analítico de correlação para o caso do sistema massivo sob a influência do ruído bimodal .....	49
3.1.4	Resultados termoestatísticos para tempo longo e considerações energéticas.....	50
<b>4</b>	<b>Temperaturas efetivas para a partícula bimodal</b>	<b>57</b>
4.1	Temperatura Cinética e Temperatura Posicional $T_{k,x}$ .....	57
4.1.1	Caso Massivo, temperatura ou Cinética $T_k$ .....	58
4.1.2	Caso superdissipado, Temperatura posicional $T_x$ .....	60
4.1.3	Comparando Temperatura Posicional de caso superdissipado com a energia potencial média do caso massivo.....	61
4.1.4	Comparando fluxos energéticos de casos massivo e caso superdissipado.....	62
4.2	Temperatura Intensiva $T_i$ .....	62
4.2.1	Abordagem heurística .....	64
4.2.2	Aproximação analítica para a entropia no caso simétrico.....	67
4.2.3	$T_i$ para modelo I - partícula massiva sob o reservatório bimodal externo .....	69
4.2.4	$T_i$ modelo II - caso superdissipado .....	76
4.2.5	$T_i$ modelo III - caso interno .....	78
4.3	Temperatura efetiva no contexto da teoria de função resposta $T_r$ .....	81
4.3.1	Abordagem Heurística .....	82
4.3.2	Abordagem Analítica .....	86
4.3.3	Sistema Massivo.....	88
4.3.4	Sistema Superdissipado .....	90
4.4	Temperatura efetiva no contexto de máquinas térmicas $T_b$ .....	92
4.5	Comparação das abordagens de temperatura efetiva .....	94
<b>5</b>	<b>Conclusões e Perspectivas Futuras</b>	<b>98</b>
5.1	A Temperatura e as Temperaturas .....	98
5.2	Desdobramentos desenvolvidos durante a pesquisa.....	102
5.2.1	De Kramers-Moyal a Equação de Evolução da Probabilidade .	103
5.2.2	Relações de flutuação .....	106
5.3	Produção entrópica e Integral Fluctuation Theorem.....	110

5.4	Igualdade de Jarzynski.....	111
5.5	Volatilidade Intradiária.....	112
5.5.1	Potenciais não lineares.....	113

# Lista de Notações

Em ordem de aparição:

- $S$  : Entropia de Shannon
- $k_B$  : Constante de Boltzmann
- $\epsilon$  : Eficiência
- $W$  : Trabalho
- $Q_\alpha$  : Calor produzido por fonte  $\alpha$
- $\vartheta$  : Temperatura empírica
- $\varphi(\vartheta)$  : Escala absoluta da temperatura do gás ideal
- $m$  : Massa
- $k$  : Constante elástica
- $\gamma$  : Constante dissipativa
- $\eta$  : Ruído gaussiano
- $T$  : Temperatura canônica
- $\langle \ \rangle$  : Média sobre amostras
- $E$  : Energia média
- $C_x(t', t)$  : Autocorrelação temporal de  $x$   $\langle x(t')x(t) \rangle$
- $R_x(t', t)$  : Função resposta de  $x$

- $\tau$  : Tempo característico de evanescência da autocorrelação de uma varável
- $\xi_t$  : Ruído gaussiano colorido, dotado de tempo
- $\delta(t)$  : Delta de Dirac
- $p(x)$  : Densidade de probabilidade da variável estocástica  $x$
- $O$  : Observável
- $P_{est}$  : Distribuição estacionária
- $Bv, \chi$  : Coeficiente do expoente em distribuição estacionária de forma gaussiana para a velocidade ou posição da partícula com dinâmica regida por equação de Langevin generalizada.
- $J$  : Fluxo energético de um dado sistema, podendo ser tanto relacionado a injeção energética ( $J_{inj}$ ) que o sistema sofre como a dissipação energética ( $J_{dis}$ ) promovida por seus mecanismos internos.
- $J^o$  : Fluxo energético para caso superdissipado.
- $\Xi$  : Tempo longo, após atingimento de estado estacionário.
- $T^*, m^*, k^*, \gamma^*$  : o mapeamento de um sistema com reservatório externo em um sistema com reservatório interno.
- $L$  : função de grandes desvios
- $\Pi$  : entropia produzida por sistema
- $\Psi$  : entropia trocada entre sistema e reservatório de calor
- $a, b$  : valores assumidos por reservatório bimodal
- $\mu_a, \mu_b$  : taxas de transição ente dois estados do reservatório
- $\xi$  : ruído bimodal
- $f(\xi)$  : distribuição de probabilidade
- $\alpha$  : soma das taxas de transição  $\mu_a$  e  $\mu_b$

- $T_k$  : Temperatura efetiva cinética
- $T_i$  : Temperatura efetiva intensiva ou de configuração
- $T_r$  : Temperatura efetiva de resposta
- $h_\alpha$  : Coeficiente de ajuste logarítmico para relação entre entropia e energia média da partícula sob ruído bimodal
- $W$  : Espaço de fase
- $\Gamma$  : Função Gamma
- $\psi$  : Função Digamma
- $\Gamma$  : Função Zeta de Riemann
- $\Omega$  e  $\Lambda$ : Simplificações analítica para soluções estatísticas de equações de Langevin e Langevin generalizadas, associadas respectivamente a parte oscilatória e a parte evanescente dessas soluções
- $L$  : Protocolo associado ao funcionamento de uma micromáquina térmica
- $u_r$  : Série de incrementos de uma série temporal  $x$  na escala  $r$
- $M^k$  : k-ésimo momento de Kramers-Moyal
- $D^k$  : k-ésimo coeficiente de Kramers-Moyal

# Lista de Figuras

- 2.1 Estrutura de pólos Eq.(2.19) no plano complexo. Os pólos no arco inferior só se tornam relevantes em cálculos de grandezas dependentes do tempo como as correlações. [13] ..... 34
- 2.2 Evolução temporal de potência injetada  $J_{inj}$  e do módulo da potência dissipada  $|J_{dis}|$ , note que o sistema em estado estacionário estabiliza a diferença entre as potências injetada e dissipada que constitui a energia média do sistema, a despeito disso, ambos os fluxos seguem a troca de calor e energia associados do lado da injeção com o reservatório e da dissipação com a o termo  $\gamma v$  da equação de Langevin generalizada. [13] ..... 41
- 2.3 Distribuição numérica para a média das potências injetada e dissipada, note-se que nesse caso temos a energia média do sistema  $\langle E \rangle = 1/2$ , por isso a potência dissipada é plotada subtraída do valor da energia total, para alinhar as médias dos fluxos de entrada e saída energética sistema. Novamente a simulação aqui foi feita com todos parâmetros mecânicos  $\{m, \gamma, k\}$  iguais a um. [13] ..... 41
- 3.1 Perfil do Ruído Bimoda  $\xi(t)$ , simulação realizada com  $\mu_a = \mu_b = 2s^{-1}$  e  $a = b = 2$  ..... 45
- 3.2 Correlação da posição  $\langle v(t)v(t + s) \rangle$  versus o intervalo  $s$ . Os pontos são obtidos por uma implementação numérica da Eq. (2.10) e a linha corresponde á Eq. (3.19). Todos os parâmetros mecânicos nesse caso são iguais a 1 ..... 50

3.3	Histograma da velocidade da partícula sob influência do reservatório bimodal, note-se a evolução entre os casos plotados, nomeadamente com todos parâmetros mecânicos $\{m, \gamma, k\}$ iguais a um, temperatura cinética $T_k$ mantida constante. [12] .....	54
3.4	Evolução temporal de potência injetada $J_{inj}$ e do módulo da potência dissipada $ J_{dis} $ , note que o sistema em estado estacionário estabiliza a diferença entre as potências injetada e dissipada que constitui a energia média do sistema, a despeito disso, ambos os fluxos seguem a troca de calor e energia associados do lado da injeção com o reservatório e da dissipação com a o termo $\gamma v$ da equação de Langevin generalizada. [12] .....	55
3.5	Distribuição numérica para a função de grandes desvios associada às potências injetada e dissipada, note-se que nesse caso temos a energia média do sistema $\langle E \rangle = 1/2$ , por isso a potência dissipada é plotada subtraída do valor da energia total, para alinhar as médias dos fluxos de entrada e saída energética sistema. Novamente a simulação aqui foi feita com todos parâmetros mecânicos $\{m, \gamma, k\}$ iguais a um. [12] .	55
3.6	Função taxa para grandes desvios dos fluxos energético associados ao reservatório bimodal. Aqui observarmos o caso dissipado, para valores distintos do parâmetro $\alpha$ , $\alpha = 1/2$ e todos parâmetros mecânicos $\{m, \gamma, k\}$ iguais a 1. Nos pontos verdes temos $\alpha = 1$ , nos azuis $\alpha = 10$ e nos pontos pretos $\alpha = 100$ , já a linha amarela representa o caso de ruído gaussiano branco dado pela equação eq. (2.46) [12] .....	56
4.1	Série de figuras que constituem a investigação heurística ao redor do conceito da temperatura intensiva $T_i$ .....	66
4.2	Aproximando histogramas de $p(x)$ com $n_\sigma = 2.5$ e $p(v)$ com $n_\sigma = 30$ da partícula bimodal com parâmetros mecânicos $\{m, k, \gamma\} = \{1, 1, 1\}$ .....	69
4.3	Entropia versus Energia para diferentes valores de $\alpha$ com $T_k = 0.710 \dots$ à esquerda : $\alpha$ entre $1/10$ e $46/10$ . à direita : $\alpha$ entre $3$ and $108/10$ . As inserções interiores mostram a validade da equação Eq. (4.27). [24]	71

4.4	Medida de erro $R^2$ para os ajustes implementados pela Eq. (4.27) no gráfico anterior, observe que mesmo na situação menos gaussiana, quando $\alpha \rightarrow 0$ o ajuste tem alto nível de precisão convergindo rapidamente para um situação de erro desprezível.....	72
4.5	acima à esquerda: $\frac{\partial S}{\partial \alpha}$ versus $\alpha$ . acima à direita: $\frac{\partial S}{\partial E}$ . $E=3/10$ $\alpha=14/10$ versus $E$ . Abaixo $\frac{\partial S}{\partial E}$ $T_k=1$ . As linhas correspondem à proposta analítica enquanto os pontos foram obtidos da implementação Eq. (2.10). Para os parâmetros restantes usamos $m = k = \gamma = 1$ . [24] .....	74
4.6	painel esquerdo: gráfico para $h_\alpha$ no modelo superdissipado com parâmetros mecânicos todos iguais a um; painel direito ajuste logaritmico entre entropia e energia, para $\alpha$ e $\sigma \in \{1/10, 2/10, \dots, 3\}$ e parâmetros mecânicos iguais a um. [24] .....	78
4.7	Entropia versus energia para $\alpha \in [0.4, 3.3]$ , $\sigma = 1$ e os parâmetros mecânicos todos iguais a um no modelo com o ruído dicotômico de classe interna; Eq. (4.62). Cada valor distinto de $\alpha$ é representado por uma cor diferente como nos gráficos similares precedentes, note que todos valores de $\alpha$ resultam na mesma curva, isto é, um reservatório de caráter interno simplifica a relação entre entropia e energia do sistema, desconectando-a de sua dependência na cor do ruído, indicada pelo parâmetro $\alpha$ . [24] .....	79
4.8	Gráficos da função resposta (em vermelho) para partícula sujeita a reservatório bimodal com parados com a derivada da função de correlação da partícula bimodal (em azul) e também a do caso limite Langevin (em verde) .....	83
4.9	$C_x(t, t')$ versus $\chi_x(t, t')$ para $\alpha = 1.4$ and $m = k = \gamma = 1$ . $T_r = 1.26$ .	84
4.10	Temperatura efetiva extraída da verificação numérica do teorema de flutuação dissipação para a partícula bimodal, em (a) Temos a Temperatura efetiva para ajuste com reservatório bimodal e Langevin. Em (b) temos o RSquared para erro em ajuste com correlação analítica, caso bimodal e Langevin. ....	85

- 4.11 Temperaturas efetivas para o modelo massivo, Painel esquerdo: valores para  $T_i$  são indicados pela linha azul representada junto da Temperatura Cinética mantida constante na linha vermelha. A linha vertical corresponde ao valor crítico  $\alpha^* = 4.611$  . . . . Painel direito: valores para  $T_r$  são indicados pela linha roxa, também em contraponto com o valor constante de  $T_k$  em vermelho. Os dois gráficos são feitos com a seguinte configuração de parâmetros mecânicos  $m = k = \nu = 1$ . A temperatura cinética é mantida constante no valor 1. [24] .....97
- 5.1 Estimando o primeiro coeficiente de Kramers-Moyal para drift  $D_1$  com séries de incremento  $u_r$  calculadas a partir de valores reais do índice IBOV entre 1/1/2014 e 1/1/2014 em diversas escalas  $r$  diferentes. Note-se que o valor de  $D_1$  é dado pela inclinação do ajuste linear obtido sobre os pontos dos planos definidos por escala  $r$  constante. .... 105
- 5.2  $u_r$  para  $r \in \{200, 500, 1000, 2000, 4000, 8000, 16000, 20000, 25000, 50000\}$   
107
- 5.3 representação diagramática do processo de solução do sistema estocástico não linear por recorrência Eq.(5.36). Aqui um círculo duplo representa um termo  $\tilde{x}$ , enquanto um círculo simples representa um termo  $\tilde{\zeta}(s)$  e a integral tripla representada pela tripla linha no grafo .114

# Capítulo 1

## Introdução

Essa tese atravessa e expande alguns resultados de pesquisa já publicada em três papers distintos, a saber:

- "A large deviation analysis on the near-equivalence between external and internal reservoirs", João R. Medeiros, Sílvio M. Duarte Queirós, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Volume 451, 2016
- "Thermostatistics of a damped bimodal particle", João R. Medeiros, Sílvio M. Duarte Queirós, *Phys. Rev. E* 92, 062145, 29 December 2015
- "Effective temperatures for single particle system under dichotomous noise", João R. Medeiros and Sílvio M. Duarte Queirós, *J. Stat. Mech.* (2021) 063205

Esses três trabalhos se relacionam como desdobramento um do outro, embora, com o feitiço típico de pesquisa real, o que era secundário nos primeiros se torna o tema central ou primário do terceiro artigo (o mais recentemente publicado) e também o fulcro dessa tese que reúne aspectos das três publicações convergindo para o conceito a temperatura efetiva e suas implicações.

Este se tornou o elo conceitual que atravessa as publicações na visão já consolidada que apresento do meu trabalho acadêmico.

## 1.1 Estrutura desta Tese

- Capítulo 1 - Introduzo a tema geral da tese e a motivação para o trabalho.
- Capítulo 2 - Contextualizo a quase equivalência entre reservatórios externos e internos por meio de uma análise de grandes desvios com o viés implicado pelo tema geral da temperatura efetiva. Discuto também resultados do artigo "A large deviation analysis on the near-equivalence between external and internal reservoirs" com o viés implicado pelo tema geral da temperatura efetiva.
- Capítulo 3 - Enquadro o problema da termoestatística de uma partícula bimodal voltada para a temperatura efetiva. Discuto resultados do artigo "Thermodynamics of a damped bimodal particle" com mesma a mesma perspectiva voltada para temperatura efetiva.
- Capítulo 4 - Discuto o problema central da tese: a definição de uma temperatura efetiva para uma partícula sujeita a ruído dicotômico, desenvolvendo o tema das diversas medidas que podem servir como temperatura efetiva a depender do contexto da análise desenvolvida. Atravesso resultados do artigo "Effective temperatures for single particle system under dichotomous noise", desenvolvendo o tema das diversas medidas que podem servir como temperatura efetiva a depender do contexto da análise desenvolvida.
- Capítulo 5 - Discuto conclusões tiradas e esboço possíveis desdobramentos que foram explorados durante o período do meu doutorado.

## 1.2 Motivação

Para ciência, almeja-se Logos. Discurso e propósito, ordem e base, Ratio ou razão. E não se invocam palavras em línguas mortas pelo verniz de transcendência que elas concedem. Até porque, esta tese não projeta letras para olhos incautos, não trata de transcendência, mas de ciência. Logos, para ciência, discurso e razão.

Explico-me, por que deixo assim tão explícito que esse é o domínio da explicação. É por demais relevante para mim como pesquisador, ou trabalhador do domínio da

ciência, partir do princípio, ou começar do começo, com o perdão do pleonasma<sup>1</sup>. E para cobrir o longo período que passei cursando o doutorado no Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, tenho intenção mais ampla que apenas enunciar os resultados que colecionei no caminho, minha meta é ao menos apontar o processo pelo qual foram assentando em mim os conceitos que, reunidos aqui, convergem para os resultados, publicados nos meus artigos em colaboração com meu orientador.

Tendo em vista que os resultados produzidos durante esse período também foram desdobramentos das fundações lançadas durante o meu período de mestrado, algo do que já foi discutido anteriormente na minha dissertação será novamente tangenciado ou mesmo reelaborado dentro do escopo maior a que o trabalho pôde galgar, uma vez que o conceito de temperatura efetiva, que aparecia apenas de forma passageira como um corolário da discussão, aqui toma centralidade total.

E buscando ainda mais desenrolar o fio que amarra o trabalho realizado num todo coerente, vou me permitir navegar nessa breve seção inicial águas ainda mais passadas, em que se origina meu interesse pela área que escolhi para pesquisa, assim como a motivação geral para minha empreitada acadêmica.

Muito se diz que a Física descreve os elementos fundamentais que embasam outras ciências, por ter no alcance material dos seus modelos as menores partículas de que se tem notícia, e por outro lado alcançar no campo da cosmologia e astrofísica o comportamento dos maiores corpos celestes. Sua ambição, ironicamente desmedida, parece ser encampar no seu escopo a totalidade do Universo.

Entretanto, na experiência de encostar superficialmente em diversas áreas da Física, durante minha graduação e mestrado, senti uma grande inquietação na seara do mais epistemológico permear como problema pervasivo a atividade científica a ser discutida e trabalhada. Pensava acerca do entendimento das condições dentro das quais o conhecimento científico pode ser produzido: Quais são as premissas de seu método? Quais seus vínculos?

Na prática (o teste final de qualquer empreitada do pensamento), na ausência desses fundamentos epistêmicos, muito da pesquisa em física pode se resumir a uma série de especialidades, sem de fato abrir implicações para outras áreas, seja na física ou em outros campos do conhecimento. Descobrir a física estatística foi, na contramão do que eu vinha observando como a limitação do alcance real do ofício

---

<sup>1</sup>Há engenharia em toda redundância desse texto, segurança operacional e de processo.

científico, uma porta para as questões da atividade científica no seu âmbito metodológico, assim como um descortinar de alcance para resultados científicos dentro e fora da academia.

A escolha da física estatística como minha área preferencial de pesquisa foi assentada na compreensão quase elementar de que só é possível implementar o método científico uma vez que se conheçam noções básicas de estatística. Um experimento deve ser repetido muitas vezes para que seu resultado seja validado, e para toda hipótese sobre o mundo corresponde um teste de hipótese que a valida ou não. Desse modo, produzir teoria sobre uma série de experimentos deve ser em primeiro lugar a teoria do espaço em que vivem essas múltiplas manifestações do desenrolar de um determinado evento, circunscrito por uma série de condições de contorno, por que não, o espaço dos ensembles.

Clarifico: a premissa mais fundamental da abordagem estatística é a ideia de que a informação que temos disponível sobre o comportamento do sistema é incompleta, ou ainda, a de que nossos instrumentos cognitivos, de medida e computação não são suficientes para dar conta da complexidade do sistema, mesmo que por muita sorte ou muita virtude conheçamos perfeitamente a dinâmica elementar das partículas que compõe o sistema. Ora, essa não é a condição da física estatística, essa é a condição existencial de toda ciência.

Mais do que isso, na física estatística havia a promessa de interface com outras áreas, em particular para meu interesse, tanto a economia (a partir da qual pode-se entender e estudar o comportamento humano e seus mecanismos de sobrevivência), como a biologia (a partir da qual compreendemos o comportamento dos diversos seres vivos que povoam nosso mundo), e por fim a física do estado sólido em que está assentada a física dos materiais<sup>2</sup>.

Para completar, na minha perspectiva, a prevalência da física estatística como mais fundamental ou completa entre as abordagens disponíveis no campo da pesquisa atual, a própria mecânica quântica está fundada no conceito de incerteza, a condição existencial dos problemas de física estatística.

É evidente que a incerteza no contexto quântico se diferencia intrinsecamente daquela associada a verossimilhança, o que se vê particularmente destacado no estudo de estados quânticos puros, onde temos superposição probabilística por oposição aos

---

<sup>2</sup>É difícil conceber mais materialidade imediata que nos estudos da escassez de recursos (economia), da vida (biologia) e, pleonasticamente, na ciência de materiais

estados mistos em que a probabilidade atinge tanto a dimensão da verossimilhança quanto aquela intrínseca ao estado quântico. Ainda assim, a formulação dos problemas científicos nos termos da probabilidade, seja intrínseca ou extrínseca, é ubíqua e, por conta disso, totalmente fundamental.

Quase por acaso, o que torna tudo ainda mais significativo, já que navegamos o domínio da probabilidade e da estatística, meu trabalho convergiu para o tema temperatura, cujo poder de atravessar domínios é quase proverbial<sup>3</sup>.

E subjacente, ou mesmo equivalente, à temperatura como conceito, como se verá em detalhe mais a frente, jaz a ideia de equilíbrio, outro conceito que atravessa diversas disciplinas. A ideia de equilíbrio como ponto de convergência, ou atrator de diversas dinâmicas, que resume o estado fundamental, ou perseverante de um sistema, aponta na direção que este trabalho procura aprofundar. Como se dá esse processo de convergência, ou aproximação dos diferentes aspectos ou funções desempenhadas pela temperatura no equilíbrio e como podemos entendê-los como temperaturas efetivas, isto é, medidas associadas a essas diferentes faces da temperatura, fora do equilíbrio.

Reciprocamente, o trabalho exposto nestas páginas também procura informar o próprio conceito de estado dinâmico com métricas distintas de distância ou aproximação ao dito equilíbrio térmico, para tanto lançando mão de ferramentas teóricas basilares como a equação de Langevin generalizada. No escopo desse modelo vamos também explorar as violações do Teorema de Flutuação e Dissipação provocadas pela presença de reservatórios exóticos, em particular, exploraremos o reservatório Bimodal, em cujo contexto meu trabalho de mestrado foi desenvolvido.

Por fim, considero relevante apontar que a discussão feita aqui ao redor do conceito de equilíbrio e temperatura traduz sempre resultados obtidos no âmbito de modelos unidimensionais e de uma única partícula singular, sujeita a um reservatório que injeta calor e produz um transiente até a obtenção de um estado estacionário. Este é o quadro de Langevin generalizado apontado acima, em que exploramos algumas variações quanto à forma da dissipação, do potencial e do reservatório de calor.

Trata-se de uma abordagem simples, porém a simplicidade desse tipo de modelo pode ser enganosa. É esta simplicidade que dá azo a uma ampla gama de aplicações

---

<sup>3</sup>Se ciência é procurar a verdade com os olhos vendados como na brincadeira Quente ou Frio.

e os conceitos que emergem da iteração do modelo sobre esses distintos casos de aplicação<sup>4</sup> inelutavelmente vem a incluir implicações profundas sobre formas mais complexas ou específicas de formular o mesmo problema.

As implicações profundas de um modelo na Física são como as implicações profundas de uma metáfora, alcançando para além da mensagem declarada, ou do sistema equacionado, as adequações e afinidades semânticas, ou de conteúdo científico, para além do simplismo, na lapidação da pedra bruta e complexa, a jóia da simplicidade.

### 1.3 Linhas Gerais

O presente trabalho discute possíveis adaptações do conceito de temperatura em um contexto de modelos que orbitam a estrutura e o arcabouço teórico associado a equação de Langevin.

Para tanto, foi necessário desdobrar o conceito da equação de Langevin generalizada como ferramenta para descrição de um sistema sob influência de reservatórios gaussianos coloridos (como visto no capítulo 2) e do reservatório bimodal (como visto no capítulo 3), ambos exemplos basilares de situação não Markoviana.

Nas duas abordagens, que vieram a resultar em duas publicações distintas em que se explorou o conceito de temperaturas efetivas, a convergência no tempo das dinâmicas para uma situação de estacionaridade das distribuições de probabilidade associadas aos graus de liberdade da partícula é a característica que permite o estabelecimento da analogia com o equilíbrio térmico.

Nessa situação, orientada no sentido da consolidação de um estado estatístico, igualmente se estabelecem de forma duradoura para o sistema estacionário as propriedades longamente discutidas nesse trabalho (energia média, resposta e aspectos de configuração). O estudo dessas propriedades como complementares para a caracterização da termicidade ou atermicidade do sistema, por ser fundado na situação de estabilidade estatística, espelha também o conceito estendido de equilíbrio que

---

<sup>4</sup>Como as estruturas que emergem de autômatos celulares após algumas iterações.

encontramos em outras áreas. É por conta disto que ouvimos com frequência (entre físicos) a expressão “termalizar” como um sinônimo do processo de atingir um ponto estável, onde há um balanço de forças ou de fluxos: uma situação estacionária.

Se esmiuçamos no contexto da microeconomia o dito equilíbrio Walrasiano extrapola o conceito de equilíbrio térmico para em um problema de otimização, onde fundamentalmente o estado de equilíbrio é caracterizado como um ponto fixo da função de excesso de demanda [46]. Nesse contexto, o ponto fixo é análogo ao estado estacionário, afinal o estado estacionário de uma equação de Langevin generalizada pode ser entendido como um ponto fixo do operador de evolução temporal.

Da mesma forma, na biologia, o equilíbrio em um sistema de Predador-Presa [47] corresponde a um estado estabilizado das populações, que corresponde necessariamente a uma estatística definida que não exhibe evoluções significativas a partir de um tempo característico de relaxamento, ou “termalização”.

Acredito que, se por um lado exploramos as diversas temperaturas efetivas, expandindo a discussão ao redor de fundamentos da termodinâmica, em particular do conceito de temperatura, por outro, com os resultados teóricos obtidos podemos ilustrar casos em que o uso dos conceitos trabalhados atravessa problemas de outros domínios do conhecimento como os mencionados acima.

Assim, o mesmo impulso generalizante que procura esticar os limites de uma proposição científica restrita a um determinado conjunto de condições de contorno encontra ressonância na tentativa de conectar os resultados e vislumbres desenvolvidos no âmbito dessa pesquisa a uma paisagem mais ampla da ciência atrelada ao conceito generalizado, que aqui neste trabalho trata-se da temperatura.

## **1.4 Definições de temperatura**

Vamos preparar o terreno relembrando algumas das formulações fundamentais a que o conceito de temperatura deve o seu grande alcance e sua profundidade no domínio da física. Tenhamos também sempre em vista que o propósito final aqui é introduzir paulatinamente os distintos papéis que o conceito desempenha para reuní-

los de forma eficiente na generalização aqui proposta, a ser inserida no contexto de não equilíbrio.

Notemos que a termodinâmica é essencialmente uma descrição quantitativa de um sistema macroscópico a partir de poucas variáveis, procurando assim investigar o estado observável do sistema segundo as grandezas que configuram sua situação geral. Entre exemplos de grandezas físicas associadas a essa descrição macroscópica podemos mencionar o volume total do sistema, a pressão exercida pelo sistema sobre o ambiente que o circunscribe. Essas grandezas então configuram a situação em que o sistema se encontra a partir da equação de estado, que pode ser formulada de diversas maneiras a depender de características do sistema estudado, entre elas podemos mencionar a relação de Boyle  $PV = Nk_B T$ .

Equações de estado também podem ser formuladas a partir da energia ou entropia totais do sistema. Ambas grandezas tem interpretações desafiadoras, em particular quando transcendem sua abstrata formulação matemática, e vem assumir um papel de grandeza física no discurso científico.

A entropia, por exemplo, é muitas vezes referida como uma métrica para a desordem do sistema; essa interpretação pode ser enganosa por depender do conceito às vezes subjetivo de ordem. Uma interpretação que considero mais adequada, assentada tanto em teoria da informação quanto em ecologia quantitativa e caracteriza a entropia como uma medida da diversidade de configurações apresentadas pelo sistema. [1, 2]

Note que trata-se fundamentalmente de um conceito probabilístico, associado ao espaço de fases, isto é, ao espaço das possíveis estados que o sistema pode apresentar. Dado um espaço de fases discreto  $x_i$ , a probabilidade  $p(x_i)$  associada a essa espaço, a constante de boltzmann  $k_B$  podemos escrever a fórmula da entropia de Shannon-Boltzmann-Gibbs  $S_{BG}$  a seguir:

$$S_{BG}(x) \equiv k_B \sum_i p(x_i) \log p(x_i) \quad (1.1)$$

Já em um espaço de fases contínuo  $x$ , podemos levar a soma discreto ao limite em que se torna a integral, resultando na fórmula a seguir:

$$S_{BG}(x) \equiv k_B \int p(x) \log p(x) dx \quad (1.2)$$

Partindo da produção clássica de Carnot, podemos resgatar o enunciado original da temperatura absoluta, presente no trabalho de Thomson. [3].

Uma máquina térmica tem sua eficiência  $\epsilon$  definida pela proporção entre o trabalho auferido ( $W$ ) e calor transmitido da fonte quente para a máquina ( $Q_1$ ).<sup>5</sup>

$$\epsilon = \frac{W}{Q_1} \quad (1.3)$$

Maximizar a eficiência desse processo corresponde no limite a aniquilar qualquer produção de entropia no ciclo térmico. Note-se que nessa passagem o conceito fulcral da reversibilidade entra em jogo. Uma vez que a produção de entropia vai a zero, entende-se que os caminhos cíclicos disponíveis a percorrer pelo sistema ao longo do processo são dinamicamente intercambiáveis com seus correspondentes reversos.

Por conservação da energia sabemos que o Trabalho total deve ser a diferença entre o calor  $Q_1$  emitido pela fonte quente e o calor  $Q_2$  absorvido pela fonte fria  $W = Q_1 - Q_2$  assim obtemos a célebre expressão da eficiência:

$$\epsilon_{max} = 1 - \frac{Q_2}{Q_1} \quad (1.4)$$

Thomson observa que a razão  $\frac{Q_2}{Q_1}$  depende apenas das temperaturas empíricas que caracterizam os reservatórios e conclui que, excetuando-se uma constante multiplicativa arbitrária que define a magnitude da medida,  $\frac{Q_2}{Q_1}$  define a escala absoluta da temperatura do gás ideal  $\Phi(\vartheta_1, \vartheta_2)$ , referida na expressão abaixo pela função  $\varphi$  cujo domínio é dado pelas temperaturas empíricas  $\vartheta$

$$\frac{Q_2}{Q_1} = \Phi(\vartheta_1, \vartheta_2) = \frac{\varphi(\vartheta_1)}{\varphi(\vartheta_2)} \quad (1.5)$$

Huang, em seu livro texto [4], define temperatura como um parâmetro termodinâmico. Para um dado sistema, podemos definir uma equação de estado, que relaciona todos os parâmetros termodinâmicos funcionalmente.

A definição de Huang pode ser considerada como incompleta, ou circular, na medida em que o conceito de parâmetro termodinâmico pressupõe uma termodinâ-

---

<sup>5</sup>Note a indexação 1 representa a fonte quente e 2 a fonte quente. Referir-se à seção inicial de Notações para esclarecimento quanto a qualquer variável usada nesse texto

mica, campo cuja definição não pode escapar inevitavelmente do conceito central de temperatura.

Por outro lado, relaxando o rigor conceitual, podemos interpretar Huang como referindo o conceito fundamental que define e aloca a temperatura no sistema conceitual ao de parâmetro da equação de estado. Nesse contexto a temperatura fundamentalmente fica associada ao conceito de configuração e espaço de fase, que como veremos será um dos modos principais para se calcular temperatura efetiva em um contexto de não-equilíbrio.

Olhemos para a já citada relação de Boyle  $PV = Nk_B T$  que vincula as três variáveis termodinâmicas ( $P$ ,  $V$ ,  $T$ ), pressão, volume e temperatura, respectivamente. Nela temos equação de estado do gás ideal, que define então, segundo Huang, uma escala típica de temperatura. Para tanto, Huang sugere dividir a temperatura em intervalos iguais por uma cadeia de máquinas de Carnot que realizem cada uma o mesmo trabalho, definindo assim uma unidade ou escala associada à medida. O conceito de temperatura fica, nessa definição, vinculado ao de calor e ao de trabalho, entende-se também a relação de proporção linear entre calor transferido e temperatura, própria do caso ideal.

Note-se como essa enunciação do conceito de temperatura necessariamente entrelaça conceitos de calor, trabalho, energia e estado. O amplo espectro de propriedades de sistema, subjacente a ideia de estado térmico estão aí representados.

Por outro lado, devemos ressaltar como em outros contextos a temperatura emerge desempenhando função distinta, porém igualmente fundamental, como no estudo da equação de Langevin, datando do início do século XX. Note-se que no contexto de Langevin, a própria noção canônica de equilíbrio térmico já deve ser substituída pelo conceito do estado estacionário, e a definição de temperatura correspondentemente já toma um sentido distinto daquele enunciado por exemplo no contexto do equilíbrio térmico, em particular no contexto da equação de Langevin observamos que o sistema converge para um estado em que entropia é produzida constantemente como resultado do balanço dos termos de troca energética [5]<sup>6</sup>, enquanto o equilíbrio térmico é caracterizado por uma produção de entropia nula.

Tendo como referência o célebre artigo de Einstein em 1905 acerca do movimento browniano [6], em que temos uma formulação preliminar da equação de Langevin

---

<sup>6</sup>Essa discussão será esmiuçada em maior detalhe no capítulo 2.

investigando o movimento browniano, já encontramos a temperatura como elo entre dissipação e flutuação. Sublinhemos que a premissa fundamental lançada por Einstein para derivar o deslocamento quadrado médio de uma partícula em movimento browniano naquele contexto: a diferença de escalas associada ao tamanho da partícula focal do modelo e às distâncias entre as partículas constituintes do banho térmico, ou do líquido sobre o qual o movimento browniano se desenrola.

Essa diferença de escalas sugere uma reflexão ubíqua, que atravessa diversas modelagens encontradas tanto no contexto da física como de outros campos de estudo como economia e biologia. Como modelar um indivíduo na sua relação com o meio em que se encontra e que o circunscreve, e como a diferença de escala entre o destacado indivíduo e a soma estatística dessas muitas interações às quais está sujeito age sobre ele em média? Quais são os vínculos que garantem uma estatística para essa relação?

E no contexto do movimento browniano já temos a equação de Langevin operando, sendo uma simples equação de força, e portanto diferencial, acrescida de um elemento estocástico que vem a representar o reservatório térmico, ou banho térmico, ou melhor, a interação do indivíduo com seu meio.

Como resultado correspondente, na busca do deslocamento quadrado médio das partícula de Brown, confirma-se a intuição elementar proposta originalmente por Boltzmann, a de que a Energia cinética média das partículas, isto é, sua agitação média corresponde a temperatura, a sensação de frio ou calor que sentimos quando em contato com um fluido.

Observemos que por oposição às definições de Thomson e Huang, anteriormente mencionadas, nesse contexto estamos diante de uma investigação do papel da temperatura em um contexto microscópico. Nesse sentido, seria possível também, em um esforço de alojar a temperatura na escala da partícula focal de estudo, definir a contraparte microscópica do conceito como esse movimento médio da partícula quando sujeita a situação de equilíbrio. Por oposição às outras definições, aqui estaríamos diante de um entendimento do conceito em uma escala mais fundamental, embora necessariamente atrelada a ideia de reservatório térmico.

Mais modernamente, Van Kampen [5] já assume o quadro proposto por Langevin como uma abordagem generalizável sobre processos estocásticos, assentado de forma pioneira no trabalho de Einstein e Smoluchowski quando do seu estudo do movimento Browniano, antecipando o viés que sugerimos aqui. O estudo da

partícula focal sujeita a uma interação de um meio circundante de fato veio a ser reconhecidamente um modelo robusto para uma ampla variedade de fenômenos. [5]

As minúcias associadas a esse modelo serão esmiuçadas ao longo desta tese, em particular por que, como se verá a frente, os modelos aqui estudados são todos generalizações da equação de Langevin.

O conceito de equilíbrio está lançado como premissa mais ou menos tácita nas três definições de temperatura referidas acima. Nesse contexto clássico temperatura e equilíbrio são intercambiáveis na medida em que o equilíbrio define um estado em que as trocas de calor se extinguem por completo e portanto a temperatura é preservada.

A alternativa atérmica a essa ideia centra-se no estudo de estados estacionários em que a partícula encontra-se sujeita a troca constante de calor, porém convergindo para um regime no qual a injeção energética sobre o sistema é igual a dissipação e a energia total média encontra-se preservada<sup>7</sup>.

Dentro do quadro de Langevin, o movimento é sujeito a um termo de dissipação, um de restituição elástica e a um termo de flutuação distribuída gaussianamente. Seguindo esse mapa no estudo do efeito de um banho térmico sobre a dinâmica associada à uma única partícula segundo a abordagem de Langevin temos;

$$m\ddot{x} = -k\dot{x} - \gamma x + \eta \quad (1.6)$$

Onde  $x$  é a posição,  $m$  é massa,  $k$  é constante elástica,  $\gamma$  é a coeficiente dissipativo e  $\eta$  é a ação do reservatório gaussiano sobre a partícula. O reservatório no caso Langevin é desprovido de memória, isto é não há uma escala temporal associada à sua função de autocorrelação  $\langle \eta(t)\eta(t') \rangle$ . A temperatura ocorre como parte do fator de proporcionalidade associado à magnitude das flutuações da interação entre a partícula e o meio;

---


$$\langle \eta(t)\eta(t') \rangle = 2\gamma T \delta(t - t') \quad (1.7)$$

<sup>7</sup>Existem outras propriedade decorrentes da estacionaridade como a ergodicidade fraca. Essa propriedade garante que médias sobre amostras de um dado observável  $O$  sejam iguais a médias no tempo deste mesmo observável  $\bar{O} = \langle O \rangle$ . Podemos mencionar também a independência das distribuições das coordenadas  $x$  e  $v$  com sua distribuição conjunta  $\rho(x, v) = \rho(x)\rho(v)$

Dado que a distribuição normal  $N(\mu, \sigma) \propto \exp^{-\frac{(\xi - \mu)^2}{\sigma}}$  representa a estatística do ruído gaussiano, isto é,  $\eta \sim N(\mu, \sigma)$  é possível obtemos os momentos da posição e da velocidade (ver seção 2.4 para método de Fourier-Laplace para o cálculo de momentos estatísticos), a partir de que verifica-se;

$$v^2 = T \quad (1.8)$$

Essa é a temperatura dita canônica, correspondente a uma medida média de agitação da partícula (a variância de sua velocidade no caso  $\langle v \rangle = 0$ ), aqui nessa seara estamos nos aproximando dos conceitos trabalhados por Einstein, Smoluchowski e Langevin. Podemos analisar igualmente cenários atérmicos e pesquisar a possibilidade de se estabelecer uma relação funcional comparável, uma escala energética típica. Dada a Energia Livre de Helmholtz, onde  $F$  representa a energia livre;

$$F \equiv E - TS \quad (1.9)$$

Observa-se a interdependência entre energia, entropia e temperatura; dessa relação podemos extrair ainda uma outra equação para obter o valor da temperatura; concentrada na derivada entre as duas grandezas termodinâmicas  $S$  e  $E$ ;

$$T \equiv \frac{dE}{dS} \quad (1.10)$$

A equação acima ressalta essencialmente a complementariedade entre as propriedades da intensividade e extensividade associadas respectivamente à temperatura  $T$  e à entropia  $S$ <sup>8</sup>, presente também nos pares de Legendre  $\{p, V\}$ ,  $\{\mu, N\}$ . Nesse ponto já observamos um parentesco maior com a ideia de Huang em que o conceito de estado e configuração são os elementos básicos da definição de temperatura.

Essencialmente, o presente trabalho procura investigar, a partir dos resultados clássicos para sistemas em equilíbrio térmico, casos de reservatório dito atérmico, isto é, na ausência do referido equilíbrio. A emergência de um estado estacionário nesses processos estocásticos pode garantir a obtenção de uma estatística para o sistema, base para estabelecer relações parelhas às observadas no equilíbrio. Entre essas relações podemos discernir a própria definição de temperatura.

---

<sup>8</sup>Diz-se intensiva a grandeza que não escala com o sistema, isto é que é independente de seu tamanho. Chama-se extensiva aquela grandeza que, medida em um sistema no mesmo estado porém maior por um dado fator, apresentará seu valor magnificado por esse mesmo fator

É necessário nos ater aos aspectos da estacionaridade que garantam o transporte de relações entre os parâmetros termodinâmicos nos dois casos. Essa abordagem é aparentada à dos trabalhos de Ford, Eyre [8] e Pongmungranan [9], no qual relações termodinâmicas são desenvolvidas no contexto da entropia de Tsallis  $S_q$  [10], um exemplo célebre de uma generalização termodinâmica. Note-se, a fórmula canônica de Shannon-Boltzmann-Gibbs:

$$S_{BG}(p) \equiv k \sum_i p_i \log p_i \quad (1.11)$$

Emerge como limite quando o parâmetro  $q$  vai a um da fórmula generalizada de Tsallis:

$$S_q(p) \equiv \frac{k}{q-1} \left[ 1 - \sum_i p_i^q \right] \quad (1.12)$$

$$S_{BG} = S_{q \rightarrow 1}(p_i) \quad (1.13)$$

No caso contínuo:

$$S_{BG}(x) \equiv k \int p(x) \log p(x) dx \quad (1.14)$$

$$S_q[p] = \frac{k}{q-1} \left[ 1 - \int (p(x))^q dx \right] \quad (1.15)$$

Da mesma forma, temos como meta a preservação de um caso particular do sistema em que as propriedades térmicas (no caso da generalização de Tsallis, extensivas) reemergem.

A partir de uma abordagem numérica, podemos investigar o comportamento da partícula simulada sujeita ao reservatório atérmico, em particular, estamos interessados no seu comportamento posterior ao relaxamento associado à sua trajetória no espaço de fase até o regime estacionário. A energia média acumulada pelo sistema pode ser calculada diretamente da estatística da posição e da velocidade;

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2} \langle v^2 + x^2 \rangle \quad (1.16)$$

Observe-se aqui como no regime estacionário ainda tem-se a garantia da equipartição estatística da energia, dado que para que a energia total do sistema atinja um valor constante que caracteriza o regime estacionário do sistema é esperado que injeção e dissipação térmica atinjam balanço estatístico. Observe-se como na analogia com o equilíbrio é importante ressaltar aqui também o teorema de Virial (inserir continuidade a explicação).

A entropia média pode ser estimada lançando-se mão de histogramas que aproximam as distribuições de ambas posição e velocidade, assim ter-se-á uma contribuição correspondente a cada uma das coordenadas de fase, nomeadamente,  $S = S_x + S_v$ . Essa análise fica em uma primeira instância baseada na fórmula de Shannon-Boltzmann-Gibbs referida na equação 1.13,  $S = - \int \rho(x, v) \log \rho(x, v) dx dv$ , mas uma discussão posterior sobre outras fórmulas alternativas também é desenvolvida com o intuito de confrontar o ganho teórico advindo de sua utilização no contexto do desenvolvimento de uma termodinâmica de não equilíbrio.

Tendo mapeada a técnica geral de aproximação ao resultado esperado, tanto na forma analítica quanto na numérica, podemos avaliar como de diferenciam ou se aproximam, a temperatura canônica ( $T_k$ ), referida ao segundo cumulante da velocidade no estado estacionário, como outras temperaturas efetivas passíveis de avaliação no caso atérmicos, como a dita temperatura intensiva ( $T_i$ ), ligada com a fórmula de Helmholtz para a energia livre.

Também no contexto do teorema de flutuação-dissipação podemos mencionar a presença da temperatura desempenhando o papel fundamental de relacionar a autocorrelação do sistema com sua função resposta. Lembremos da relação associada.

$$\frac{\partial C_x(t', t)}{\partial t'} = TR_x(t, t') \quad (1.17)$$

Onde  $C_x$  é a autocorrelação da partícula e  $R_x$  representa a função resposta da partícula, associada ao relaxamento de uma estatística se volta a um estado estacionário dada uma perturbação linear  $\delta x$  que aja sobre a partícula. A temperatura nesse sentido associa a sensibilidade (observe que em muitas referências chama-se susceptibilidade a transformada de fourier da função resposta) de um sistema a uma perturbação pequena.

O teorema de flutuação-dissipação abre assim uma oportunidade para em regimes

de violação ou relaxamento da equação acima, em particular em situações de não equilíbrio, exploremos-se a relação que existe em estados estacionários entre funções resposta e autocorrelações associadas a graus de liberdade do sistema analisado.

Faz-se também uma análise de uma temperatura efetiva chamada Temperatura de resposta ( $T_r$ ) extraída de uma avaliação numérica da relação de flutuação dissipação, que liga a função resposta de observáveis sistema com a auto-correlação dos mesmos.

## Capítulo 2

# A natureza interna ou externa de um reservatório em termoestatística

### 2.1 Introdução

Como tema central associado à discussão acerca de reservatórios para sistemas térmicos podemos destacar a escala associada às partículas constituintes do meio que caracteriza o banho térmico.

Notemos como a ideia fundamental por trás do teorema de flutuação-dissipação é que o mesmo mecanismo é responsável pelos dois comportamentos observados pelo sistema, o reservatório térmico. Na formulação canônica, o meio composto por partículas de escala inferior a partícula focal analisada interage com a mesma partícula focal por meio de constantes colisões em múltiplas direções e velocidades distintas que vem a provocar o ruído observado no sistema assim como a dissipação. Por conta da origem comum de ambos fenômenos, flutuação e dissipação, é de se esperar que a escala temporal típica associada a ambos seja idêntica.

Isto configura um cenário de verificação do teorema de flutuação e dissipação, que também é caracterizado no trabalho de Kubo como característico de um reservatório dito interno ao sistema, no sentido em que o termo de ruído encontra-se indelevelmente associado a dinâmica da partícula, interagindo também como um dissipador para o movimento e conseqüentemente para energia total do sistem. Note-se que o trabalho de Kubo generaliza o modelo original referido por Einstein quando da investigação acerca do movimento browniano por introduzir o termo de memória

tanto a dissipação quanto à flutuação, dado que na concepção primeira a equação de Langevin associada ao movimento browniano não envolve qualquer tipo de escala temporal típica tanto para o comportamento dissipativo como para o termo estocástico associado à flutuação, que ficam igualmente delta-correlacionados, o que corresponderia ao limite em que a escala temporal  $\tau$  se aproxima arbitrariamente de zero.

Por contraste, uma situação de reservatório externo corresponde ao cenário em que não se trata de um mesmo mecanismo a justificar ambos comportamentos fundamentais da partícula, mas de interações distintas. A separação dos dois mecanismos configura a situação do reservatório como externa ao sistema e isso é fundamentalmente tratado a partir das distintas escalas temporais associadas aos dois comportamentos.

Entretanto, a seguinte questão se faz pertinente para se expandir e aprofundar o entendimento acerca do teorema de flutuação e dissipação: em que medida as situações de reservatório interno e externo são análogas ou se diferenciam para além das escalas temporais associadas aos dois comportamentos?

Note-se, lançando o olhar sobre o caso mais simples de reservatório dito externo, em que a dissipação no sistema é não possui memória, tratando-se de um termo na equação na força desprovido de qualquer escala temporal, e um kernel associado a ela, enquanto o termo de flutuação possui uma escala típica temporal  $\tau$  a ele associada podemos ressaltar um aspecto fundamental que diferencia ambas situações:

O reservatório externo ao sistema realiza trabalho sobre o mesmo, modificando a energia total do sistema, tratando-se, em outros termos de um reservatório de trabalho do sistema enquanto o reservatório interno cumpre essencialmente a função de um reservatório de calor, inserindo ruído sem afetar a energia total do sistema.

Note-se aqui como o reservatório externo pode ter a amplitude de sua contribuição energética ao sistema definida pela temperatura associada ao reservatório. Aqui é importante ressaltarmos como no contexto de uma definição da autocorrelação do termo estocástico nos seguintes termos:

$$\langle \eta(t_1)\eta(t_2) \rangle = \frac{\nu T}{\tau} e^{-\frac{|t_1-t_2|}{\tau}} \quad (2.1)$$

Observando que ambos sistemas de reservatório externo e interno podem conduzir a estados estacionários dado certos vínculos entre os parâmetros, o trabalho

aqui desenvolvido procura explorar os limites com que podem se aproximar as duas situações.

Com o propósito de aprofundar-se o entendimento da diferença entre as situações de reservatório interno e externo, este trabalho testa a seguinte conjectura: Existe um mapeamento linear dos parâmetros termomecânicos associados ao funcionamento do sistema que possa tornar as duas situações análogas?

Se essa hipótese fosse confirmada, a conversão da situação de reservatório externo para uma situação de reservatório interno corresponderia apenas a uma transformação de escala nos parâmetros do problema, sem que houvesse uma implicação mais profunda sobre a física do sistema.

Como vamos observar, o mapeamento consegue tornar a situação termoestatística equivalente apenas em primeira ordem no contexto dos momentos associados às grandezas físicas do sistema.

## 2.2 Caso Reservatório Interno

### Dissipação e Flutuação delta-correlacionados

Dada a equação de Langevin generalizada onde o ruído gaussiano  $\eta(t)$  possui memória como apontado na equação 2.1, caracterizando assim a situação de reservatório externo.

$$m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = -\gamma \frac{dx(t)}{dt} - \frac{d}{dx} V(x) + \eta_t. \quad (2.2)$$

Dado um potencial harmônico  $V(x) = k \frac{x^2}{2}$ ,

$$m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = -\gamma \frac{dx(t)}{dt} - k x(t) + \eta_t. \quad (2.3)$$

Estamos interessados em compreender os fluxos energéticos associados ao estado estacionário do sistema acima. Para tanto é necessário obter a estatística do sistema no estado estacionário. A abordagem adotada para tal segue o cálculo de Fourier-Laplace como definido na seção a seguir.

## Dissipação e Flutuação com o mesmo tempo característico $\tau$

Observe que um caso de reservatório interno pode existir também na presença de um kernel de memória para a dissipação dado por  $\kappa(t_1, t_2) = \frac{\nu T}{\tau} e^{-\frac{|t_1 - t_2|}{\tau}}$ , dado que a correlação do ruído apresente um decaimento com a mesma escala temporal de evanescência,  $\tau$ , isto é:

$$\langle \xi(t)\xi(t + \tau) \rangle = \frac{\nu T}{\tau} e^{-\frac{|t_1 - t_2|}{\tau}} \quad (2.4)$$

Usando o mesmo potencial harmônico  $V(x) = k\frac{x^2}{2}$ , obtemos a seguinte equação de Langevin generalizada:

$$m \frac{d^2x(t)}{dt^2} = - \int \kappa(t^j - t) \frac{dx(t)}{dt^j} dt^j - kx(t) + \xi_t. \quad (2.5)$$

Note-se que esse caso em que dissipação e flutuação tem um mesmo tempo característica engloba como caso particular o caso em que ambos os mecanismos energéticos são delta-correlacionado no limite  $\tau \rightarrow 0$ .

## 2.3 Caso Reservatório Externo

Note-se que uma vez que o teorema de Flutuação e Dissipação garante no caso interno a equivalência entre memória associada ao tempo característico do termo de dissipação e do termo estocástico correspondente a flutuação do sistema, sistemas onde o reservatório se enquadra na classe externa são qualificados como instâncias de violação desse mesmo teorema.

### Dissipação com tempo característico $\tau$ e flutuação delta-correlacionada

Representando o caso de reservatório externo, dentro também de uma quadro generalizado associado ao formalismo de Langevin, podemos citar duas formulações distintas. Primeiramente exemplificaremos o caso em que temos perseverança no tempo para a dissipação, enquanto a flutuação segue com caráter de ruído branco. Assim, introduzindo o kernel dissipativo  $\kappa(t_1, t_2) = \frac{\nu T}{\tau} e^{-\frac{|t_1 - t_2|}{\tau}}$  sobre a formulação de Langevin generalizada;

$$m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = - \int \kappa(t' - t) \gamma \frac{dx(t')}{dt'} dt' - \frac{d}{dx} V(x) + \eta_t. \quad (2.6)$$

Dado um potencial harmônico  $V(x) = k \frac{x^2}{2}$ ;

$$m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = - \int \kappa(t' - t) \gamma \frac{dx(t')}{dt'} dt' - k x(t) + \eta_t. \quad (2.7)$$

Assim nessa primeira forma do caso externo, tem-se a presença de memória na dissipação enquanto o mesmo não será verificado para a flutuação isto é o ruído terá uma escala temporal distinto do mecanismo dissipativo.

Note, é por simplicidade que se trata nesse caso o ruído como de fato delta-correlacionado, sendo a ideia física que embasa essa aproximação a de que apesar de necessariamente haver alguma escala temporal associada a essa flutuação, ela pode ser considerada arbitrariamente menor que a escala da dissipação:

$$\langle \eta(t) \eta(t + \tau) \rangle = \delta(t - \tau) \quad (2.8)$$

### **Flutuação com tempo característico $\tau$ e Dissipação delta-correlacionada.**

Por fim vamos ao caso de reservatório externo que será nosso parâmetro de referência para a análise de quase-equivalência desenvolvida neste capítulo:

$$m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = -\gamma \frac{dx(t)}{dt} - \frac{d}{dx} V(x) + \xi_t. \quad (2.9)$$

Dado um potencial harmônico  $V(x) = k \frac{x^2}{2}$ ;

$$m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = -\gamma \frac{dx(t)}{dt} - k x(t) + \xi_t. \quad (2.10)$$

Onde o ruído  $\xi$  é gaussianamente distribuído  $p(\xi) \propto \exp(-\xi^2)$  e possui uma autocorrelação temporal com caráter evanescente com uma escala temporal típica  $\tau$ :

$$\langle \xi(t) \xi(t + \tau) \rangle = \frac{\gamma T}{\tau} e^{-\frac{|t_1 - t_2|}{\tau}} \quad (2.11)$$

## 2.4 Termoestatística Analítica por Cálculo de Resíduo

Seguindo modelo de abordagem presente nos trabalhos de Morgado e Queirós [11] lançamos mão do espaço de Laplace-Fourier para encontrar as expressões analíticas dos cumulantes estatísticos. Vale ressaltar que esse tipo de cálculo estatístico explicado nessa seção está por trás de todos os resultados termoestatísticos demonstrados ao longo desse trabalho, sendo uma ferramenta analítica poderosa para acessar os estados estacionários associados a equações de Langevin generalizadas e pontos fixos de equações diferenciais em geral.

Definindo-se a transformada de Laplace Fourier da variável  $O$  segundo a seguinte fórmula:

$$\tilde{O}(iq + \varepsilon) \equiv \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} O(t) e^{-(iq+\varepsilon)t} dt. \quad (2.12)$$

A observação fundamental que transforma o cálculo de médias temporais (idênticas a médias sobre observações quando da emergência da propriedade ergódica) em cálculo de resíduo no plano complexo é:

$$\langle O \rangle = \bar{O} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T O(t) dt = \lim_{z \rightarrow 0} z \int_0^{\infty} e^{-zt} O(t) dt \quad (2.13)$$

Atacando diretamente a distribuição estacionária das posições e velocidades podemos escrever;

$$P_{est}(x, v) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^{\infty} \langle \delta(x - x(t)) \delta(v - v(t)) \rangle dt \quad (2.14)$$

que é equivalente a;

$$P_{est}(x, v) = \lim_{z \rightarrow 0} z \int_0^{\infty} e^{-zt} \langle \delta(x - x(t)) \delta(v - v(t)) \rangle dt \quad (2.15)$$

Retrabalhando essa expressão usando a forma exponencial dos deltas no espaço de Fourier e expandindo-as em séries de potência obtemos;

$$P_{est}(x, v) = \sum_{n,m=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dQ dP}{2\pi 2\pi} e^{i(Qx+Pv)} \frac{(-iQ)^n (-iP)^m}{n! m!} \lim_{z \rightarrow 0} z \int_0^{\infty} e^{-zt} \langle x^n(t) v^m(t) \rangle \quad (2.16)$$

Efetuada a transformada de Laplace ao fim da expressão podemos escrever a solução do sistema, note que a função  $R(q)$  é dependente do modelo que se está tratando, referir a seção anterior para a explicitação de cada caso:

$$\lim_{z \rightarrow 0} e^{-zt} \langle x^n(t) v^m(t) \rangle = \lim_{z \rightarrow 0} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{h=1}^n \frac{dq_h}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{j=1}^m \frac{dp_j}{2\pi} z^{-h} \frac{z}{z - \sum_{h=1}^n (iq_h + \epsilon) + \sum_{j=1}^m (ip_j + \epsilon) i} \times \prod_{h=1}^n \frac{1}{R(iq_h + \epsilon)} \prod_{j=1}^m \frac{1}{R(ip_j + \epsilon)} \prod_{h=1}^n \tilde{\eta}(iq_h + \epsilon) \prod_{j=1}^m \tilde{\eta}(ip_j + \epsilon) \quad (2.17)$$

A partir do Lema de Jordan e por cálculo de resíduo podemos então inferir as distribuições, a informação estatística estará alojada nos pólos que emergem da média aplicada sobre os fatores de ruído. O teorema de Isserlis-Wick afirma, dado  $\eta$  variável aleatória com distribuição normal, temos:

$$\sum_i \eta_i^* \eta_i + \sum_{i,j} \langle \eta_i \eta_j \rangle \quad (2.18)$$

Desta forma, no caso gaussiano podemos reduzir a média do produto dos fatores de ruído à soma dos mesmos. Isto é, no caso gaussiano a equação (2.17) pode ter o último termo simplificado para uma soma de  $n + m$  termos, onde  $n + m$  é a ordem do momento estatístico a ser calculado.

Para obter diretamente os momentos estatísticos associados ao observável  $O$  também pode ser desenvolvida pela abordagem a equação Eq.(2.17)

$$\langle O^n \rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{\mathcal{D}} z^{-\sum_{l=1}^n z} \frac{h(i q_1 + \epsilon) \dots h(i q_n + \epsilon)}{R(i q_1 + \epsilon) \dots R(i q_n + \epsilon)} \times \tilde{\zeta}(i q_1 + \epsilon) \dots \tilde{\zeta}(i q_n + \epsilon) \frac{dq_1}{2\pi} \dots \frac{dq_n}{2\pi} \quad (2.19)$$

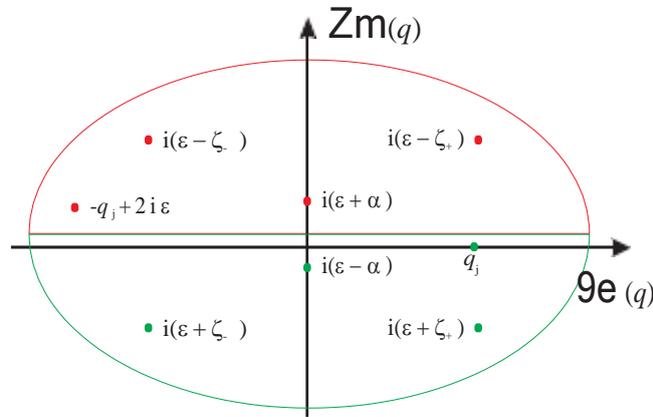


Figura 2.1: Estrutura de pólos Eq.(2.19) no plano complexo. Os pólos no arco inferior só se tornam relevantes em cálculos de grandezas dependentes do tempo como as correlações. [13]

Note-se que a estatística completa do problema se torna acessível nessa abordagem a partir do cálculo dos resíduos associados a estrutura de pólos encontrada quando da aplicação da transformação de fourier sobre a dinâmica do sistema.

Dessa forma todas escalas temporais associadas às memórias de flutuação e dissipação do sistema devem emergir nos pólos encontrados quando do cálculo da estatística associada a dinâmica do sistema.

## 2.5 Aplicando análise termoestatística aos casos de reservatório interno e externo

Note-se que a aplicação do método descrito na seção anterior obtemos a função geradora

$$\rho(x, v) = \frac{1}{Z} \exp(-B v^2 - B_x x^2) \quad (2.20)$$

para o caso externo:

$$B_v = \frac{1}{2} \frac{m + \tau(\gamma + k\tau)}{T} \quad (2.21)$$

$$B_x = \frac{1}{2} \frac{k m + \tau(\gamma + k\tau)}{T(m + \gamma\tau)} \quad (2.22)$$

para o caso interno, fazendo  $\tau \rightarrow 0$

$$B_v = \frac{1}{2} \frac{m}{T} \quad (2.23)$$

$$B_x = \frac{1}{2} \frac{k}{T} \quad (2.24)$$

Ambos estados estacionários apresentam distribuições gaussianas, a mesma forma que emerge de um contexto clássico de Langevin, assim como solução da equação de Fokker-Plank, que para o caso de reservatório interno, fica:

$$B_x = \frac{1}{2} \frac{k}{T} \quad (2.25)$$

Observe que para caracterizarmos os sistemas é também de importância fundamental buscarmos os fluxos de trabalho e calor associados, isto é a estatística do trabalho exercido sobre o sistema pelo reservatório, assim como a estatística do calor dissipado pelo sistema.

O caso de reservatório externo é mais desafiador tanto do ponto de vista analítico quanto da computação numérica e simulação, daí emerge também algo da motivação original do trabalho, que propunha alinhar a possibilidade de transformar a situação mais impeditiva e desafiadora de casos externos em sistemas aproximados com reservatório interno que mantivessem o máximo das propriedades termoestatísticas

associadas ao caso externo [12].

Seria possível superar a dificuldade analítica associada ao cenário de reservatório externo usando um mapeamento que o reduzisse a uma forma de reservatório interno? Note que a questão posta pelo mapeamento não implica necessariamente na equivalência perfeita entre as duas situações, mas no desenvolvimento de um instrumento de aproximação do comportamento do sistema de reservatório externo por um modelo em que o reservatório possui de caráter interno, e na definição explícita do escopo de acurácia<sup>1</sup> desse instrumento.

## 2.6 Mapeamento de caso reservatório externo em caso efetivo de reservatório interno

Assim, introduz-se um mapeamento dos parâmetros termoestatísticos associados à dinâmica do sistema que servem na investigação de como se diferenciam e se aproximam também as situações de reservatório interno e externo:

$$v^2 = \frac{T}{m + \tau(\gamma + k\tau)} = \frac{T^*}{m} \quad (2.26)$$

$$x^2 = \frac{T(m + \tau\gamma)}{k(m + \tau(\gamma + k\tau))} = \frac{T^*}{k} \quad (2.27)$$

$$E = \frac{T(2m + \tau\gamma)}{k(m + \tau(\gamma + k\tau))} = T^* \quad (2.28)$$

Assim obtemos a seguinte série de parâmetros:

---

<sup>1</sup>Em discussões acerca de modelos teóricos a definição do escopo de aplicação de uma dada metodologia, ou de premissas usadas para o modelo são a meu ver quase indistinguíveis do próprio modelo apresentado, na medida em que a existência teórica de um modelo, ou melhor, sua causa eficiente deve ser indistinguível desse espaço em que o modelo tem sua validade comprovada. Em muitos casos na física teórica vemos situações em que esse escopo não é bem definido, nessas situações é essencial que a pesquisa caminhe sobre as fronteiras mais vagas que fecham o território do fenômeno explicado, para vincular todo resultado teórico a um campo de atuação declarado.

$$m^* = m + \frac{\gamma\tau}{2} \quad (2.29)$$

$$k^* = \frac{m^*}{m + \tau\gamma} k \quad (2.30)$$

$$\gamma^* = \gamma \quad (2.31)$$

$$T^* = \frac{m^*}{m + \tau(\gamma + k\tau)} T \quad (2.32)$$

Aqui é relevante ressaltar como o mapeamento explicita o efeito que a introdução da escala temporal de decaimento  $\tau$  tem sobre os parâmetros do sistema. Isto é, o mecanismo analítico do mapeamento permite que comparemos diretamente o caso interno canônico com o caso de reservatório externo quando entendido segundo a álgebra do caso interno. Dessa forma é importante ressaltarmos os seguintes efeitos que se observam sobre os parâmetros termomecânicos:

- $m^* > m$ , o valor da massa aumentaria, isto é, a inércia do sistema se intensifica sob o efeito da escala temporal e da dissipação
- $k^* < k$ , a constante elástica teria seu valor reduzido, isto é, a intensidade com que o sistema recupera sua sua posição média em uma situação de distanciamento do estado estacionário sofre uma redução
- $\gamma^* = \gamma$ , a dissipação do sistema permaneceria inalterada pela introdução da escala temporal
- $T^* < T$  a temperatura do sistema sofreria uma redução quando da introdução da escala de memória, o que corresponde a intuição introduzida pelo efeito observado sobre os parâmetros mecânicos.

Nesse presente esforço teórico já investiga-se um deslocamento do valor de temperatura provocado pela memória, que corresponderia a uma temperatura efetiva, como função da escala temporal típica de memória. Observe-se também como a cor associada ao decaimento representa um alongamento do transiente da partícula uma vez que ela se encontra em estado afastado do estacionário associado á dinâmica do reservatório externo.

Note-se que a expressão para o mapeamento da temperatura terá recorrência mais à frente quando do tópico da temperatura cinética (ver seção 4.2). Antecipando um pouco a discussão que virá a seguir, essa temperatura efetiva pode ser observada na largura da distribuição associada á energia cinética média da partícula. Apesar de introduzi-la simplesmente com a notação  $T^*$ , em concordância com a publicação original, mais tarde essa temperatura pode ser identificada pelo símbolo  $T$ .

## 2.7 Fluxos Energéticos e Análise de Grandes Desvios

Vamos introduzir o cálculo dos fluxos energéticos, conceito importante que vem a ilustrar o tema geral do presente documento que ao trabalhar o conceito de temperaturas efetivas inevitavelmente atravessa a questão das trocas de calor entre sistema e reservatório:

$$\langle E \rangle = \lim_{\Xi \gg \gamma/m} \langle J_{inj}(\Xi) \rangle + \langle J_{dis}(\Xi) \rangle \quad (2.33)$$

$$\langle E \rangle = \lim_{\Xi \gg \gamma/m} \int_0^{\Xi} \langle v(t)\eta(t) \rangle dt - \gamma \int_0^{\Xi} v^2(t) dt \quad (2.34)$$

Note que as médias temporais acima podem ser tratadas conforme a técnica do cálculo de resíduo ilustrada na seção 2.4.

Assim, para o sistema com reservatório externo definido na seção 2.3, obtemos para o cálculo das potências injetada e dissipada :

$$\lim_{\Xi \gg \gamma/m} \langle J_{inj}(\Xi) \rangle = - \frac{T\gamma\tau(m - k\tau^2)}{[m + \tau(\gamma + k\tau)]^2} + \frac{\gamma T}{[m + \tau(\gamma + k\tau)]} \Xi \quad (2.35)$$

$$\lim_{\Xi \gg \gamma/m} \langle J_{dis}(\Xi) \rangle = - \frac{T[m(2m + 5\gamma\tau + 2km\tau^2) + \tau^2(\gamma^2 - k\gamma\tau)]}{2[m + \tau(\gamma + k\tau)]^2} + \frac{\gamma T}{[m + \tau(\gamma + k\tau)]} \Xi \quad (2.36)$$

Para o sistema equivalente de reservatório interno, definido pela equação na seção 2.2, porém onde se fazem as substituições associadas ao mapeamento definido na presente seção, o que implica em definir um ruído branco temos os seguintes

resultado:

$$\lim_{\Xi \gg \gamma/m} \langle J_{inj}(\Xi) \rangle = \frac{\gamma T^*}{m^*} \Xi \quad (2.37)$$

$$\lim_{\Xi \gg \gamma/m} \langle J_{dis}(\Xi) \rangle = \frac{\gamma T^*}{m^*} \Xi - T^* \quad (2.38)$$

O que implica na seguinte expressão para a energia total:

$$\lim_{\Xi \gg \gamma/m} \langle E \rangle = \frac{\gamma T^* \Xi}{m^*} + T^* - \frac{\gamma T^*}{m^*} \quad (2.39)$$

Seja o limite assintótico de injeção ou dissipação totais de energia após um tempo  $\Xi$ , temos:

$$\mathbf{J} = \Xi \lim_{\Xi \rightarrow \infty} \frac{1}{\Xi} \mathbf{J}(\Xi) \quad (2.40)$$

Aplicando as substituições associadas ao mapeamento Eq.(2.6) na expressão acima, obtemos novamente a expressão associada à media dos fluxos energéticos para o reservatório externo. Podemos escrever, após as substituições serem feitas:

$$\langle \mathbf{J} \rangle = \langle \mathbf{J} \rangle^* \quad (2.41)$$

Esse resultado contraria a intuição que o teorema de Kubo promove, uma vez que permite montar-se um modelo com reservatório de classe interna que aproxima perfeitamente em primeira ordem a estatística dos fluxos energéticos de um sistema com reservatório de classe externa.

Se efetuamos o cálculo para segunda ordem nos cumulantes dos fluxos energéticos, não é possível estabelecer o mesmo resultado de equiparação a partir do uso do mapeamento Eq. (2.6), em particular, obtemos :

$$\mathbf{J}^2_c(\Xi)^* = 2 \frac{\gamma T^{*2}}{m^*} \Xi = \frac{\gamma T^2 (2m + \gamma \tau)}{(m + \tau(\gamma + k\tau))^2} \Xi \quad (2.42)$$

Enquanto para o sistema original de classe externa, o resultado para os segundos cumulantes tem a seguinte expressão:

$$\mathbf{J}^2_c(\Xi) = \frac{\gamma T^2 (2m + \gamma \tau)}{(m + \tau(\gamma + k\tau))^2} \Xi + \frac{\gamma^2 T^2 (3m + \tau(\gamma - k\tau))}{(m + \tau(\gamma + k\tau))^3} \tau \Xi \quad (2.43)$$

Note-se que as expressões são ligeiramente distintas e indicam o limite em que o mapeamento é capaz de aproximar um sistema com o reservatório externo por um com reservatório interno onde o mapeamento foi efetuado.

Dado que em primeira ordem o mapeamento oferecido pela eq.(2.6) aproxima a estatística dos fluxos, podemos usar temperatura efetiva obtida para escrever, no caso da partícula de Langevin sob a influência do reservatório colorido (o sistema usado aqui como referência do reservatório de classe externa), o valor das médias de fluxos energéticos injetado e dissipado pelo sistema, nomeadamente:

$$\langle J_{inj}(\Xi) \rangle \propto | \langle J_{dis}(\xi) \rangle | = \frac{\gamma T^*}{m} \Xi \quad (2.44)$$

A expressão acima é idêntica à obtida para um reservatório de Lévy-Itô, o resultado canônico. Desta forma a ideia do mapeamento introduziu a possibilidade de uma forma efetiva de temperatura que na situação estacionária replica a forma funcional esperada em situação de equilíbrio térmico. É importante também aqui destacar que a temperatura efetiva  $T^*$  vem a tomar a forma de  $T$  mais adiante no texto dessa tese, esta variação de notação remonta ao próprio histórico original das publicações associadas a esse trabalho.

Uma equiparação aproximada pode ser aferida quando do cálculo da taxa de grandes desvios, que dá conta da probabilidade associada a ocorrência de um dado macroestado, no caso presente do fluxo energético. Note novamente aqui que a caracterização energética do problema é ubíqua nesse trabalho, dado que o aprofundamento de entendimento das relações entre energia, entropia e temperatura consiste na verdadeira termoestatística que se procura desenvolver, conectando a estatística dos modelos usados com o macroestado observável e usável<sup>2</sup> do problema.

Se escrevemos a função de grandes desvios para esses fluxos energéticos, obtemos a seguinte forma, também idêntica ao resultado esperado em situação de ruído delta-correlacionado e equilíbrio térmico:

$$L((J)) \propto \exp - \frac{\# \left( \mathbf{J} - \frac{\nu T}{m} \right)^2}{4T \mathbf{J}} \quad (2.45)$$

---

<sup>2</sup>Por mais teórica que se faça a presente discussão, a conexão dos modelos estudados com problemas práticos da Biologia, da Economia e do estudo de séries temporais em um sentido lato é o fio condutor que procura orientar o raciocínio aqui desenvolvido, por isso a problema da eficiência energético ou mesmo o uso do sentido de Energia como em teoria de processamento de sinais em teoria da informação é o enfoque que se procura dar.

Se incluimos a normalização:

$$L(J) = \frac{1}{Z_L} \exp \left[ - \frac{\beta}{4T} \left( J - \frac{\nu T}{m} \right)^2 \right] \quad (2.46)$$

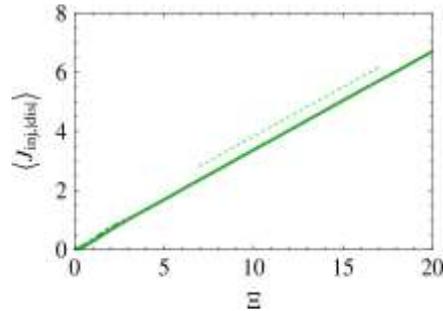


Figura 2.2: Evolução temporal de potência injetada  $J_{inj}$  e do módulo da potência dissipada  $|\psi_{dis}|$  note que o sistema em estado estacionário estabiliza a diferença entre as potências injetada e dissipada que constitui a energia média do sistema, a despeito disso, ambos os fluxos seguem a troca de calor e energia associados do lado da injeção com o reservatório e da dissipação com a o termo  $\gamma\nu$  da equação de Langevin generalizada. [13]

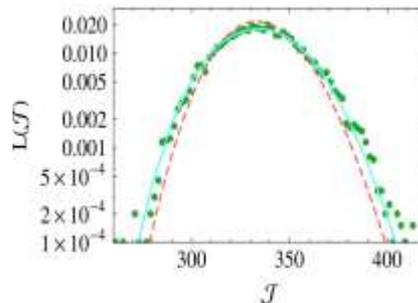


Figura 2.3: Distribuição numérica para a média das potências injetada e dissipada, note-se que nesse caso temos a energia média do sistema  $\langle E \rangle = 1/2$ , por isso a potência dissipada é plotada subtraída do valor da energia total, para alinhar as médias dos fluxos de entrada e saída energética sistema. Novamente a simulação aqui foi feita com todos parâmetros mecânicos  $\{m, \gamma, k\}$  iguais a um. [13]

Observe que podemos quantificar a evolução de um sistema é fornecida pela entropia,  $S$ . A mudança total da entropia de um sistema em não-equilíbrio é dada pela

superposição da produção de entropia,  $\Pi$ , e da troca de entropia com o reservatório de calor que o circunscreve,  $\Psi$ ,

$$\frac{dS}{dt} = \Pi - \Psi \quad (2.47)$$

De maneira que quando o sistema atinge o estado estacionário temos,

$$\Pi(\Xi) - \Psi(\Xi) = 0 \quad \left(\Xi = \frac{m}{\gamma}\right) \quad (2.48)$$

Como discutido na introdução, é possível associar entropia ao calor. Assim, também podemos relacionar a mudança de entropia com a estatística dos fluxos de energia que calculamos acima. Especificamente, relacionamos  $\Pi$  com o trabalho (transferência de energia) realizado pelo reservatório sobre a partícula, e  $\Psi$  com o calor dissipado pelo atrito do sistema. A relação explícita é dada pela correspondência de cada termo de mudança de entropia  $\Pi(\Psi)$  com a respectiva potência injetada (dissipada), dividida pela temperatura.

$$j(t) \equiv \frac{dJ(t)}{dt} \quad (2.49)$$

$$j_{inj}(t) = T \Pi \quad (2.50)$$

$$j_{dis}(t) = T \Psi \quad (2.51)$$

Ao assumir nossa hipótese de mapeamento e a temperatura como a temperatura efetiva  $T^*$  que obtivemos, podemos facilmente verificar

$$\Pi = \Psi = \frac{\gamma}{m^*} \quad (2.52)$$

Esta é exatamente a mesma forma obtida para reservatórios térmicos, de classe interna. Assim, também no aspecto entrópico em primeira ordem obtemos a equivalência dos casos de reservatório interno e externo pelo uso dos parâmetros efetivos, em particular a temperatura efetiva  $T^*$  obtida pelo mapeamento.

# Capítulo 3

## Partícula sob Ruído Bimodal

### 3.1 Sistema sob ruído Bimodal

Dentre os modelos mais elementares para o caso de reservatórios atérmicos, aqui temos como referência o reservatório bimodal, isto é, que assume apenas dois valores distintos oscilando entre eles segundo taxas de transição constantes como se verá mais a frente.

A ideia de resumir nesse contexto resultados que caracterizem uma abordagem genérica sobre reservatórios atérmicos está baseada na simplicidade do modelo dicotômico. Ao englobar um conjunto de valores binário, o reservatório dicotômico se aproxima do reservatório mais simples possível que não satisfaz a gaussianidade esperada do modelo térmico tradicional, do ponto de vista da Teoria da Informação.

Recordemos que no trabalho original de Shannon o logaritmo na fórmula da entropia usava base 2, tendo no sinal binário a medida mínima para se codificar qualquer mensagem, e por conseguinte, qualquer informação. Segue-se aqui a mesma intuição que orienta esse trabalho seminal: um sistema com apenas dois estados consiste no menor espaço possível em que, por alternância, é possível representar um sinal.

Além disso o reservatório binário, por sua simplicidade, tem ampla aplicabilidade em temas muito diversos tais como engenharia, biologia e economia, em seguida vão alguns exemplos:

- Na engenharia distribuições bimodais estão associadas aos estados elétricos

ligado e desligado. Assim, quando analisamos histogramas de séries temporais para sensores de máquinas industriais<sup>1</sup> encontramos invariavelmente dois picos, um centrado em uma região da variável sensoreada correspondente à máquina desligada e outra correspondente a um estado típico da máquina ligada.

- Da mesma forma, no contexto de células fotovoltaicas, distribuições parecidas são observadas mapeando a incidência luminosa e a correspondente a capacidade de produção energética da célula, o que naturalmente é uma replicação do processo de produção energética que encontramos no contexto da biologia ao redor da fotossíntese.
- No contexto financeiro, esse tipo de ruído pode desempenhar o efeito de uma compra ou de uma venda de um dado ativo sobre o portfólio de um dado investidor, igualmente capturando a forma binária ou bimodal, característica desse aspecto da finança quantitativa.

Assim, o reservatório dicotômico foi escolhido pela grande generalidade que tem para representar fenômenos de diversas naturezas, além dos citados acima podemos ainda referenciar trabalhos ao redor de temas tais como: transporte bidirecional intracelular em filamentos citoesqueléticos mediado pela proteína Kinesina-1 e a Dineína citoplasmática - que puxam a carga transportada em direções opostas, semelhante a um cabo de guerra estocástico ou a cinética de marcadores proteicos em meios capilares, por exemplo, a dinâmica de íons de cálcio no plasma sanguíneo [14], bem como catracas nanométricas [16]. Além disso, o ruído telegráfico se encaixa na descrição das propriedades de transporte em materiais amorfos [17], cromatografia [18], efeitos quânticos [19,20].

Todos esses exemplos são fundamentados na existência de dois estados distintos que acumulam a atividade típica do reservatório. Entre outros reservatórios atômicos fundamentais podemos mencionar o reservatório de poisson, que igualmente assume valores distribuídos de forma discreta, porém configurando uma situação de reservatório interno, por contraste ao caso dicotômico.

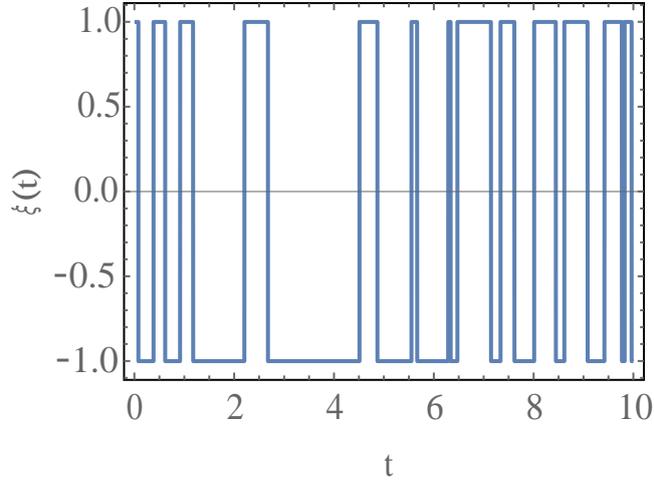


Figura 3.1: Perfil do Ruído Bimoda  $\xi(t)$ , simulação realizada com  $\mu_a = \mu_b = 2s^{-1}$  e  $a = b = 2$ .

### 3.1.1 Ruído Bimodal

Define-se o reservatório bimodal a partir da seguinte equação mestra, vinculada pelos parâmetros de amplitude ( $a$  e  $b$ ) e de taxa de transição ( $\mu_a$ ,  $\mu_b$ ) entre os dois estados assumidos pelo fator estocástico:

$$f(\zeta) = p \delta(\zeta + a) + \bar{p} \delta(\zeta - b) \quad (3.1)$$

onde;

$$p = \frac{\mu_a}{\mu_a + \mu_b} \quad ; \quad \bar{p} = \frac{\mu_b}{\mu_a + \mu_b} \quad (3.2)$$

que se reduz no caso simétrico ( $\mu_a = \mu_b$  e  $b = -a$ ) a:

$$f(\zeta) = \frac{1}{2} \delta(\zeta + a) + \frac{1}{2} \delta(\zeta - a) \quad (3.3)$$

Note-se que no trabalho original, incluído na tese de mestrado defendida por mim,

<sup>1</sup>sejam acelerômetros, sensores de torque e rotação de motores, sejam sensores elétricos para corrente, voltagem etc.

trabalhamos o caso assimétrico, isto é, onde duas taxas de transição distintas estão associadas aos dois estados do reservatório, obtendo um resultado de mais generalidade. No texto dessa tese focaremos no caso simétrico pela maior simplicidade analítica dos resultados, que no entanto não compromete a heterogeneidade térmica, ou a "atermicidade" do caso trabalhado, co contexto fundamental para ensejar o uso de uma medida efetiva de temperatura fora da situação de equilíbrio térmico.

Dada a seguinte equação mestra;

$$\begin{aligned} \square \quad \frac{\partial f(a,t|\xi_0,t_0)}{\partial t} &= \mu_a f(b,t|\xi_0,t_0) - \mu_b f(a,t|\xi_0,t_0) \\ \square \quad \frac{\partial f(b,t|\xi_0,t_0)}{\partial t} &= \mu_b f(a,t|\xi_0,t_0) - \mu_a f(b,t|\xi_0,t_0) \end{aligned}$$

Podemos derivar o seguinte resultado;

$$\langle \zeta(t_1)\zeta(t_2) \rangle = \alpha^2 e^{-\alpha|t_1-t_2|} \quad (3.4)$$

Onde  $\alpha = \mu_a + \mu_b$  .

Em outras palavras, como se verá com maior clareza mais a frente, o interesse da presente análise é satisfeito pela situação simétrica na medida em que o parâmetro fundamental que mediará o distanciamento da situação de Langevin tradicional (onde o estado estacionário se aproxima do equilíbrio térmico) consiste na soma das taxas de transição  $\mu_a + \mu_b = \alpha$ , que é o inverso do tempo característico de decaimento ( $1/\tau$ , usando a notação introduzida no capítulo anterior).

Assim a partir do caso simétrico podemos produzir um quadro de distanciamento do equilíbrio térmico controlando o parâmetro  $\alpha$  associado a chamada cor do ruído, ou sua persistência temporal.

### 3.1.2 Modelos Dinâmicos para uma Partícula sob Reservatório Bimodal

#### I - Partícula Massiva em Reservatório Bimodal

Seguindo o modelo da partícula Langevin, estamos interessados em um modelo que inclua no seu conjunto dinâmico uma força restitutiva, uma dissipativa (caracterizadas respectivamente pelas constante  $k$ ,  $\gamma$ ) e o termo da flutuação bimodal ( $\zeta$ )

$$m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = -\gamma \frac{dx(t)}{dt} - k x(t) + \zeta_t. \quad (3.5)$$

Para esta equação encontra-se a seguinte solução no espaço de Laplace:

$$\tilde{x}(q) = \frac{\tilde{\zeta}(q)}{\kappa \pm \frac{-\vartheta}{2} \pm \frac{\gamma \sqrt{\kappa_+}(q - \kappa_-)}{4\omega^2 - \vartheta^2}} \quad (3.6)$$

$$\kappa = \frac{-\vartheta}{2} \pm \frac{\gamma \sqrt{\kappa_+}(q - \kappa_-)}{4\omega^2 - \vartheta^2} \quad (3.7)$$

$$\vartheta = \frac{\gamma}{m} \quad (3.8)$$

$$\omega^2 = \frac{k}{m} \quad (3.9)$$

Note-se que os pólos  $\kappa_+$  e  $\kappa_-$  contribuirão no cálculo estatístico feito pela abordagem de Fourier-Laplace apresentado no capítulo anterior como a influência dos parâmetros mecanismos da equação sob o comportamento da partícula.

Já as médias efetuadas sobre o numerador  $\tilde{\zeta}(q)$  contribuirão com pólos em  $\alpha$  associados à escala temporal da flutuação no sistema, esse mesmo padrão será observado para todas as variedades de modelo Langevin Generalizado discutidas neste trabalho.

#### II - Sistema Superdissipado em Reservatório Bimodal

Também discutimos ao longo desse trabalho resultados equivalentes obtidos para o limite superdissipado do modelo acima que pode ser escrito da seguinte forma:

$$\gamma \frac{dx(t)}{dt} = -k x(t) + \zeta_t. \quad (3.10)$$

Esse caso especial do modelo I por sua vez apresenta a seguinte solução no espaço de Laplace;

$$\tilde{x}(q) = \frac{\tilde{\zeta}(q)}{\gamma(q - \kappa)} \quad (3.11)$$

$$\kappa = \frac{-k}{\gamma} \quad (3.12)$$

### III - Partícula Massiva em Reservatório Bimodal Interno

Mais à frente nesse trabalho, avaliamos alguns resultados termostáticos produzidos para uma variação de nosso modelo com a partícula massiva em que inserimos um kernel de dissipação dotado do mesmo tempo de persistência  $\alpha^{-1}$  que o reservatório:

$$m \frac{d^2x(t)}{dt^2} = -\gamma \int_0^t dt' K(t-t') \frac{dx(t')}{dt'} - k x(t) + \zeta_t. \quad (3.13)$$

Onde o kernel insere memória na dissipação com a mesma cor (persistência temporal) associada ao reservatório:

$$K(t) = \frac{1}{\alpha} e^{-\alpha t} \quad (3.14)$$

$$\tilde{x}(q) = - \frac{\alpha \tilde{\zeta}(q)(\alpha + q)}{\alpha^2 \gamma q + \alpha^2 k + \alpha k q + \alpha m q^3 + \alpha^2 m q^2} \quad (3.15)$$

Esse sistema se diferencia em seu tratamento termoestatístico por apresentar três polos associados à seus parâmetros mecânicos e as características do ruído, note-se que o polinômio no denominador é do terceiro grau, assim, é possível expressar a solução acima nos seguintes termos;

$$\tilde{x}(q) = - \frac{\tilde{\zeta}(q)(\alpha + q)}{m(q - \kappa)(q - \kappa)(q - \kappa)} \quad (3.16)$$

### 3.1.3 Cálculo analítico de correlação para o caso do sistema massivo sob a influência do ruído bimodal

Obtemos a expressão exata para as correlações  $C_x(s)$  e  $C_v(s)$  com o mesmo método descrito acima. Dada a equação Eq.(3.4)

$$\langle \zeta(t_1)\zeta(t_2) \rangle = \alpha^2 e^{-\alpha|t_1-t_2|} \quad (3.17)$$

Podemos obter o seguinte resultado, no espaço de Laplace Fourier, efetuando transformações sobre a auto-correlação da posição:

$$\begin{aligned} \langle x(t)x(t+s) \rangle &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \iint dt_1 dt_2 \delta(t-t_1)\delta(t+s-t_2) \langle x(t_1)x(t_2) \rangle \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \iiint dq_1 dq_2 dt_1 dt_2 e^{iq_1(t-t_1)} e^{iq_2(t+s-t_2)} \langle x(t_1)x(t_2) \rangle \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \iint dq_1 dq_2 e^{iq_1 t} e^{iq_2(t+s)} \iint dt_1 dt_2 e^{-iq_1 t_1} e^{-iq_2 t_2} \langle x(t_1)x(t_2) \rangle \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \iint dq_1 dq_2 e^{iq_1 t} e^{iq_2(t+s)} \langle \tilde{x}(iq_1)\tilde{x}(iq_2) \rangle \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \iint dq_1 dq_2 e^{iq_1 t} e^{iq_2(t+s)} \frac{1}{R(iq_1)R(iq_2)} \langle \tilde{\xi}(iq_1)\tilde{\xi}(iq_2) \rangle \end{aligned} \quad (3.18)$$

Substituindo o resultado anterior na equação acima efetuando a integração obtemos;

$$C_x(s) = \frac{a^2}{2m\gamma k\Omega} \frac{1}{(k + \alpha^2 m)^2 - \alpha^2 \gamma^2} \left\{ 2mk\gamma\Omega e^{-\alpha s} + \alpha e^{-\frac{\gamma s}{2m}} \left[ \gamma(-\gamma^2 + 3km + \alpha^2 m^2) \sin(\Omega s) + 2m\Omega(mk + \alpha^2 m - \gamma^2) \cos(\Omega s) \right] \right\} \quad (3.19)$$

Onde introduzimos a expressão da frequência característica para as oscilações associada aos parâmetros mecânicos do sistema:  $\Omega \equiv \frac{\sqrt{\gamma^2 - 4km}}{2m}$ .

O mesmo pode ser feito para outras quantidades semelhantes como  $\langle v(t)x(t+s) \rangle$  e  $\langle v(t)v(t+s) \rangle$

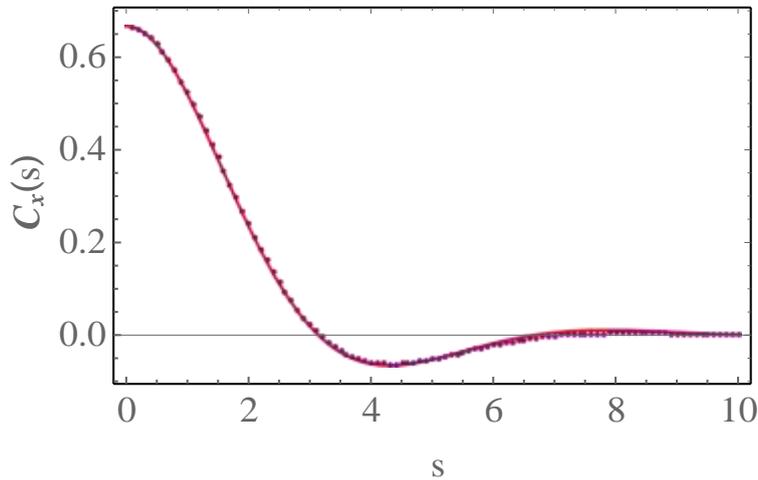


Figura 3.2: Correlação da posição  $\langle v(t)v(t+s) \rangle$  versus o intervalo  $s$ . Os pontos são obtidos por uma implementação numérica da Eq. (2.10) e a linha corresponde á Eq. (3.19). Todos os parâmetros mecânicos nesse caso são iguais a 1 1

### 3.1.4 Resultados termoestatísticos para tempo longo e considerações energéticas

Como resultado imediato de primeira ordem obtemos para os momentos estatísticos de primeira ordem:

$$\langle v \rangle = 0 ; \langle x \rangle = 0 \quad (3.20)$$

Essa estatística em primeira ordem correspondem a intuição que temos do estado estacionário. Note-se ainda que em um cenário de ruído simétrico, postulado nas seções anteriores, todos os momentos de ordem ímpar terão seus valores zerados. Já que todas as forças e condições iniciais são simétricas em relação ao zero do sistema unidimensional, necessariamente as distribuições resultantes da convergência do sistema para o estado estacionário devem também exibir formas simétricas, isto é, que não possuem qualquer componente de *skewness*.

Pode-se obter essa estatística diretamente na integração no plano complexo como exemplificada em detalhes para o cálculo da correlação na seção acima;

$$v^{2n+1} = 0 ; \quad x^{2n+1} = 0 \quad n \in \{0, 1, 2, 3, \dots\} \quad (3.21)$$

Observe como casos particulares do resultado obtido para correlações os resultados dos cálculos dos segundos momentos estatísticos, obtidos no limite  $s \rightarrow 0$ .

$$v^2 = \frac{a^2 \alpha^2}{\gamma(k + \alpha(\gamma + m\alpha))} ; \quad x^2 = \frac{a^2(m\alpha + \gamma)}{k\gamma(k + \alpha(\gamma + m\alpha))} \quad (3.22)$$

Observe que o segundo cumulante da velocidade é diretamente proporcional a temperatura no caso canônico da equação de Langevin, em que temos:

$$T = 2 \langle K \rangle = m \quad v^2 \quad (3.23)$$

Por equivalência, no caso de não equilíbrio esse valor vem a ser o responsável por caracterizar a temperatura cinética  $T_k$ , em ressonância com o resultado exibido ao fim do capítulo anterior, em que o mapeamento de reservatório externo por um sistema de reservatório interno recupera em primeira ordem a forma funcional do resultado estatístico para os fluxos energéticos, assim como para a função taxa de grandes desvios, ver seção 2.7.

Assim obtemos para a temperatura cinética (o conceito será aprofundado no capítulo a seguir dedicada as definições alternativas de temperatura efetiva que exploramos) associada à partícula Langevin generalizada sob a influência do ruído bimodal.

$$T_k = \frac{a^2 \alpha^2 m}{\gamma(k + \alpha(\gamma + m\alpha))} \quad (3.24)$$

É importante apontar também que obtendo os segundos cumulantes podemos produzir uma aproximação gaussiana das distribuições estacionárias a partir de aproximações de Edgeworth ou aparentadas, naturalmente, a precisão dessas aproximações está limitada pela gaussianidade do reservatório ver seção 4.2.2.

Entretanto, note-se que o reservatório bimodal induz no sistema uma série infinita de cumulantes. Lembrando o teorema de Pawula, sabemos que apenas no caso gaussiano podemos escrever a expansão da estatística do problema limitada aos dois primeiros coeficientes de Kramers-Moyal (ver capítulo 5 a definição explícita da expansão de Kramers-Moyal e discussões ao redor da aplicabilidade desse tipo de abordagem a sistemas com reservatórios não gaussianos). Assim, em um sentido fundamental o reservatório não é perfeitamente caracterizado por essa expansão, apenas de forma aproximada, com mais ou menos sucesso conforme a distância que o reservatório está do seu limite gaussiano.

Tendo efetuado cálculos de momentos até quarta ordem para o caso bimodal, entendo ser possível o cálculo da série infinita dos cumulantes da posição e velocidade das partículas mediante uma indução de alta complexidade sobre o cálculo de resíduo efetuado.

Perceba: a estrutura de pólos estando definida, temos como necessária a implicação de que os cálculos a resultarem na estatística completa dos graus de liberdade do problema também estão perfeitamente definidos. Uma vez conhecida a estrutura de pólos, o cálculo de resíduo e as integrações no plano complexo, apesar de difícil operação, podem ser automatizados. Lançado esse tipo de automatização sobre a metodologia descrita na seção 2.4 é factível a descrição completa da estatística do problema.

Contudo, esse não é sequer o foco da presente análise, e tampouco a essência do resultado que se pretende desenvolver ao redor da ideia de temperaturas efetivas em sistemas de não-equilíbrio, o fulcro geral do trabalho aqui desenvolvido. A obtenção da série total dos cumulantes pode clarificar a definição de aspectos de configurações assumidas pelo sistema mas ainda não esclarece o afastamento ou aproximação ao equilíbrio térmico em determinadas condições da equação de Langevin Generalizada sob a influência do ruído dicotômico.

## Limite Gaussiano

Um dos resultados mais importantes obtido durante o estudo do reservatório de calor bimodal foi a conexão da equação de Langevin Generalizada sob reservatório de calor dicotômico com o limite em que esse reservatório assume feição gaussiana e a dinâmica resultante se aproxima do comportamento de Langevin caônico.

Assim como no caso do ruído gaussiano colorido, a redução do tempo característico  $\tau$  a zero obtém de volta a mesma estrutura estatística e as características energéticas da equação canônica de Langevin, um sistema que no seu estado estacionário reproduz as distribuições de Boltzmann para os graus de liberdade da partícula e representa uma situação de equilíbrio térmico.

Note que apenas observando a definição do ruído dicotômico podemos produzir a intuição que lança as bases para o definição do limite gaussiano, se aceleramos a alternância entre os dois estados típicos do reservatório bimodal de forma arbitrária, vamos nos aproximando de uma situação em que a partícula sofre empurrões indistintamente de um lado ou de outro (estado  $\alpha$  ou  $-\alpha$ ), simulando uma situação de um ruído aleatoriamente distribuído ao redor da média, sem persistência temporal significativa entre seus dois estados. Esta variação veloz entre os dois estados do reservatório reproduz uma distribuição resultante do Teorema Central do Limite [21], isto é, uma situação consistente em com o caso do reservatório de calor do tipo ruído branco gaussiano.

A observação do Limite Gaussiano está dependente da manutenção da espessura das distribuições associadas aos graus de liberdade da partícula, tendo em vista o resultado associado a temperatura efetiva derivada no caso do ruído gaussiano colorido, tomamos aqui como parâmetro a espessura da distribuição da velocidade no estado estacionário, tendo já como referência também o critério que associa a energia cinética média da partícula o papel de temperatura.

Assim a partir da definição da temperatura cinética  $T_k$ , mantendo-a constante podemos efetuar o limite  $\alpha \rightarrow \infty$  sem que haja uma descaracterização da energia cinética média associada a partícula no estado estacionário.

Note-se que manter  $T_k$  corresponde a corrigir os valores da amplitude do ruído  $\Delta = 2\alpha$  a cada mudança em  $\alpha$  seguindo a expressão para  $T_k$ , isto é, para um novo  $\alpha'$  é preciso calcular um novo a partir da fórmula abaixo:

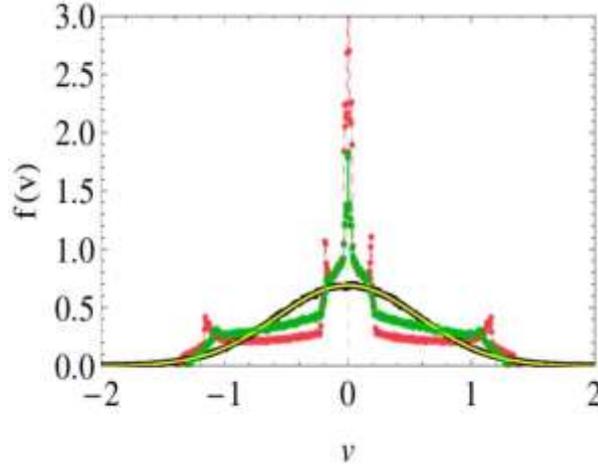


Figura 3.3: Histograma da velocidade da partícula sob influência do reservatório bimodal, note-se a evolução entre os casos plotados, nomeadamente com todos parâmetros mecânicos  $\{m, \gamma, \beta\}$  iguais a um, temperatura cinética  $T_k$  mantida constante. [12]

$$T_k = \frac{a^2 \alpha^2 m}{\gamma(k + \alpha(\gamma + m\alpha))} \rightarrow a = \frac{\gamma^{1/2}(k + \alpha(\gamma + m\alpha))^{1/2}}{\alpha m^{1/2}} T_k \quad (3.25)$$

Assim, mantendo-se a temperatura constante é possível obtermos de volta a distribuição estacionária com forma gaussiana como mostra a figura 3.3.

Essa abordagem para a conexão entre os casos de reservatório de calor gaussiano branco e reservatório de calor não markoviano bimodal permite o entendimento de comportamento do sistema quando da aproximação ao estado de equilíbrio térmico por via da relaxação do tempo característico de autocorrelação do reservatório  $\tau = \frac{1}{\alpha}$ .

Perceba, efetuando o limite simples  $\alpha \rightarrow 0$  nos leva à seguinte expressão:

$$\lim_{\alpha \rightarrow \infty} T_k = \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \frac{a^2 \alpha^2 m}{\gamma(k + \alpha(\gamma + m\alpha))} = \frac{a^2}{\gamma} \quad (3.26)$$

Assim o quadrado amplitude do ruído no limite  $\alpha \rightarrow \infty$  deve corresponder à temperatura, refletindo o resultado esperado no caso gaussiano branco.

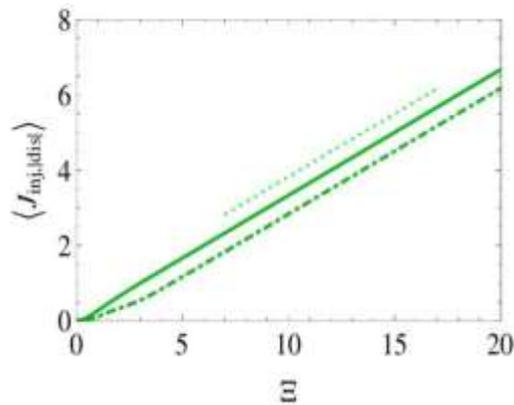


Figura 3.4: Evolução temporal de potência injetada  $J_{inj}$  e do módulo da potência dissipada  $|J_{dis}|$  note que o sistema em estado estacionário estabiliza a diferença entre as potências injetada e dissipada que constitui a energia média do sistema, a despeito disso, ambos os fluxos seguem a troca de calor e energia associados do lado da injeção com o reservatório e da dissipação com a o termo  $\gamma v$  da equação de Langevin generalizada. [12]

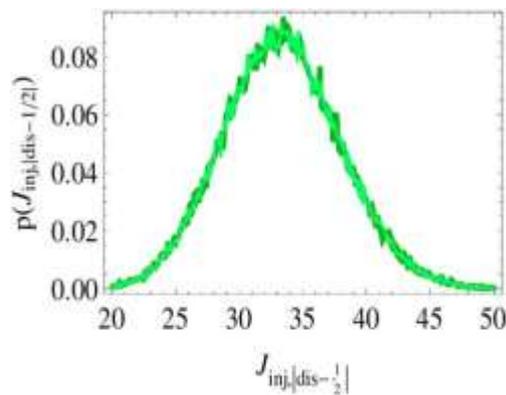


Figura 3.5: Distribuição numérica para a função de grandes desvios associada às potências injetada e dissipada, note-se que nesse caso temos a energia média do sistema  $\langle E \rangle = 1/2$ , por isso a potência dissipada é plotada subtraída do valor da energia total, para alinhar as médias dos fluxos de entrada e saída energética sistema. Novamente a simulação aqui foi feita com todos parâmetros mecânicos  $\{m, \gamma, k\}$  iguais a um. [12]

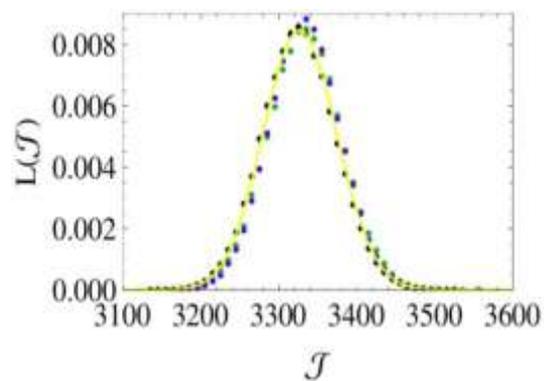


Figura 3.6: Função taxa para grandes desvios dos fluxos energético associados ao reservatório bimodal. Aqui observamos o caso dissipado, para valores distintos do parâmetro  $\alpha$ ,  $\alpha = 1/2$  e todos parâmetros mecânicos  $\{\eta, \nu, k\}$  iguais a 1. Nos pontos verdes temos  $\alpha = 1$ , nos azuis  $\alpha = 10$  e nos pontos pretos  $\alpha = 100$ , já a linha amarela representa o caso de ruído gaussiano branco dado pela equação eq. (2.46) [12]

## Capítulo 4

# Temperaturas efetivas para a partícula bimodal

### 4.1 Temperatura Cinética e Temperatura Posicional $T_{k,x}$

Como referido de passagem no capítulo 3 e na introdução, o conceito de energia cinética média da partícula corresponde à noção intuitiva (ancorada na teoria cinética dos gases e em física estatística básica) que se tem de temperatura como uma aproximação do estado de agitação microscópica das partículas que constituem o sistema observado. Já no caso superdissipado, como se verá mais adiante o papel tomado pela temperatura cinética vem a ser desempenhado pela temperatura posicional, fundamentalmente mapeando a magnitude das flutuações associadas a estatística estacionário dos graus de liberdade do modelo estudado.

É importante mencionar que o conceito da temperatura cinética (ou de Marconi, como referida em [13]) não só foi o primeiro a surgir na pesquisa do ponto de vista cronológico, mas também lançou o referencial sobre o qual a comparação com outras formas de temperatura efetiva é feita mais à frente, como se verá ao fim deste capítulo. Note-se que a escolha da temperatura cinética como fundamento para a comparação foi efetuada por tratar-se da mais simples do ponto de vista conceitual, respondendo também à relação central que o conceito de temperatura tem com a energia média das partículas, cuja expressão mais completa é o teorema do Virial [4].

Além disso, como observado no capítulo 3, a própria definição do pervasivo limite gaussiano, ou limite de ruído branco está assentada na manutenção da magnitude das flutuações da velocidade no estado estacionário.

Do ponto de vista algébrico, consideramos que para se observar de forma isolada o comportamento das definições de temperatura efetiva alternativas à temperatura de cinética, é preciso que as definições de temperatura alternativas sejam desenvolvidas em um quadro de manutenção do valor da temperatura cinética constante, desta forma, o valor de uma temperatura efetiva destaca o comportamento daquele determinado aspecto (seja resposta ou configuração) mantida a referência da energia cinética média. Esta abordagem investiga a sensibilidade dos aspectos distintos de resposta e configuração no comportamento estacionário sob a variação de parâmetros distintos do reservatório, em especial do parâmetro  $\alpha$  que aproxima ou distancia o reservatório da situação gaussiana.

Por outro lado, como será elaborado mais extensamente a seguir, mesmo que algebricamente a temperatura cinética lance o fundamento deste estudo, é importante ressaltar que não há uma hierarquia conceitual entre as abordagens de temperatura efetiva em não equilíbrio que supere a situação específica que se procura investigar. Dependendo do interesse da análise a ser feita sobre o dado sistema estacionário em não equilíbrio, as outras abordagens (nomeadamente, de configuração e resposta) podem ser mais completas no sentido de caracterizar a "temperatura efetiva", ou, sendo talvez mais rigoroso, uma métrica para a distância que o sistema se encontra de uma situação de equilíbrio térmico.

#### 4.1.1 Caso Massivo, temperatura ou Cinética $T_k$

O estudo dos cumulantes associado à posição e à velocidade permitiu a definição da Temperatura cinética, também chamada Temperatura de Marconi, ligada ao segundo cumulante da velocidade  $\langle v^2 \rangle$ , para  $\alpha = \mu_a + \mu_b$

$$v^2 = \frac{2\mu_a\mu_b(a-b)^2}{\alpha(\gamma(k + \alpha(\gamma + \alpha m)))} \quad (4.1)$$

Seja um caso simétrico em que os valores assumidos pelo ruído são equidistantes da origem ( $b = -a$ ) e com iguais taxas de transição ( $\mu_a = \mu_b = \alpha/2$ ), obtemos

$$T_k \equiv m \ v^2 = \frac{a^2 \alpha m}{\gamma(k + \alpha(\gamma + \alpha m))} \quad (4.2)$$

Dos trabalhos previamente desenvolvidos reconhecemos a existência de limites gaussianos para as distribuições estacionárias da partícula bimodal nas linhas isothermas do plano  $\{\alpha, a\}$ , assim sabemos que mantendo-se a Temperatura de Marconi constante e aumentando-se a taxa de transição alpha podemos recuperar a gaussianidade das distribuições e com ela a convergência das temperaturas efetivas para o único limite térmico.

Uma evidência substancial para o uso da temperatura cinética ou de Marconi como efetiva fica amparada pelo resultado da estatística dos fluxos energéticos, isto é, das potências injetadas e dissipadas no sistema. Temos que;

$$\langle J_{dis}(\Xi) \rangle \equiv \lim_{\Xi \rightarrow \infty} \frac{1}{\Xi} \int_0^{\Xi} [-\gamma v(t)] v(t) dt, \quad (4.3)$$

E o fluxo de trabalho que injeta energia ao sistema;

$$\langle J_{inj}(\Xi) \rangle \equiv \lim_{\Xi \rightarrow \infty} \frac{1}{\Xi} \int_0^{\Xi} \zeta(t) v(t) dt, \quad (4.4)$$

Observamos que obtém-se a mesma forma funcional para sistemas em contato com reservatórios térmicos com temperatura  $T$ ;

$$J_{inj}^{(termico)}(\Xi) = - J_{dis}^{(termico)}(\Xi) = \frac{\gamma}{m} T \Xi. \quad (4.5)$$

Assim, para o reservatório massivo bimodal obtemos;

$$\langle J_{inj}(\Xi) \rangle = - \langle J_{dis}(\Xi) \rangle = \frac{\gamma}{m} T_k \Xi. \quad (4.6)$$

Note-se que o uso da temperatura cinética recupera a forma funcional da expressão para os fluxos energéticos, permitindo o mapeamento aproximado nesse contexto

dos resultados ligados ao equilíbrio térmico observado no caso Langevin.

É importante também mencionar que o análogo da equipartição de energia ( $E = T$  dado  $m \langle v^2 \rangle / 2 = T/2$  e  $k \langle x^2 \rangle / 2 = T/2$ ) não se aplica no caso do ruído dicotômico, De fato, aqui a relação se torna:

$$E = T_k \left( 1 + \frac{\gamma}{2 m \alpha} \right) \quad (4.7)$$

que demonstra dependência explícita nas escalas de dissipação ( $\gamma$ ) e da cor ( $\alpha$ ). Note-se também que, quando  $\gamma \ll \alpha$ , a equipartição é recuperada:

$$E = T_k \quad (4.8)$$

#### 4.1.2 Caso superdissipado, Temperatura posicional $T_x$

A energia média para a partícula superdissipada sob a influência do ruído dicotômico tem a seguinte expressão

$$E = \frac{k}{2} x^2 = T_x \quad (4.9)$$

Donde estabelecemos a temperatura posicional:

$$T_x = \frac{\sigma^2}{2(k + \alpha \gamma)} \quad (4.10)$$

Que se torna a medida efetiva base para as outras abordagens de temperatura efetiva, como também será feito a partir da temperatura cinética no caso massivo

Calculamos a estatística dos fluxos energéticos injetivo e dissipativo. Aplicando a abordagem de Laplace-Fourier, obtemos:

$$J_{inj}^o(\Xi) = -J_{dis}^o(\Xi) = 2 \alpha T_x(\Xi) \quad (4.11)$$

### 4.1.3 Comparando Temperatura Posicional de caso superdissipado com a energia potencial média do caso massivo

É imediato se observar que a temperatura posicional consiste no valor da energia total da partícula no caso super dissipado, que se concentra no termo potencial devido à situação de superdissipação.

Podemos, para efeito de maior compreensão das sutilezas associadas a definição de temperatura associada a magnitude das flutuação da estatística estacionária dos dois casos (massivo e superdissipado), estabelecer uma comparação direta entre o resultado obtido para a energia potencial média no caso massivo e a temperatura posicional do caso superdissipado.

Temos para o valor da energia potencial média no caso massivo:

$$\langle E_p \rangle = \frac{a^2(m\alpha + \gamma)}{2\gamma(k + \alpha(\gamma + \alpha m))} = \frac{1}{2} + \frac{\gamma}{2m\alpha} T_k \quad (4.12)$$

E para a temperatura posicional;

$$T_x = \frac{a^2}{2(k + \alpha \gamma)} \quad (4.13)$$

Podemos estabelecer a comparação pela razão e pela diferença entre os dois termos, a razão nos dá:

$$\frac{\langle E \rangle_p}{T_x} = \frac{(m\alpha + \gamma)(k + \alpha \gamma)}{\gamma(k + \alpha(\gamma + m\alpha))} \quad (4.14)$$

Observe que no limite  $\alpha \rightarrow \infty$  a razão entre ambas expressões vai a um, a temperatura posicional convergindo assim para o valor da energia potencial média do caso massivo. Se calculamos a diferença entre os dois termos obtemos:

$$\langle E \rangle_p - T_x = \frac{a^2(m\alpha + \gamma)}{2\gamma(k + \alpha(\gamma + \alpha m))} - \frac{a^2}{2(k + \alpha \gamma)} = \frac{a^2(m\alpha + \gamma)(k + \alpha \gamma) - a^2\gamma(k + \alpha(\gamma + \alpha m))}{2\gamma(k + \alpha(\gamma + \alpha m))(k + \alpha \gamma)} \quad (4.15)$$

Que vai a zero no limite  $\alpha \rightarrow \infty$ . Assim, observamos como a queda do tempo característico do reservatório ( $\tau = 1/\alpha$ ) a zero aproxima os resultados dos casos massivo e superdissipado.

#### 4.1.4 Comparando fluxos energéticos de casos massivo e caso superdissipado

Dado que;

$$T_x = \frac{a^2}{2(k + \alpha \gamma)} \quad T_k \equiv m \langle v^2 \rangle = \frac{a^2 \alpha m}{\gamma(k + \alpha(\gamma + \alpha m))}$$

Vamos comparar os resultados obtidos para os fluxos eneréticos no caso massivo e no caso superdissipado, se observamos a diferença entre os dois resultados obtemos:

$$\begin{aligned} J_{inj}^o(\Xi) - J_{inj}(\Xi) &= \frac{2\alpha T_x(\Xi)}{\alpha a^2 \Xi} - \frac{\gamma}{m} \frac{T_k \Xi}{\alpha a^2 \Xi} \\ &= \frac{2\alpha}{k + \alpha \gamma} - \frac{\gamma}{(k + \alpha)(\gamma + \alpha m)} = \frac{\alpha^3 a^2 m}{(k + \alpha \gamma)(k + \alpha(\gamma + \alpha m))} \Xi \end{aligned}$$

Observe-se que a diferença entre as duas expressões concentra-se no termo cúbico em  $\alpha$ , o que corresponde a intuição de que o limite superdissipado elimina um grau polinomial no problema associado a derivada superior do termo de inércia ligado a  $m$  na equação de Langevin generalizada.

Podemos também comparar os dois resultados pela razão entre eles:

$$\frac{J_{inj}(\Xi)}{J_{inj}^o(\Xi)} = \frac{2\alpha T_x \Xi}{\frac{\gamma}{m} T_k \Xi}$$

Substituindo as expressões para os fluxos do caso massivo e superdissipado, obtemos:

$$\frac{2\alpha \frac{a^2}{2(k + \alpha \gamma)} \Xi}{\frac{\gamma}{m} \frac{a^2 \alpha m}{\gamma(k + \alpha(\gamma + \alpha m))} \Xi} = \frac{k + \alpha(\gamma + \alpha m)}{k + \alpha \gamma}$$

Novamente observamos a diferença da dependência polinomial superior em  $\alpha$  do caso massivo, ponderada pela massa  $m$ .

## 4.2 Temperatura Intensiva $T_i$

Para que entendamos como os aspectos de intensividade da temperatura emergem em um contexto de não-equilíbrio, necessariamente devemos nos debruçar sobre o

conceito de Entropia. Em linhas breves, considero importante elucidar qual abordagem o presente trabalho toma na apreensão do conceito, cujo alicerce em Teoria da Informação no trabalho de Shannon considero de maior alcance ou mais generalizada que a sua contraparte Boltzmanniana, como sugerido na Introdução.

Muitas vezes expressa quivocadamente como "desordem", a ideia de entropia provoca controvérsias desde sua concepção, pela abstração que exige, e pelas formas diversas em que é usada, primeiro na termodinâmica, e depois em contexto mais probabilista, associada indiretamente ao conceito de verossimilhança ou *log-likelihood*.

O estudo do aspecto entrópico em uma equação de langevin generalizada resulta da necessidade de caracterizar a relação entre energia média e entropia do sistema no estado estacionário. Lembremos que os três conceitos estão relacionados de forma quase inextricável, dado a forma termodinâmica da entropia:

$$\Delta S = \frac{Q}{T} \quad (4.16)$$

A expressão clássica liga o total de energia trocada pelo sistema, também conhecido como Calor (Q) de forma diretamente proporcional ao aumento de entropia no sistema, enquanto a Temperatura (T) é inversamente proporcional, assumindo um papel de controle do total da produção entrópica, em outras palavras, uma temperatura suficientemente alta tornaria qualquer produção entrópica irrisória dado um calor constante. Note, o jogo entre temperatura, entropia e energia atravessa quase todos princípios e relações termodinâmicas, ditando no limite a orinetação e desdobramento dos processos estudados.

Se investigamos a definição de energia livre, nomeadamente:

$$\Delta F = \Delta H - T \Delta S \quad ; \quad \Delta F = \Delta H - Q \quad (4.17)$$

Lembramos que a energia disponível no sistema para a produção de trabalho se deve ‘a variação total de entalpia no sistema  $\Delta H$ , isto é, da totalidade do conteúdo energético, subtraída do calor trocado  $Q$ , ou melhor do produto da  $T \Delta S$ . Note-se aqui, em uma situação de não equilíbrio, a temperatura efetiva que deve operar nesse tipo de análise e transformação pseudotermodinâmica<sup>1</sup> seria justamente a temperatura intensiva  $T_i$  que nesse capítulo procuramos definir para o caso Langevin

<sup>1</sup>Não esquecemos que o termo termodinâmica não se enquadra *stritu sensu* na situação de não equilíbrio.

generalizado.

Quanto à questão de otimização energética para a realização de trabalho por sistemas adequadamente representados pela forma de Langevin Generalizada, o estudo da entropia intensiva se torna um caminho direto para o estabelecimento de resultados para eficiência, sempre com anteparo no limite gaussiano onde se deve esperar a reobtenção da situação térmica. Um sistema em estado majorado de temperatura intensiva produz menos entropia e portanto é um processo com mais reversibilidade e eficiência, no sentido de que um custo energético menor de input é aproveitado em maior grau para a obtenção de trabalho, quando em um contexto de ciclo térmico, ou de um protocolo que aja sobre o sistema. Para maiores detalhes sobre essa discussão aponto para o fim deste capítulo onde o conceito de temperatura efetiva é explorado especificamente no contexto de máquinas térmicas.

A abordagem de temperatura intensiva procura capturar o par intensivo da entropia, mas em um contexto de não equilíbrio, lembrando mais uma vez os postulados da termodinâmica:

$$\frac{1}{T_i} \equiv \frac{\partial S}{\partial E} \quad (4.18)$$

Usando resultados analíticos pareados com a implementação de simulações numéricas, podemos verificar a entropia e a energia correspondentes ao estado estacionário da partícula. Obtendo ambas as quantidades podemos entender como variam sob alterações nos parâmetros  $\{a, \alpha\}$  que definem a força bimodal simétrica e por consequência o nível de gaussianidade da distribuição do reservatório.

### 4.2.1 Abordagem heurística

Antes do trabalho convergir para a definição formalmente correta da temperatura intensiva, que passa pela temperatura cinética  $T_k$  tornada fixa para o cálculo da derivada que vemos mais à frente na eq. (4.18), uma análise inicial foi feita com o intuito de verificar qual aproximação teria a derivada  $\frac{dS}{dE} |_{\alpha}$  da temperatura cinética  $T_k$ . Como se verá adiante, o termo  $\frac{dS}{dE} |_{\alpha}$  na realidade é uma das parcelas na expressão total que captura a temperatura intensiva associada ao processo investigado e tem particular valor por estar diretamente ligado a gaussianidade da distribui-

ção do ruído, lembrando que no limite  $\alpha \rightarrow \infty$  essa distribuição converge para a Maxwelliana.

Com o intuito de explorar, dentro de diferentes parâmetros  $\{\sigma, \alpha\}$  para o reservatório bimodal, diferentes configurações do modelo massivo (I) quanto a energia média e entropia consolidadas após o atingimento do estado estacionário, a abordagem tomada foi simular ensembles de sistemas com iguais parâmetros mecânicos, varrendo a extensão mais significativa do valor desses parâmetros, em particular valores baixos para  $\alpha$ , o responsável pela gaussianidade do reservatório, na situação mais próxima de zero, dado que nessa região a forma exótica do reservatório bimodal aparece com mais força nas distribuições associadas ao estado estacionário [13], como indica o gráfico na figura 3.3.

Na figura 4.1, podemos observar como a entropia da partícula bimodal no estado estacionário varia para diversas amplitudes  $\sigma$  e taxas de transição  $\alpha$  distintos, mantendo-se todos parâmetros mecânicos constantes ( $m = k = \gamma = 1$ ), a figura totaliza 1600 (40x40) simulações.

Uma vez varrido esse espaço significativo de configurações da partícula sob influência do reservatório bimodal para parâmetros mecânicos fixos, é possível calcular numericamente a derivada  $\frac{dS}{dE} |_{\alpha}$ , a hipótese tratada sendo de que já que os fluxos energéticos exibem estatísticas iguais em primeira ordem e da mesma forma o função de grandes desvios para os fluxos, (resultado obtido em capítulo 3 no contexto do mapeamento entre reservatórios interno e externo assim como no capítulo 4 no contexto específico do reservatório bimodal), possivelmente a relação entre entropia e energia refletisse o mesmo espelhamento, ou o fizesse de forma aproximada.

É importante notar o aspecto heurístico nessa altura, como sugere o nome da seção, que considero relevante para o entendimento das escolhas tomadas mais tarde quanto a definição final da temperatura intensiva assim, como subsequentemente da temperatura de resposta. Essencialmente o resultado obtida de forma preliminar aqui dá a sugestão do que se procura verificar mais a frente, cobrindo de forma parcial com o instrumento numérico o que mais tarde desponta como uma proposição bem definida e diretamente verificável na eq. (4.18).

No painel (a), derivada de valores obtidos para a entropia do sistema em relação à sua energia média  $\frac{dS}{dE} |_{\alpha}$  para diversas simulações com valores distintos de amplitude  $\sigma$  e taxa de transição  $\alpha$ , no painel direito (b), temos o valor da temperatura

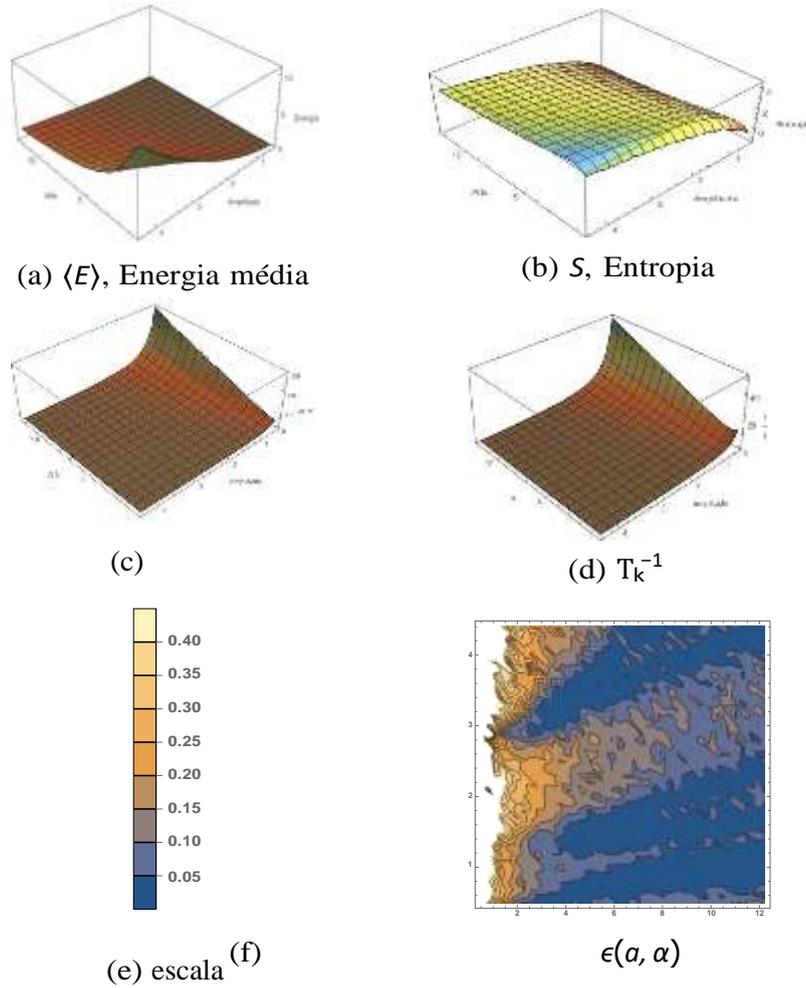


Figura 4.1: Série de figuras que constituem a investigação heurística ao redor do conceito da temperatura intensiva  $T_i$ .

cinética  $T_k$  da mesma partícula bimodal no estado estacionário. As simulações feitas para a obtenção desta visualização cobriram ruídos bimodais com parâmetros nos seguintes intervalos:  $\{\alpha, a\} \in (0.2, 6) \times (0.5, 12.2)$  Mapa da diferença escalada  $\frac{\partial S}{\partial E \cdot \alpha} = \frac{1}{T_k} - \frac{1}{T_k^{-1}}$ , uma abordagem anterior à obtenção da expressão para a temperatura intensiva  $T_i$ . Valores de Energia média e Entropia para diversas simulações da partícula bimodal em caso de modelo I (também chamado massivo ou *underdamped*) com parâmetros mecânicos  $\{m, \nu, k = \{1, 1, 1\}$  e parâmetros do reservatório variando nos respectivos intervalos:  $a \in (0.1, 4.2)$  e  $\alpha \in (0.1, 12)$

Na figura 4.1f podemos observar em quais pontos do plano  $a \times \alpha$  o inverso da

temperatura cinética se aproxima do termo  $\frac{\partial S}{\partial E} \cdot \alpha$ , seja a distância do ajuste calculada da seguinte forma:

$$\epsilon(\alpha, \alpha) = 1 - \frac{\frac{\partial S}{\partial E}(\alpha, \alpha)}{T_k(\alpha, \alpha)} \quad (4.19)$$

## 4.2.2 Aproximação analítica para a entropia no caso simétrico

Outra forma de se obter soluções analíticas para a entropia das distribuições associada ao estado estacionário da partícula sujeita ao ruído bimodal é o ajuste polinomial, observamos que dados os parâmetros mecânicos  $m, k, \gamma$  é sempre possível definir uma região do espectro  $\{\alpha, a, \nu\}$  onde a precisão desejada para o ajuste se verifique. Essa precisão foi quantificada a partir da entropia de KullBack Liebler.

$$D_{KL}[p(x)||p_{approx}(x)] = - \int_{\Omega} p(x) \log \frac{p_{approx}(x)}{p(x)} dx \quad (4.20)$$

O método de ajuste polinomial para essa aproximação baseia-se em trabalho de Munkhammar, Mattsson e Rydèn [23] e consiste em encontrar os coeficientes do polinômio de grau escolhido para o ajuste igualando os momentos produzidos pela distribuição e aqueles oriundos do ajuste, como se verá mais extensamente a seguir, sempre com o intuito de minimizar a distância entre ambos.

Dado que possuem-se resultados analíticos para os momentos da posição e da velocidade da partícula bimodal até a quarta ordem pode-se exprimir analiticamente aproximações para as distribuições com polinômios de até quarto grau; seja

$$p_{approx}(x) = a_0 + a_2x^2 + a_4x^4 \quad ; \quad p_{approx}(v) = b_0 + b_2v^2 + b_4v^4 \quad (4.21)$$

Usando as expressões analíticas para os momentos podemos encontrar os coeficientes das duas aproximações e avaliar qual a eficiência dessa aproximação.

$$x^0 = \int_{-n\sigma_x}^{n\sigma_x} p_{approx}(x) dx = 1 \quad ; \quad v^0 = \int_{-n\sigma_v}^{n\sigma_v} p_{approx}(v) dv = 1 \quad (4.22)$$

$$x^2 = \int_{-n\sigma_x}^{n\sigma_x} x^2 p_{approx}(x) dx \quad ; \quad v^2 = \int_{-n\sigma_v}^{n\sigma_v} v^2 p_{approx}(v) dv \quad (4.23)$$

$$x^4 = \int_{-n\sigma_x}^{n\sigma_x} x^4 p_{approx}(x) dx \quad ; \quad v^4 = \int_{-n\sigma_v}^{n\sigma_v} v^4 p_{approx}(v) dv \quad (4.24)$$

A partir de uma avaliação numérica pode-se inferir para um dado conjunto de parâmetros mecânicos qual o  $n$  mais apropriado, definindo o intervalo de integração onde o ajuste se torna mais adequado. obtendo-se as fórmulas analíticas aproximadas para as distribuições podemos aplicar o resultado para derivar uma solução analítica para a entropia:

$$S = - \int p(x) \text{Log}(p(x)) dx + \int p(v) \text{Log}(p(v)) dv \quad , \quad (4.25)$$

e daí fazer-se a derivada em relação à expressão analítica da energia média. Usando-se como critério a distância de Kullback Leibler:

Avaliamos em qual região do espectro  $\{\alpha, a\}$  as aproximações polinomiais atingem uma acurácia razoável.

Existem ainda outras formas de aproximar as distribuições da velocidade e da posição já referida em trabalhos prévios como a aproximação de Edgeworth e a de Gram Charlier, ambas aparentadas em seu método, que consiste em encontrar os cumulantes estatísticos associados às variáveis aleatórias em questão e a partir destes escrever a função característica da aproximação analítica desejada e por transformação de Fourier inversa chegar à sua expressão.

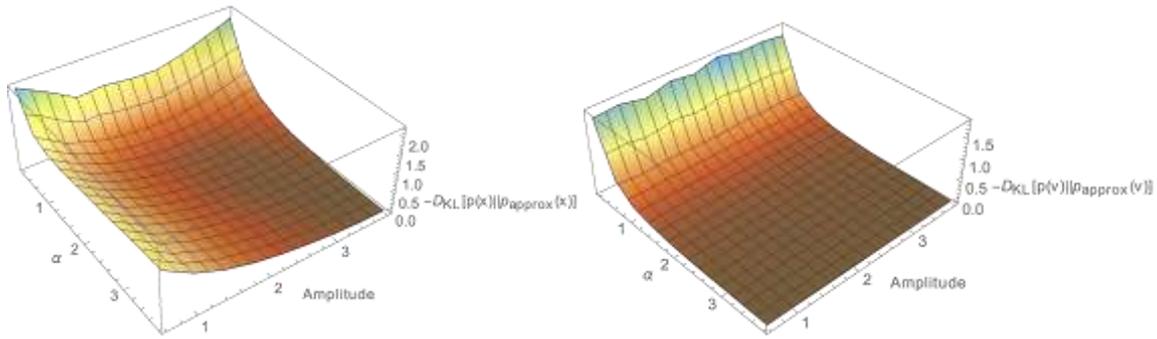


Figura 4.2: Aproximando histogramas de  $p(x)$  com  $n_\sigma = 2.5$  e  $p(v)$  com  $n_\sigma = 30$  da partícula bimodal com parâmetros mecânicos  $\{n, k, \gamma\} = \{1, 1, 1\}$  e polinômios de quarto grau obtemos bons resultados para os histogramas da velocidade para  $\alpha > 1$  e para os histogramas da posição para  $\alpha > 1.3, \sigma > 1.3$

### 4.2.3 $T_i$ para modelo I - partícula massiva sob o reservatório bimodal externo

Aqui passamos para os resultados de temperatura intensiva para o caso massivo, que passa inicialmente pela definição de uma fórmula ansatz para a obtenção da relação entre entropia e energia no sistema estacionário para em seguida prosseguir para a definição mais rigorosa da temperatura efetiva de intensividade ou configuração.

A partir dos resultados numéricos (ver fig. (4.3)) é possível observar a forma funcional da dependência entre Entropia e Energia média para a partícula sob influência do reservatório bimodal, fixando-se a taxa de transição  $\alpha$  do ruído, obtemos:

$$S_\alpha = \ln h_\alpha E, \quad (4.26)$$

Com,

$$h_\alpha = h^{-1} + \frac{h^l}{\alpha^2}^{-1} \quad (4.27)$$

Dado que o sistema no estado estacionário mantém sua energia média constante, e que sua distribuição da energia possui perfil compacto, correspondente ao perfil compacto observado nas distribuições de ambas posição e velocidade podemos argu-

mentar que a energia média define o volume típico ocupado pelo sistema no espaço de fase, o que sugere que o ansatz Eq. (4.27) reflete a célebre fórmula de Boltzmann:

$$S_B = k_B \text{Log}(W) \quad (4.28)$$

Além da ressonância que esse resultado encontra com a teoria cinética dos gases, podemos mencionar também que sua forma funcional replica, a menos da dependência no parâmetro  $\alpha$  o resultado esperado no caso Langevin canônico sob a influência de reservatório de Lévy-Itô, dadas distribuições de equilíbrio:

$$P_{\text{langevin}}(x) = \frac{k}{(2\pi k_B T)^{1/2}} \exp \frac{-k}{2k_B T} x^2 \quad (4.29)$$

$$P_{\text{langevin}}(v) = \frac{m}{(2\pi k_B T)^{1/2}} \exp \frac{-m}{2k_B T} v^2 \quad (4.30)$$

O que resulta para a entropia de Shannon  $S = S_x + S_v$  em:

$$S_{\text{langevin}} = \ln \frac{2\pi e k_B T}{(km)^{1/2}} \quad (4.31)$$

Do o teorema de equipartição de energia, temos:

$$\langle E \rangle = \langle K \rangle + \langle U \rangle = k_B T \quad (4.32)$$

Substituindo na eq. (4.31) obtém-se:

$$S_{\text{langevin}} = \ln [hE] \quad ; \quad h = \frac{2\pi e}{(km)^{1/2}} \quad (4.33)$$

Assim, a partir do limite gaussiano do reservatório bimodal é possível obter-se o valor de  $h$  analiticamente. Voltando a Eq. (4.27), temos:

$$\lim_{\alpha \rightarrow \infty} \cdot_T S_{\alpha} = S_{\text{langevin}} \quad (4.34)$$

Em outras palavras:

$$\lim_{\alpha \rightarrow \infty} \cdot_T \ln \left[ h^{-1} + \frac{h^{\#}}{\alpha^2} \right] \cdot E = \ln [hE] \quad (4.35)$$

Efetuada ajustes de exponenciais sobre os resultados numéricos podemos estipular o valor da constante  $h_\alpha$  e assim de tanto de  $h$  quanto de  $h'$ . (associada a um valor específico do parâmetro  $\alpha$ , associado à cor do ruído) é possível obter uma aproximação analítica para o valor da Entropia.

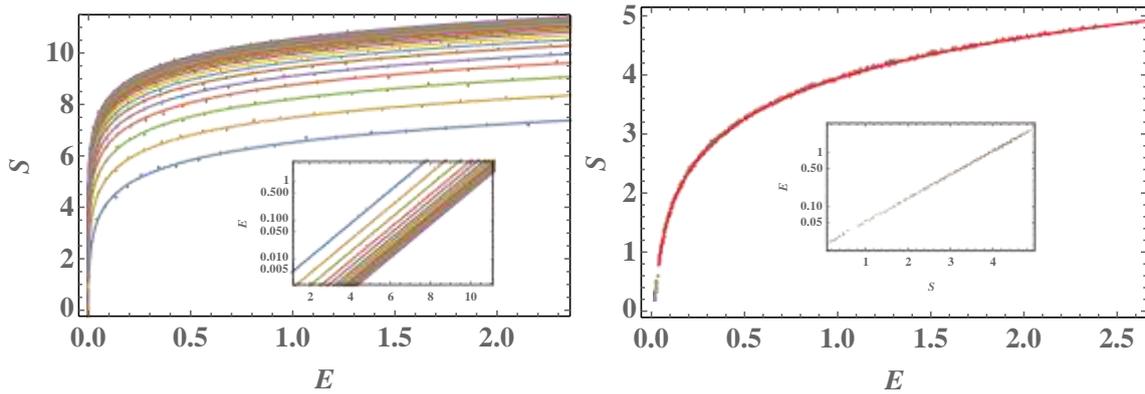


Figura 4.3: Entropia versus Energia para diferentes valores de  $\alpha$  com  $T_k = 0.710\dots$  à esquerda :  $\alpha$  entre  $1/10$  e  $46/10$ . á direita :  $\alpha$  entre  $3$  and  $108/10$ . As inserções interiores mostram a validade da equação Eq. (4.27). [24]

Note-se novamente que a noção de manutenção de  $T_k$ , voltando ao limite gaussiano definido no seção 3.1.3, com o objetivo que se tenha a variância associada a velocidade da partícula constante, isto é, um cenário de agitação média comparável a noção intuitiva de temperatura. essa definição inaugura uma abordagem quasi-canônica, dado que estaremos comparados amostras do sistema entre as quais apesar de mantermos fixa a temperatura cinética e variar-se a energia média do sistema, emulando o ensemble canônico tradicional, em que mantém-se fixa a temperatura de equilíbrio. Assim, efetuamos a variação dos parâmetros  $\alpha$  e  $\sigma$  sobre a curva definida pela equação Eq. (4.2)

Como mencionado na definição da temperatura cinética  $T_k$ , a definição rigorosa de  $T_i$  passa por uma abordagem isomarconiana para a derivada  $\frac{dS}{dE}$ , isto é, procurando investigar como se comporta  $\frac{dS}{dE} T_k$ . Como observaremos, a convergência do valor de  $T_i$  para  $T_k$  acaba emergindo naturalmente, após breve a manipulação algébrica

das derivadas parciais associadas aos parâmetros  $\{\sigma, \alpha\}$  que desdobram a expressão

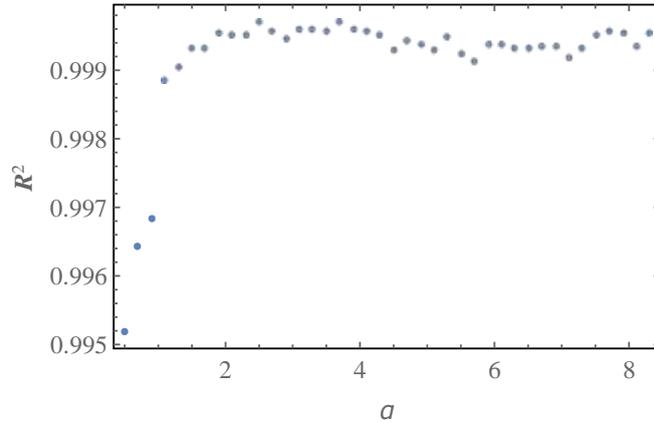


Figura 4.4: Medida de erro  $R^2$  para os ajustes implementados pela Eq. (4.27) no gráfico anterior, observe que mesmo na situação menos gaussiana, quando  $\alpha \rightarrow 0$  o ajuste tem alto nível de precisão convergindo rapidamente para um situação de erro desprezível.

$$\frac{dS}{dE} \cdot T$$

A entropia é função da energia  $E$ , e do parâmetro atérmico,  $\alpha$ ,

$$dS = \frac{\partial S}{\partial E} dE + \frac{\partial S}{\partial \alpha} d\alpha. \quad (4.36)$$

Em adição assumem-se as relações a seguir:

$$d\alpha = \frac{\partial \alpha}{\partial a} da + \frac{\partial \alpha}{\partial T_k} dT_k, \quad (4.37)$$

$$da = \frac{\partial a}{\partial E} dE + \frac{\partial a}{\partial T_k} dT_k. \quad (4.38)$$

Inserindo Eq. (4.37) em Eq. (4.36) e dividindo por  $dE$  obtemos

$$\frac{dS}{dE} = \frac{\partial S}{\partial E} + \frac{1}{dE} \frac{\partial S}{\partial \alpha} \frac{\partial \alpha}{\partial a} da + \frac{\partial \alpha}{\partial T_k} dT_k, \quad (4.39)$$

Como fixamos a temperatura cinética,  $dT_k = 0$ , obtém-se

$$\frac{dS}{dE} = \frac{\partial S}{\partial E} + \frac{1}{dE} \frac{\partial S}{\partial \alpha} \frac{\partial \alpha}{\partial a} \frac{\partial a}{\partial E} dE + \frac{\partial a}{\partial T_k} dT_k, \quad (4.40)$$

Usando novamente a condição  $dT_k = 0$ ,

$$\frac{dS}{dE}_{T_k} = \frac{\partial S}{\partial E}_{\alpha} + \frac{\partial S}{\partial \alpha}_E \frac{\partial \alpha}{\partial E}_{T_k} \quad (4.41)$$

A expressão obtida acima, eq.(4.41) é uma ferramenta analítica poderosa, com ampla gama de aplicações. Isso fica claro se listamos as poucas premissas usadas na sua obtenção, nomeadamente i) a fixação dos parâmetros mecânicos do sistema, ii) um reservatório cujas propriedades dependem exclusivamente de dois parâmetros.

Um maior detalhamento será realizado na sequência, quando a mesma abordagem será usada para os casos do sistema superdissipado e também de reservatório interno, nesses contextos é possível explicitar o significado físico especial que cada um dos termos presentes na expressão traduz.

Voltando ao foco desta subseção, o sistema massivo (modelo I), lançamos mão da expressão para a energia do sistema:

$$E = \frac{\alpha^2(\gamma + 2\alpha m)}{2\gamma(\alpha\gamma + k + \alpha^2 m)} = \frac{\gamma T_k}{2\alpha m} + T_k \quad (4.42)$$

Assim, obtemos, substituindo em eq.(4.41) ;

$$\frac{\partial E}{\partial \alpha}_{T_k} = - \frac{\gamma T_k}{2\alpha^2 m} \quad (4.43)$$

$$\frac{1}{T_i} = \frac{dS}{dE}_{T_k} = \frac{\partial S}{\partial E}_{\alpha} - \frac{2\alpha^2 m}{\gamma T_k} \frac{\partial S}{\partial \alpha}_E \quad (4.44)$$

Note-se como a definição presente relaciona diretamente a definição fechada da temperatura intensiva  $\frac{dE}{dS}_{T_k}$  com sua formulação heurística  $\frac{dE}{dS}_{\alpha}$  da temperatura intensiva, cujos resultados numéricos foram exibidos no começo do capítulo.

Mais do que isso, é necessário verificar numericamente também a convergência da temperatura intensiva  $T_i$  para a temperatura cinética  $T_k$ , quando efetuamos a operação do limite gaussiano. Podemos assim investigar de que maneira a Tempera-

tura Intensiva, derivada da relação acima se aproxima da Temperatura de cinética ou de Marconi, que caracteriza também em a escala típica de energia do problema.

Na figura 4.1, parte da investigação heurística ao redor da definição da temperatura intensiva, pode-se reconhecer a aproximação funcional entre o termo  $\frac{dE}{dS} \cdot \alpha$  e  $T_k$ . Já na figura 4.5 a seguir, temos cada um dos termos da equação (4.44) em um painel próprio onde justapomos a curva associada ao resultado analítico com pontos advindos de simulações numéricas.

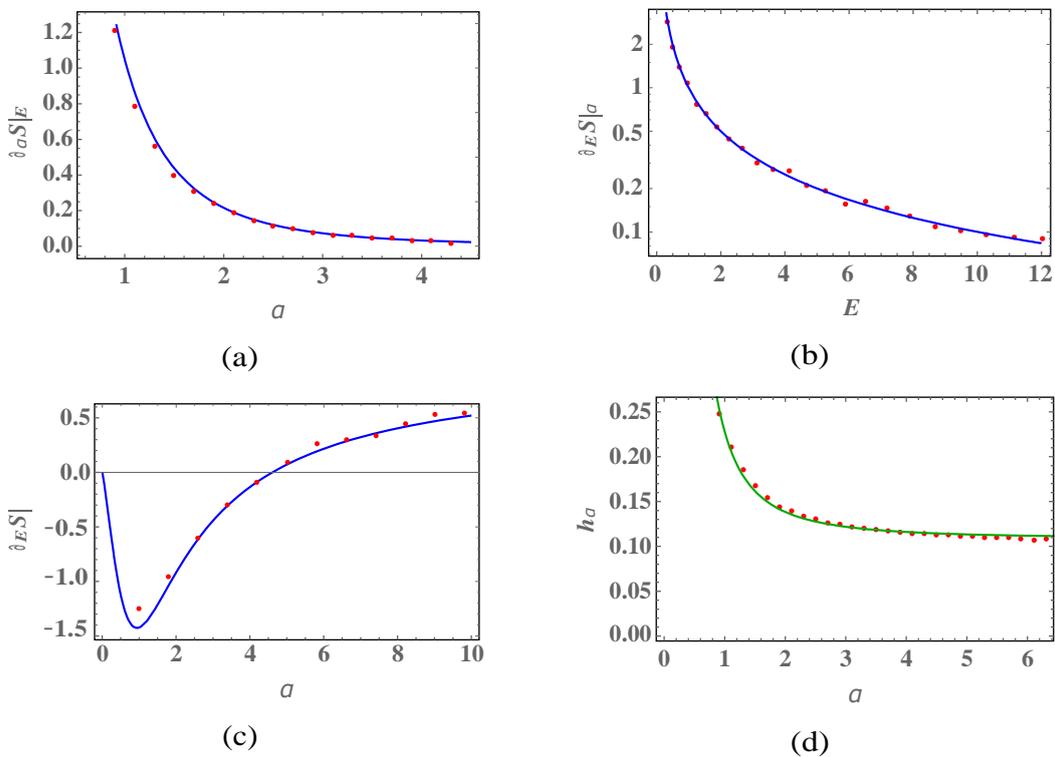


Figura 4.5: acima à esquerda:  $\frac{\partial S}{\partial \alpha} \Big|_{E=3/10}$  versus  $\alpha$ . acima à direita:  $\frac{\partial S}{\partial E} \Big|_{\alpha=14/10}$  versus

$E$ . Abaixo  $\frac{\partial S}{\partial E} \Big|_{T_k=1}$ . As linhas correspondem à proposta analítica enquanto os pontos foram obtidos da implementação Eq. (2.10). Para os prâmetros restantes usamos  $m = k = \gamma = 1$ . [24]

A equação (4.44) pode ser desdobrada analiticamente para um resultado fechado usando-se a forma funcional providenciado pelo ansatz da equação (4.27). Assim, para cada termo temos:

$$\frac{\partial S}{\partial E} = \frac{1}{E} \quad (4.45)$$

$$\frac{\partial S}{\partial \alpha} = \frac{2h^j}{\alpha^3 h^{-1} + \alpha h^j} \quad (4.46)$$

Assim, substituindo em eq.(4.44), obtemos:

$$\frac{1}{T_i} = \frac{1}{E} - \frac{2\alpha^2 m}{\gamma T_k} \frac{2h^j}{\alpha^3 h^{-1} + \alpha h^j} \quad (4.47)$$

Observe que existe um valor de  $\alpha$  crítico para a temperatura intensiva,  $\alpha^*$  onde o valor de  $T_i$  diverge, podemos obter o valor analiticamente observando a singularidade na expressão do denominador na segunda parcela da equação acima:

$$\alpha^* = \sqrt{\frac{2h^j}{-hh^j}} \quad (4.48)$$

Note pela curva exibida em figura (4.5d) que o valor de  $h^j$  é negativo, o que garante um valor real para  $\alpha^*$ .

Note-se que o ajuste entre ambas Temperatura intensiva ( $T_i$ ) e a Temperatura de Cinética ( $T_k$ ) é concomitante à convergência para a forma gaussiana que as distribuições de posições e velocidades assumem quando o parâmetro  $\alpha$  assume valores grandes, o que é consistente com a situação de equilíbrio térmico onde temos a convergência de todas as temperaturas efetivas para a temperatura propriamente dita.

Observe que  $\alpha = \alpha^*$  corresponde a  $\partial E S|_{T_k} = 0$ , o ponto singular do espaço de parâmetros onde uma variação no valor da energia do sistema não produz uma mudança correspondente na entropia do sistema, tornando-se quantidades não relacionadas na transição entre as regiões negativas e positivas  $T_i$ . À medida que  $\alpha$  tende ao infinito — e a amplitude do ruído,  $\alpha$ , muda de forma que  $T_k$  seja mantida constante —, obtém-se uma situação que imita o caso do reservatório gaussiano e  $T_i = T_k = T$ , como esperado. Também é relevante mencionar que muitos aspectos da distribuição de estado estacionário  $\rho(x, v)$  passam por algum tipo de comportamento crítico determinado pelo parâmetro  $\alpha$ , como a curtose e a assimetria da distribuição, portanto, o comportamento crítico exibido por  $T_i$  em  $\alpha^*$  não é inédito. [12]

#### 4.2.4 Ti modelo II - caso superdissipado

Para o caso superdissipado, é possível obter um valor analítico para a entropia a partir da expressão para a distribuição da posição, assim para todo  $n \in 0, 1, 2, \dots$ :

$$\langle x^{2n} \rangle = \frac{a^{2n}(2n-1)!!}{k^n \prod_{j=1}^n (\alpha\gamma + (2j-1)k)} \quad (4.49)$$

Ver Eq. (2.19) para o método análogo de obtenção da estatística, a fórmula para  $n$  é encontrada seguindo uma indução matemática simples a partir dos 4 primeiros termos, dado que as distribuições são simétricas todos os momentos ímpares são iguais a zero, isto é  $\langle x^{2n+1} \rangle = 0$ .

Desta maneira, a fórmula acima em Eq. (4.49) nos provê a completa informação estatística do problema, possibilitando que recuperemos a densidade da distribuição de probabilidade associada à posição da partícula  $p(x)$ , através da aplicação de uma transformada de Fourier inversa sobre a função geradora dos momentos  $G_x(q)$ .

$$p(x) = \int \exp[iqx] G_x(q) dq = \int \exp[iqx] \sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^n q^n \langle x^n \rangle}{n!} dq \quad (4.50)$$

De onde obtemos [25]:

$$p(x) = \frac{k \Gamma \frac{\alpha\gamma}{2k} + 1}{\sqrt{\pi a \Gamma \frac{\alpha\gamma}{2k}}} \frac{k^2}{1 - a^2 x^2} \frac{\alpha\gamma - 1}{2k} \quad (4.51)$$

A Eq. (4.51) está de acordo com uma solução pré via obtida por uma abordagem de teoria de campos [26].  
Calculando a entropia de Gibbs:

$$S = - \int p(x) \log p(x) dx \quad (4.52)$$

Que para a distribuição em estado estacionário (4.51) yields:

$$S = \log \frac{k \Gamma \frac{\alpha\gamma}{2k} + 1}{\sqrt{\pi a \Gamma \frac{\alpha\gamma}{2k}}} + \frac{2k}{\alpha\gamma} \frac{(\alpha\gamma - 2k) \Gamma \frac{\alpha\gamma}{2k}}{\alpha\gamma \Gamma \frac{\alpha\gamma}{2k}} + \frac{\alpha\gamma h}{2k} \psi^{(0)} \frac{\alpha\gamma}{2k} \quad (4.53)$$

$$\bar{\nu} + \psi^{(0)} \frac{\alpha}{k} \quad (4.53)$$

Onde  $\psi^{(0)}$  representa a função Digamma  $\psi(x)$  avaliada em  $x = 0$  [27]. A expressão

acima também pode ser escrita da seguinte forma:

$$S = \log[E] + \log \frac{\Gamma(\frac{\alpha\gamma + k}{2k})}{\Gamma(\frac{\alpha\gamma}{2k})} + \frac{(\alpha\gamma \frac{\alpha\gamma}{2k} 2k)\Gamma}{+ 1 \frac{\alpha\gamma}{2k}\Gamma} \psi^{(0)} \frac{h \alpha\gamma}{2k} - \psi^{(0)} \frac{\alpha\gamma + k}{2k} \quad (4.54)$$

A fórmula analítica para a entropia do sistema nos dá a possibilidade de desenvolver um vislumbre mais profundo no ansatz (4.27) usado no modelo I; note que a dependência logarítmica entre energia e entropia. Expandindo essa fórmula até a segunda potência de  $\alpha$  obtemos:

$$S = \log[E] + \frac{2k}{\alpha\gamma} + \log \frac{k}{a \alpha\gamma e} + \alpha \frac{\gamma (\pi^2 + 6 \log[4])}{6k} - \alpha^2 \frac{\gamma^2 (12 Z_r[3] + \pi^2)}{8k^2} + O \alpha^3 \quad (4.55)$$

Onde  $Z_r[x]$  representa a função zeta de Riemann [28]. Tomando a expressão para a energia média estacionária em Eq. (4.10) e a definição  $h_\alpha = h^{-1} + \frac{h}{\alpha^2}$  em consideração, usamos a mesma expansão até a segunda potência em Eq. (4.27), o ansatz  $S = \log(h_\alpha E)$ , para obter:

$$S = \log[E] + 2 \log[\alpha] - \log[h] - \frac{\alpha^2}{h h'} + O \alpha^3 \quad (4.56)$$

De fato, Eq. (4.56) funciona como uma aproximação para Eq. (4.55). Usando as duas equações, é possível encontrar formas analíticas dos termos  $h$  and  $h'$ . Entretanto, ambas expressões não serão importantes para a relação entre temperaturas intensiva e posicional no regime superdissipado, como veremos a seguir.

Usando a Eq. (4.41) para o modelo superdissipado:

$$\frac{dS}{dE \cdot T_x} = \frac{\partial S}{\partial E \cdot \alpha} + \frac{\partial S}{\partial \alpha \cdot E} \frac{\partial \alpha}{\partial E \cdot T_x} \quad (4.57)$$

Como temos  $E = T_x$ ;

$$\frac{\partial \alpha}{\partial E \cdot T_x} = 0 \quad (4.58)$$

Observe como o termo  $\frac{\partial \alpha}{\partial E \cdot T_x}$  exprime uma métrica da dispersão da energia pelos graus de liberdade do sistema analisado, indicando como a cor do reservatório varia

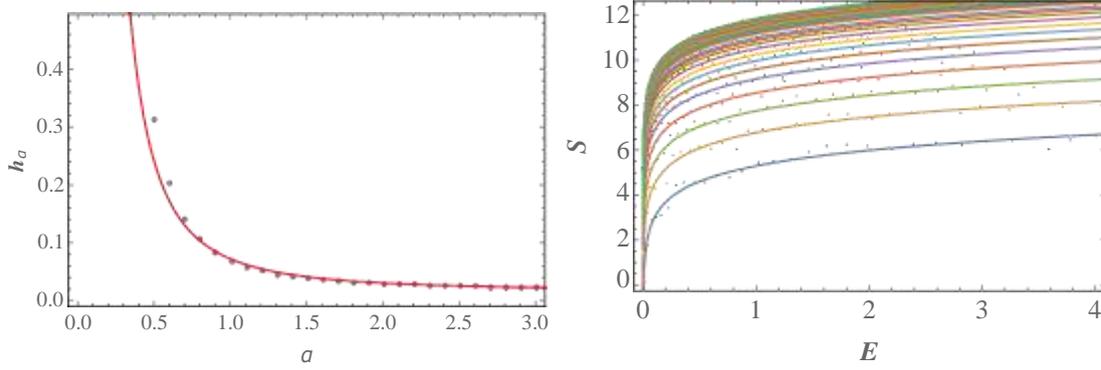


Figura 4.6: painel esquerdo: gráfico para  $h_\alpha$  no modelo superdissipado com parâmetros mecânicos todos iguais a um; painel direito ajuste logaritmico entre entropia e energia, para  $\alpha$  e  $a \in \{1/10, 2/10, \dots, 3\}$  e parâmetros mecânicos iguais a um. [24]

em relação a variação da energia total uma vez que fixamos a temperatura posicional/cinética. No presente caso, a concentração de toda a energia em um único grau de liberdade corresponde a um máximo de acumulação de energia no grau de liberdade associado a temperatura efetiva, no caso a temperatura posicional,  $T_x$ .

Assim seguindo adiante a manipulação algébrica de Eq. (4.41), obtém-se:

$$\frac{dS}{dE} \Big|_{T_x} = \frac{\partial S}{\partial E_\alpha} = \frac{1}{E} \quad (4.59)$$

Que implica:

$$\frac{dS}{dE} \Big|_{T_x} = \frac{1}{T_i} = \frac{1}{E} \quad (4.60)$$

E finalmente:

$$T_i^o = T_x \quad (4.61)$$

Donde concluímos que no caso superdissipado a temperatura posicional corresponde diretamente a medida de temperatura intensiva.

#### 4.2.5 $T_i$ modelo III - caso interno

Note-se que a expressão para definição da temperatura intensiva Eq. (4.41) tem um poder descritivo amplo, englobando com simplicidade nos seus termos aspectos

associados a relação entre a massa da partícula e o coeficiente de dissipação  $\gamma$ , como visto na seção anterior, como também a memória do sistema como se mostrará agora.

Nessa seção vamos ilustrar como a abordagem presente para a temperatura intensiva em um cenário de não equilíbrio é afetada em um caso de reservatório interno como definido no capítulo 2, isto é, pela presença de um kernel dissipativo com o mesmo tempo de persistência característico  $\alpha^{-1}$  que aquele associado ao reservatório. Assim estudamos o seguinte modelo, também sujeito ao ruído dicotômico:

$$m \frac{d^2x(t)}{dt^2} = -\gamma \int_0^t \kappa(t-t') \frac{dx(t')}{dt'} dt' - kx(t) + \zeta_t, \quad v(t) \equiv \frac{dx(t)}{dt} \quad (4.62)$$

Note que a adição do kernel dissipativo com a expressão a seguir garante que o modelo verifica o teorema de Kubo, e assim o reservatório se torna da classe interna:

$$\kappa(t-t') = \frac{1}{\alpha} e^{-\alpha(t-t')} \quad (4.63)$$

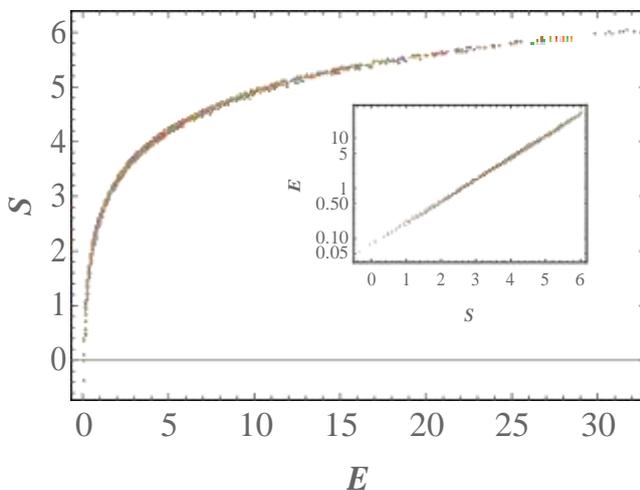


Figura 4.7: Entropia versus energia para  $\alpha \in [0.4, 3.3]$ ,  $\alpha = 1$  e os parâmetros mecânicos todos iguais a um no modelo com o ruído dicotômico de classe interna; Eq. (4.62). Cada valor distinto de  $\alpha$  é representado por uma cor diferente como nos gráficos similares precedentes, note que todos valores de  $\alpha$  resultam na mesma curva, isto é, um reservatório de caráter interno simplifica a relação entre entropia e energia do sistema, desconectando-a de sua dependência na cor do ruído, indicada pelo parâmetro  $\alpha$ . [24]

Vamos examinar Eq. (4.41), nossa fórmula mais completa para descrever a rela-

ção entre temperatura efetiva, entropia e energia média para toda a série de modelos que estamos analisando:

$$\frac{dS}{dE}_{T_x} = \frac{\partial S}{\partial E}_{\alpha} + \frac{\partial S}{\partial \alpha}_{E} \frac{\partial \alpha}{\partial E}_{T_x}. \quad (4.64)$$

Agora, similarmente ao limite gaussiano aplicado ao modelo massivo, o termo que vai a zero é  $\frac{\partial S}{\partial \alpha}_{E}$ , dado que para um mesmo valor energético, a variação do valor de  $\alpha$  não modifica o valor da entropia, como observado na figura (4.7).

Note-se que a verificação do teorema de flutuação dissipação atua como um aproximador da situação de equilíbrio térmico devido a convergência que provoca entre o aspecto intensivo da temperatura e o aspecto energético da temperatura, associado a distribuição da energia média nos graus de liberdade do sistema analisado.

$$\frac{\partial S}{\partial \alpha}_{E} = \frac{\partial}{\partial \alpha}_{E} \ln(hE) = 0 \quad (4.65)$$

Naturalmente, o termo  $\frac{\partial S}{\partial \alpha}_{E}$  em Eq. (4.41) descreve como a entropia do sistema  $S$  se altera com mudanças no parâmetro de cor do reservatório de calor  $\alpha$  (e assim no tempo de perseverança do ruído associado à atividade do reservatório  $1/\alpha$ ), enquanto a energia do sistema é mantida constante.

Note que em todo o espaço de parâmetros  $\{\alpha, \alpha\}$  a mesma curva exponencial delinea a relação entre Entropia e Energia média. Dada a validade da Eq. (4.27) atestada pela figura (4.7) obtemos:

$$\frac{dS}{dE}_{T_k^{int}} = \frac{1}{T_i^{int}} = \frac{1}{E}. \quad (4.66)$$

$$T_i^{int} = E. \quad (4.67)$$

Note que a Eq. (4.41) é uma abordagem poderosa para determinar propriedades de intensividade térmica efetiva em múltiplos modelos, dado que cada uma das três derivadas parciais vai a zero em condições específicas tanto do limite de ruído gaussiano, como o caso do reservatório de classe interna e o regime de superdissipação.

Aqui, novamente a convergência entre a temperatura intensiva e a temperatura cinética também é obtida, como visto na seção anterior, a convergência entre  $T_k$  e

$T_i$  é uma propriedade verificada do caso superdissipado, onde o termo  $\frac{\partial \alpha}{\partial E} \cdot T_x$  garante a equivalência das temperaturas cinética e intensiva, de forma similar ao limite gaussiano no caso massivo.

### 4.3 Temperatura efetiva no contexto da teoria de função resposta $T_r$

O teorema de flutuação dissipação clássico garante, no equilíbrio térmico, a seguinte relação:

$$\frac{\partial C_x(t', t)}{\partial t'} = TR_x(t, t') \quad (4.68)$$

Podemos desenvolver uma abordagem de temperatura efetiva a partir da teoria de função resposta [29], seja a função de auto-correlação da posição da partícula, observando  $t' > t$ :

$$C_x(t', t) = \langle x(t')x(t) \rangle \quad (4.69)$$

Observando que o valor analítico para essa correlação pode ser encontrado a partir de integrações no plano complexo, em abordagem similar a desenvolvida na seção 3.19.

E a correspondente função resposta definida a partir da sensibilidade do sistema a uma perturbação ou kick, que desloca a partícula do estado estacionário (em que a média sobre amostras dos graus de liberdade é constante). A perturbação move ligeiramente o sistema de seu máximo entrópico e o obriga a percorrer novamente essa última etapa de evolução no espaço de fases; dada uma perturbação ou kick suficientemente pequeno podemos utilizar a função de resposta linear, nomeadamente:

$$R_x(t, t') = - \frac{\delta \langle x(t) \rangle}{\delta x(t')} \quad (4.70)$$

Ao longo desse trabalho exploramos diferentes modelos em que é possível estabelecer uma relação efetiva que emula o teorema de flutuação e dissipação mesmo dentro de um quadro de não equilíbrio.

### 4.3.1 Abordagem Heurística

Efetuada uma simulação da partícula em contato com o reservatório bimodal e sujeitando-a após o transiente em tempo  $t^j$  a um deslocamento  $\delta x$  podemos, utilizando-se de um número suficientemente robusto de amostras<sup>2</sup>, obter o valor da função resposta associada à posição da partícula, seguindo a definição da eq. (4.70).

A figura 4.8 compara os resultados extraídos das fórmulas analíticas para a derivada da correlação da posição da partícula bimodal e a função resposta obtida numericamente pela simulação de um kick  $\delta x^j$  efetuado sobre a partícula em um número suficientemente grande de samples. A forma como a média da posição ( $\delta \langle x(t) \rangle$ ) sofre variação sob essa influência até evanescer e a partícula apresentar novamente a estatística associada ao estado estacionário nos dá a dita função resposta.

Como esperado o limite gaussiano também é acusado pela convergência da função resposta do sistema. Enquanto na região ainda podemos ver o ajuste da simulação numérica com o resultado analítico esperado para a partícula sob a influência do reservatório bimodal, depois que o parâmetro atérmico  $\alpha$  atinge a região (0.1, 2.5) não só as distribuições começam a aparentar um aspecto gaussiano como a própria resposta do sistema assume um ajuste mais refinado com a derivada da correlação para o caso Langevin como mostra a figura (4.8).

A partir da função resposta ( $R(t)$ ) podemos obter igualmente a susceptibilidade que na análise linear pode ser reduzida a integral da função resposta no tempo, nomeadamente:

$$\chi(t, t^j) = \int_t^{t^j} R(t, t^j) dt^j \quad (4.71)$$

Integrando-se no tempo a eq. (4.68) obtemos a versão integral do teorema de flutuaç ao-dissipação, onde a temperatura aparece como a constante da relação linear que conecta a susceptibilidade à correlação:

$$\chi(t, t^j) = \frac{1}{T} C(t, t^j) \quad (4.72)$$

---

<sup>2</sup>As simulações desenvolvidas no contexto desse trabalho sempre adotam um critério de convergência baseado nos valores médios de posição velocidade e energia, que espera-se convergirem para os valores analíticos esperados com  $R^2 < 0.01$ .

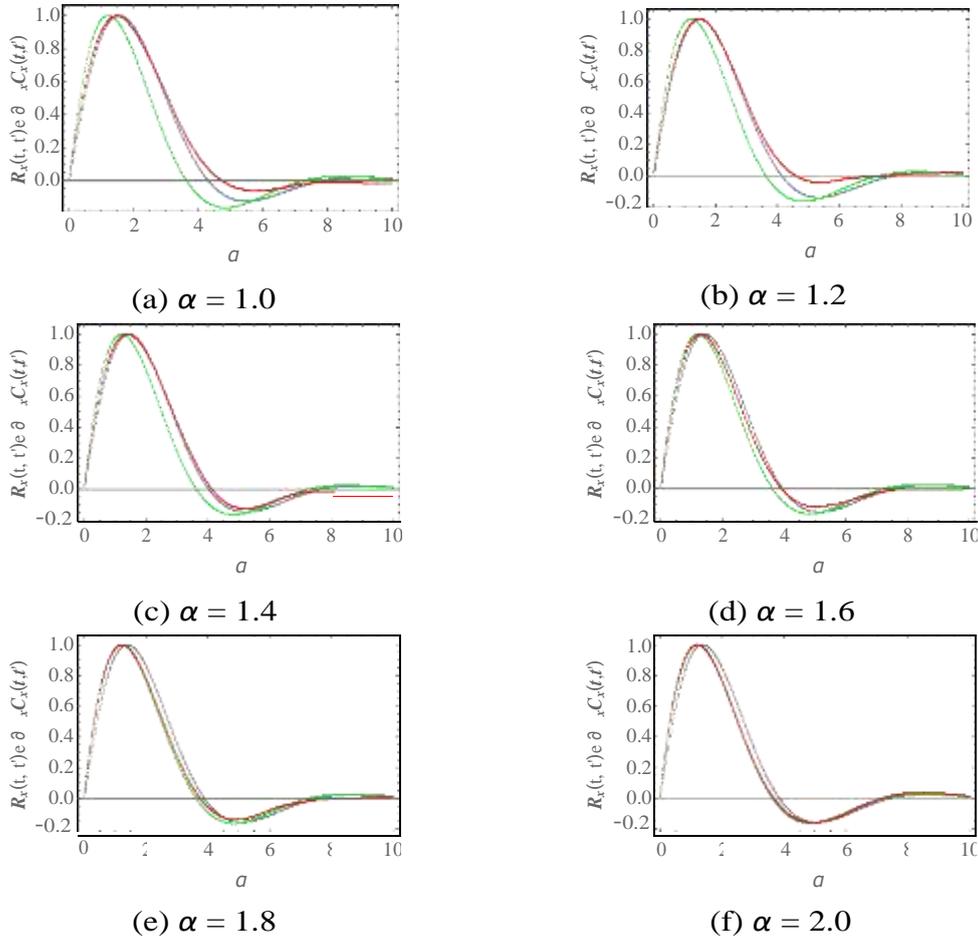


Figura 4.8: Gráficos da função resposta (em vermelho) para partícula sujeita a reservatório bimodal com parados com a derivada da função de correlação da partícula bimodal (em azul) e também a do caso limite Langevin (em verde)

Assim, podemos estipular numericamente uma temperatura de resposta efetiva em uma situação de não equilíbrio pela inclinação da linha representada na figura (4.9). Observe que na maior parte das situações, como se verá mais adiante, ao atingirmos a definição explícita baseada nas formas analíticas para a correlação, existem poucas regiões dos parâmetros mecânicos e de reservatório em que de fato se verifica o ajuste linear entre ambas quantidades. Dessa forma, com a investigação ainda em estado heurístico foi importante verificar a frequência de não linearidade na relação quanto a diferentes parâmetros para configurar a simulação do sistema, por outro lado, imediatamente ficou claro que o simples ajuste linear e extração do coeficiente associado entre susceptibilidade e correlação era inefetivo, em especial

para casos com  $\alpha$  baixo.

Na figura 4.10 temos as métricas do ajuste explicitamente obtido utilizando a abordagem heurística demonstrada na figura 4.9, isto é fazendo-se uma regressão linear sob o gráfico e extraindo seu coeficiente. Para cada regressão linear efetuada, igualmente, a abordagem vai desenvolvida tanto para o caso gaussiano colorido como para o dicotômico, observe-se que o valor da temperatura tende a cair com o aumento do parâmetro  $\alpha$ , convergindo para o valor de 1 da temperatura cinética  $T_k$  que é mantida constante. Note-se como o ajuste tem qualidade muito inferior no caso dicotômico para valores de  $\alpha$  baixos, assim como compromete um pouco sua performance em valores de  $\alpha$  altos para os dois casos, o que é explicado pela perda de resolução para o cálculo numérico da função resposta em si.

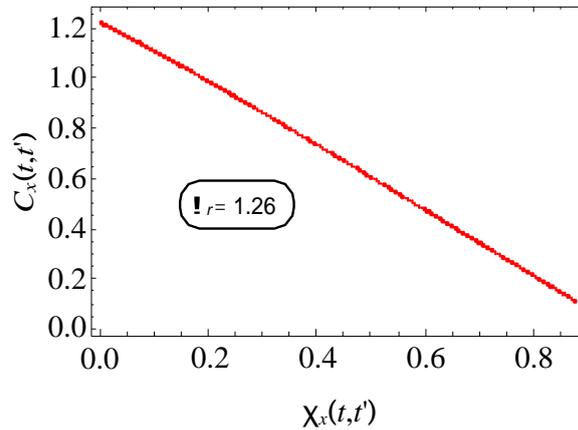


Figura 4.9:  $C_x(t, t')$  versus  $\chi_x(t, t')$  para  $\alpha = 1.4$  and  $m = k = \gamma = 1$ .  $T_r = 1.26$

Outra possibilidade explorada brevemente enquanto nessa etapa heurística da definição da temperatura efetiva de resposta estava ligada com desenvolvimentos mais recentes [30] que sugerem uma versão estendida da mesma relação, passível de descrever sistemas dentro ou fora do equilíbrio.

$$R_x(t, t') = x(t) \frac{\partial \ln(\rho(x(t')))}{\partial x(t')} \quad (4.73)$$

Onde  $\rho$  é a distribuição associada ao estado estacionário. Note-se que a expressão analítica fechada para o caso da partícula Bimodal não é de fácil obtenção, discorre-se mais longamente sobre o tema da expressão fechada para as distribuições da posição e da velocidade da partícula bimodal na referência [31].

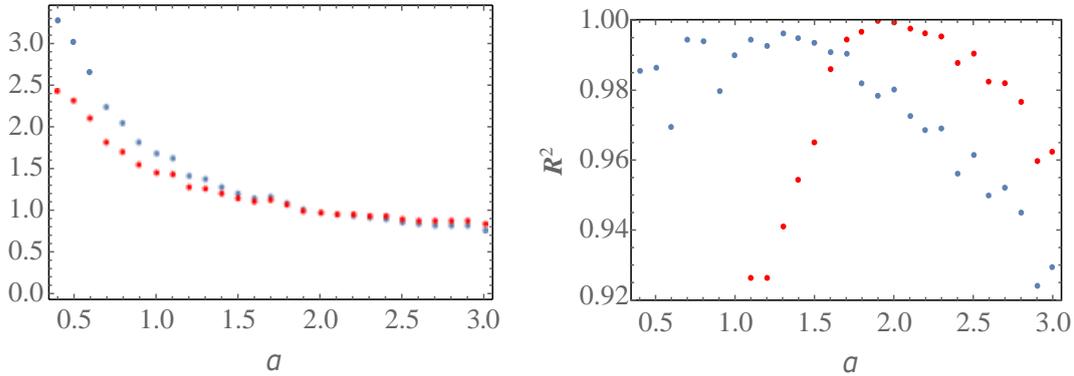


Figura 4.10: Temperatura efetiva extraída da verificação numérica do teorema de flutuação dissipação para a partícula bimodal, em (a) Temos a Temperatura efetiva para ajuste com reservatório bimodal e Langevin. Em (b) temos o RSquared para erro em ajuste com correlação nalgica, caso bimodal e Langevin.

Entre alternativas para o cálculo analítico podemos mencionar aproximações das distribuições estacionárias para  $x$  e  $v$  no caso bimodal tanto usando ajustes polinomiais para a distribuição como pelo método de gram Charlier ou Edgeworth em ordens superiores a cálculo analítico da média na Eq. (4.73) se torna inviável.

Observe-se que a expressão Eq. (4.73) pode ser entendida como uma aproximação linear da variação da entropia da partícula quando afetada de uma pequena modificação  $\delta x$  linear entre  $t$  e  $t'$ .

Dessa forma, notamos que esta abordagem, se utilizada para a definição de temperatura em situação efetiva, se aproxima da abordagem utilizada para a definição da temperatura intensiva  $T_i$ , em que pequenas variações dos parâmetros associados ao reservatório também são usadas para se definirem derivadas parciais associadas a esses mesmos parâmetros e às configurações estatísticas apresentadas pela partícula nessas diferentes formas.

Observando a definição de função resposta em Eq. (4.73), é possível identificar nela a ocorrência do viés entrópico, em particular pela aparição do termo  $\ln(\rho(x(t)))$  que sabemos ser a verossimilhança ou a Log-likelihood de observar uma dada ocorrência do valor  $x(t)$  para a posição.

Abrindo a média em sua forma de integral sobre amostras é possível realizar como a derivada em  $x$  aplicada sobre a loglikelihood na verdade exprime a primeira ordem de uma expansão polinomial para a variação da loglikelihood sob a trajetória perturbada (acrescida do pequeno choque  $\delta x$ ) da partícula.

$$R_{\tilde{x}}(t, t') = - \int x(t) \frac{\partial \ln(\rho(x(t)))}{\partial x(t)} = - \int x(t) \frac{\partial \ln(\rho(x(t)))}{\partial x} \rho(x) dx$$

### 4.3.2 Abordagem Analítica

É possível também extrair uma função repostada analítica a uma dada perturbação sofrida pela partícula ao longo de sua trajetória, como exemplo vamos avaliar a situação provocada pela aplicação de uma força constante na forma  $f(t) = f \Theta(t - t_0)$ . Se fazemos este estudo sobre modelo da partícula sujeita à influência de um reservatório dicotômico obtemos a seguinte equação de forças:

$$m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = -\gamma \frac{dx(t)}{dt} - kx(t) - \zeta_t + f\Theta(t - t_0) \quad (4.74)$$

Transformando esse modelo para o espaço de Fourier Laplace obtemos e utilizando as condições iniciais  $x(0) = v(0) = 0$  e  $\zeta_0 = a$ ;

$$ms^2 \tilde{x}(s) + k\tilde{x}(s) + \gamma(s\tilde{x}(s)) - \zeta(s) + \frac{fe^{-st_0}}{s} = 0 \quad (4.75)$$

Que resulta em:

$$\tilde{x}(s) = \frac{\zeta(s)}{ms^2 + \gamma s + k} + \frac{fe^{-st_0}}{s(ms^2 + \gamma s + k)} \quad (4.76)$$

Efetuada a transformada inversa de Laplace e aplicando a média obtemos:

$$\langle x(t) \rangle = \frac{a}{\alpha(\gamma - \alpha m) - k} e^{-\frac{\gamma t}{2m}} \left[ \frac{(\gamma - 2\alpha m) \sin \frac{t\Omega}{m} + \cos \frac{t\Omega}{m}}{\Omega} - e^{-\alpha t} \right] - \frac{f}{2k} \Theta(t - t_0) \left[ \frac{e^{-\frac{\gamma(t-t_0)}{2m}} \sin \frac{(t-t_0)\Omega}{m}}{\Omega} + e^{-\frac{\gamma(t-t_0)}{2m}} \cos \frac{(t-t_0)\Omega}{m} - 1 \right] \quad (4.77)$$

Observe que o primeiro termo na expressão acima corresponde ao transiente da partícula, enquanto esta ainda não atingiu o estado estacionário, convergindo para zero no limite de tempo longo. O segundo termo se trata da susceptibilidade a ação da força  $f$ , atuando a partir de  $t_0$ , note-se que o tempo característico ligado

ao relaxamento dos efeitos provocados pela perturbação não se relaciona a aspectos do reservatório, mas apenas aos prâmetros mecânicos do problema, de fato, como se verá mais adiante, o segundo termo corresponde perfeitamente a susceptibilidade de uma partícula Langevin. Assim, a resposta do modelo é equivalente ao caso de equilíbrio, porém desligada do reservatório atérmico do modelo.

Nos casos dos modelos de classe externa, tanto o superdissipado quanto o mas-sivo, investigamos o comportamento de resposta efetiva do sistema, inscrito nas suas funções de autocorrelação se processa, dado que flutuação e dissipação nos dois ca-sos se encontram desligadas, não sendo produzidas por um mesmo mecanismo, ou partilhando de uma mesma escala temporal típica.

Referindo-nos a seção previa em que mostrou-se a convergência de  $T_k$  and  $T_i$  no limite de ruído gaussiano para o reservatório bimodal (nomeadamente  $\alpha \rightarrow \infty$  mantendo-se  $T_k$ ), nós avaliaremos como esse mesmo limite afeta a expressão para a autocorrelação da posição.

Revisitando o resultado para a autocorrelação do modelo massivo exibido em Eq.(3.19) sob a influencia do ruído bimodal, podemos escrevê-lo em uma forma ainda mais condensada:

$$\langle x(t)x(t+s) \rangle = \text{const} \frac{e^{-\gamma s}}{2m} \frac{1}{k} \frac{\gamma(2km + \Lambda)}{2m\Omega\Lambda} \sin(\Omega s) + \cos(\Omega s) - \frac{\gamma}{\alpha\Lambda} e^{-\alpha s}, \quad (s \geq 0) \quad (4.78)$$

De fato, o limite de ruído branco produz a convergência do fator indicado por *const* para  $T_k$ , e a expressão completa da auto-correlação se torna uma forma mo-dificada da susceptibilidade linear para o caso Langevin, onde se atinge o equilíbrio térmico. Designamos assim o fator *const* como a temperatura efetiva e a expres-são remanescente da auto-correlação da posição como a susceptibilidade efetiva  $\chi_{\text{eff}}$ , seguindo um caminho próximo àquele desenvolvida em Ref. [32], onde, em uma abor-dagem complementar à nossa, uma expressão para a correlação efetiva é derivada da susceptibilidade.

$$C_x(t, t') = T_r \chi_{\text{eff}}(t, t'). \quad (4.79)$$

### 4.3.3 Sistema Massivo

A definição da susceptibilidade efetiva  $\chi_{eff}$ , estabelece uma relação análoga ao FDT, e é baseada na observação das mudanças que ocorrem na forma da autocorrelação da posição, quando o reservatório se aproxima do limite gaussiano  $\alpha \rightarrow \infty$  com  $T_k$  mantida constante.

Tomando o modelo Langevin tradicional, em que  $\eta(t)$  é ruído gaussiano com  $\langle \eta(t) \rangle = 0$  e  $\langle \eta^2(t) \rangle = 2\gamma T$ ;

$$m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = -\gamma \frac{dx(t)}{dt} - kx(t) + \eta(t), \quad v(t) \equiv \frac{dx(t)}{dt} \quad (4.80)$$

Podemos obter a função de autocorrelação da posição ( $C_x(s) = \langle x(t)x(t+s) \rangle$ ) pela mesma abordagem de Laplace-Fourier que usamos para o caso dicotômico para obter o resultado canônico (veja Risken capítulo 7 [33]). Note que o índice  $l$  é usado para distinguir fórmulas associadas ao caso Langevin;

$$C'_x(s) = T \frac{e^{-\frac{\gamma s}{2m}}}{k} \cos \left[ \frac{\hbar s}{2m} \sqrt{4km - \gamma^2} \right] - \frac{\gamma}{4km - \gamma^2} \sin \left[ \frac{\hbar s}{2m} \sqrt{4km - \gamma^2} \right] \quad (4.81)$$

Que pode ser simplificada usando a expressão  $\Omega \equiv \frac{\sqrt{\gamma^2 - 4km}}{2m}$  para a frequência característica da mecânica do sistema:

$$C'_x(s) = T \frac{e^{-\frac{\gamma s}{2m}}}{k} \cos [s\Omega] - \frac{\gamma}{2m\Omega} \sin [s\Omega] \quad (4.82)$$

Uma vez que o equilíbrio térmico seja atingido, a relação de flutuação e dissipação será verificada Eqs. (4.68), lembremos:

$$-\frac{\partial C'_x(s)}{\partial s} \equiv T R(s) \quad (4.83)$$

$$C'_x(0) - C'_x(s) \equiv T \chi(s). \quad (4.84)$$

Agora aplicamos o limite gaussiano à autocorrelação da posição no modelo sujeito à influência do reservatório bimodal e observamos como a correlação muda até atingir seu limite. O resultado completo é:

$$C_x(s) = \frac{1}{mk} T_k \frac{\alpha^2 m^2 + mk - \gamma^2}{\alpha^2 m - \gamma \alpha + k} \frac{\gamma k}{\alpha^3 m^2 + \alpha km - \alpha \gamma^2} e^{-\alpha s} +$$

$$+ e^{-\frac{\gamma s}{2m}} \frac{\gamma (\alpha^2 m^2 + 3km - \gamma^2)}{\sqrt{4km - \gamma^2} (\alpha^2 m^2 + km - \gamma^2)} \sin \frac{h_s}{2m} \sqrt{4km - \gamma^2} i + \cos \frac{h_s}{2m} \sqrt{4km - \gamma^2} i \quad (4.85)$$

No limite de  $\alpha \rightarrow \infty$  o fator evanescente  $e^{-\alpha s}$  associado a  $\alpha^{-1}$ , o tempo de persistência do reservatório vai a zero. Isso nos deixa com:

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} C_x(s) = \frac{1}{mk} T_k \frac{(\alpha^2 m^2 + (...))}{(\alpha^2 m + (...))}$$

$$\times e^{-\frac{\gamma s}{2m}} \frac{\alpha^2 m^2 + (...)}{\alpha^2 m^2 + (...)} \frac{\gamma}{\sqrt{4km - \gamma^2}} \sin \frac{h_s}{2m} \sqrt{4km - \gamma^2} i + \cos \frac{h_s}{2m} \sqrt{4km - \gamma^2} i \quad (4.86)$$

que se torna, seguindo a regra de l'Hôpital:

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} C_x(s) = \frac{1}{k} T_k e^{-\frac{\gamma s}{2m}} \frac{\gamma}{\sqrt{4km - \gamma^2}} \sin \frac{h_s}{2m} \sqrt{4km - \gamma^2} i + \cos \frac{h_s}{2m} \sqrt{4km - \gamma^2} i \quad (4.87)$$

que pode ser simplificado para:

$$\lim_{\substack{\alpha \rightarrow 0 \\ T_k = const}} C_x(s) = \frac{1}{k} T_k e^{-\frac{\gamma s}{2m}} \frac{\gamma}{2m\Omega} \sin(\Omega s) + \cos(\Omega s) \quad (4.88)$$

Comparando Eq. (4.88) e Eq. (4.81) observamos que são muito similares exceto por um sinal nos termos oscilatórios. Note que toda a dependência em  $\alpha$  está agora armazenada na temperatura cinética  $T_k$ , e a expressão remanescente é uma forma ligeiramente modificada da susceptibilidade linear encontrada tanto no sistema Lan-gevin, como no nosso modelo com ruído dicotômico.

$$\begin{aligned}
\chi'(s) &= \frac{1}{T} (C'(0) - C'(s)) = \\
&= \frac{1}{T} \left[ 1 - e^{-\frac{\gamma s}{2m}} \sqrt{\frac{-\gamma}{4km - \gamma^2}} \sin \frac{h_s}{2m} \sqrt{4km - \gamma^2} + \cos \frac{h_s}{2m} \sqrt{4km - \gamma^2} \right] = \\
&= \frac{k}{k} \frac{1 - e^{-\frac{\gamma s}{2m}} \sqrt{\frac{-\gamma}{4km - \gamma^2}} \sin [s\Omega] + \cos [s\Omega]}{2m\Omega} \quad (4.89)
\end{aligned}$$

Como as mesmas características mecânicas são compartilhadas pelos dois sistemas, a susceptibilidade linear do nosso modelo dicotômico à ação de um pequeno campo constante tem a mesma forma da expressão acima, e pode também ser avaliada pelo método de Laplace-Fourier, como indicado previamente.

Concluimos que há fatores separáveis na expressão original para a autocorrelação da posição (Eq. (4.78) or Eq. (4.85)) que, no limite  $\alpha \rightarrow \infty$  em que o ruído bimodal assume características de ruído branco, convergem respectivamente para  $T_k$  e para susceptibilidade linear modificada. O primeiro desses dois fatores é a temperatura de resposta mencionada acima :

$$T_r = T_k \frac{\alpha^2 m + k - \gamma^2/m}{\alpha^2 m - \gamma\alpha + k} \quad (4.90)$$

Definimos o fator que determina a relação entre  $T_k$  e  $T_r$  como a susceptibilidade efetiva, seguindo o molde da investigação de relações de flutuação-dissipação. Note que o fator  $(\alpha^2 m - \gamma\alpha + k)$  é onipresente nos resultados da termoestatística da partícula bimodal.

$$\begin{aligned}
\chi_{eff}(s) &= \frac{e^{-\alpha s}}{k} \frac{\gamma k}{\alpha^3 m^2 + \alpha km - \alpha \gamma^2} + \\
&+ \frac{e^{-\frac{\gamma s}{2m}}}{k} \frac{\gamma (\alpha^2 m^2 + 3km - \gamma^2)}{\sqrt{4km - \gamma^2} (\alpha^2 m^2 + km - \gamma^2)} \sin [s\Omega] + \cos [s\Omega] \quad (4.91)
\end{aligned}$$

#### 4.3.4 Sistema Superdissipado

Usando o mesmo método descrito para o caso massivo, agora temos a seguinte variação do modelo:

$$\gamma \frac{dx(t)}{dt} = -kx(t) + \eta_t, \quad v(t) \equiv \frac{dx(t)}{dt} \quad (4.92)$$

que resulta na seguinte auto correlação para a posição:

$$C_x^o(s) = \frac{T}{k} e^{-\frac{ks}{\gamma}} \quad (4.93)$$

Note que a aplicação de uma força constante implica na seguinte fórmula para a susceptibilidade. Esse resultado é equivalente tanto para o sistema superdissipado sob a ação do reservatório bimodal como no caso Langevin, dado que os dois sistemas partilham da mesma configuração mecânica  $\gamma$  e  $k$ :

$$X(t, t+s) = \frac{1}{k} e^{-\frac{ks}{\gamma}} - 1 \quad (4.94)$$

A autocorrelação da posição para a partícula superdissipada em interação com o reservatório dicotômico é:

$$C_x^o(s) = a^2 \frac{ke^{-\alpha s} - \alpha \gamma e^{-\frac{ks}{\gamma}}}{k(k - \alpha \gamma)(k + \alpha \gamma)} \quad (4.95)$$

Usando a Eq. (4.10) podemos reescrever a expressão acima da seguinte forma:

$$C_x^o(s) = T_x \frac{2 ke^{-\alpha s} - \alpha \gamma e^{-\frac{ks}{\gamma}}}{k(k - \alpha \gamma)} \quad (4.96)$$

Aplicando o limite de ruído branco, definido como  $\alpha \rightarrow \infty$  com a temperatura posicional  $T_x$  mantida constante, obtemos:

$$\lim_{\substack{\alpha \rightarrow \infty \\ T_x = \text{const}}} C_x^o(s) = \frac{2T_x}{k} e^{-\frac{ks}{\gamma}} \quad (4.97)$$

Que nos dá a susceptibilidade efetiva:

$$\chi_{eff}^o(s) = \frac{2}{k} e^{-\frac{ks}{\gamma}} \quad (4.98)$$

E a temperatura de resposta:

$$T_r^o = T_x \quad (4.99)$$

Note que esse resultado para a partícula superdissipada é consistente com aquele

para a partícula massiva.

O Limite de ruído branco apresenta muitos aspectos próximos do equilíbrio, tal como a convergência das três medidas de efetividade térmica, a forma funcional dos fluxos energéticos médios através do uso das temperaturas cinética/posicional) [12], e distribuição de probabilidade gaussiana para ambas posição e velocidade, mas ainda assim, não verifica o teorema de flutuação-dissipação

## 4.4 Temperatura efetiva no contexto de máquinas térmicas $T_b$

Conhecemos a célebre definição do ciclo de Carnot que impõe ao sistema quatro fases de evolução dinâmica, duas de caráter isotérmico e duas de caráter adiabático. O trabalho recente de colaboradores [34] sugere que um mesmo ciclo pode ser definido microscopicamente para a evolução temporal de uma única partícula, seguindo o quadro generalizado de Langevin, trata-se de um respaldo proveitoso para o entendimento de micro máquinas presentes na biologia molecular.

Assim, usando um termo de protocolo que divida a evolução dinâmica da partícula nessas mesmas quatro etapas damos logo de saída com a questão da definição da temperatura efetiva, no contexto das etapas isotérmicas. Havendo tantas possíveis abordagens para o desenvolvimento de uma temperatura efetiva, qual seria a mais apropriada ao contexto?

Seguindo a formulação clássica de temperatura devida a Thompson mencionada no começo deste trabalho, a contextualização do conceito de temperatura efetiva pode igualmente estar situada no ciclo da máquina térmica, lembremos em especial a relação mencionada entre as temperaturas empíricas observadas nos reservatórios e as trocas de calor <sup>3</sup>.

Evidentemente as partes adiabáticas do ciclo consistiriam em etapas em que o termo estocástico no modelo, associado ao reservatório seria desligado, mantendo-se apenas a evolução determinística sem a injeção energética promovida pelo reservatório.

$$m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = -\gamma \frac{dx(t)}{dt} - kx(t) - \zeta_t - k_L(x - L) \quad (4.100)$$

---

<sup>3</sup>ver capítulo 1.

Onde a variável  $L$  é dependente do tempo e corresponde a posição de um pistão que varia segundo um regime oscilatório, definido por um valor médio  $L_m$ , uma variação

$$L(t) = L_m + \frac{\Delta L}{2} \cos(\Omega t) \quad (4.101)$$

A resolução do sistema no espaço de Fourier-Laplace toma um aspecto distinto do anterior, advindo da presença do protocolo associado à atividade do pistão, obtém-se:

$$\tilde{x}(s) = \frac{k_L}{R(s)} \tilde{L}(s) + \frac{\zeta(s)}{R(s)} \quad (4.102)$$

O trabalho exercido pelo pistão sobre o sistema ao longo de um ciclo terá a seguinte forma:

$$W_{ciclo} \propto \int dt \dot{L} \langle x(t) \rangle \quad (4.103)$$

Podemos então calcular como são as potências injetada e dissipada pela partícula nesse contexto, e delas derivar uma relação para uma temperatura efetiva  $T_b$ , de forma similar ao raciocínio desenvolvido por Thomson quando no intuito de definir uma escala absoluta de temperatura.

Obtendo a média das potências injetada e dissipada por ciclo, estabelecemos a temperatura a partir da razão entre o calor consumido pelo sistema nas etapas equivalentes às fontes fria e quente.

Com definição de eficiência para o ciclo de Carnot, teríamos  $W = Q_H - Q_C$ , onde  $Q_C$  e  $Q_H$  seriam a troca de calor com os reservatórios frio e quente, respectivamente; como nossa partícula fica ligada a apenas um reservatório, transformamos a eficiência na razão entre o calor total produzido pelo reservatório ao longo de um ciclo. Dado que o tempo de ciclo fica definido pela trajetória do pistão  $\tau = 1/\Omega$  temos;

$$Q = \int_0^{\tau} (J_{inj} - J_{dis}) dt \quad (4.104)$$

Assim, efetuar o cálculo da energia total acumulada pelo sistema fica equivalente ao

cálculo do calor trocado entre fonte quente e fonte fria no caso clássico. Por fim, a temperatura efetiva associada a situação isotérmica do ciclo pode ser derivada:

$$\eta = \frac{W}{Q} = 1 - \frac{T_b}{T} \quad (4.105)$$

Isto é:

$$T_b = T \left( 1 - \frac{W}{Q} \right) \quad (4.106)$$

Note que essa definição garante a convergência do valor de  $T_b$  de volta a temperatura cinética  $T$  se eliminamos o termo  $L$ , correspondente a interação do pistão com a partícula, dado que o trabalho  $W$  fica a igual a zero.

## 4.5 Comparação das abordagens de temperatura efetiva

Nosso trabalho, até o presente momento, apresentou uma análise sobre um conjunto de definições de temperatura efetiva para equações de Langevin generalizadas em contato com ruído dicotômico. Apresentamos assim uma descrição quantitativa de três aspectos fundamentais da temperatura que podem ser identificados em sistemas de não equilíbrio, e identificamos o limite assintótico onde o ruído dicotômico apresenta comportamento comparável ao de um reservatório gaussiano tradicional, atingindo a convergência das três medidas efetivas  $T_k$ ,  $T_i$  and  $T_r$  para o modelo. Demonstramos que é possível aprofundar o entendimento acerca de aspectos fundamentais com que a temperatura efetiva se manifesta suas propriedades no contexto de não-equilíbrio, dado um conjunto de modelos simples que resumem os efeitos centrais conhecidos por serem inerentes a própria definição da temperatura de equilíbrio.

Desenvolvendo a abordagem quasi-canônica, através da qual comparamos diferentes realizações do sistema fixando como referência a temperatura cinética  $T_k$ , apresentamos uma generalização de não equilíbrio do ensemble canônico tradicional, que, por sua vez, fixa a temperatura de equilíbrio  $T$ . Essa abordagem oferece um fundamento simples para o desenvolvimento de relações uma a uma entre as

diferentes medidas efetivas.

O análogo da temperatura no caso de não equilíbrio é exatamente estabelecido pela coleção de valores, cada um representando uma faceta termoestatística do problema: sua energia cinética média e os fluxos energéticos ( $T_k$ ), a resposta da energia média do sistema a mudanças na informação contida no mesmo ( $T_i$ ), e a resposta efetiva do sistema associada com sua autocorrelação ( $T_r$ ).

A mesma equivalência entre as três abordagens é também atingida no regime superdissipado, o que indica que a aproximação ao equilíbrio pode ser forçada sobre um sistema pela aplicação de um dado conjunto de vínculos sobre os parâmetros mecânicos, no caso superdissipado especificamente,  $m/\gamma \rightarrow 0$ . É também crucial afirmar que esses resultados demonstram que existem formas alternativas de medir a aproximação ao equilíbrio. Em vez de limitar a quantificação da aproximação ao equilíbrio à aplicação da divergência de Kullback-Leibler medindo a distância dos histogramas de não-equilíbrio e a distribuição de Maxwell, a comparação entre as temperaturas efetivas  $T_k$ ,  $T_r$  and  $T_i$  também apresenta uma métrica relevante para a proximidade de um sistema ao equilíbrio, dado que, sem a convergência dessas medidas, o sistema está em não-equilíbrio.

No modelo massivo bimodal, nossos resultados mostram uma hierarquia dependente do sistema entre os valores das três propostas,  $T_k < T_r < T_i$  com todas elas convergindo para o mesmo valor no limite de ruído branco. Esse ordenamento é associado a distribuição de probabilidade de  $x$  e  $v$  da partícula sob a influência do ruído dicotômico [12], mais exótica que a resposta e a correlação, que por sua vez basicamente preservam sua forma Langevin usual, ainda que modificadas pela presença da cor do ruído.

Observando a figura 4.11 nota-se a presença de uma região negativa para a temperatura intensiva, isto é uma região do espaço de parâmetros do sistema em que um aumento de entropia no sistema resulta em queda da energia média total. Essa situação se estabelece quando é possível solucionar o sistema por meios quasideterminísticos. Assim como o ruído dicotômico, reservatórios gasosos muito rarefeitos podem também apresentar  $T_i < 0$ .

Identificamos o ponto crítico  $\alpha^*$  no espaço de parâmetros em que  $T_i$  fica indefinida, e o sistema perde a relação entre energia e entropia, então nesse conjunto particular de parâmetros, o ruído dicotômico torna a energia do sistema indiferente a variações no espaço de configuração, note também que esse mesmo resultado é

transferível para o ruído gaussiano colorido.

Além disso, a Eq. (2.10) contempla uma ampla gama de setups experimentais [35], considerando trabalho prévio em reservatórios de não equilíbrio [36], antecipa-se que as diferenças entre as diversas temperaturas efetivas serão enfatizadas quando os potenciais confinantes apresentam não linearidades, como no modelo IV, dado que a presença dessas não linearidades provavelmente ativa cumulantes de alta ordem do ruído dicotômico  $\zeta_t$ , fazendo com que os mesmos ajam como fontes suplementares de energia.

Mencionando mudanças de informação e energia no sistema, recordamos que a eficiência do trabalho efetuado por um ciclo térmico onde a injeção energética no sistema é produzida por reservatório com autocorrelação evanescente comparável aquela observada no caso dicotômico pode ser igualmente utilizada como a definição de uma quarta temperatura efetiva, que batizamos antecipadamente de  $T_a$ . Esse tipo de abordagem foi desenvolvido na Ref. [37], analisando um ciclo quântico de Otto.

Essa quarta dimensão do conjunto de temperaturas efetivas, assim como as outras, deve exibir a propriedade de convergência para o valor da temperatura de equilíbrio térmico, na medida em que o sistema se aproxima desse estado. ao estudo dos diversos aspectos da temperatura

Note que em sistemas descritos por equações de Langevin generalizadas já previamente mencionadas, investigações semelhantes podem ser desenvolvidas em sistemas de não-equilíbrio para os quais temperaturas efetivas podem ser consideradas nomeadamente sistemas granulares [36], dinâmicas de fluidos ativados [38], turbulência [39], fluidos simples com uma direção preferencial de fluxo [40], vórtices interagentes em supercondutores [41], modelos de redes genéticas [42], processos de auto-organização biológica [43] e catracas [16] ou mesmo em finança como mostraremos mais à frente.

Por fim, é importante ressaltar como o uso das três temperatura efetivas esclarece a série de propriedades esperadas da grandeza temperatura, que no entanto sequer está definida na situação de não equilíbrio em que os modelos estudados nesse trabalho se encontram. Uma forma de lidar com a multiplicidade dessas propriedades cogitada como resposta para a definição final da elusiva temperatura de não-equilíbrio é a conjunção das várias temperaturas efetivas em um vetor que articularia as diversas propriedades de temperatura efetiva em cada uma de suas dimensões.

$$\vec{T}_{tot} = (T_k, T_i, T_r) \quad (4.107)$$

Esse objeto matemático corresponderia a coleção de valores que procuram representar as características complementares que se espera da temperatura no equilíbrio. Mantendo-se a ideia da convergência para o equilíbrio, é possível derivar algumas propriedades basilares como por exemplo:

$$\lim_{\alpha \rightarrow \infty} \vec{T}_{tot} = (1, 1, 1)T_k \quad (4.108)$$

A proposta de investigar diversas formulações da temperatura efetiva em caso de não-equilíbrio desenvolvida no contexto dos modelos aqui estudados repercutiu em publicações ao redor do tema de eficiência energética para partículas ativas [44], assim como estudos recentes de coloides ativos sujeitos a ruído dicotômico [45].

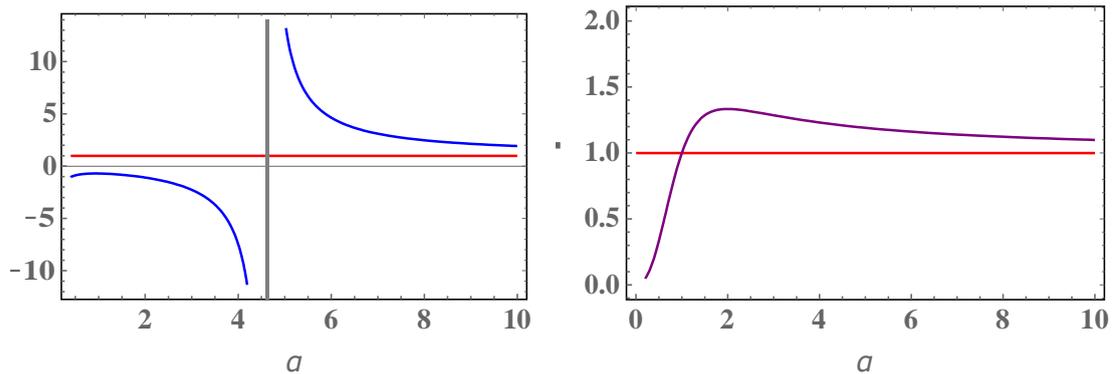


Figura 4.11: Temperaturas efetivas para o modelo massivo, Painei esquerdo: valores para  $T_i$  são indicados pela linha azul representada junto da Temperatura Cinética mantida constante na linha vermelha. A linha vertical corresponde ao valor crítico  $\alpha^* = 4.611 \dots$ . Painei direito: valores para  $T_r$  são indicados pela linha roxa, também em contraponto com o valor constante de  $T_k$  em vermelho. Os dois gráficos são feitos com a seguinte configuração de parâmetros mecânicos  $m = k = \gamma = 1$ . A temperatura cinética é mantida constante no valor 1. [24]

# Capítulo 5

## Conclusões e Perspectivas Futuras

### 5.1 A Temperatura e as Temperaturas

Caracterizar a termicidade ou atermicidade de um determinado sistema, corresponde a entender como se relacionam conceitos de energia média, resposta e configuração estatística de um determinado estado cuja distribuição persevera no tempo. O conjunto completo de ferramentas teóricas aqui explorado, que buscam entrelaçar essas três características essenciais do estado estacionário, articulam três facetas fundamentais do que deve ser a análise de um estado estacionário para qualquer problema em séries temporais. Dependendo do enfoque da análise a ser feita, uma das três temperaturas efetivas mencionadas ao longo do texto (nomeadamente  $T_k$ ,  $T_i$ ,  $T_r$ ) pode caracterizar a "temperatura efetiva" de maneira mais apropriada. Fundamentalmente, o que o presente trabalho propicia é uma medida múltipla para a distância que o sistema estudado se encontra de uma situação de equilíbrio térmico.

Em termos de alinhamento histórico com o debate produzido ao redor da temperatura considero necessário o posicionamento da discussão produzida quanto a investigação de implicações das premissas usadas pela formulação clássica da termodinâmica, nomeadamente as de equilíbrio térmico, em especial a convergência dos diversos aspectos que estruturam as diferentes abordagens para temperatura efetiva aqui discutidas. Como mencionado anteriormente, acreditamos que a própria definição de equilíbrio térmico é enriquecida com métricas que as temperaturas efetivas apresentam para a aproximação ao estado de equilíbrio.

Assim, a referência do trabalho de Boltzmann quando da definição da teoria cinética de gases e a formulação do teorema-H anima o presente esforço teórico com o seguinte fio condutor: se a temperatura é uma grandeza emergente de um sistema onde uma série de premissas deve ser verificada (nomeadamente, grande quantidade de partículas, ergodicidade das interações, etc), quais propriedades da temperatura como fenómeno emergente podem ser desassociadas da situação de equilíbrio e des-tacadamente associadas a cada uma dessas premissas?

Em outras palavras, o entendimento mais elementar da temperatura como energia média das moléculas em constante entrecchoque em um gás pode ser igualmente generalizado para uma situação não térmica por simples transporte da operação estatística da média, entretanto o mesmo não se pode afirmar da temperatura de configuração, por exemplo em uma situação em que a autocorrelação do ruído não assuma o forma evanescente observadas na expressão para a autocorrelação da posição da eq.(4.85) ou em uma situação de não convergência da distribuição associada a velocidade e posição da partícula. Assim, observamos exemplos em que não se pode esperar um quadro completo quanto às três temperaturas efetivas aqui discutidas.

Se compreendemos o comportamento térmico de um sistema como um conjunto de propriedades que emergem de interações múltiplas em contínuas variações quanto a disposição material (posições, momentos e massa) das partículas envolvidas, igualmente podemos em uma situação atérmica explorar esse conjunto amplo de possíveis interações na sua massa estatística e estabelecer parâmetros segundo as duas situações são comparáveis.

Da mesma forma com que físicas distintas são exploradas como implicação de mecanismos teóricos alternativos que descrevem interações fundamentais, aqui também se esboça uma discussão ao redor dos ganho ou perdas teóricas apresentada pela introdução do conceito de temperaturas efetivas.

Por um lado o uso de temperaturas efetivas pode ser considerado equivocado na medida em que desassocia a temperatura do conceito de equilíbrio térmico, por outro, amplia-se qualificando como efetiva a medida de temperatura podemos completar a caracterização do comportamento de um sistema do ponto de vista termoestatístico, ressaltando em cada temperatura efetiva um aspecto importante e indispensável do comportamento que um sistema estocástico vem a apresentar no estado estacionário.

De forma sintética o trabalho procurou investigar como o comportamento ter-

moestatístico de um sistema submetido a reservatórios exóticos se compara a um sistema clássico submetido a reservatórios normais. A comparação é feita tendo como mecanismo principal o cálculo analítico da estatística associada aos observáveis físicos da partícula que protagoniza o modelo, com um foco tanto na análise dos fluxos energéticos quanto na produção de entropia associada com distribuição estatística da partícula no estado estacionário.

É importante notar que para todo cálculo analítico corresponde uma simulação numérica cujo propósito é validar o cálculo efetuado analiticamente. As simulações numéricas são feitas em uma série de conjuntos de parâmetros termomecânicos distintos, em uma abordagem teórica que procura ser mais robusta pelo apoio de um experimento computacional que valida o comportamento analítico esperado. Note que toda a abordagem analítica aqui desenvolvida tem seu aspecto de maior sofisticação no tratamento das equações estocásticas a partir do espaço de Fourier-Laplace e cálculo de resíduo estatístico por meio de integrações no plano complexo.

Um dispositivo teórico importante de ser discutido, por seu uso ter centralidade nos resultados associados a temperatura intensiva é o uso de expressões ersatz, ou seja, de expressões teóricas que se articulam como ajustes teóricos sobre o aparato computacional oferecido pelas simulações. A dificuldade de se escrever uma expressão fechada para a entropia de um sistema de uma única partícula encontra uma possível via alternativa na abordagem aqui apresentada, que em sua simplicidade permite não só a obtenção de uma expressão que corretamente prevê a entropia associada ao estado estacionário de um sistema Langevin generalizado sob a influência de ruído bimodal, mas também sugere uma similitude com a fórmula clássica de Boltzmann, o que conecta em um sentido insuspeito a teoria da mecânica estatística para várias partículas com a situação unidimensional aqui tratada.

Os resultados indicam que as propriedades associadas à temperatura no equilíbrio térmico emergem e convergem em ritmos distintos em direção O entendimento do conceito de temperatura em um espectro mais amplo do que o oferecido na concepção canônica oferece uma alternativa para a concepção da própria conceito de equilíbrio, e sua correspondente formulação em termos técnicos.

Desta forma pretendemos enfim sintetizar os resultados mais importantes aqui discutidos em forma itemizada, a sequenciar ponto a ponto os resultados e as implicações centrais das análises aqui demonstradas.

- Para equações de Langevin generalizadas com reservatório de classe externa do tipo ruído gaussiano colorido é possível aproximar a função de grandes desvios para os fluxos energéticos  $L(J)$  em primeira ordem usando sistema proxy com reservatório de classe interna que corresponde a um sistema efetivo em primeira ordem, ao qual está associada uma temperatura efetiva, definida por esse mapeamento.
- A temperatura efetiva  $T^*$  que emerge do mapeamento no caso da equação de Langevin Generalizada sobre Ruído Gaussiano colorido é proporcional ao valor obtido para energia cinética média:  $T^* = 2 \langle K \rangle = m \langle v^2 \rangle$
- Seguindo o resultado apresentado para o caso gaussiano colorido, uma temperatura efetiva  $T_k$  é definida para o caso da equação de Langevin Generalizada sob ruído dicotômico, nessa situação, as substituições que  $T^*$  tem a mesmo alcance que substituições feitas por  $T_k$  replicar o mesmo resultado obtido para o caso Gaussiano colorido.
- Equações de Langevin generalizadas sob ruído dicotômico (caso ruído bimodal) podem replicar o comportamento termoestatístico da equação de Langevin canônica em uma situação de limite gaussiano. Essa situação é caracterizada pelo limite  $\lim_{\alpha \rightarrow \infty} |T_k$  com a temperatura efetiva  $T_k$  mantida constante, nesse limite as distribuições estacionárias exóticas do caso dicotômico convergem para gaussianas e o sistema assume o comportamento da equação de Langevin canônica.
- Dada a existência de um limite gaussiano, onde temos distribuições gaussianas correspondentes à situação observada em equilíbrios térmicos, verificamos como outros dois aspectos fundamentais da temperatura no equilíbrio se comportam na situação não-gaussiana e de não equilíbrio apresentada pelo caso bimodal, observamos assim, como essas outras temperatura efetivas convergem para o valor da temperatura de equilíbrio no limite gaussiano. Temperatura intensiva ou de configuração  $T_i$  e Temperatura de resposta  $T_r$  são explorados nesse contexto.
- A temperatura intensiva  $T_i$  é definida baseada na relação de par variável intensiva e variável extensiva que a temperatura desempenha no termo de calor que

figura na primeira lei da termodinâmica, nomeadamente  $Q = T\Delta S$ . Assim a temperatura é entendida como a derivada parcial  $\frac{\partial S}{\partial E}_{T_k}$  efetuada sobre curvas isotérmicas do ponto de vista da Temperatura cinética  $T_k$ . Essa definição conecta com o limite gaussiano e temos assim  $\lim_{\alpha \rightarrow \infty} T_i = T_k$

- A temperatura intensiva  $T_i$  possui um valor crítico  $\alpha^*$ , uma configuração do reservatório em que mudanças na entropia do sistema efetuadas sobre a curva isomarcioniana não tem relação definida com mudanças em sua energia média.
- A temperatura intensiva  $T_i$  possui um valores positivos acima de  $\alpha^*$  e negativos abaixo
- A temperatura de resposta  $T_r$  é definida baseada em uma relação de flutuação e dissipação efetiva construída a partir das funções de autocorrelação para a posição, onde se define de forma correspondente uma função resposta efetiva  $R_{eff}$ . A convergência  $T_r = T_k$  é observada no limite gaussiano
- No caso de superdissipado  $m/\gamma \rightarrow 0$ , obtemos também a convergência das três medidas  $T_k = T_i = T_r$
- O objeto matemático  $\mathcal{T}_{tot} = (T_k, T_i, T_r)$  coleciona diferentes aspectos de temperatura efetiva, e pode ser usado como uma medida múltipla para a aproximação ou distanciamento do equilíbrio térmico, dada a convergência ou divergência dos seus componentes.

## 5.2 Desdobramentos desenvolvidos durante a pesquisa

Em linha com a afirmada necessidade de se explorar o conceito de temperatura para além de sua definição estrita na termodinâmica, nesta seção introduzimos a discussão ao redor de possíveis propagações da ideia de temperatura efetiva e trabalho preliminar que foi desenvolvido ao redor destes tópicos.

Uma das frentes de trabalho que desenvolvi envolveu alguns resultados parciais obtidos no contexto do processamento de séries de preços para ações negociadas na Bovespa.

Esta abordagem foi principalmente baseada em trabalhos ao redor do conceito de turbulência e transferência de entropia entre diferentes escalas temporais. Como será mais elaborado na próxima seção, o conceito de turbulência está largamente associado a evolução da distribuição da probabilidade, que aparece conectada ao Langevin Approach de Van Kampen na forma da equação de Fokker-Planck [5], cujos coeficientes podemos derivar a partir da expansão de Kramers-Moyal.

### 5.2.1 De Kramers-Moyal a Equação de Evolução da Probabilidade

A caracterização completa das propriedades estatísticas de um conjunto de dados pode ser efetuada pela determinação das densidades de probabilidade conjuntas associadas a evolução das distintas variáveis ( $x_i$ ) envolvidas.

Em outras palavras obtendo-se a distribuição:

$$\rho_N(\Delta x_1, \Delta t_1; \Delta x_2, \Delta t_2; \dots; \Delta x_N, \Delta t_N) \quad (5.1)$$

E a respectiva função geradora, isto é, a transformada de Fourier da Distribuição, cuja expansão polinomial descreve todos os momentos estatísticos associados a o comportamentos das variáveis  $x_i$  estudadas;

$$\tilde{\rho}_N(\Delta x_1, \Delta q_1; \dots) = \int \exp -i \sum t_i q_i \rho_N(\Delta x_1, \Delta t_1; \dots) \mathbf{Y} dq_i \quad (5.2)$$

Pode-se também de imediato derivar todas as correlações, detendo a totalidade da informação estocástica do problema [21].

No caso de processos aos quais se aplica a propriedade de Markov, isto é processos em que temos:

$$P(x_i | x_1, x_2, \dots, x_{i-1}) = P(x_i | x_{i-1}) \quad (5.3)$$

, é possível ainda inserir uma simplificação à densidade  $\rho_N(\dots)$ , expressando-a como o produto de probabilidades condicionais duas a duas variáveis  $x_i, x_{i+1}$ , dessa

manipulação da assumpção markoviana podemos escrever a equação de Chapman-Kolmogorov;

$$p(\Delta x_2, \Delta t_2 | \Delta x_1, \Delta t_1) = \int p(\Delta x_2, \Delta t_2 | \Delta x_i, \Delta t_i) p(\Delta x_i, \Delta t_i | \Delta x_1, \Delta t_1) d\Delta x_i \quad (5.4)$$

Dado um único incremento da variável  $x$  podemos escrever Chapman-Kolmogorov na seguinte forma;

$$p(x, t + \tau) = \int T(\Delta x | x - \Delta x, t) p(x - \Delta x, t) d\Delta x \quad (5.5)$$

Expandindo o integrando em  $\Delta x$  encontra-se;

$$p(x, t + \tau) = p(x, t) + \int d\Delta x \sum_{k=1}^{\infty} (-\Delta x)^k \frac{1}{n!} \frac{\partial^k T(\Delta x | x, t) p(x, t)}{\partial x^k} \quad (5.6)$$

Assim são definidos os momentos de Kramers-Moyal;

$$M^{(k)}(x, \Delta x, t) = \frac{1}{\tau} \int d\Delta x (\Delta x)^k T(\Delta x | x, t) \quad (5.7)$$

Estando interessados na transferência de informação que o fenômeno da turbulência efetua entre diferentes escalas de incrementos em uma série temporal, desta forma definiremos o valor dos incrementos dessa série no escopo aplicamos a seguinte notação: sejam  $u_r$  os incrementos associados a uma escala  $r$ ;

$$u_r = x(t) - x(t - r\tau) \quad (5.8)$$

da definição de  $u_r$ , podem ser definidos os momentos de Kramers-Moyal escrever;

$$M^{(k)}(u_r, \Delta r, r) = \frac{1}{\Delta r} \int_{-\infty}^{\infty} (u_r - u_{r+\Delta r})^k p(u_{r+\Delta r} | u_r) du_{r+\Delta r} \quad (5.9)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} (u_r - u_{r+\Delta r})^k p(u_{r+\Delta r} | u_r) du_{r+\Delta r} \quad (5.10)$$

$$= \langle (u_r - u_{r+\Delta r})^k \rangle_{u_{r+\Delta r}} \quad (5.11)$$

Assim, retornando a equação Eq. (5.6), usamos a definição dos momentos de Kramers-Moyal para chegar à equação de Kramers-Moyal em sua versão discreta:

$$\frac{1}{\Delta r} p(u_{r+\Delta r}, t + \tau) - p(u_r, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{M_n(u_r, \Delta r, t) p(u_r, t)}{\partial u_r^n} \quad (5.12)$$

No limite  $\tau \rightarrow 0$ , obtemos a versão contínua da equação acima, definindo-se os coeficientes de Kramers-Moyal a partir dos respectivos momentos:

$$D^{(k)}(u_r, r) = \lim_{\Delta r \rightarrow 0} \frac{1}{k! \Delta r} M^{(k)}(u_r, \Delta r, r) \quad (5.13)$$

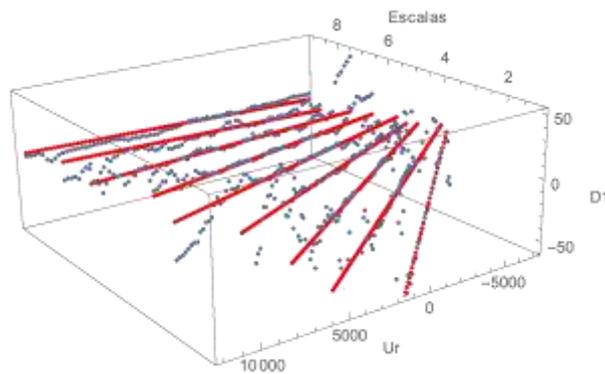


Figura 5.1: Estimando o primeiro coeficiente de Kramers-Moyal para drift  $D_1$  com séries de incremento  $u_r$  calculadas a partir de valores reais do índice IBOV entre 1/1/2014 e 1/1/2014 em diversas escalas  $r$  diferentes. Note-se que o valor de  $D_1$  é dado pela inclinação do ajuste linear obtido sobre os pontos dos planos definidos por escala  $r$  constante.

Assim alcançamos a expansão de Kramers-Moyal:

$$-r \frac{\partial}{\partial r} p(u_r | u_{r+\Delta r}) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x} \quad (5.14)$$

E em seguida podemos extrair da expansão acima a equação de Fokker-Planck correspondente a esse mesmo limite  $\tau \rightarrow 0$ , que pode ser entendida como um truncamento da expansão de Kramer-Moyal até segunda ordem refletindo a predominância dos

dois primeiros momentos de Kramers-Moyal.

$$\frac{\partial}{\partial r} p(u_r|u_{r'}) = D_1(u_r, r) \frac{\partial}{\partial u} p(u_r|u_{r'}) + D_2(u_r, r) \frac{\partial^2}{\partial u^2} p(u_r|u_{r'}) + \sum_n D_n(u_r, r) \frac{\partial^n}{\partial u^n} p(u_r|u_{r'}) \quad (5.15)$$

Aqui note-se como se procura aproximar a dinâmica específica associada a cada escala temporal dentro do conjunto de escalas pretendido a se observar na série temporal analisada. Tendo uma equação para a evolução da distribuição da probabilidade associada a cada escala  $r$  podemos estudar cada uma dessas dinâmicas e produzir métricas para a transferência de informação que ocorre entre diferentes escalas como se verá em maior detalhe adiante.

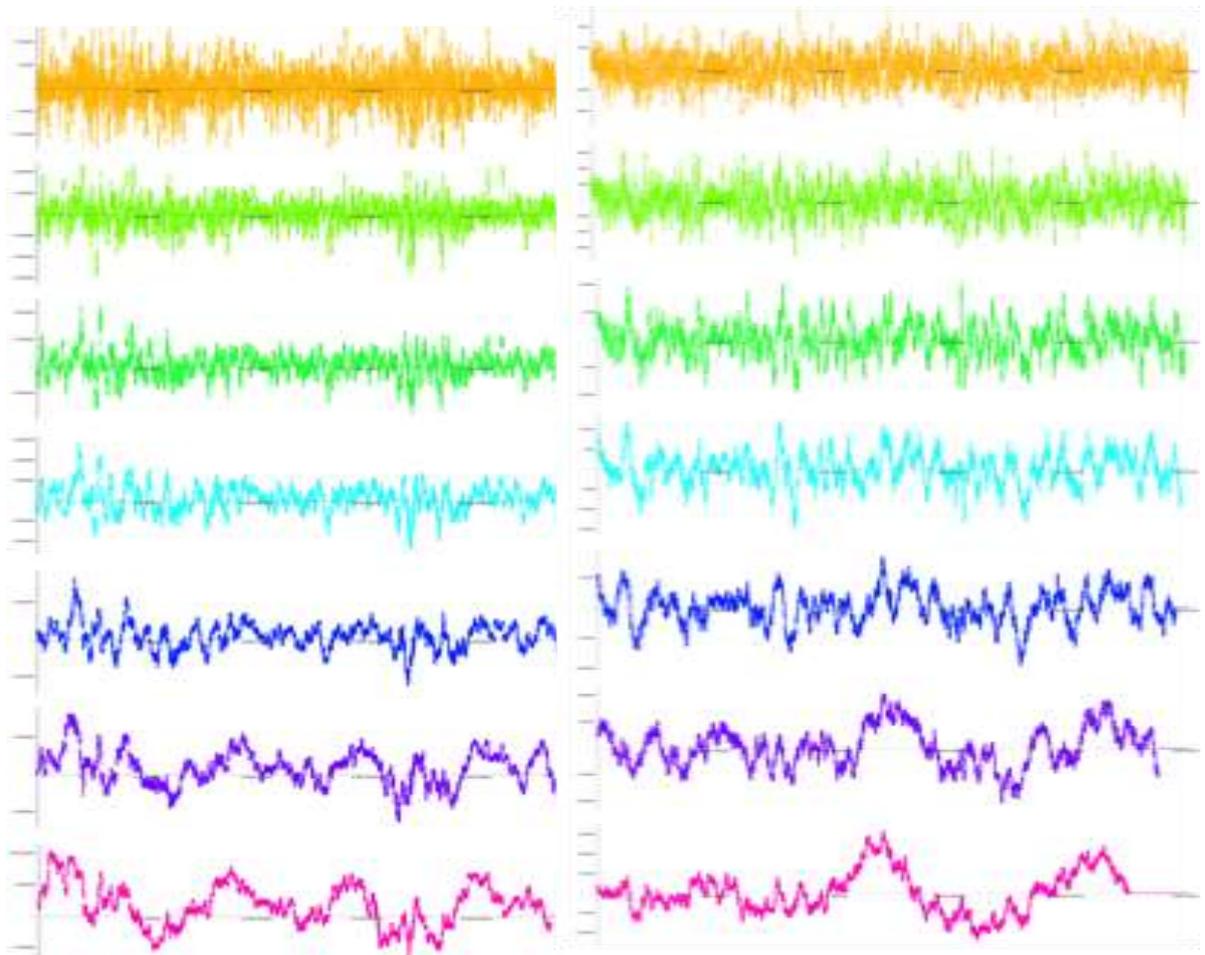
Na figura 5.2 A maior escala  $r = 5000$  aparece no topo do gráfico em amarelo e descendo vamos obtendo sucessivamente os valores menores de  $r$ . Observe-se que os incrementos  $u_r$  em escalas temporais mais curtas mostram com mais clareza as tendências associadas as curvas em quanto os incrementos escalas longas tem o perfil mais descorrelacionados, exibindo um perfil mais ruidoso.

Este comportamento está associado a perda de compatibilidade entre a escala  $r$  de análise do incremento e a escala típica da dinâmica observada nos dois casos. A escolha de granularidade do gráfico da série temporal para os preços, assim como a escolha de parâmetros mecânicos e condições iniciais da simulação de Langevin demonstrada buscou aproximar os dois comportamentos, com algum sucesso do ponto de vista heurístico. A ideia da visualização é mostrar o caminho feito entre as escalas modificando o tipo de comportamento observado até um ponto de equiparação da curva observada a uma série de ruído gaussiano.

## 5.2.2 Relações de flutuação

A partir do estudo das dinâmicas para equação de evolução da distribuição da variável em diversas escalas é natural enveredarmos para o conceito das relações de flutuação. Como veremos, o estudo de relações de flutuação tangencia o escopo dos desdobramentos ao redor do conceito de temperatura efetiva, mas em um campo aplicado a econofísica, seguindo a linha do raciocínio apresentado na seção anterior.

Aqui voltamos à discussão de produção de entropia, que tem implicações imediatas sobre o tópico da temperatura intensiva. Pode-se afirmar que a segunda lei



(a)  $u_r$  para valores reais do índice IBOV (b)  $u_r$  para valores simulados de um processo Langevin

Figura 5.2:  $u_r$  para  $r \in \{200, 500, 1000, 2000, 4000, 8000, 16000, 20000, 25000, 50000\}$

da termodinâmica expressa fundamentalmente a irreversibilidade na evolução dos processos físicos.

As relações de flutuação tem como objetivo refinar a expressão da segunda lei em um sentido estatístico, dado que, se a segunda lei afirma que em uma escala global é preciso que a entropia aumente, é possível que se observem em escalas menores movimentos reversos, em que há consumo de entropia<sup>1</sup>, sem que haja uma verdadeira violação da segunda lei, na medida em que se garante ainda o irreversibilidade do processo na escala global. As relações de flutuação dão conta desse aspecto

<sup>1</sup>Produção de entropia negativa, custo entrópico ou até para algumas fontes, o fenômeno da sintropia. [47]

distribuído dos fenômenos. investigam como a produção de entropia se dispersa estatisticamente no espaço do sistema analisado.

Note-se, a orientação privilegiada das transformações físicas encontra-se em contraponto com a mecânica clássica, cujas equações são passíveis de reversão temporal como apontou Lochsmidt em seu célebre paradoxo.

Assim, observamos que a descrição de um dado sistema físico consiste necessariamente da definição de uma certa escala espaço-temporal, a escala do sistema, ou objeto de estudo. A definição desta escala está usualmente relacionada diretamente com a possibilidade de fazerem-se observações adequadas à ela pelos instrumentos disponíveis, mas pode também refletir a limitação de escopo da teoria que se pretende aplicar para produzir-se interpretação dos dados obtidos por medição.<sup>2</sup>

O estabelecimento de relações de flutuação passa então pelo balanço probabilístico entre a trajetória no espaço de fase de um observável e a dita trajetória reversa. Nomeadamente podemos definir uma medida de irreversibilidade para um dado processo representado pela variável multidimensional  $X$  nos seguintes termos:

$$I(X) = \log \frac{P^F(X)}{P^R(X)} \quad (5.16)$$

Onde o termo  $P^F$  representa a probabilidade da variável evoluir no sentido entrópico e  $P^R$  designa a probabilidade da trajetória reversa. Analogamente, a variável  $\bar{x}$  consiste na realização reversa da variável  $x$ . Designando o operador de reversão temporal como  $\hat{T}$  Dada a evolução da variável  $x$  conduzida por um protocolo  $\lambda$  temos as relações:

$$\hat{T}x = \bar{x} \quad , \quad \hat{T}p = -p \quad , \quad \hat{T}\lambda = \bar{\lambda} \quad (5.17)$$

Sob uma aproximação que reduz ambas trajetórias a uma sequência de  $n$  passos é possível reduzir as trajetórias ao produto de diversas etapas e, usando a equação de Fokker-Planck, demonstrar que a medida de irreversibilidade apresentada assim é aparentada da própria produção entrópica do sistema;

$$I(X) = \log \frac{P^F(x)}{P^R(x)} = \log \frac{P_0(X_0)}{P_f(X_n)} \prod_{i=1}^n \frac{P(X_i|X_{i-1}, \lambda(t_i))}{P(\hat{T}X_{i-1}|\hat{T}X_i, \lambda(t_i))} \quad (5.18)$$

<sup>2</sup>Por exemplo as Físicas distintas e irreconciliáveis (até a data de publicação desta tese) que descrevem fenômenos nas escalas microscópica e cosmológica.

Para o caso canônico da partícula Langevin unidimensional, dada a forma gaussiana das distribuições de equilíbrio e também dos propagadores temporais que podem ser usados para operar a evolução temporal do sistema [33], é possível mostrar que:

$$\frac{P(v_i|v_{i-1})}{P(\hat{T}_{v_{i-1}}|\hat{T}_{v_{i-1}})} = -\frac{1}{k_B} \frac{m}{2T_i} (v_i^2 - v_{i-1}^2) \quad (5.19)$$

Note-se a ocorrência da temperatura nessa expressão, conectando diretamente energia e entropia do sistema, nesse contexto diretamente associado a ao aspecto da intensividade e temperatura de configuração, levantamos esse ponto pelo interesse que se tem de desdobrar esse tipo de ferramental teórico para estados estacionários em que não existe stritu sensu a situação de equilíbrio como discutido repetidamente no presente trabalho.

Observando-se que a variação de calor interna do sistema  $\Delta Q$  estará associada à variação de energia cinética da partícula presente no lado direito da equação acima. e utilizando a relação entre a variação de calor e a geração de entropia  $\Delta Q = T \Delta S$ , obtemos

$$\frac{P(v_i|v_{i-1})}{P(-v_{i-1}|-v_{i-1})} = -\frac{\Delta Q_{meio}}{T} = \Delta S_{meio} \quad (5.20)$$

Além disso temos que;

$$\frac{P_0(v_0)}{P_f(v_n)} = -(\log(P(v_0, t_0)) - \log(P(v_f, t_f))) \quad (5.21)$$

Dado que,

$$\langle S \rangle_{sys} = -k_B \int dv P(v, t) \log(P(v, t)) \quad (5.22)$$

Podemos identificar os dois fatores no interior do logaritmo no lado direito da equação Eq. (5.18) com as duas contribuições para a produção entrópica destacadas

nas equações Eq. (5.20) e Eq. (5.22) obtendo finalmente

$$\Delta S_{tot} = \Delta S_{sis} + \Delta S_{meio} = k_B \log \frac{P^F(\mathcal{X})}{P^R(\mathcal{X})} \quad (5.23)$$

A expressão acima reproduz a expressão escrita no capítulo 2 para descrever a relação entre entropia do sistema e entropia do meio, eq. (2.48), sendo a entropia do meio aquela advinda da injeção energética ( $\Delta S_{sis} = \Psi$ ) enquanto a entropia do sistema aquela advinda da dissipação energética ( $\Delta S_{meio} = \Pi$ ), dando conta assim dos dois fluxos energéticos que conduzem a esbilização do sistema no estado estacionário quando de sua equalização.

### 5.3 Produção entrópica e Integral Fluctuation Theorem

Sabemos da termodinâmica clássica o viés entrópico que orienta os processos naturais no sentido positivo da produção dessa grandeza elusiva, cuja interpretação perpassa múltiplas perspectivas e inclusive contempla definições matemáticas variadas (como casos mais expressivos a fórmula clássica de Shannon e a mais moderna entropia  $S_q$  de Tsallis [10]). Como discutido acima, o resultado  $\Delta S > 0$  está condicionado não só ao limite termodinâmico mas também à uma escala temporal própria ao processo ou sistema estudados.

Sabe-se que no contexto microscópico e em escalas temporais curtas pode-se observar o fenômeno da produção de entropia negativa, inclusive no contexto de séries temporais esse perfil *síntropico* corresponde a uma atividade anômala na série. Já que não se tem garantia de uma perpétua produção positiva de entropia, deve-se observar algum balanço entre ambos os possíveis perfis entrópicos que garanta na macroescala a validação da segunda lei.

Retrabalhando a equação Eq. (5.23) podemos obter o Teorema de flutuação

integral, exponenciando e efetuando a média temos;

$$e^{-\Delta S_{tot}(X)/k_B} = \int dX P^F(X) e^{-\Delta S_{tot}(X)/k_B} = \int dX P^F(X) \frac{P^R(X)}{P^F(X)} = 1 \quad (5.24)$$

$$e^{-\Delta S_{tot}(X)/k_B} = 1$$

## 5.4 Igualdade de Jarzynski

A partir do trabalho desenvolvido por Jarzynski [48], lançando mão da relação de flutuação, também atribuída a Crooks [49], caracterizando o estado de reversibilidade microscópica. A trajetória alinhada com a produção entrópica é exponencialmente mais provável que sua contraparte reversa:

$$\frac{P(A \rightarrow B)}{P(B \rightarrow A)} = e^{\beta(W_{A \rightarrow B} - \Delta F)} \quad (5.25)$$

Dessa relação podemos derivar:

$$e^{\frac{-\Delta F}{kT}} = e^{\langle \frac{-W}{kT} \rangle} \quad (5.26)$$

Acreditamos que a mesma relação pode ser estabelecida em um contexto generalizado de ruídos exóticos, em particular o caso dicotômico, a aplicação de um protocolo agindo sobre a posição da partícula<sup>3</sup> é instrumental na definição de quantidades alternativas à temperatura clássica e ao trabalho clássico, mas que ainda assim possam conservar essa relação funcional.

Para definir um trabalho sobre o sistema é necessário lançar mão de um protocolo, equivalente a uma ação externa sobre a partícula, mais especificamente, consistiria em acrescentar um termo a equação Eq. (2.10)

$$m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = -\gamma \frac{dx(t)}{dt} - kx(t) - \zeta_t + k_L x_L \quad (5.27)$$

<sup>3</sup>similar àquele aplicado na definição da micro máquina térmica.

## 5.5 Volatilidade Intradiária

Dada uma série de preços para ativos financeiros (foi usada database da BOVESPA extraída do software de trade algorítmico Metatrader 5), desenvolvemos a análise de cascata estocástica tendo em consideração aspectos já anteriormente ressaltados (nos trabalhos de Queirós e Graczyk [51] [52]) da dinâmica financeira.

Em um esforço de limpar o sinal condizente com as flutuações provocadas pela sobreposição de ordens de compra e venda, aplicamos um filtro sobre o sinal de precificação correspondente às volatilidades intradiárias associadas aos horários de negociação, assim podemos inferir com mais clareza o efeito do agregamento de informações sobre o preço, em vez de sujeitá-lo por demais à recorrente maré de mercado correspondente à sazonalidade diária dos investidores.

$$r(t) = \frac{\rho(t)}{\sigma(t)} \quad (5.28)$$

Sendo que  $t_i$  corresponde ao  $i$ -ésimo horário do dia, seja  $N$  o número de dias no banco de dados analisado;

$$\mu(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N p(t_i) \quad \sigma(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (p(t_i) - \mu(t))^2 \quad (5.29)$$

Avaliando dados da Bovespa extraídos do Metatrader 5 podemos inferir propriedades de transferência de informação entre as escalas, dado o escalamento dos incrementos nas distintas janelas temporais; que pode ser mapeado pelas ditas funções de estrutura, isto é, os momentos associados à estatística dos incrementos  $u_r$

$$S_k(u_r) = u_r^k \quad (5.30)$$

$$u_r := x(t+r) - x(t) \quad (5.31)$$

$$p_{st}(u(r), r) = \frac{1}{Z(r)} e^{-\varphi(u(r), r)} \quad (5.32)$$

$$Z(r) = \int e^{-\varphi(u(r), r)} du \quad (5.33)$$

$$\Delta S_{tot}(u(\cdot)) = - \int_L^\lambda \partial_r u_r \partial_u \varphi(u(r)) dr - \text{Log} \frac{\rho(u_\lambda, \lambda)}{\rho(u_L, L)} \quad (5.34)$$

Observamos que existe uma relação de escalamento para as funções de estrutura dada a evolução da estatística dos incrementos ao longo de diversas escalas

Além de usos previamente estabelecidos na literatura [5], divisamos um respaldo experimental para esses resultados estatísticos a serem lançados sobre outras aplicações não menos significativas, em particular no âmbito da finança quantitativa onde preços flutuantes de ativos podem estar sujeitos a ruídos, ou melhor flutuações que podem ser entendidas como forças de injeção energética assumindo perfis similares. A ideia fundamental de muitos analistas financeiros no quesito do embate entre força compradora e força vendedora como polos opostos que exercem peso sobre preço e volatilidade de ativos financeiros pode ser aproximada pelo modelo da partícula bimodal, como poderemos ver mais adiante.

### 5.5.1 Potenciais não lineares

Uma perspectiva de desenvolvimento da pesquisa ao redor dos três aspectos da temperatura efetiva (energia cinética média, configuração e resposta) discutidos nessa tese passa pela introdução de potenciais não lineares nos modelos estudados. Incluindo um termo de potencial quártico, responsável por tornar a dinâmica ainda mais exótica, embora ainda conservativa. Nesse contexto será interessante delinear

como a convergência e divergência das componentes  $T = (T_k, T_v, T_r)$  se opera em diferentes configurações dos parâmetros mecânicos e dos associados ao reservatório.

Alguns resultados preliminares foram obtidos para essa situação, no que seria um modelo IV, sistema superdissipado em reservatório bimodal interno com potencial não-linear:

$$\gamma \int_0^t dt K(t') \frac{dx(t)}{dt} = -k x(t) - k x^3(t) + \zeta_t. \quad (5.35)$$

Para a solução da equação de força estocástica não-linear é preciso utilizar uma abordagem de recorrência, obtemos:

$$\tilde{x}(q) = \frac{\tilde{\zeta}(q)}{\gamma(q - \kappa)} - \frac{k_3}{\gamma(q - \kappa)} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_2}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_3}{2\pi} \frac{\tilde{x}(iq_1 + \epsilon) \tilde{x}(iq_2 + \epsilon) \tilde{x}(iq_3 + \epsilon)}{q - (iq_1 + iq_2 + iq_3)} \quad (5.36)$$

$$\kappa = \frac{-k}{\gamma} \quad (5.37)$$

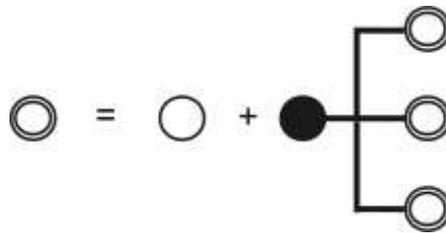


Figura 5.3: representação diagramática do processo de solução do sistema estocástico não linear por recorrência Eq.(5.36). Aqui um círculo duplo representa um termo  $\tilde{x}$ , enquanto um círculo simples representa um termo  $\tilde{\zeta}(s)$  e a integral tripla representada pela tripla linha no grafo

Como discutido no capítulo II, a complexidade associada a solução estatística deve ser superada pelo uso de ferramentas de automatização do cálculo analítico, sendo esse o caminho evidente para a exploração de toda a paisagem de modelo Langevin generalizados, tendo o estudo de temperaturas efetivas no estado estacionário em função de parâmetros mecânicos e de reservatório como complemento essencial ao entendimento da termoestatística do problema.

## Referências Bibliográficas

- [1] Thomas M. Cover, Joy A. Thomas, *Elements of Information Theory* 7 April 2005 , 2006 John Wiley and Sons, Inc.
- [2] Matteo Smerlak, *Thermodynamics of inequalities: From precariousness to economic stratification*, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, **441**, 2016, Pages 40-50
- [3] Cugliandolo L F, Kurchan J and Parisi G 1994 *J. Phys. I (France)* **4** 1641; Casas-Vázquez J and Jou D 2003 *Rep. Prog. Phys.* **66** 1937
- [4] Huang K 1987 *Statistical Mechanics* (New York City - NY: Willey)
- [5] van Kampen N G 2007 *Stochastic Processes in Physics and Chemistry* (Amsterdam: Elsevier, Amsterdam).
- [6] Einstein, A. (1905). *O n the Movement of Small Particles Suspended in Stationary Liquids Required by the Molecular-Kinetic Theory of Heat. Annalen der Physik*, 17(8), 549-560.
- [7] Ian J. Ford and Robert W. Eyre 2015 *Phys. Rev. E* **92** 022143
- [8] Ian J. Ford and Robert W. Eyre 2015 *Phys. Rev. E* **92** 022143
- [9] M. Ponmurugan 2009 *Phys. Rev. E* **93** 032107
- [10] Tsallis C 1988 *Journal of Statistical Physics* E **52** 062145
- [11] Morgado W, Queirós S 2016 *Phys. Rev. E* **93** 012121
- [12] J. R. Medeiros and S. M. D. Queirós, S M 2015 *Phys. Rev. E* **92** 062145

- [13]J. R. Medeiros and S. M. D. Queirós, S M 2015 *Phys. Rev. E* **92** 062145
- [14]A. Gitterman, *Physica A* **221**, 330 (1995).
- [15]T. Harada and S.-I. Sasa, *Math. Biosci.* **207**, 365 (2007).
- [16]A. B. Kolomeisky and M. E. Fisher, *Annu. Rev. Phys. Chem.* **58**, 675 (2007).
- [17]G. Pfister and H. Scher, *Adv. Phys.* **27**, 747 (1978).
- [18]J. Giddings and H. Eyring, *J. Phys. Chem.* **59**, 416 (1955).
- [19]C. R. de Oliveira, C. M. Arizmendi, and J. Sanchez, *Physica A* **330**, 400 (2003).
- [20]Y. Jung, E. Barkai, and R. J. Silbey, *Chem. Phys.* **284**, 181 (2002).
- [21]Barry James, *Probabilidade: um curso em nível intermediário*, Projeto Euclides, 1981, Instituto de Matemática Pura e Aplicada, CNPq
- [22]Farago J 2002 *J. Stat. Phys.* **107** 781;  
Morgado W A M and Duarte Queirós S M 2014 *Phys. Rev. E* **90** 022110
- [23]Munkhammar J, Mattsson L, Ryden J 2017 *PLoS ONE*. E **12(4)** e0174573.
- [24]J. R. Medeiros and S. M. D. Queirós, Effective temperatures for single particle system under dichotomous noise, *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* 2021, 063205 (2021).
- [25]O cálculo pode ser feito usando: I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series and Products* (Academic Press, New York, 2007) ou com a assistência do software Wolfram Mathematica<sup>©</sup>.
- [26]M.O. Caceres and A.A. Budini, *J. Phys. A* **30**, 8427 (1997). M.O. Caceres, *Phys. Rev. E* **67**, 016102 (2003).
- [27]Weisstein, Eric W. "Digamma Function."From MathWorld—A Wolfram Web Resource. <https://mathworld.wolfram.com/DigammaFunction.html>
- [28]Sondow, Jonathan and Weisstein, Eric W. "Riemann Zeta Function."From MathWorld—A Wolfram Web Resource. <https://mathworld.wolfram.com/RiemannZetaFunction.html>

- [29] Cugliandolo L 2011 *J. Phys. A (Review Section)*. **44** 483001
- [30] Umberto Marini Bettolo, Marconia Andrea Puglisib, Angelo Vulpiani 2008 *Physics Reports* **461** 483001 111-195
- [31] Duarte Queirós S M 2016 *Phys. Rev. E* **94** 042114
- [32] E. Fodor, C. Nardini, M.E. Cates, J. Tailleur, P. Visco, and F. van Wijland, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 038103 (2016); E. Fodor, H. Hayakawa, J. Tailleur, and F. van Wijland, *Phys. Rev. E* **98**, 062610 (2018).
- [33] H. Risken, *The Fokker-Planck Equation* (Springer-Verlag, Berlin, 1989);
- [34] Lucianno Defaveri, Welles A Morgado 2017 *Physics Review E* **96** 052115
- [35] S. Ciliberto, *Phys. Rev. X* **7**, 021051 (2017); M.L. Mugnai, C. Hyeon, M. Hinczewski, and D. Thirumalai, *Rev. Mod. Phys.* **92**, 025001 (2020)
- [36] W.A.M. Morgado and S.M. Duarte Queiros, *Phys. Rev. E* **86**, 041108 (2012); K. Kanazawa, T. Sagawa, and H. Hayakawa, *Phys. Rev. E* **87**, 052124 (2013); M.M. Candido, W.A.M. Morgado, and S.M. Duarte Queirós, *Phys. Rev. E* **96**, 032143 (2017).
- [37] W. Niedenzu, D. Gelbwaser-Klimovsky, A.G. Kofman, and G. Kurizki *New. J. Phys.* **18**, 083012 (2016).
- [38] T.K. Haxton and A.J. Liu, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 195701 (2007); A.R. Abate and D.J. Durian, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 245701 (2008).
- [39] V. Grenard, N. Garnier, and A. Naert, *J. Stat. Mech*, L09003 (2008).
- [40] R. Belousov and E.G.D. Cohen, *Phys. Rev. E* **94**, 062124 (2016); R. Belousov, E.G.D. Cohen, and L. Rondoni, *Phys. Rev. E* **94**, 032127 (2016);
- [41] J.S. Andrade Jr, G.F.T. da Silva, A.A. Moreira, F.D. Nobre, and E.M.F. Curado, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 260601 (2010).
- [42] T. Lu, J. Hasty and P.G. Wolynes, *Biophys. J.* **91**, 84 (2006).
- [43] R.L. Jack, M.F. Hagan, and D. Chandler, *Phys. Rev. E* **76**, 021119 (2007).

- [44]N. Göth, U. Baul, J. Dzubiella *Phys. Rev. E* **106**, 064611 ,Äi Published 22 December 2022
- [45]L. Cocconi, J. Knight, C.Roberts. (2022). Optimal power extraction from active particles with hidden states. 10.48550/arXiv.2211.16377.
- [46]Mas-Colell A, Whinston M D, Green J R 1995 *Microeconomic Theory* (New York: Oxford University Press).
- [47]A.G. Gomes, M.C. Varriale, *Modelagem de Ecossistemas: Uma Introdução* (2001) *Ed. da UFSM*
- [48] Christopher Jarzynski, *Comptes Rendus Physique* **8**, Issues 5,Äi6, June,ÄiJuly 2007, Pages 495-506
- [49]Crooks G. 1999 *Phys. Rev. E* **60** 2721
- [50]Voit J 2001 *The Statistical Mechanics of Financial Markets* (Berlin: Springer)
- [51]Queirós S *Trading volume in financial markets: An introductory review Chaos, Solitons and Fractals* **88** 2016,
- [52]Graczyk M, Queirós S 2016 *Intraday Seasonalities and Nonstationarity of Trading Volume in Financial Markets: Individual and Cross-Sectional Features Elsevier*