

Dissertação de Mestrado

TERMOESTATÍSTICA DE UMA PARTÍCULA BIMODAL

João Ribeiro Medeiros

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Rio de Janeiro, 2015

-

Dissertação de Mestrado ao Centro Brasileiro
de Pesquisas Físicas sob orientação do
Pesquisador Doutor *Sílvia Manuel Duarte Queirós*
para a obtenção do título de
Mestre em Física por **João Ribeiro Medeiros**

2015

Agradecimentos

Agradeço ao meu orientador Sílvio Manuel Duarte Queirós pela atenção que dedicou a mim e ao meu trabalho, pela disponibilidade com que sempre se fez acessível às questões que apresentei ao longo da pesquisa, pela compreensão com que encarou minhas eventuais dificuldades e pelo convívio harmonioso que tivemos nesses dois anos.

Agradeço ao Antonio Domingues por ótimas conversas.

Agradeço a Leonardo Cirto e Felipe Tolentino pela hospitalidade com que me receberam no ambiente da TEO e pela ajuda de toda sorte com o Linux.

Agradeço à minha mãe Luciana Monteiro Ribeiro, ao meu pai Ricardo Amaury de Medeiros, Cristina Braga, Antonia Braga de Medeiros, Daniel Barczinsky, Julio Ribeiro Coutinho, Felipe Jardim, Rodrigo Alves, Roberta Falcão Trombetta, Georgia Lau, Victor Cumplido, Julia Fernandez, Marina Sereno, Kizzy Amiuna, Fabio Lúcio Alves, Laís Lavra, Pedro Braga Soares, Sasha Lazarev, Konrad Güttler, Filipe Oliveira, Daniel Pimenta, David Gonçalves, Clement Mombeuraux, Michel Moreaux e Matthias F. por sua presença no mundo.

Agradeço a CAPES pelo apoio financeiro.

Resumo

Nesta dissertação analisa-se o modelo constituído por uma partícula massiva em um sistema caracterizado por um potencial harmônico confinante, uma dissipação linearmente proporcional à velocidade e uma flutuação associada a um reservatório analiticamente definido por um ruído telegráfico. Faz-se a análise estatística de estado estacionário para a posição e velocidade e também para os valores de quantidades acumuladas como os fluxos de calor e energia que provêm o estado estacionário. Verifica-se que a introdução de uma temperatura canônica relacionada com a escala das flutuações da velocidade permite a obtenção de uma estrutura análoga à situação de reservatório Gaussiano branco. Simulações são usadas para confirmação dos resultados analíticos.

Apresentam-se também resultados da termoestatística da partícula sujeita ao ruído gaussiano colorido, a partir dos quais verifica-se uma hipótese de um mapeamento entre um sistema de reservatório interno e externo tema desenvolvido como introdução aos métodos e ferramentas teóricas necessários para a pesquisa.

Abstract

In this dissertation we analyze a model composed of a massive particle in a system with harmonic confining potential, a fluctuation linked to a reservoir analytically defined by telegraph noise, as well as a dissipative force linearly proportional to the particle's velocity. Statistical analysis of stationary state is carried out for the particle's position, velocity and for accumulated quantities such as the heat and energetic fluxes that provide stationarity. The introduction of a canonical temperature related to the typical scales of velocity fluctuation establishes an analogy with an ordinary system with white Gaussian reservoir. The analytical results are verified through numerical simulation.

Some other results related to the thermostatics of a coloured Gaussian particle are also presented and a hypothesis of mapping between internal and external reservoir cases is tested. This theme was developed as an introduction to methods and tools that were to be necessary for the research.

Notação

Por ordem de aparição;

- \mathcal{O} Grandeza física (observável)
- $\langle \mathcal{O}^n \rangle$ Enésimo momento de \mathcal{O}
- $\langle\langle \mathcal{O}^n \rangle\rangle$ Enésimo cumulante de \mathcal{O}
- ς Evento aleatório
- $f(\varsigma)$ Função densidade de probabilidade
- $f(\varsigma)_s$ Função densidade de probabilidade no estado estacionário
- g Função aleatória
- Ξ Tempo de evolução do sistema
- ω Frequência, variável conjugada do tempo no espaço de Fourier
- $S(\omega)$ Densidade espectral
- $C_{\mathcal{O}\mathcal{O}'}$ Função de correlação
- \mathbb{T}_τ Matriz de probabilidades de transição entre estados passado tempo τ
- \mathbb{W}_τ Matriz de probabilidades de transição por unidade de tempo, matriz das taxas de transição

- S Entropia
- Π Variação no tempo de entropia causada por fatores internos ao sistema
- Ψ Variação no tempo de entropia causada por fatores externos ao sistema
- $M_n(\mathcal{O}, t)$ Momentos de Kramers-Moyal
- $D_n(\mathcal{O}, t)$ Coeficientes de Kramers-Moyal
- L_{FPP} Operador de Fokker-Planck
- $\eta(t)$ Variável estocástica
- $S(\mathcal{P}, h, g)$ Integral de Stieltjes
- W_t Processo de Wiener
- $\zeta(t)$ Ruído telegráfico
- a, b Estados do ruído telegráfico
- μ taxa de transição entre estados b e a do ruído telegráfico
- $\bar{\mu} = \rho\mu$ taxa de transição entre estados a e b do ruído telegráfico
- α Memória do ruído, no caso do telegráfico, a soma das duas taxas de transição
- p razão entre taxa μ e α
- \bar{p} razão entre taxa $\bar{\mu}$ e α

- \mathcal{B}, \mathcal{D} Funções das taxas de transição e dos estados
- ξ Ruído gaussiano com cor
- m Massa da partícula
- γ Constante dissipativa
- k Constante elástica
- \hat{k} Constante definida na eq. (5.6)
- $\hat{\gamma}$ Constante definida na eq. (5.7)
- D Constante difusiva
- T Temperatura
- Γ Kernel de memória
- τ_r Tempo típico de dissipação
- τ_s Tempo típico de oscilação harmônica
- q variável recíproca do tempo
- $R(s)$ Estrutura de pólos de $\tilde{x}(iq + \epsilon)$
- κ_{\pm} Pólos de $\tilde{x}(iq + \epsilon)$
- Z Função de partição

- \mathcal{E} Energia total
- \mathcal{K} Energia cinética
- \mathcal{V} Energia potencial
- J_{inj} Potência injetada
- J_{dis} Potência dissipada
- $L(\mathcal{J})$ Função de grandes desvios para os fluxos energéticos do sistema
- $\mathcal{F}_i, \mathcal{F}_i, \mathcal{H}_{ij}$ Funções para tornar os resultados mais compactos

Conteúdo

1	Introdução	1
2	Elementos Básicos de Teoria de Processos Estocásticos	7
2.1	Descrição de processos estacionários no espaço de Fourier	8
2.1.1	A função de correlação	9
2.2	Tipos de processos estocásticos	13
2.2.1	Natureza dos espaços	13
2.2.2	Natureza da dinâmica	14
2.3	O processo de Markov	15
2.3.1	A Equação de Chapman-Kolmogorov	17
2.3.2	Estacionariedade de um processo de Markov	18
2.4	A Equação-Mestre	21
2.4.1	Formulação	21
2.4.2	A matriz de transição no contexto da equação mestre	23
2.4.3	Condições de estacionariedade	26
2.4.4	Especificações da equação mestre numa abordagem contínua	30
2.4.5	Casos particulares da Eq. (2.62)	33
2.5	A abordagem estocástica no espaço das variáveis	35
2.5.1	A representação de Itô e Stratonovich	39
3	O Ruído Telegráfico	42
3.1	Aspectos teóricos	42
3.2	Implementação numérica do ruído	46

4	O Modelo Dinâmico e o Método de Solução	49
4.1	O método de solução	55
4.2	Método de Laplace-Fourier e o teorema do valor final	57
4.2.1	Correlação de n tempos do ruído Gaussiano	62
4.2.2	Correlação de n tempos do ruído telegráfico	63
5	Resultados	65
5.1	Resultados para o ruído Gaussiano colorido ¹	65
5.2	Resultados para o Reservatório Dicotômico	80
5.2.1	Estatística da Velocidade	80
5.2.2	Estatística da Posição	92
5.3	Considerações Energéticas para o Reservatório Dicotômico	100
6	Conclusões e Perspectivas Futuras	114
6.1	Conclusões	114
6.2	Perspectivas futuras	118

¹Os resultados desta seção foram apresentados no XXXVII *Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada* tendo recebido o prêmio de melhor poster em Física Estatística.

Lista de Figuras

3.1	<p>Excerto de séries temporais para diferentes tipos de ruídos telegráficos. Em verde, $a = -b = 1$ e $\mu = \bar{\mu} = 1$ em vermelho $a = -b = 3/\sqrt{8}$ e $\mu = 2/3 = \bar{\mu} = 1/3$ e em cinza $a = -b = \sqrt{37/10}$ e $\mu = \bar{\mu} = 5$. Os valores das amplitudes são ajustados para que a temperatura seja a mesma.</p>	48
4.1	<p>Estrutura típica dos pólos nos cálculos a serem efetuados no presente trabalho.</p>	62
5.1	<p>Simulação numérica com $m = \gamma = k = T = \tau = 1$. <i>Painel de cima:</i> Evolução do Fluxo total injetado/dissipado para um sistema de reservatório externo. Os fluxos instantâneos, que são os declives das linhas após o transiente, vale $1/3$, o mesmo que a linha pontilhada (verde). De acordo com a Eq. (5.19) o mesmo comportamento é encontrado para um sistema de reservatório interno com $m^* = 3/2$, $T^* = 1/2$ and $k^* = 3/4$. <i>Painel de baixo:</i> Distribuição de grandes desvios (LDF) do fluxo total (injetado) obtida por simulação (pontos) e a LDF para um sistema de reservatório interno dada pela Eq. (5.32) (linha pontilhada) para um tempo $\Xi = 1000$. Embora os picos sejam coincidentes, as larguras (e a forma) são diferentes. Na versão mapeada a variância vai como $\Xi/3$ [Eq. (5.33)], enquanto que nos cálculos feitos no sistema efetivo deverá evoluir como $4\Xi/9$ [Eq. (5.35)]. O resultado é claramente melhorado recorrendo à expansão de Edgeworth [Eq. (5.36)] como demonstra a linha a cheio.</p>	78
5.2	<p>Evolução temporal de $\langle\langle v^2 \rangle\rangle$. A linha a cheio corresponde a simulação numérica com estatística sobre 10^6 amostras com os seguintes parâmetros numéricos: $m = k = \alpha = \gamma = 1$, $a = -b = 1$ e $\mu = \bar{\mu} = 1/2$. A linha tracejada representa o limite de tempo longo $\langle\langle v^2 \rangle\rangle = 1/3$.</p>	81

- 5.3 Evolução temporal de $\langle\langle v^3 \rangle\rangle$. A linha a cheio corresponde a simulação numérica com estatística sobre 10^6 amostras com os seguintes parâmetros numéricos: $m = k = \alpha = \gamma = 1$, $a = -b = 1$ e $\mu = 2/3$, $\bar{\mu} = 1/3$. A linha tracejada representa o limite de tempo longo $\langle\langle v^3 \rangle\rangle = -16/1701 = 9.4 \dots \times 10^{-3}$. 84
- 5.4 Assimetria da distribuição de $f(v)$ v probabilidade do estado a do ruído, p . Para todos os casos $m = k = \gamma = 1$, $a = -b = 1$. A linha a cheio (verde) corresponde a $\alpha = 1$, a linha tracejada (púrpura) tem $\alpha = 1/4$, e a linha tracejada-pontilhada (magenta) corresponde ao caso $\alpha = \alpha^* = 1/2$ para o qual a assimetria se inverte de acordo com a Eq. (5.50). 87
- 5.5 Evolução temporal de $\langle\langle v^4 \rangle\rangle$. A linha a cheio corresponde a simulação numérica com estatística sobre 10^6 amostras com os seguintes parâmetros numéricos: $m = k = \alpha = \gamma = 1$, $a = -b = 1$ e $\mu = \bar{\mu} = 1/2$. A linha tracejada representa o limite de tempo longo $\langle\langle v^4 \rangle\rangle = -16/273 = -0.0586 \dots$ 89
- 5.6 Distribuição estacionária $f(v)$ v v obtidos por simulação numérica. Para todos os casos, $T = 1/3$, $m = k = \gamma = 1$, $p = \bar{p} = 1/2$ e $b = -a$. A verde $\alpha = 1$, $a = 1$; a vermelho pálido $\{\alpha = \alpha^\dagger = 0.5438 \dots, a = 1.06188 \dots\}$ e a preto $\{\alpha = 100, a = \sqrt{3367/100}\}$. A linha amarela representa uma gaussiana com variância $1/3$, que corresponde ao limite assintótico da distribuição $f(v)$ quando α tende para infinito. À direita o mesmo gráfico em log-linear. 90
- 5.7 Curtose do sistema v probabilidade estacionária do estado a com $m = k = \gamma = 1$ e $b = -a = 1$. A linha a cheio verde corresponde a $\alpha = 1$, a linha tracejada-pontilhada vermelho pálido tem $\alpha = \alpha^\dagger = 0.5438 \dots$ e a linha tracejada marrom $\alpha = 45/100$ 91
- 5.8 Curtose do sistema em função de α e de p assumindo os parâmetros $m = k = \gamma = 1$ e $b = -a = 1$ 91
- 5.9 Evolução temporal de $\langle x \rangle$. A linha a cheio corresponde a simulação numérica com estatística sobre 10^6 amostras com os seguintes parâmetros numéricos: $m = k = \alpha = \gamma = 1$, $a = -b = 1$ e $\mu = 2/3$, $\bar{\mu} = 1/3$. A linha tracejada representa o limite de tempo longo $\langle x \rangle = 1/3$ 93

- 5.10 Evolução temporal de $\langle\langle x^2 \rangle\rangle$. A linha a cheio corresponde a simulação numérica com estatística sobre 10^6 amostras com os seguintes parâmetros numéricos: $m = k = \alpha = \gamma = 1$, $a = -b = 1$ e $\mu = \bar{\mu} = 1/2$. A linha tracejada representa o limite de tempo longo $\langle\langle x^2 \rangle\rangle = 2/3$ 94
- 5.11 Evolução temporal de $\langle\langle x^3 \rangle\rangle$. A linha a cheio corresponde a simulação numérica com estatística sobre 10^6 amostras com os seguintes parâmetros numéricos: $m = k = \alpha = \gamma = 1$, $a = -b = 1$ e $\mu = 2/3$, $\bar{\mu} = 1/3$. A linha tracejada representa o limite de tempo longo $\langle\langle x^3 \rangle\rangle = -479/1701 = -0.2915\dots$. 95
- 5.12 Assimetria da distribuição de $f(x)$ v probabilidade do estado a do ruído, p de acordo com a Eq. (5.61) . Os parâmetros considerados foram os seguintes: $m = k = \gamma = 1$, $a = -b = 1$ e $\alpha = 1$ 96
- 5.13 Evolução temporal de $\langle\langle x^4 \rangle\rangle$. A linha a cheio corresponde a simulação numérica com estatística sobre 10^6 amostras com os seguintes parâmetros numéricos: $m = k = \alpha = \gamma = 1$, $a = -b = 1$ e $\mu = \bar{\mu} = 1/2$. A linha tracejada representa o limite de tempo longo $\langle\langle x^4 \rangle\rangle = -166/273 = -0.608\dots$ 98
- 5.14 Evolução temporal de $\langle\langle x^4 \rangle\rangle$. A linha a cheio corresponde a simulação numérica com estatística sobre 10^6 amostras com os seguintes parâmetros numéricos: $m = k = \alpha = \gamma = 1$, $a = -b = 1$ e $\mu = \bar{\mu} = 1/2$. A linha tracejada representa o limite de tempo longo $\langle\langle x^4 \rangle\rangle = -166/273 = -0.608\dots$ 98
- 5.15 Distribuição estacionária $f(x)$ vs x obtidos por simulação numérica. Para todos os casos, $T = 1/3$, $m = k = \gamma = 1$, $p = \bar{p} = 1/2$ e $b = -a$. A verde $\alpha = 1$, $a = 1$; a vermelho pálido $\{\alpha = \alpha^\dagger = 0.5438\dots, a = 1.06188\dots\}$ e a preto $\{\alpha = 100, a = \sqrt{3367/100}\}$. A linha amarela representa uma gaussiana com variância $2/3$, que corresponde ao limite assintótico da distribuição $f(x)$ quando α tende para infinito. À direita o mesmo gráfico em log-linear. 99
- 5.16 Distribuição empírica dos fluxos $J_{\text{inj}}(\Xi)$ e $J_{|\text{dis}|}(\Xi)$ para $m = k = \alpha = \gamma = 1$, $a = -b = 1$, $\mu = \bar{\mu} = 1/2$ e $\Xi = 1000$. Como verificado as duas distribuições são concorrentes. O ajuste de $1/2$ no fluxo dissipado serve apenas para eliminar valores constantes que se anulam no cálculo de J_{dis} 103

- 5.17 Evolução temporal da média dos fluxos $\langle J_{\text{inj}}(\Xi) \rangle$ (linha cheia) e $\langle J_{|\text{dis}|}(\Xi) \rangle$ (linha tracejada-pontilhada) obtida por simulação numérica de 10^6 amostras independentes com os seguintes parâmetros $m = k = \alpha = \gamma = 1$, $a = -b = 1$, $\mu = \bar{\mu} = 1/2$. A linha pontilhada representa o comportamento do crescimento assintótico dado pela Eq. (5.77), $\langle \mathcal{J}(\Xi) \rangle = \Xi/3$ 106
- 5.18 Evolução temporal da variância dos fluxos $\langle \langle J_{\text{inj}}^2(\Xi) \rangle \rangle$ (linha cheia) e $\langle \langle J_{\text{dis}}^2(\Xi) \rangle \rangle$ (linha tracejada-pontilhada) obtida por simulação numérica de 10^6 amostras independentes com os seguintes parâmetros $m = k = \alpha = \gamma = 1$, $a = -b = 1$, $\mu = \bar{\mu} = 1/2$. A linha pontilhada tem declive $8/36 = 0.2(2)$ como dado para a Eq. (5.84). 111
- 5.19 Distribuição dos grandes desvios dos fluxos (caso injetado) para $\Xi = 10^4$ obtida a partir do cálculo de 10^5 amostras independentes com os seguintes parâmetros $m = k = \gamma = 1$, $a = -b = 1$, $\mu = \bar{\mu} = 1/2$. Os casos apresentados correspondem a $\alpha = 1$ (verde), $\alpha = 10$ (azul) e $\alpha = 100$ (negro). A linha amarela corresponde ao limite Gaussiano branco dado pela Eq. (5.32). 112
- 5.20 Coeficiente dos cumulantes do fluxo em função da cor do ruído telegráfico (multiplicada por 50) para os seguintes parâmetros $m = k = \gamma = 1$, $a = -b = 1$ e temperatura de Marconi $1/3$. A linha cheia (cinza) é a média, a linha pontilhada (negro) a variância, a linha azul tracejado corresponde ao terceiro cumulante e linha verde pontilhada-tracejada representa o quarto cumulante. O terceiro cumulante tem um mínimo para $\alpha \simeq 0.9$. Para $\alpha \simeq 1.5$ a distribuição muda a sua curtose. 113

Capítulo 1

Introdução

Desde os trabalhos fundamentais de Boltzmann, a mecânica estatística se foca no estabelecimento de relações entre a dinâmica microscópica de um sistema e suas propriedades macroscópicas, nomeadamente as relações termodinâmicas, que podem ser medidas em um laboratório de forma mais ou menos simples [1]. Em particular, a constatação de leis da termodinâmica implica a verificação do chamado limite termodinâmico, bem como de um estado de equilíbrio ao qual se pode associar uma temperatura.

Complementarmente ao tratamento assente na análise da dinâmica determinista de cada partícula num sistema de inúmeros constituintes, o trabalho de Einstein sobre a partícula Browniana – cuja dinâmica é definida por meio de uma equação de Langevin para a velocidade – permitiu a descrição do comportamento dinâmico-probabilístico de uma partícula e a obtenção da relação entre diversos observáveis e a temperatura do meio circundante, o qual numa perspectiva termodinâmica desempenha o papel de reservatório com o qual o sistema troca calor.

A formulação de Langevin parte do princípio que em um infinitésimo de tempo, a partícula

em estudo tem um número elevadíssimo de colisões com as restantes partículas do meio e que essas colisões têm um tempo de relaxação assumido como nulo. Mediante estas premissas a força estocástica terá uma natureza Gaussiana.

Contudo, situações de equilíbrio correspondentes à equação de Langevin, representam uma parte muito pequena dos sistemas que nos circundam. Basta lembrar que sistemas biológicos estão claramente fora do equilíbrio [2], pelo menos a um nível global. Mormente, tem surgido de cenários de não-equilíbrio um vasto conjunto de trabalhos no qual deve se realçar o estabelecimento de relações análogas às equações da Termodinâmica clássica [3, 4, 5, 6, 7], assim como relações sobre a evolução do estado de não-equilíbrio também conhecidas como relações de flutuação [8, 9].

Frequentemente, o limite de aplicabilidade das tradicionais relações Termodinâmicas é violado devido a pelo menos um dos seguintes três motivos:

- a) o sistema é composto por um número de partículas demasiado pequeno e por isso é incompatível com o limite termodinâmico;
- b) existe uma dependência temporal de quantidades outrora paramétricas que regem a evolução do sistema;
- c) o meio circundante não se caracteriza em termos estatísticos por um comportamento de tipo Browniano, em que todos os cumulantes de ordem superior à segunda são nulos. Isto é, por aplicação directa do Teorema de Pawula, não é possível se empregar um tratamento probabilístico baseado na resolução da equação de Fokker-Planck.

A este ponto é fundamental sublinhar que a inexistência de um estado de equilíbrio não implica na ausência de um estado estacionário no qual se podem realizar medições globalmente independentes do tempo e que em sentido lato verificam um princípio de ergodicidade. Noutras palavras, apenas o estado estacionário supremo, o de equilíbrio, se encontra inacessível. Exemplos de sistemas deste tipo são inúmeros, dentre os quais se enfatizam motores moleculares [10], nomeadamente aqueles de origem biológica [11][12] ou sistemas de colóides [13].

Para além do interesse científico enquadrado num contexto de pesquisa básica, a procura por problemas mais gerais é também impelida por um enorme interesse no entendimento e previsão das propriedades termoestatísticas de sistemas pequenos em áreas de tecnologia e inovação [14, 15, 16, 12, 17, 18].

No primeiro caso – o puramente científico – vale a pena notar que, de acordo com o teorema de Lévy-Itô sobre a decomposição da medida [19], o ruído de Poisson representa o paradigma do processo estocástico com medida puramente singular, complementando desta forma a continuidade de medida exibida pelo ruído de Browniano. O problema dos ruídos de pulso (caso Poissoniano) tem sido recentemente estudado em uma perspectiva termoestatística permitindo a determinação de resultados muito interessantes, nomeadamente no problema do transporte de calor e a emergência do carácter singular de um reservatório por meio das não-linearidades.

Existem no entanto diversas situações que não se enquadram em uma composição de ruídos brancos contínuos e singulares e que naturalmente não verificarão condições tradicionais da mecânica estatística de não-equilíbrio tal como a relação de flutuação-dissipação. Nesta classe,

um caso importante são situações em que o sistema é sujeito a perturbações que podem assumir dois valores sendo que as transições ocorrem de forma aleatória (a taxas específicas). Este é o caso do ruído telegráfico (também conhecido ruído Browniano de 2 estados). Para além do interesse acadêmico na compreensão de problemas com propriedades analíticas diferentes daquelas usualmente abordadas [20, 21, 22, 23, 24], principalmente porque este ruído não é compatível com a Equação de Fokker-Planck, o ruído telegráfico se adequa à descrição de problemas nanomecânicos como transporte bidirecional intracelular em filamentos do citoesqueleto mediado por dois conjuntos de motores moleculares — nomeadamente a Kinesina-1 e Dineína citoplasmática — que puxam a carga em direções opostas em um “cabo de guerra” estocástico [25] ou a cinética de marcadores proteicos em meios capilares como por exemplo a dinâmica do ión de cálcio no plasma sanguíneo [26] e modelos de catracas nanométricas [27]. Adicionalmente, o ruído telegráfico parece mostrar-se adequado na descrição de propriedades de transporte em materiais amorfos [28] e cromatografia [29], para mencionar alguns.

Dada a complexidade analítica, os problemas aqui mencionados são tratados considerando diversas condicionantes, principalmente as seguintes: os sistemas são superamortecidos e as taxas de transição entre os estados do ruído são iguais assim como as suas amplitudes. Mesmo para este caso, trabalhos de Hänggi e co-autores [10, 24] e Cáceres [30] mostram a impossibilidade de uma solução fechada; sendo que o primeiro se concentra no cálculo das correntes de probabilidade e o segundo caso com os momentos da velocidade, sempre de sistemas superamortecidos. Além disso, nenhum dos casos trata questões energéticas relacionadas com os

fluxos de energia injetada e calor dissipado pelo sistema que garante a existência de um estado estacionário caracterizado por flutuações da velocidade e de posição as quais são passíveis de associar a uma temperatura do sistema.

Nesta dissertação, apresento resultados que pretendem cobrir tópicos ausentes na literatura, nomeadamente a estatística de sistemas mecânicos dissipativos e amortecidos sujeitos a reservatórios dicotômicos (ruído telegráfico) obtendo a estatística de posição e velocidade no estado estacionário assim como a análise energética dependente do tempo. Os resultados são obtidos por passagem ao espaço recíproco de Laplace-Fourier e aplicação do teorema do valor final, já que não estarei interessado no comportamento do transiente, mas sim nas dependências de tempo longo. Esta formulação tem a vantagem perante os habituais tratamentos assentes na Equação-Mestra (ou Fokker-Planck) de não necessitar da explicitação do propagador, preservando a possibilidade de evolução das quantidades.

Estrutura da dissertação

A dissertação se encontra organizada da forma seguinte:

- No Capítulo 2, apresento elementos básicos da teoria de processos estocásticos, desde a sua definição e classificação até a descrição da sua evolução através da equação-mestra. Da equação-mestra estabeleço condições para a emergência de um estado estacionário, a sua separação entre evolução criada por variações contínuas (que levam à Equação de Fokker-Planck) e por saltos. Para concluir o capítulo mostro como é possível passar de

uma formulação probabilística dada pela equação mestra (ou suas componentes) a uma formulação estocástica estabelecida no espaço de probabilidades;

- No Capítulo 3, faço uma caracterização do ruído telegráfico e por conseguinte do reservatório dicotômico;
- No Capítulo 4, introduzo as equações base sobre as quais assentam a dinâmica do problema e explico o método de solução através de transformações de Laplace-Fourier;
- No Capítulo 5, em primeiro lugar, discuto um modelo intermédio de um sistema sujeito a um reservatório Gaussiano, porém colorido, que dá origem a uma dinâmica não-Markoviana. Este caso preserva a propriedade gaussiana do reservatório, introduzindo ao mesmo tempo a cor do ruído e a natureza externa do reservatório, tal como acontece no reservatório dicotômico. Em seguida parte-se para o problema principal, a descrição termoestatística do problema dicotômico;
- No Capítulo 6, faço uma resenha dos resultados obtidos e perspetivo evoluções possíveis do trabalho aqui apresentado.

Capítulo 2

Elementos Básicos de Teoria de Processos Estocásticos

Começo então por fornecer alguns elementos teóricos básicos sobre o qual assentará o estudo dos modelos físicos nos quais se centra a dissertação. As observáveis que tratarei são quantidades Físicas, \mathcal{O} , (e.g. posição, velocidade) que variam no tempo por ação de forças sobre as quais não existe informação completa do seu valor a cada estado de tempo. Desta forma, em um contexto probabilístico, tratarei quantidades que dependem funcionalmente de eventos aleatórios, ς , distribuídos de acordo com uma função densidade de probabilidade, $f(\varsigma)$, por meio de uma função aleatória, g . Ao compreender a dependência temporal juntamente com a dependência relativamente ao evento aleatório ς pode se dizer que o conjunto dessas variáveis aleatórias,

$$\mathcal{O} = g(\varsigma, t). \quad (2.1)$$

constitui um processo estocástico. Alternativamente, o processo estocástico pode ser visto como um *ensemble* $\{\mathcal{O}\} = \{g(\varsigma, t)\}$ onde o tempo é definido num intervalo de tempo compreendido

entre Ξ_0 e Ξ . Sob o ponto de vista prático, o interesse é determinar o comportamento estatístico destas funções, particularmente o cálculo dos momentos de ordem n dessa variável,

$$\langle \mathcal{O}(t_1) \dots \mathcal{O}(t_n) \rangle = \int \mathcal{O}(t_1) \dots \mathcal{O}(t_n) f(\zeta, t) d\zeta. \quad (2.2)$$

Se os momentos de ordem n são invariantes por translações de tempo τ ,

$$\langle \mathcal{O}(t_1 + \tau) \dots \mathcal{O}(t_n + \tau) \rangle = \langle \mathcal{O}(t_1) \dots \mathcal{O}(t_n) \rangle \quad (2.3)$$

o processo diz-se estacionário.

2.1 Descrição de processos estacionários no espaço de Fourier

Tal como acontece em diversos problemas deterministas, a análise de um processo estocástico pode ser incomparavelmente mais simples quando o seu estudo é feito no espaço recíproco em vez de no espaço real.¹

Considero $\mathcal{O}(t)$ um processo estocástico definido num intervalo entre $-\Xi \leq t \leq \Xi$ de tal forma que a variável \mathcal{O} é nula fora deste intervalo. No espaço recíproco essa quantidade se define como,

$$\mathcal{O}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{O}(t) e^{i\omega t} dt, \quad (2.4)$$

a inversa, dessa maneira, vem dada através da equação,

$$\mathcal{O}(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{O}(\omega) e^{-i\omega t} dt, \quad (2.5)$$

¹Por exemplo, recorde diversos problemas de física do estado sólido onde se utiliza a rede recíproca ou no estudo de fenômenos críticos com a aplicação do grupo de renormalização [31].

CAPÍTULO 2. ELEMENTOS BÁSICOS DE TEORIA DE PROCESSOS ESTOCÁSTICOS 9

Se $\mathcal{O}(t)$ é uma observável física, deve ser representada por um número real, portanto seu quadrado também será necessariamente real. O complexo conjugado de $\mathcal{O}(\omega)$ verifica a seguinte relação,

$$\mathcal{O}^*(\omega) = \mathcal{O}(-\omega). \quad (2.6)$$

Da formulação de Fourier Eqs. (2.4) e (2.5) é possível definir a partir do módulo da variável $\mathcal{O}(\omega)$ o espectro de frequência do processo estocástico,

$$S(\omega) = \frac{1}{\Xi} |\mathcal{O}(\omega)|^2, \quad (2.7)$$

que se relaciona com o Teorema de Parseval.

A interpretação da Eq. (2.7) é bastante simplificada pelo tratamento via função seno da transformada de Fourier, *i.e.*, a variável aleatória $\mathcal{O}(t)$ pode ser representada através de uma soma ponderada de funções seno, cada qual com uma frequência ω entre 0 e π/Ξ , sendo que pela Eq. (2.6), o intervalo entre $-\pi/\Xi$ e 0 corresponde a variável conjugada no espaço recíproco. Assim sendo, o cálculo da $S(\omega)$ permite avaliar o peso de uma dada frequência. Como $S(\omega)$ não é uma quantidade normalizada esta quantidade é então definida como **densidade espectral**. Mostrarei daqui a pouco qual a relevância de $S(\omega)$.

2.1.1 A função de correlação

Até aqui mostrei que um processo estocástico corresponde essencialmente a um conjunto ordenado no tempo de uma determinada função aleatória. Pela Eq. (2.2) é possível o cálculo

CAPÍTULO 2. ELEMENTOS BÁSICOS DE TEORIA DE PROCESSOS ESTOCÁSTICOS 10

dos diferentes momentos estatísticos através de uma média de ensembles. Tal operação fornece informação de como a variável aleatória evolui no tempo de forma mais provável, $\langle \mathcal{O}(t) \rangle$, e qual a grandeza típica dos desvios relativamente a esse valor mais provável, $\sqrt{\langle \mathcal{O}(t)^2 \rangle - \langle \mathcal{O}(t) \rangle^2}$, além de outras informações relativas aos restantes momentos. Não obstante, estas quantidades não estabelecem qualquer relação sobre a evolução do ensemble, *i.e.*, como os valores da função aleatória se relacionam entre si.

De maneira a considerar tal questão é importante introduzir a função de correlação como o segundo cumulante calculado assincronamente,

$$C_{\mathcal{O}\mathcal{O}'}(t_1, t_2) = \langle \mathcal{O}(t_1) \mathcal{O}'(t_2) \rangle - \langle \mathcal{O}(t_1) \rangle \langle \mathcal{O}'(t_2) \rangle, \quad (2.8)$$

de tal forma que, quando as variáveis \mathcal{O} e \mathcal{O}' são as mesmas se tem a função de autocorrelação $C_{\mathcal{O}}(t_1, t_2)$ e em caso contrário $C_{\mathcal{O}\mathcal{O}'}(t_1, t_2)$ toma o nome de função de correlação cruzada.² Quando $\mathcal{O} = \mathcal{O}'$ e $t_1 = t_2$ a função de correlação reduz-se à variância.

Quando o processo é estacionário [Eq. (2.3)], as variáveis são independentes do tempo e por conta disso a função de correlação $C(t_1, t_2)$ apenas dependerá da diferença entre os instantes t_1 e t_2 , ou de $|t_1 - t_2|$, considerando a validade da condição de simetria temporal associada a um **processo estacionário**, no qual **médias no tempo equivalem a médias sobre amostras**. Sob estas circunstâncias,

$$C_{\mathcal{O}\mathcal{O}'}(t_1, t_2) = C_{\mathcal{O}\mathcal{O}'}(0, t) \quad (2.9)$$

$$C_{\mathcal{O}\mathcal{O}'}(0, t) = C_{\mathcal{O}'\mathcal{O}}(-t, 0)$$

²Frequentemente calcula-se também a chamada co-variância que corresponde simplesmente a $\langle \mathcal{O}(t_1) \mathcal{O}'(t_2) \rangle$.

em que t representa a distância temporal (ou *time lag* em inglês). Desta última equação se desprende que para um sistema de observáveis múltiplas é possível escrever as diferentes funções de correlação numa única matriz.

No caso em que $\mathcal{O}(t)$ seja um número complexo,

$$C_{\mathcal{O}\mathcal{O}}(0, t) = C_{\mathcal{O}\mathcal{O}}(-t, 0)^* . \quad (2.10)$$

Tendo introduzido as características gerais da função de correlação está-se em condições de apresentar o **Teorema de Wiener-Khinchin**,

Teorema 1 *Na situação em que $\mathcal{O}(t)$ é um processo estocástico estacionário verifica-se a seguinte relação entre a função de correlação e a densidade espectral,*

$$S(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} C_{\mathcal{O}}(t) e^{i\omega t} dt, \quad (2.11)$$

Para o provar se considera o processo $\mathcal{O}(t)$ genérico sobre o qual se calcula a função de correlação,

$$\begin{aligned} C_{\mathcal{O}}(t_1, t_2 = t_1 + t) &= \frac{1}{\Xi} \int \mathcal{O}(t_1)^* \mathcal{O}(t_2) \delta(t - t_2 + t_1) dt_1 dt_2 \\ &= \frac{1}{\Xi} \frac{1}{2\pi} \int \mathcal{O}(t_1)^* \mathcal{O}(t_2) e^{-i\omega(t-t_2+t_1)} dt_1 dt_2 d\omega \\ &= \frac{1}{\Xi} \frac{1}{2\pi} \int \left[\int \mathcal{O}(t_1)^* e^{i(-\omega)t_1} dt_1 \right] \left[\int \mathcal{O}(t_2) e^{i\omega t_2} dt_2 \right] e^{-i\omega t} d\omega \\ &= \frac{1}{2\pi} \int \left[\frac{1}{\Xi} \mathcal{O}^*(\omega) \mathcal{O}(\omega) \right] e^{-i\omega t} d\omega. \end{aligned} \quad (2.12)$$

CAPÍTULO 2. ELEMENTOS BÁSICOS DE TEORIA DE PROCESSOS ESTOCÁSTICOS 12

Alternativamente a prova pode ser feita de forma inversa,

$$\begin{aligned}
 S(\omega) &= \frac{1}{\Xi} \mathcal{O}(\omega)^* \mathcal{O}(\omega) & (2.13) \\
 &= \frac{1}{\Xi} \left[\int \mathcal{O}(t_1) e^{i\omega t_1} dt_1 \right]^* \left[\int \mathcal{O}(t_2) e^{i\omega t_2} dt_2 \right] \\
 &= \frac{1}{\Xi} \int \int [\mathcal{O}^*(t_1) e^{-i\omega t_1}] [\mathcal{O}(t_1 + t) e^{i\omega(t_1+t)}] dt dt_1 \\
 &= \int e^{i\omega t} dt \left[\int \frac{1}{\Xi} \mathcal{O}^*(t_1) \mathcal{O}(t_1 + t) dt_1 \right].
 \end{aligned}$$

Se o ruído é descorrelacionado então pode se verificar facilmente que a sua densidade espectral é constante, ou seja, todas as frequências do processo estocástico no espaço recíproco de Fourier contribuem de igual modo. Fazendo uma analogia com luz pode se dizer que *um processo estocástico totalmente descorrelacionado é equivalente a um ruído branco*.

Embora a densidade espectral possa se exprimir sob variadas formas, a esmagadora maioria dos sistemas tem o comportamento assintótico descrito por,

$$S(\omega) \sim \omega^{-\beta}. \quad (2.14)$$

Casos particulares são o passeante aleatório em que $\beta = 2$ e o ruído branco em que $\beta = 0$. Destacamos também um tipo de processo intermédio importante em que $\beta = 1$, que se encontra numa vasta gama de sistemas ditos complexos, de fenômenos climatológicos a fisiológicos.

Se $\mathcal{O}(t)$ é um processo estocástico, a variável $\mathcal{O}(\omega)$ pode ser entendida como um processo estocástico, no espaço recíproco. Conseqüentemente, é possível calcular uma função de correlação e tentar entender em que medida as frequências se relacionam, pelo menos num pro-

cesso estacionário no qual médias sobre amostras podem ser substituídas por médias no tempo,

$$\begin{aligned}
 \langle \mathcal{O}(\omega)^* \mathcal{O}(\omega') \rangle &= \left\langle \left[\int \mathcal{O}(t_1)^* e^{i(-\omega)t_1} dt_1 \right] \left[\int \mathcal{O}(t_2) e^{i\omega' t_2} dt_2 \right] \right\rangle \quad (2.15) \\
 &= \left\langle \left[\int \mathcal{O}(t_1)^* e^{i(-\omega)t_1} dt_1 \right] \left[\int \mathcal{O}(t_1 + t) e^{i\omega'(t_1+t)} dt \right] \right\rangle \\
 &= \left[\int e^{i t_1(\omega' - \omega)} dt_1 \right] \left[\int \langle \mathcal{O}(t_1)^* \mathcal{O}(t_1 + t) \rangle e^{i\omega' t} dt \right] \\
 &= \delta(\omega' - \omega) S(\omega).
 \end{aligned}$$

Daqui se concluí que em um processo estocástico estacionário os valores de $\mathcal{O}(\omega)$ são independentes para frequências diferentes.

2.2 Tipos de processos estocásticos

Os processos estocásticos podem ser classificados quanto à natureza dos seus espaços (estado e tempo) e pela sua dinâmica.

2.2.1 Natureza dos espaços

- Tempo discreto e espaço de amostras discreto (e.g.: fluxos de automóveis diários, formação de filas);
- Tempo contínuo e espaço de amostras discreto (e.g.: modelos de crescimento de população sobretudo em biologia de sistemas, número de átomos de uma amostra que decaíram);
- Tempo discreto e espaço de amostras contínuo (e.g.: o tempo de espera para o decaimento do n -ésimo átomo, o volume de água consumido em cada dia por uma habitação);

- Tempo contínuo e espaço de amostra contínuo (e.g.: o tempo de espera para o decaimento do átomo seguinte [ordenada] ao decaimento do n -ésimo átomo [abscissa])

2.2.2 Natureza da dinâmica

Embora exista uma miríade de processos estocásticos de natureza dinâmica diferente, estes podem ser costumeiramente analisados a propósito da verificação (ou não) das seguintes propriedades:

- **Processo puramente aleatório** no qual a (densidade de) probabilidade condicionada de se observar um valor \mathcal{O}_n no instante t_n é totalmente independente da história. Ou seja exista a igualdade de probabilidades,

$$f(\mathcal{O}_n; t_n | \mathcal{O}_{n-1}; t_{n-1}, \dots, \mathcal{O}_1; t_1) = f(\mathcal{O}_n; t_n). \quad (2.16)$$

- **Martingala:** um processo estocástico $\{\mathcal{O}_t\}$ é uma martingala em relação a um processo estocástico $\{\mathcal{O}'_t\}$ no qual em cada instante de tempo,³

$$\langle |\mathcal{O}_t| \rangle < \infty \quad (2.17)$$

e para todo $t \geq s$,

$$\langle \mathcal{O}_t | \{\mathcal{O}'_{t' \leq s}\} \rangle = \mathcal{O}_s. \quad (2.18)$$

Indicando que o valor médio condicionado à história anterior corresponde à observação no tempo s . Ou seja, o conhecimento prévio sobre o processo não permite qualquer antevisão do valor seguinte. Compreendemos assim que esta classe se adequa à situação de

³A propriedade de martingala pode ser analisada sobre o processo per si.

jogos justos ou de ausência de transmissão de informação que constitui a base da hipótese de mercado eficiente. Noto que a martingala se divide em vários casos particulares (martingala local, semimartingala, martingala de sequência de diferenças, martingala sigma, etc) [32]. A exploração destes conceitos está fora do escopo da dissertação.

- **Processo Markoviano:** processo estocástico em que a probabilidade condicionada num instante t_n , dado que se observou um valor \mathcal{O}_{n-1} no instante imediatamente anterior t_{n-1} , é completamente independente do conhecimento sobre a história do processo estocástico até t_{n-2} , inclusive. Na seção seguinte explorarei com um pouco mais este tipo de processo.

2.3 O processo de Markov

O processo de Markov tem relação com alguns dos processos mais fundamentais e reconhecidos em Física, nomeadamente o problema do movimento Browniano, qualitativamente estudado por Robert Brown em 1827 e posteriormente quantificado por Einstein em 1905⁴, no qual uma partícula se encontra em um meio de partículas mais leves que colidem com esta. O tema será discutido com maior propriedade e detalhe adiante.

A Markovianidade pode ser alternativamente explicada como um processo estocástico, $\{\mathcal{O}_t\}$, de dimensão indefinida, tal que para qualquer sucessão temporal $t_1 < \dots < t_n$ se verifica a se-

⁴É muitas vezes ignorado, mas a Teoria do Movimento Browniano teve um papel fundamental para o estabelecimento da natureza descontínua da matéria.

guinte relação entre as probabilidades condicionadas,

$$f(\mathcal{O}_n; t_n | \mathcal{O}_{n-1}; t_{n-1}, \dots, \mathcal{O}_1; t_1) = f(\mathcal{O}_n; t_n | \mathcal{O}_{n-1}; t_{n-1}), \quad (2.19)$$

ou numa descrição de tempo contínuo, o processo de Markov deverá obedecer à condição de Lindeberg,

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|\mathcal{O} - \mathcal{O}'| > \varepsilon} f(\mathcal{O}, t + \Delta t | \mathcal{O}', t) d\mathcal{O} = 0, \quad (2.20)$$

para todo $\varepsilon > 0$. Dito de outro modo, para um qualquer intervalo ε no valor da amostra, o valor final dessa variável deverá ser finitamente diferente do valor \mathcal{O}' da condição inicial sendo que deverá tender para zero mais rapidamente do que a distância temporal Δt .

Noutras palavras, um processo de Markov fica perfeitamente caracterizado através da probabilidade referente ao valor inicial, $f(\mathcal{O}_1; t_1)$ e através da probabilidade condicionada que estabelece a probabilidade de se medir um determinado processo estocástico. Analiticamente,

$$\begin{aligned} f(\mathcal{O}_n; t_n, \mathcal{O}_{n-1}; t_{n-1}, \dots, \mathcal{O}_1; t_1) &= f(\mathcal{O}_n; t_n | \mathcal{O}_{n-1}; t_{n-1}) f(\mathcal{O}_{n-1}; t_{n-1} | \mathcal{O}_{n-2}; t_{n-2}) \\ \times f(\mathcal{O}_{n-2}; t_{n-2} | \mathcal{O}_{n-3}; t_{n-3}) \dots f(\mathcal{O}_1; t_1) &= \prod_{i=0}^{n-2} f(\mathcal{O}_{n-i}; t_{n-i} | \mathcal{O}_{n-i-1}; t_{n-i-1}) f(\mathcal{O}_1; t_1) \end{aligned} \quad (2.21)$$

A respeito da propriedade Markoviana de um sistema vale a pena sublinhar os seguintes pontos:

- A atribuição da propriedade de Markov a um processo estocástico requer atenção a diversos detalhes, nomeadamente: o jogo entre as escalas de observação do sistema (*i.e.*, a taxa de amostragem) e o tempo de correlação da observável física; a verificação da propriedade Eq. (2.19) para qualquer ordem de n assim como a explicitação de todo o processo estocástico apenas e só pelas condições da Eq. (2.21);

- a verificação de Markovianidade de um sistema (físico) resulta em grande maioria da incapacidade de se observar um sistema a uma escala suficientemente pequena em que os efeitos de memória surgem⁵, tal decorre da formulação de Langevin do movimento Browniano;
- o facto de um processo estocástico de dimensão d ser Markoviano não implica que um seu sub-espço de dimensão d' seja também Markoviano. Complementarmente, o caminho reverso, *i.e.*, o de aumento da dimensionalidade, pode permitir a explicitação de uma propriedade de Markov a um dado processo.

2.3.1 A Equação de Chapman-Kolmogorov

O processo estocástico de Markov necessita obedecer à sua condição Eq. (2.19). Deste modo, conhecendo probabilisticamente a condição inicial do problema, pode se obter a descrição probabilística completa da sucessão de valores. Porém, geralmente se está interessado em determinar probabilidades condicionadas em um processo estocástico markoviano independentemente dos valores intermédios entre o valor da quantidade aleatória \mathcal{O} no instante de interesse t e o valor \mathcal{O}_0 em um dado instante anterior não imediato, t_0 .

Considerando uma sequência de três observações $t_3 > t_2 > t_1$ de um processo estocástico

⁵Por exemplo, C.W. Gardiner chega a afirmar “there is really no such thing as the Markov process”[33].

markoviano. Da probabilidade conjunta para os três eventos,

$$\int f(\mathcal{O}_3; t_3, \mathcal{O}_2; t_2, \mathcal{O}_1; t_1) d\mathcal{O}_2 = \int f(\mathcal{O}_3; t_3 | \mathcal{O}_2; t_2) f(\mathcal{O}_2; t_2 | \mathcal{O}_1; t_1) f(\mathcal{O}_1; t_1) d\mathcal{O}_2$$

$$f(\mathcal{O}_3; t_3, \mathcal{O}_1; t_1) = f(\mathcal{O}_1; t_1) \int f(\mathcal{O}_3; t_3 | \mathcal{O}_2; t_2) f(\mathcal{O}_2; t_2 | \mathcal{O}_1; t_1) d\mathcal{O}_2,$$

utilizando a lei de Bayes,

$$f(\mathcal{O}_3; t_3 | \mathcal{O}_1; t_1) f(\mathcal{O}_1; t_1) = f(\mathcal{O}_1; t_1) \int f(\mathcal{O}_3; t_3 | \mathcal{O}_2; t_2) f(\mathcal{O}_2; t_2 | \mathcal{O}_1; t_1) d\mathcal{O}_2,$$

de onde se chega a,

$$f(\mathcal{O}_3; t_3 | \mathcal{O}_1; t_1) = \int f(\mathcal{O}_3; t_3 | \mathcal{O}_2; t_2) f(\mathcal{O}_2; t_2 | \mathcal{O}_1; t_1) d\mathcal{O}_2, \quad (2.22)$$

correspondente à **Equação de Chapman-Kolmogorov**.

2.3.2 Estacionariedade de um processo de Markov

Concomitantemente à propriedade de markovianidade, um sistema pode ser também estacionário; aliás, toda a mecânica estatística de equilíbrio acaba por corresponder à situação em que o sistema é descrito por um conjunto de observáveis $\{\mathcal{O}_t\}$ que constituem um processo de Markov estacionário e em que a probabilidade do estado inicial corresponde exactamente à distribuição de equilíbrio. Uma das maiores vantagens analíticas do estado estacionário de um processo estocástico é que este permite a equivalência entre médias realizadas no tempo e médias realizadas sobre diferentes amostras, propriedade conhecida por propriedade ergódica, mas que formalmente (em teoria matemática) representa somente um aspecto dos sistemas ergódicos.

CAPÍTULO 2. ELEMENTOS BÁSICOS DE TEORIA DE PROCESSOS ESTOCÁSTICOS 19

Para um processo markoviano estacionário, a probabilidade de transição depende apenas do intervalo de tempo,

$$f(\mathcal{O}_2; t + \tau | \mathcal{O}_1, t) = f(\mathcal{O}_2; \tau | \mathcal{O}_1; 0) = \mathbb{T}_\tau(\mathcal{O}_2 | \mathcal{O}_1), \quad (2.23)$$

e

$$f(\mathcal{O}_1; t) = f_s(\mathcal{O}_1), \quad (2.24)$$

de tal maneira que a equação de Chapman-Kolmogorov fica,

$$\mathbb{T}_{\tau+\tau'}(\mathcal{O}_3 | \mathcal{O}_1) = \int \mathbb{T}_\tau(\mathcal{O}_3 | \mathcal{O}_2) \mathbb{T}_{\tau'}(\mathcal{O}_2 | \mathcal{O}_1) d\mathcal{O}_2. \quad (2.25)$$

As condições de estacionariedade apresentadas permitem definir a partir de um processo de Markov estacionário um outro processo não estacionário tal que no limite de tempo longo venha a apresentar um comportamento estacionário ou seja,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} f(\mathcal{O}_1; t | \mathcal{O}_0; 0) = f_s(\mathcal{O}_1). \quad (2.26)$$

As probabilidades condicionais, $f(\mathcal{O}_2; t_2 | \mathcal{O}_1, t_1)$, evoluirão também para uma situação estacionária. Complementarmente, em uma situação estacionária, a Eq. (2.23) é válida para qualquer valor real de τ . Além do mais, a probabilidade conjunta independe do ordenamento dos argumentos da probabilidade conjunta. Aplicando então a lei de Bayes,

$$\mathbb{T}_\tau(\mathcal{O}_2 | \mathcal{O}_1) f(\mathcal{O}_1) = \mathbb{T}_{-\tau}(\mathcal{O}_1 | \mathcal{O}_2) f(\mathcal{O}_2). \quad (2.27)$$

CAPÍTULO 2. ELEMENTOS BÁSICOS DE TEORIA DE PROCESSOS ESTOCÁSTICOS 20

Embora a equação anterior possa ser equivocadamente vista como uma regra de balanço detalhado,⁶ ela apenas pode ser interpretada como a regra que descreve a relação entre diferentes abordagens de um problema estacionário em que ambas se relacionam por uma regra de evolução simétrica. Do mais, não é difícil entender que,

$$\int \mathbb{T}_\tau (\mathcal{O}_2 | \mathcal{O}_1) d\mathcal{O}_2 = 1, \quad (2.28)$$

representando que em um processo estocástico a função deverá evoluir para um valor qualquer, incluindo retornar/permanecer em \mathcal{O}_1 . Da mesma forma,

$$\int \mathbb{T}_\tau (\mathcal{O}_2 | \mathcal{O}_1) f(\mathcal{O}_1) d\mathcal{O}_1 = f(\mathcal{O}_2). \quad (2.29)$$

É possível definir-se para um processo de Markov o valor médio $\mathcal{O}(t)$ condicionado a uma dada condição inicial,

$$\langle \mathcal{O}(t) \rangle_{|\mathcal{O}_0; t_0} = \int \mathcal{O} f(\mathcal{O}; t | \mathcal{O}_0, t_0) d\mathcal{O}. \quad (2.30)$$

A correlação pode então ser escrita,

$$\langle \mathcal{O}(t) \mathcal{O}(t_0)^* \rangle = \int \langle \mathcal{O}(t) \rangle_{|\mathcal{O}_0; t_0} \mathcal{O}_0^* f(\mathcal{O}_0, t_0) d\mathcal{O}_0. \quad (2.31)$$

Embora a Eq. (2.31) seja válida para qualquer processo estocástico, é preciso ter em atenção que tendo a probabilidade $f(\mathcal{O}_0, t_0)$ e as condicionais $f(\mathcal{O}; t | \mathcal{O}', t')$, o processo de Markov fica completamente definido, sendo $\langle \mathcal{O}(t) \rangle_{|\mathcal{O}_0; t_0}$ uma das quantidades que caracteriza a evolução do processo.

⁶A regra de balanço detalhado implica o mesmo sentido temporal, i.e., as taxas de evolução *in* e *out* deverão se equivaler para que não exista variação de probabilidade.

A Eq. (2.31) acaba por ter um papel crucial na definição da função de correlação no estado estacionário. Daí que, se a equação de evolução da média se comporta como,

$$\frac{d}{dt} \langle \mathcal{O}(t) \rangle_{|\mathcal{O}_0; t_0} = -c \langle \mathcal{O}(t) \rangle_{|\mathcal{O}_0; t_0},$$

dadas as propriedades da probabilidade condicionada no estado estacionário,

$$\frac{d}{dt} \langle \mathcal{O}(t) \mathcal{O}(t_0)^* \rangle = -c \langle \mathcal{O}(t) \mathcal{O}(t_0)^* \rangle,$$

o que implica numa mesma evolução temporal para a média e a função de correlação, sendo que $\langle \mathcal{O}(t_0) \mathcal{O}(t_0)^* \rangle - \langle \mathcal{O}(t_0) \rangle^2$ define o segundo cumulante.

2.4 A Equação-Mestre

Na seção anterior apresento uma descrição probabilista em que se definiu a probabilidade de um determinado estado \mathcal{O} no instante t mediante um conjunto de probabilidades de transição \mathbb{T} . Alternativamente, é possível tratar o problema tentando entender como evolui a probabilidade no tempo para um dado estado \mathcal{O} , ou noutras palavras, levando em conta o tempo de permanência do sistema nos estados acessíveis. Este tipo de abordagem é realizado por intermédio da chamada equação-mestre, que representa uma forma mais manejável da equação da Chapman-Kolmogorov no caso em que o processo estocástico é Markoviano.

2.4.1 Formulação

Considere-se um processo de Markov homogêneo e sua matriz de transição \mathbb{T}_τ no limite em que o intervalo de tempo τ tende para um infinitésimo.

CAPÍTULO 2. ELEMENTOS BÁSICOS DE TEORIA DE PROCESSOS ESTOCÁSTICOS 22

Tome-se $\mathbb{W}(\mathcal{O}_2 | \mathcal{O}_1)$ a probabilidade por unidade de tempo (ou **taxa de transição**) de o sistema passar do estado \mathcal{O}_1 para o estado \mathcal{O}_2 .

Recorrendo à representação matricial, pode-se separar $\mathbb{T}_\tau(\mathcal{O}_2 | \mathcal{O}_1)$ em contribuições da diagonal e fora da diagonal. O primeiro caso representa a probabilidade de o sistema se manter no estado anterior (\mathcal{O}_1) durante τ , ou equivalentemente, o complementar de a partícula transitar para qualquer estado. Tem-se então, em primeira ordem em τ , assumindo um espaço de amostras contínuo,

$$\mathbb{T}_\tau(\mathcal{O}_2 | \mathcal{O}_1) = \left[1 - \tau \int \mathbb{W}(\mathcal{O}'_2 | \mathcal{O}_1) d\mathcal{O}'_2 \right] \delta(\mathcal{O}_2 - \mathcal{O}_1) + \tau \mathbb{W}(\mathcal{O}_2 | \mathcal{O}_1) + O(\tau^2). \quad (2.32)$$

Inserindo esta relação na equação de Chapman-Kolmogorov resulta em,

$$\begin{aligned} \mathbb{T}_{\tau+\tau'}(\mathcal{O}_3 | \mathcal{O}_1) &= \int \left\{ \left[1 - \tau \int \mathbb{W}(\mathcal{O}'_3 | \mathcal{O}_2) d\mathcal{O}'_3 \right] \delta(\mathcal{O}_3 - \mathcal{O}_2) + \tau \mathbb{W}(\mathcal{O}_3 | \mathcal{O}_2) \right\} \\ &\quad \times \mathbb{T}_{\tau'}(\mathcal{O}_2 | \mathcal{O}_1) d\mathcal{O}_2 \\ &= \mathbb{T}_{\tau'}(\mathcal{O}_3 | \mathcal{O}_1) - \tau \mathbb{T}_{\tau'}(\mathcal{O}_3 | \mathcal{O}_1) \int \mathbb{W}(\mathcal{O}'_3 | \mathcal{O}_3) d\mathcal{O}'_3 \\ &\quad + \tau \int \mathbb{W}(\mathcal{O}_3 | \mathcal{O}_2) \mathbb{T}_{\tau'}(\mathcal{O}_2 | \mathcal{O}_1) d\mathcal{O}_2 \end{aligned} \quad (2.33)$$

$$\frac{\mathbb{T}_{\tau+\tau'}(\mathcal{O}_3 | \mathcal{O}_1) - \mathbb{T}_{\tau'}(\mathcal{O}_3 | \mathcal{O}_1)}{\tau} = \int \mathbb{W}(\mathcal{O}_3 | \mathcal{O}_2) \mathbb{T}(\mathcal{O}_2 | \mathcal{O}_1) d\mathcal{O}_2 - \mathbb{T}(\mathcal{O}_3 | \mathcal{O}_1) \int \mathbb{W}(\mathcal{O}_2 | \mathcal{O}_3) d\mathcal{O}_2$$

reordenando os termos levando em conta que τ é pequeno, no limite $\tau \rightarrow 0$,

$$\frac{\partial \mathbb{T}(\mathcal{O}_3 | \mathcal{O}_1)}{\partial \tau} = \int [\mathbb{W}(\mathcal{O}_3 | \mathcal{O}_2) \mathbb{T}(\mathcal{O}_2 | \mathcal{O}_1) - \mathbb{T}(\mathcal{O}_3 | \mathcal{O}_1) \mathbb{W}(\mathcal{O}_2 | \mathcal{O}_3)] d\mathcal{O}_2, \quad (2.34)$$

Assumindo como condição inicial para o processo $f(\mathcal{O}, t) = \delta(t - t_0)$, aplicando a igualdade

a ambos os lados e integrando tem-se a forma usual da equação-mestre,

$$\frac{\partial f(\mathcal{O}, t)}{\partial t} = \int [\mathbb{W}(\mathcal{O} | \mathcal{O}') f(\mathcal{O}', t) - f(\mathcal{O}, t) \mathbb{W}(\mathcal{O} | \mathcal{O}')] d\mathcal{O}', \quad (2.35)$$

O primeiro termo do lado direito da equação representa o ganho de probabilidade do estado \mathcal{O} por transições de outros estados \mathcal{O}' e o segundo termo a perda de probabilidade desse estado por transição para outros estados \mathcal{O}' .

A situação que liga $f(\mathcal{O}, t)$ ao vínculo inicial $f(\mathcal{O}, t) = \delta(t - t_0)$ é fundamental para uma interpretação correta da equação-mestre. Ou seja, a equação-mestre não descreve a evolução da probabilidade estrita, mas sim uma equação de evolução da probabilidade condicionada. Apenas por imposição da condição inicial se tem a evolução da densidade de probabilidade. Observamos também que o produto $\mathbb{W}(\mathcal{O} | \mathcal{O}') f(\mathcal{O}', t)$ pode ser entendido como a corrente de probabilidade de \mathcal{O}' para \mathcal{O} .

Adicionalmente, a equação mestre descreve especificamente para um dado sistema a evolução da probabilidade no tempo, ao contrário da Equação de Chapman-Kolmogorov que pode ser entendida como um corolário da Markovianidade do sistema.

2.4.2 A matriz de transição no contexto da equação mestre

O tratamento anterior, particularmente as definições, pode ser condensado através de uma abordagem matricial, pelo menos quando o espaço de estados é discreto. Neste caso, a Eq. (2.35) será escrita como,⁷

$$\frac{d\mathbf{f}}{dt} = \mathbf{W}\mathbf{f}, \quad (2.36)$$

⁷Para uma notação mais concisa deixa-se de lado a explicitação da dependência temporal da probabilidade.

CAPÍTULO 2. ELEMENTOS BÁSICOS DE TEORIA DE PROCESSOS ESTOCÁSTICOS 24

onde f assume a forma de um vector linha em que cada elemento é a probabilidade de cada estado possível f . A matriz das taxas de transição tem seus elementos dados por,

$$w_{ij} = \mathbb{W}_{ij} - \delta_{ij} \sum_l \mathbb{W}_{li}, \quad (2.37)$$

tal que,

$$\mathbb{W}_{ij} \geq 0 \quad (i \neq j) \quad (2.38)$$

$$\sum_i \mathbb{W}_{ij} = 0 \quad \forall_j \quad (2.39)$$

A Eq. (2.39) acaba por ter um impacto semelhante ao Teorema de Perron-Frobenius para a matriz de transição: *Desta forma é possível dizer que Eq. (2.39) pode ser lida como a definição da existência de um valor próprio, o vector unitário, tal que o seu valor próprio é nulo. Ou seja, existirá pelo menos um vector próprio f_s , também de valor próprio nulo, tal que,*

$$W f_s = 0. \quad (2.40)$$

Ora atendendo ao lado esquerdo da Eq. (2.36), a condição anterior implica $\frac{df_s}{dt} = 0$, isto é, f_s é **a solução estacionária.**

Dado a matriz W descrever a possibilidade de transições entre diferentes estados acessíveis ao sistema pode se analisar a estrutura de W da seguinte forma:

- A matriz W se diz *reduzível* se for possível reorganizá-la de maneira a que esta possa se apresentar na forma,

$$W = \left[\begin{array}{c|c} A & 0 \\ \hline \text{---} & \text{---} \\ 0 & Q \end{array} \right]. \quad (2.41)$$

Pode-se assim separar o sistema em dois sub-conjuntos de estados dinamicamente desligados, cada um com seu vetor próprio estacionário. Uma situação típica deste caso é quando o estado do sistema é caracterizado por pelo menos um vínculo de conservação, impedindo desta forma que existam transições entre estados que não sejam no fundo estados degenerados relativamente a esse vínculo.

- A matriz W é *irreduzível* se após reorganização apresenta a forma,

$$W = \left[\begin{array}{c|c} A & C \\ \hline \text{---} & \text{---} \\ 0 & Q \end{array} \right]. \quad (2.42)$$

As sub-matrizes A e Q são quadradas enquanto que a matriz C não o é necessariamente. Escrevendo as equações para ambos os casos em que se continuam a separar os sistemas em dois casos \mathbf{f}_a e \mathbf{f}_b ,

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\mathbf{f}_a}{dt} = A \mathbf{f}_a + C \mathbf{f}_b \\ \\ \frac{d\mathbf{f}_b}{dt} = Q \mathbf{f}_b \end{array} \right. . \quad (2.43)$$

As variações de probabilidade do sub-sistema b não são influenciadas pelas probabilidades do sub-sistema a . Na situação que permite a existência de um estado estacionário, cada linha deverá ter resultante negativa sobre as colunas de Q . Considerando que o traço completo sobre a

probabilidade deve conservar-se igual a 1, a perda de probabilidade de f_b deverá ser compensada pelo ganho de probabilidade de f_a de tal forma que,

$$\sum_i Q_{ij} = -\sum_i C_{ij}, \quad (2.44)$$

donde se pode entender que os estado b são estados transiente e os estados a são os estados absorvente. Nesta situação $f_s = \{f_{s,a}, f_{s,b}\} = \{\{f_{s,a}\}, \{0\}\}$.

Recorrendo à derivação da equação mestre é possível verificar a relação entre a matriz de transição \mathbb{T} e a matriz W para uma análise de um sistema a uma taxa τ ,

$$\mathbb{T} = \exp[W\tau]. \quad (2.45)$$

O teorema de Perron-Frobenius garante que, se o maior valor próprio da matriz \mathbb{T} for menor do que 1 (em valor absoluto) o processo dará origem a um estado estacionário. Mais, a solução estacionária $\frac{df}{dt} = 0$ é única.

2.4.3 Condições de estacionaridade

Sob o ponto de vista termoestatístico um sistema se classifica (também) pela sua produção de entropia, S , (ou de calor). Para sistemas que têm entropia total constante,

$$\frac{dS}{dt} = \Pi - \Psi = 0, \quad (2.46)$$

Π e Ψ representam duas formas de entropia. Π está associada aos fatores internos relacionados com a evolução do sistema e a extremização da entropia. Já Ψ representa a troca de entropia do sistema com o seu entorno. Assim:

- Um sistema se diz *no estado estacionário* se a variação de entropia for nula,

$$\frac{dS}{dt} = 0, \quad (2.47)$$

sendo que,

$$\Pi = \Psi. \quad (2.48)$$

- Um sistema se diz em um *estado de equilíbrio* se para além de $\frac{dS}{dt} = 0$, não existir produção de entropia nem trocas com o exterior, *i.e.*,

$$\Pi = \Psi = 0. \quad (2.49)$$

- Obviamente que um sistema sofre um processo irreversível se,

$$\frac{dS}{dt} \geq 0, \quad (2.50)$$

de onde se compreende que a aproximação ao estado de equilíbrio é globalmente um processo irreversível.

Voltando à equação mestre se verifica que,

$$\sum_j W_{ij} f_{j,\text{est}} = \sum_j W_{ji} f_{i,\text{est}}, \quad (2.51)$$

estabelece que em um estado estacionário a soma de todas as transições (por unidade de tempo) para um estado i terá que ser compensada pelas transições desse estado para os restantes estados

j. Esta condição garante $\frac{dS(t)}{dt} = 0$, mas não exclui a produção de entropia, cujas componentes internas e externas devem se compensar (caso contrário se está em presença de um outro tipo de processo). Ou seja $\frac{dS(t)}{dt} = 0$, é uma condição necessária, mas não suficiente para a produção nula de entropia. Esta é condição essencial para a obtenção de um estado estacionário em não-equilíbrio.

Quanto à condição de equilíbrio, esta impõe a ausência de produção de entropia de qualquer espécie. Isto é, o estado de equilíbrio é definido através da imposição de vínculos (energia, volume, número de partículas) que implicam que o sistema deva ser fechado e isolado. Desta forma, o espaço de fase total fica dividido em regiões e dentro de cada uma as condições impostas pelos vínculos são respeitadas. Por conta dos vínculos, estados com diferentes valores são inacessíveis entre si fazendo com que a matriz de transição possa ser expressa numa forma reduzível.

Neste caso, $f_{i,est}$ corresponde à distribuição de equilíbrio $f_{i,eq}$ e é possível se analisarem individualmente as transições entre os pares,

$$W_{ij} f_{j,eq} = W_{ji} f_{i,eq}, \quad (2.52)$$

que é reconhecida como a **equação de balanço detalhado**. A condição Eq. (2.52) é aquela que é garantida pela *reversibilidade das trajectórias* essencial para que se atinja um estado de equilíbrio.

Convém relembrar que de acordo com a equivalência de ensembles, a equação de balanço detalhado pode ser utilizada em situações em que o sistema troca energia (sob forma de trabalho

ou calor) e/ou partículas com um sistema maior (reservatório) de tal forma que os vínculos são estabelecidos sobre o sistema total sendo que a matriz W será estabelecida por parâmetros que classificam o sistema.

Um exemplo interessante é o caso do modelo de Ising de primeiros vizinhos cujo Hamiltoniano é definido por, $H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j$, em que $\sigma_i = \pm 1$, em contato com um reservatório a temperatura T . Para um sistema de N elementos existem 2^N estados possíveis, o que significa que rapidamente se torna inviável a realização de cálculos diretos para determinação dos momentos estatísticos do sistema ou equivalentemente da função geradora, a função de partição, Z . No entanto, sabe-se que, nestas condições, partindo de um qualquer microestado inicial $\{\sigma(t_0)\}$, o sistema evoluirá ao fim de um tempo suficientemente longo para uma situação de equilíbrio com o reservatório de tal maneira que um microestado $i \equiv \{\sigma\}$ tem a sua probabilidade dada por $f_i = Z^{-1} \exp[-\beta \mathcal{H}_i]$ e f_i verifica a condição de balanço detalhado,

$$W_{ij} \frac{\exp[-\beta \mathcal{H}_j]}{Z} = W_{ji} \frac{\exp[-\beta \mathcal{H}_i]}{Z}. \quad (2.53)$$

A Eq. (2.53) permite evitar o cálculo da função de partição e estabelece a relação entre as taxas de transição compatíveis com o equilíbrio,

$$\frac{W_{ij}}{W_{ji}} = \exp[-\beta (\mathcal{H}_i - \mathcal{H}_j)]. \quad (2.54)$$

Ficam assim estabelecidas as relações fundamentais para a análise do modelo Ising através do método de Monte Carlo, no qual é definida uma cadeia de Markov sendo que em cada passo dessa cadeia se analisa a probabilidade de inverter o sinal de um dos spins mudando o microestado de j para i , ao qual

corresponde uma variação de energia $\Delta H = H_i - H_j$ que estabelece razão das taxas de transição entre os dois estados.

2.4.4 Especificações da equação mestre numa abordagem contínua

Para concluir o estudo básico da teoria estocástica, volto à equação de Chapman-Kolmogorov de forma a determinar a evolução dos momentos estatísticos de uma quantidade U , que é função do estado do sistema, $u(\mathcal{O})$, e pelo menos duas vezes diferenciável no valor do estado. Para determinar a evolução do valor médio em um (pequeno) intervalo de tempo Δt , sendo que o sistema iniciou sua evolução em t_0 e em um estado \mathcal{O}' temos,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int u(\mathcal{O}_3) \mathbb{T}(\mathcal{O}_3, t | \mathcal{O}_1, t_0) &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int u(\mathcal{O}_3) \{ \mathbb{T}(\mathcal{O}_3, t + \Delta t | \mathcal{O}_2, t) \mathbb{T}(\mathcal{O}_2, t | \mathcal{O}_1, t_0) \\ &\quad - \delta(\mathcal{O}_3 - \mathcal{O}_2) T(\mathcal{O}_3, t | \mathcal{O}_1, t_0) \} d\mathcal{O}_3 d\mathcal{O}_2. \end{aligned} \quad (2.55)$$

Em segunda ordem, pode se exprimir o valor $u(\mathcal{O})$ como,

$$u(\mathcal{O}) = u(\mathcal{O}') + \frac{\partial u(\mathcal{O}')}{\partial z} (\mathcal{O} - \mathcal{O}') + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u(\mathcal{O}')}{\partial z^2} (\mathcal{O} - \mathcal{O}')^2 + O((\mathcal{O} - \mathcal{O}')^3). \quad (2.56)$$

Inserindo a expansão na Eq. (2.55), a integração se separa em duas grandes partes: integrações para distâncias pequenas – conforme já apresentado quando se introduziu a condição de Lindberg – e para outras situações.

Primeiramente, definam-se os **momentos de Kramers-Moyal** de ordem n ,

$$M_n(\mathcal{O}, t) \equiv \int (\mathcal{O}' - \mathcal{O})^n \mathbb{T}(\mathcal{O}', t + \Delta t | \mathcal{O}, t) dz, \quad (2.57)$$

a partir dos quais se estabelecem os **coeficientes de Kramers-Moyal**,

$$D_n(\mathcal{O}, t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} M_n(\mathcal{O}, t). \quad (2.58)$$

O primeiro momento é associado com a parte determinista da evolução do sistema e corresponde a termos de arrasto ou de atrito. O segundo momento é associado com a estocasticidade do problema relacionada com difusão no sistema.

Ao mesmo tempo, se relembra a taxa de transição entre um estado \mathcal{O} e \mathcal{O}' como,

$$\mathbb{W}(\mathcal{O} | \mathcal{O}', t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \mathbb{T}(\mathcal{O}, t + \Delta t | \mathcal{O}', t). \quad (2.59)$$

Então,

$$\frac{\partial}{\partial t} \int u(z) \mathbb{T}(z, t | \mathcal{O}', t_0) dz = I_1 + I_2, \quad (2.60)$$

tal que,

$$I_1 \equiv \lim_{|\mathcal{O}-z| \rightarrow 0} \int \left[D_1(z, t) \frac{\partial u(z)}{\partial z} + \frac{1}{2} D_2(z, t) \frac{\partial^2 u(z)}{\partial z^2} \right] \mathbb{T}(z, t | \mathcal{O}', t_0) dz \quad (2.61)$$

$$I_2 \equiv \lim_{|\mathcal{O}-z| \rightarrow 0} \int \int u(z) [\mathbb{W}'(z | \mathcal{O}, t) \mathbb{T}(z, t | \mathcal{O}', t_0) - \mathbb{W}'(\mathcal{O} | z, t) \mathbb{T}(z, t | \mathcal{O}', t_0)] dz d\mathcal{O},$$

onde o integral I_1 se refere a pequenas variações da observável, variações contínuas, (conforme sugerido pela expansão em série de Taylor) e I_2 diz respeito a saltos (variações significativas), variações singulares.

Executando integrações por partes e lembrando que $\mathbb{T}(z, t | \mathcal{O}', t_0)$ é uma função normalizada, utilizando condições de fronteira naturais $\lim_{z \rightarrow \pm\infty} \mathbb{T}(\mathcal{O}, t | \mathcal{O}', t_0) = 0$, o integral I_1 pode ser reescrito de outra forma,⁸

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \mathbb{T}(\mathcal{O}_3, t | \mathcal{O}_1, t_0) &= \left\{ -\frac{\partial}{\partial \mathcal{O}_3} [D_1(\mathcal{O}_3, t) \mathbb{T}(\mathcal{O}_3, t | \mathcal{O}_1, t_0)] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \mathcal{O}_3^2} [D_2(\mathcal{O}_3, t) \mathbb{T}(\mathcal{O}_3, t | \mathcal{O}_1, t_0)] \right\} \\ &+ \int [\mathbb{W}'(\mathcal{O}_3 | \mathcal{O}_2, t) \mathbb{T}(\mathcal{O}_2, t | \mathcal{O}_1, t_0) - \mathbb{W}'(\mathcal{O}_2 | \mathcal{O}_3, t) \mathbb{T}(\mathcal{O}_3, t | \mathcal{O}_1, t_0)] d\mathcal{O}_2 \end{aligned} \quad (2.62)$$

Até se chegar a esta equação foi empregue um tratamento pouco formal das equações que merece algumas observações:

- Considerou-se a existência de um limite finito de $\mathbb{W}(z | \mathcal{O}, t)$ para qualquer valor de \mathcal{O} e z . Isso não é totalmente verdade. Dessa forma é a integração de I_2 em z deve ser feita numa lógica de valor principal;
- É possível a explicitação de momentos e coeficientes de Karmers-Moyal de ordem superior. No entanto, estes podem se mostrar nulos na abordagem considerada. Esta propriedade está relacionada com o Teorema de Pawula;
- Ao se eliminar a integração em z se assumiu a quantidade $u(z)$ como finita diferente de zero na região de validade do espaço de estados.
- Mais uma vez a equação tal como está explicitada descreve a evolução da probabilidade

⁸Caso o espaço de valores esteja limitado a a e b a anulação da probabilidade será verificada nesses pontos.

de transição. A equação para evolução da probabilidade vem dada quando se define a probabilidade da condição inicial.

A existência de uma solução estacionária implica que os momentos de Kramers-Moyal sejam independentes do tempo e que a condição seguinte seja verificada,

$$\left\{ -\frac{\partial}{\partial \mathcal{O}} [D_1(\mathcal{O})] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \mathcal{O}^2} [D_2(\mathcal{O})] \right\} f_s(\mathcal{O}) + \int [\mathbb{W}(\mathcal{O} | \mathcal{O}') f_s(\mathcal{O}') - \mathbb{W}(\mathcal{O}' | \mathcal{O}, t) f_s(\mathcal{O})] d\mathcal{O}' = 0 \quad (2.63)$$

onde $f_s(\mathcal{O}) = \lim_{t-t_0 \rightarrow \infty} \mathbb{T}(\mathcal{O}, t | \mathcal{O}', t_0)$.

2.4.5 Casos particulares da Eq. (2.62)

Analise-se então situações que correspondem a casos comuns.

- Se os termos determinista e de difusão são nulos se obtém a equação mestre Eq. (2.34), nomeadamente,

$$\frac{\partial \mathbb{T}(\mathcal{O}_3 | \mathcal{O}_1)}{\partial t} = \int [\mathbb{W}(\mathcal{O}_3 | \mathcal{O}_2) \mathbb{T}(\mathcal{O}_2 | \mathcal{O}_1) - \mathbb{T}(\mathcal{O}_3 | \mathcal{O}_1) \mathbb{W}(\mathcal{O}_2 | \mathcal{O}_3)] d\mathcal{O}_2, \quad (2.64)$$

onde se omitiu a dependência temporal por questões de simplicidade. Se recuperamos a Eq. (2.32), solução desta equação para intervalos de tempo $\Delta t = t - t_0$ pequenos, temos

$$\mathbb{T}(\mathcal{O}_3 | \mathcal{O}_1) = \left[1 - \Delta t \int \mathbb{W}(\mathcal{O}_2 | \mathcal{O}_1) d\mathcal{O}_2 \right] \delta(\mathcal{O}_3 - \mathcal{O}_1) + \Delta t \mathbb{W}(\mathcal{O}_3 | \mathcal{O}_1) + O(\tau^2). \quad (2.65)$$

Nestas circunstâncias, para o intervalo de tempo, o sistema apresenta uma probabilidade de se manter no estado \mathcal{O}_1 ($[1 - \Delta t \int \mathbb{W}(\mathcal{O}_2 | \mathcal{O}_1) d\mathcal{O}_2]$) e uma probabilidade de transitar

para um outro valor. Por conta da probabilidade não-nula de manutenção, este processo é conhecido como o **processo de salto**, correspondente a *um processo descontínuo*;

- Alternativamente, se o sistema apresentar taxas de transição nulas e os momentos de Kramers-Moyal diferentes de zero a Eq. (2.62) se reduz à Equação de Fokker-Planck,

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbb{T}(\mathcal{O}_3, t | \mathcal{O}_1, t_0) = -\frac{\partial}{\partial \mathcal{O}_3} [D_1(\mathcal{O}_3, t) \mathbb{T}(\mathcal{O}_3, t | \mathcal{O}_1, t_0)] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \mathcal{O}_3^2} [D_2(\mathcal{O}_3, t) \mathbb{T}(\mathcal{O}_3, t | \mathcal{O}_1, t_0)]. \quad (2.66)$$

Pelo critério de Lindeberg, pode se verificar que esta equação representa então um processo puramente contínuo.

- Existe ainda o caso trivial em que $\mathbb{W} = D_2 = 0$ que resulta na equação,

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbb{T}(\mathcal{O}, t | \mathcal{O}', t_0) = -\frac{\partial}{\partial \mathcal{O}} [D_1(\mathcal{O}, t) \mathbb{T}(\mathcal{O}, t | \mathcal{O}', t_0)], \quad (2.67)$$

que não é mais do que a equação de Liouville e que obviamente conduz à solução,

$$\mathbb{T}(\mathcal{O}, t | \mathcal{O}', t_0) = \delta(\mathcal{O} - \mathcal{O}'(t; \mathcal{O}')), \quad (2.68)$$

que como já mostrado é um caso especial de processo Markoviano.

É importante realçar que escrita da forma Eq. (2.62), a evolução da probabilidade faz ressonância como o importante Teorema da medida de Lévy-Itô ao separar as componentes descontínua (ou singular) e contínua do processo. Isto é o Teorema de Lévy-Itô assegura que qualquer processo estocástico branco resulta da composição de duas partes, uma contínua, cuja evolução está relacionada com a Equação de Fokker-Planck e distribuições de natureza Gaussiana (ou funcionalmente exponenciais) e uma outra parte singular ligada a processos de salto.

2.5 A abordagem estocástica no espaço das variáveis

Na seção anterior, partindo da equação mestre foi possível determinar a Equação de Fokker-Planck como limite de situações de transição contínua entre os estados de uma observável. Para situações onde existe uma evolução singular, a Equação de Fokker-Planck deixa de ser válida e é necessário considerar outros termos que reflitam essas condições. Na maioria das vezes, esses termos deixam a equação de evolução da probabilidade condicionada analiticamente insolúvel. Talvez por isso grande parte dos estudos feitos na última centena de anos tenha sido dedicada a problemas de evolução contínua, em claro excesso face à quantidade de fenômenos que envolvem saltos. Embora já mencionado, sublinha-se que a equação de Fokker-Planck é uma equação **determinista** relacionada com uma variável estocástica, trata-se de uma formulação feito no espaço das probabilidades e não no espaço das observáveis. Como fazer a ponte entre as duas representações? Para tal, sigo a linha histórica, e olho para a Equação de Fokker-Planck de uma observável multidimensional $\vec{\mathcal{O}}$ de forma um pouco diferente,

$$\frac{\partial}{\partial t} f(\vec{\mathcal{O}}, t) = \left[-\frac{\partial}{\partial \vec{\mathcal{O}}} D_i(\vec{\mathcal{O}}, t) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \vec{\mathcal{O}}^2} D_{ij}(\vec{\mathcal{O}}, t) \right] f(\vec{\mathcal{O}}, t). \quad (2.69)$$

$$f(\vec{\mathcal{O}}, t) = \exp \left[\mathbf{L}_{FP}(\vec{\mathcal{O}}) (t - t') \right] \delta(\vec{\mathcal{O}} - \vec{\mathcal{O}}'),$$

(\mathbf{L}_{FP} representa o operador de Fokker-Planck) em que se considerou a independência temporal dos coeficientes de Kramers-Moyal e por simplicidade tomou-se $t_0 = 0$ e $\mathcal{O}_0 = \vec{0}$. Esta equação pode ser resolvida para obter a evolução de probabilidade ao longo de um pequeno intervalo de

tempo δt . Escrevendo a delta de Dirac na representação de Fourier,

$$f(\vec{\mathcal{O}}, \delta t) \approx \frac{1}{(2\pi)^n} \int \exp[\mathbf{L}_{FP}(\vec{\mathcal{O}}) \delta t - i \mathbf{k} \vec{\mathcal{O}}] d\mathbf{k}. \quad (2.70)$$

Invertendo a transformada de Fourier tem-se, em primeira ordem,

$$f(\vec{\mathcal{O}}, \delta t) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n \det D_{ij}(\vec{\mathcal{O}}, t) \delta t}} \times \exp \left[-\frac{1}{2} \frac{(\vec{\mathcal{O}} - \vec{\mathcal{O}}' - D_i(\vec{\mathcal{O}}, t) \delta t)^T [D_{ij}(\vec{\mathcal{O}}, t)]^{-1} (\vec{\mathcal{O}} - \vec{\mathcal{O}}' - D_i(\vec{\mathcal{O}}, t) \delta t)}{\delta t} \right], \quad (2.71)$$

que corresponde a uma Gaussiana cuja matriz de covariância vale $D_{ij}(\vec{\mathcal{O}}, t)$ e valor médio $\vec{\mathcal{O}}' + D_i(\vec{\mathcal{O}}, t) \delta t$.

Conseqüentemente, o problema pode então ser interpretado como a evolução dinâmica da observável $\vec{\mathcal{O}}$, a cada intervalo δt , de acordo com uma lei determinista $D_i(\vec{\mathcal{O}}, t)$ conjugada com flutuações Gaussianas, de largura $D_{ij}(\vec{\mathcal{O}}, t) \delta t$. Ou seja, no espaço da observável é possível então apresentar-se a sua evolução na forma,

$$\vec{\mathcal{O}} = \vec{\mathcal{O}}' + D_i(\vec{\mathcal{O}}, t) \delta t + D_{ij}(\vec{\mathcal{O}}, t) \sqrt{\delta t}. \quad (2.72)$$

No limite $\delta t \rightarrow 0$ podemos então definir uma variável estocástica $\eta(t)$, **não diferenciável**, tal que,

$$\langle \eta(t) \rangle = 0, \quad (2.73)$$

$$\langle \eta(t) \eta(t)^T \rangle = D_{ij}(\mathcal{O}, t),$$

de tal maneira que a equação da observável poderá ser apresentada como,

$$\mathcal{O}_i = \mathcal{O}'_i + D_i(\mathcal{O}, t) \delta t + \eta(t) \sqrt{\delta t}. \quad (2.74)$$

Apesar de não ser diferenciável a equação pode ser transformada em uma equação diferencial estocástica,

$$\frac{d\vec{\mathcal{O}}}{dt} = a(\vec{\mathcal{O}}, t) + b(\vec{\mathcal{O}}, t) \eta_t. \quad (2.75)$$

Para uma situação em que,

$$\langle \eta(t) \eta(t') \rangle = \sigma \delta(t - t'). \quad (2.76)$$

$\vec{\mathcal{O}}$ corresponde à velocidade \vec{v} , $a(\vec{\mathcal{O}}, t) = -\gamma \vec{v}$ e $b(\vec{\mathcal{O}}, t) = 1$, a Eq. (4.6) é a *Equação de Langevin*.

Para se obter a solução da Eq. (2.75) para a evolução da observável \mathcal{O} entre t e $t + \Delta t$ (volto ao caso unidimensional), a equação diferencial é trivialmente convertida na equação integral,

$$\mathcal{O}(t) - \mathcal{O}(t + \Delta t) = \int_t^{t+\Delta t} a(\mathcal{O}, t) dt + \int_t^{t+\Delta t} b(\mathcal{O}, t) \eta_t dt. \quad (2.77)$$

A equação anterior torna claro um problema: fruto do seu perfil de ruído branco o processo estocástico η não é diferenciável. Não sendo diferenciável, não é possível efetuar a integração tradicional de Newton e Leibniz. Na realidade, a segunda parcela do lado direito da Eq. (2.77) deve ser vista como uma representação do integral de Stieltjes;

Definição 2 *Explicitamente, a integral*

$$\int_t^{t+\Delta t} h(t) dg(t), \quad (2.78)$$

em que h e g são funções reais de variável real denominadas integrando e integrador, assume o papel do limite da soma,

$$S(\mathcal{P}, h, g) \equiv \sum_{i=1}^n h(t_i) [g(\mathcal{O}_{i-1}) - g(\mathcal{O}_i)], \quad (2.79)$$

onde t_i se encontra dentro no intervalo correspondente à i -ésima partição do intervalo de integração $[t, t + \Delta t]$ ($\mathcal{O}_1 = t$ e $\mathcal{O}_n = t + \Delta t$), de tal forma que para qualquer valor real $\varepsilon > 0$ e um valor real I existe uma partição \mathcal{P} tal que,

$$|S(\mathcal{P}, h, g) - I| < \varepsilon. \quad (2.80)$$

Para o caso referente às equações diferenciais estocásticas, a função $g(t)$ assume a notação W_t sendo designada por **Processo de Wiener**.

Aponto mais uma vez que as operações de derivação e integração não são sequer erradas no cenário de ruído branco sobre o qual o processo de Wiener está estabelecido. Ou seja, muito embora nos sintamos tentado a assumir,

$$\frac{dW_t}{dt} = \eta_t, \quad (2.81)$$

essa representação não faz qualquer sentido. Exatamente por isso se recorre ao integral de Stieltjes.

Assim, o elemento do processo de Wiener,

$$w_t(\Delta t) = W(t + \Delta t) - W(t) = \int_t^{t+\Delta t} dW_{t'}, \quad (2.82)$$

por aplicação do teorema central do limite $w(\Delta t)$ é uma variável distribuída Gaussianamente.

Tenho assim um novo processo estocástico completamente Markoviano onde as delta de Dirac são convenientemente eliminadas;

$$[w_t(\Delta t) w_t(\Delta t')] = \int_t^{t+\Delta t} dW_{t_1} \int_t^{t+\Delta t'} dW_{t'}, \quad (2.83)$$

e usando a propriedade do ruído Eq. (2.76), é fácil verificar que aplicando média sobre amostras,

$$\langle w_t(\Delta t) w_t(\Delta t') \rangle = \sigma^2 \min(\Delta t, \Delta t'). \quad (2.84)$$

Claramente a representação diferencial é uma representação analítica. Em implementações numéricas, deve se prestar atenção na versão discreta (embora existam depois abordagens mais sofisticadas).

2.5.1 A representação de Itô e Stratonovich

A construção de equações diferenciais estocásticas para descrever um processo estocástico é claramente de grande utilidade sob o ponto de vista prático, dado que integrações são sistematicamente mais fáceis de calcular do que somas; porém, em uma perspectiva física, esta construção tem enormes problemas como a divergência da variância da componente estocástica da força e a integração de Stieltjes,

$$S(\mathcal{P}, f, g) \equiv \sum_{i=1}^n \mathcal{F}(g_{t_i}, t_i) [g(s_i) - g(s_{i-1})], \quad (2.85)$$

Na sua implementação, *resta na Eq. (2.79) uma questão importante, o instante t_i deve estar compreendido no intervalo $[s_{i-1}, s_i]$, mas exatamente onde?* Existem duas abordagens distintas para tanto:

- a definição de Itô na qual o ruído é calculado no início do intervalo de w ;

$$S_I(\mathcal{P}, f, g) \equiv \sum_{i=1}^n \mathcal{F}(W_{s_{i-1}}, s_{i-1}) [W(s_i) - W(s_{i-1})], \quad (2.86)$$

- a definição de Stratonovich na qual se considera uma média do valor do ruído entre no início do intervalo de partição e fim de intervalo de partição,

$$S_S(\mathcal{P}, f, g) \equiv \sum_{i=1}^n \mathcal{F}\left(W_{\frac{s_i+s_{i-1}}{2}, \frac{s_i+s_{i-1}}{2}}\right) [W(s_i) - W(s_{i-1})]. \quad (2.87)$$

Matematicamente, a formulação de Itô é mais prática do que a formulação de Stratonovich.

Porém, esta maior simplicidade tem um preço; novas regras de diferenciação. A formulação de Stratonovich é vista como mais física. Tome-se como caso de estudo o problema das colisões; fazendo-se medições de uma observável do sistema em um intervalo de tempo δt , durante o qual o sistema é sujeito a um conjunto interações com o seu meio envolvente que apresenta um tempo de relaxação τ . Wong & Kazai provaram que no limite em que esse tempo de relaxação vai para zero, a formulação dinâmica de Stratonovich tem como soluções os momentos compatíveis com a função de densidade de probabilidade que resolve a solução de Fokker-Planck associada. A solução de Itô é apenas válida quando esse tempo de relaxação é explicitamente zero.

Apesar da distinção, as duas representações são conversíveis muito facilmente, para uma equação diferencial estocástica na representação de Stratonovich,

$$d\mathcal{O} = a(\mathcal{O}, t) dt + b(\mathcal{O}, t) dW_t. \quad (2.88)$$

corresponderá uma equação diferencial estocástica equivalente na interpretação de Itô,

$$d\mathcal{O} = a_I(\mathcal{O}, t) dt + b_I(\mathcal{O}, t) dW_t. \quad (2.89)$$

tal que,

$$b_I(\mathcal{O}, t) = b(\mathcal{O}, t), \quad (2.90)$$

$$a_I(\mathcal{O}, t) = a(\mathcal{O}, t) + \frac{1}{2} \frac{\partial b(\mathcal{O}_{t_i})}{\partial \mathcal{O}} b(\mathcal{O}_{t_i}).$$

Durante toda a dissertação será utilizada uma representação de Stratonovich do ruído.

Por razões históricas tratei até aqui a questões de um ruído Gaussiano,

$$\frac{d\vec{\mathcal{O}}}{dt} = a(\vec{\mathcal{O}}, t) + b(\vec{\mathcal{O}}, t) \eta_t, \quad (2.91)$$

Trabalho posterior corroborou a introdução de equações diferenciais estocásticas em que ruídos de outra natureza. É um caso particular de ruído telegráfico que terei como objetivo no que resta da dissertação.

Capítulo 3

O Ruído Telegráfico

3.1 Aspectos teóricos

O ruído telegráfico, também conhecido como ruído dicotômico ou ruído Browniano de 2 estados[20] corresponde a um processo estocástico $\{\zeta_t\}$ que poderá assumir dois valores $\zeta = \{a, b\}$. Ao longo do tempo o sistema transita de um valor para o outro com taxas pré-definidas:

- μ quando de b para a ;
- $\bar{\mu} = \rho \mu$ quando de a para b .

Nestas circunstâncias, se define a Equação Mestra,

$$\begin{cases} \frac{\partial f(a,t|\zeta_0,t_0)}{\partial t} = \mu f(b,t|\zeta_0,t_0) - \bar{\mu} f(a,t|\zeta_0,t_0) \\ \frac{\partial f(b,t|\zeta_0,t_0)}{\partial t} = \bar{\mu} f(a,t|\zeta_0,t_0) - \mu f(b,t|\zeta_0,t_0) \end{cases}, \quad (3.1)$$

em que pela conservação de probabilidade $f(a,t|\zeta_0,t_0) + f(b,t|\zeta_0,t_0) = 1$. A solução geral da Eq. (3.1) é conhecida e se obtém sem grande dificuldade. Nesta dissertação, assumo que o

ruído tem sempre a mesma condição inicial,

$$f(\zeta, t_0 | \zeta_0, t_0) = \delta_{\zeta, \zeta_0}. \quad (3.2)$$

Sob estas condições a solução fica,

$$\begin{cases} f(a, t | \zeta_0, t_0) = p + \exp[-\alpha(t - t_0)] (\bar{p} \delta_{a, \zeta_0} - p \delta_{b, \zeta_0}) \\ f(b, t | \zeta_0, t_0) = \bar{p} - \exp[-\alpha(t - t_0)] (\bar{p} \delta_{a, \zeta_0} - p \delta_{b, \zeta_0}) \end{cases}, \quad (3.3)$$

onde,

$$\alpha \equiv \mu(1 + \rho) = \mu \hat{\rho}. \quad (3.4)$$

Para tempos suficientemente longos, *i.e.*, $t - t_0 \gg \alpha^{-1}$, a probabilidade é dada por,

$$f_{\text{est}}(\zeta) = p \delta_{a, \zeta} + \bar{p} \delta_{b, \zeta} \quad (3.5)$$

sendo que,

$$p \equiv \frac{\mu}{\mu + \bar{\mu}} = \frac{\mu}{\mu(1 + \rho)} = \frac{\mu}{\alpha} = \frac{\mu}{\mu \hat{\rho}} = \hat{\rho}^{-1}, \quad \bar{p} \equiv 1 - p = \frac{\bar{\mu}}{\mu + \bar{\mu}} = \frac{\hat{\rho} - 1}{\hat{\rho}}. \quad (3.6)$$

Da Eq. (3.3) se determina a evolução do sistema entre dois instantes t e t' que apresento no quadro seguinte,

$$\begin{aligned} f(a, t | a, t') &= p + \bar{p} e^{-\alpha(t-t')} & f(a, t | b, t') &= p - p e^{-\alpha(t-t')} \\ f(b, t | a, t') &= \bar{p} - \bar{p} e^{-\alpha(t-t')} & f(b, t | b, t') &= \bar{p} + p e^{-\alpha(t-t')} \end{aligned} \quad (3.7)$$

Partindo então da equação mestra, é possível determinar os momentos de ordem n do ruído telegráfico,

$$\begin{aligned} \langle \zeta(t_1) \dots \zeta(t_n) \rangle &= \sum_{\zeta(t_1), \dots, \zeta(t_n)} [\zeta(t_1) \dots \zeta(t_n)] p(\zeta(t_1), \dots, \zeta(t_n)) \\ &= \sum_{\substack{\zeta(t_1), \dots, \zeta(t_n) \\ t_1 > \dots > t_n}} [\zeta(t_1) \dots \zeta(t_n)] p[\zeta(t_1) | \zeta(t_2)] \dots p[\zeta(t_{n-1}) | \zeta(t_n)] p[\zeta(t_n)]. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Dou agora particular atenção ao segundo cumulante,¹

$$\begin{aligned} \langle\langle \zeta(t_1) \zeta(t_2) \rangle\rangle &= \langle \zeta(t_1) \zeta(t_2) \rangle - \langle \zeta(t_1) \rangle \langle \zeta(t_2) \rangle \\ &= \Delta^2 [p\bar{p}e^{-\alpha|t_1-t_2|} - \bar{p}^2 e^{-\alpha(t_1+t_2)}] - \Delta \langle \zeta \rangle \bar{p} (e^{-\alpha t_1} + e^{-\alpha t_2}). \end{aligned} \quad (3.9)$$

No limite de tempo longo,

$$\begin{aligned} \langle\langle \zeta(t_1) \zeta(t_2) \rangle\rangle &= \Delta^2 p\bar{p}e^{-\alpha|t_1-t_2|} \\ &= \mathcal{B}\mathcal{D}e^{-\alpha|t_1-t_2|}, \end{aligned} \quad (3.10)$$

onde,

$$\mathcal{A} = ap + b\bar{p}, \quad \mathcal{B} = (a-b)p, \quad \mathcal{D} = (a-b)\bar{p}. \quad (3.11)$$

¹Preste atenção que aqui não foram feitas considerações relativamente ao ordenamento temporal.

Chamo agora a atenção para o seguinte fato. Mantendo a amplitude dos dois lados do ruído, *i.e.*, preservando o valor de Δ e aumentando a frequência do ruído ($\alpha \rightarrow \infty$), a correlação $\langle\langle \zeta(t_1) \zeta(t_2) \rangle\rangle$ tenderá para zero, o que não corresponde à situação de um ruído gaussiano colorido.

Ruído gaussiano com cor O ruído Gaussiano colorido pode ser obtido através da Equação de Langevin,

$$d\xi = -\alpha \xi dt + \alpha \sigma dW_t, \quad (3.12)$$

onde W_t corresponde ao valor do processo de Wiener com $dW = \eta dt$. Usando a Equação de Fokker-Planck pode se verificar que a distribuição é Gaussiana e a co-variância vale para tempos t_1 e t_2 maiores do que α^{-1} ,

$$\langle\langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle\rangle = \alpha \sigma^2 \exp[-\alpha |t_1 - t_2|], \quad (3.13)$$

que no limite de ruído branco, $\alpha \rightarrow \infty$, tende,

$$\langle\langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle\rangle = 2 \sigma^2 \delta(t_1 - t_2). \quad (3.14)$$

Tenho então que, para que o ruído telegráfico tenha um comportamento de ruído branco, a amplitude do ruído Δ deverá evoluir à medida que o tempo característico do ruído τ_n vai para zero.

Sendo ξ gaussiano o cálculo dos momentos $\langle \xi(t_1) \dots \xi(t_n) \rangle$ repetirá o Teorema de Isserlis-Wick, logo,

$$\langle \xi(t_1) \dots \xi(t_{2n}) \rangle = \sum \prod \langle \xi(t_l) \xi(t_{l'}) \rangle, \quad (3.15)$$

onde com $\sum \prod$ pretendo representar a soma sobre todas as combinações de partição de $\xi(t_1) \dots \xi(t_{2n})$ em diferentes pares que origina $(2n)! / (2^n n!)$ termos.

Olhando a Eq. (3.10),

$$\begin{aligned} \langle\langle \zeta(t_1) \zeta(t_2) \rangle\rangle &= \Delta^2 p \bar{p} e^{-\alpha|t_1-t_2|}. \\ &= \Delta^2 \frac{\hat{\rho} - 1}{\hat{\rho}^2} \frac{\mu \hat{\rho}}{\mu \hat{\rho}} e^{-\mu \hat{\rho} |t_1-t_2|} \\ &= \left(\frac{\hat{\rho} - 1}{\hat{\rho}^3} \frac{\Delta^2}{\mu} \right) \times (\mu \hat{\rho} e^{-\mu \hat{\rho} |t_1-t_2|}). \end{aligned}$$

Tenho que no limite em que $\mu \rightarrow \infty$, que é equivalente a fazer o tempo τ_n ir para zero, o segundo fator da equação anterior tenderá para $2\delta(t_1 - t_2)$. Para que o primeiro fator não vá para zero, que a amplitude de ruído $\Delta = a - b$ deverá crescer com $\sqrt{\mu}$, o que significa que no limite branco os valores de amplitude do ruído devem ser infinitos. As funções de correlação de ordem superior serão discutidas no capítulo referente ao método de solução.

3.2 Implementação numérica do ruído

Quer como meio de corroboração dos resultados analíticos, quer como para a obtenção de resultados para os quais a solução analítica seja impossível (ou de pouca valia em termos práticos), é importante mostrar como o ruído telegráfico é implementado numericamente. Neste ponto, surgem duas opções possíveis:

I. Olhando à Eq. (3.3) e assumindo uma dada condição inicial, x_0 , se analisa a probabilidade de o ruído ter um valor x no instante t , comparando $f(x, t | x_0, t_0)$ com um número aleatório uniformemente distribuído entre 0 e 1, r . Se o valor $f(x, t | x_0, t_0) > r$ assume o estado x . Essa verificação é feita a um passo de tempo Δ_t que deve ser ajustado de acordo com a menor escala típica que os parâmetros do problema estabelecem. Este esquema é aquele utilizado por Debashis Barik e colaboradores [58]

No caso que aqui apresento, utilizo uma proposta baseada no problema de primeira passagem. Neste caso, a Equação Mestra é resolvida de acordo com uma condição extra,

$$\begin{cases} P(b, t | a, t_0) = 0 \iff x_0 = a \\ P(a, t | b, t_0) = 0 \iff x_0 = b \end{cases} . \quad (3.16)$$

A respectiva solução implica que a probabilidade de o ruído alterar o seu estado de a para b ao fim de um intervalo de tempo $\delta_t = t - t_0$ vale,

$$P_{a \rightarrow b}(\delta_t) = \bar{\mu} \exp[-\bar{\mu} \delta_t], \quad (3.17)$$

assim como a probabilidade de o ruído alterar o seu estado de b para a ao fim de um intervalo de tempo $\delta_t = t - t_0$ vale,

$$P_{b \rightarrow a}(\delta_t) = \mu \exp[-\mu \delta_t]. \quad (3.18)$$

Tenho assim as bases do esquema de simulação do ruído tal como implementei na simulação:

II. Estando o ruído no valor a (b) num dado instante t_0 , sorteio um número δ_t exponencialmente distribuído com escala $\bar{\mu}^{-1}$ (μ^{-1}); então o ruído mantém o seu valor a (b) até que no

instante $t_0 + \delta_t = t$ o ruído adquire o valor $b(a)$ e para efeitos de cálculo do novo tempo de espera $t_0 \leftarrow t$. E daí sucessivamente.

Por mera opção todas as implementações feitas nesta dissertação tem como valor inicial do ruído $x_0 = a$.

Na Figura 3.1 estão representados três casos de ruído telegráfico para diferentes valores.

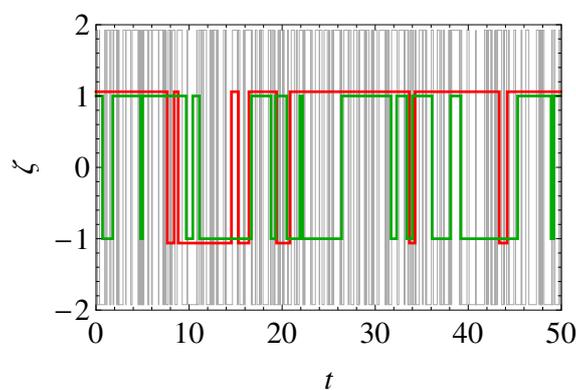


Figura 3.1: Excerto de séries temporais para diferentes tipos de ruídos telegráficos. Em verde, $a = -b = 1$ e $\mu = \bar{\mu} = 1$ em vermelho $a = -b = 3/\sqrt{8}$ e $\mu = 2/3 = \bar{\mu} = 1/3$ e em cinza $a = -b = \sqrt{37/10}$ e $\mu = \bar{\mu} = 5$. Os valores das amplitudes são ajustados para que a temperatura seja a mesma.

Capítulo 4

O Modelo Dinâmico e o Método de Solução

Nesta dissertação, analisarei problemas de não-equilíbrio tendo por base o seguinte conjunto de equações, para a posição, x , e velocidade, v , de uma partícula de massa m , sujeita a confinamento espacial, dissipação e ação de uma força estocástica, ς , que representa o efeito da interação entre a partícula e um reservatório.¹

$$\begin{cases} m \frac{dv(t)}{dt} = -\gamma v(t) - kx(t) - \varsigma_t \\ v(t) = \frac{dx(t)}{dt} \end{cases} \quad (4.1)$$

Na Eq. (4.1), os parâmetros são os seguintes:

- γ é o coeficiente de dissipação criada pelo contato entre a partícula e o meio em que esta se encontra ou onde esta está assente;
- k reflete a concavidade do potencial confinante da partícula. Sob o ponto de vista físico, este potencial pode representar um potencial de interação² de origem diversa, um aparato

¹Discorrerei sobre o conceito de reservatório mais adiante.

²O potencial harmônico é na maioria das vezes uma aproximação relativamente à maioria dos potenciais, contudo uma muito boa aproximação para uma grande classe das situações naturais/experimentais com que se lida.

mecânico como uma mola ou em situações mais comuns sob o ponto de vista nanométrico uma armadilha ótica (*optical tweezer*) que se sabe ter um comportamento muito próximo da harmonicidade [34].

Ao contrário do que sucede com o trabalho original sobre a introdução de equações diferenciais estocásticas a partir da Equação Mestra, na Eq. (4.9), ς_t representa um ruído absolutamente genérico. A utilização de formas não-Gaussianas foi já legitimada em diferentes trabalhos que anteriormente mencionei e encontra relevância em diversos problemas, nomeadamente em problemas de transporte em escala nanométrica como são os motores moleculares.

Começo por fazer uma discussão do caso tradicional do problema do movimento Browniano estudado por A. Einstein onde ς é uma variável estocástica Gaussiana. Essa propriedade é assinalada com a mudança de notação,

$$\varsigma \rightarrow \eta. \quad (4.2)$$

Nessa linha assumirei $k \rightarrow 0$, pois o potencial não terá relevância na análise que se segue, e retorno à famosa situação da partícula de pólen em água. Essa partícula de massa m interagirá com as partículas do meio, de massa m_b , de tal forma que $m_b \ll m$.³ Considerando um infinitésimo de tempo, a partícula focal tem um número elevadíssimo de colisões com as restantes. Essas colisões têm um tempo de relaxação pequeno (da ordem de 10^{-8} segundos), do ponto de vista experimental dificilmente acessível. Consequentemente, essas colisões foram assumi-

³Uma partícula de pólen tem uma massa da ordem de 10^4 vezes a massa de uma molécula de água.

das independentes equivalentemente ao que acontece na construção de Boltzmann para a teoria cinética dos gases⁴. Por razões que se prendem com a subsequente simplificação matemática introduzida por esta hipótese e a sua qualidade quando se confrontam resultados analíticos e vastíssimo leque de situações experimentais e observacionais, a assunção de independência das colisões é prevalente na maioria dos estudos.

Mediante estas circunstâncias, é simples de entender que existirá um maior número de colisões do lado correspondente ao sentido de movimento, colisões que causam uma diminuição da energia cinética da partícula. Além do mais, quanto mais celeremente a partícula se move, com mais partículas colidirá. Ou seja, somando todas estas forças pode se entender que existirá uma resultante proporcional à velocidade da partícula, que, não obstante, se comporta de maneira aleatória. Desta forma é possível entender a força de dissipação como a resultante das colisões.

Contudo, esta abordagem simplista não compreende o carácter difusivo do movimento. Logo, é preciso considerar a componente errática da resultante das forças. É possível então verificar que para este problema a dissipação e a flutuação tem a mesma fonte. No seu estudo, Einstein quantificou esta relação, através da famosa relação de flutuação-dissipação (em uma dimensão e $k_B = 1$),

$$D\gamma = 2T, \quad (4.3)$$

⁴Neste problema não existe a partícula intrusa focal.

onde D representa a constante de difusão da partícula,

$$\langle [x(t + t_0) - x(t_0)]^2 \rangle \sim D (t - t_0), \quad (4.4)$$

e T a temperatura a que o meio se encontra. A Eq. (4.3) implica,

$$\langle \eta(t) \eta(t') \rangle = 2 \gamma T \delta(t - t'), \quad (4.5)$$

e se relaciona com o teorema de flutuação dissipação⁵ mais tarde introduzido por H. Nyquist na sequência do trabalho conjunto com Johnson que permitiu quantificar a relação entre a variância da diferença de potencial num condutor, sua resistividade e a temperatura a que se encontra.

Sendo que o número de moléculas do meio é muito superior, num contexto Termodinâmico, este pode ser considerado como um reservatório e as colisões entre a partícula focal e as partículas do meio corresponderão a troca de calor entre os dois sub-sistemas.

Fica desta forma definido o tipo mais comum de reservatório, **o reservatório interno, no qual a dissipação é uma propriedade intrínseca do mesmo e faz com que a relação de flutuação-dissipação seja verificada**, assim como o teorema homônimo [35, 37].

Existem porém casos em que o problema em estudo tem uma escala de relaxamento da interação partícula-meio que não pode ser ignorada. Uma situação desse tipo ocorre quando as partículas do meio tem massa comparável com a massa da partícula em estudo. Nesse caso,

⁵O Teorema de Flutuação dissipação estabelece que se um sistema verifica a condição de balanço detalhado (*i.e.*, em equilíbrio térmico), a aplicação de uma pequena força nesse sistema implica numa resposta que equivale a uma flutuação espontânea. Esta relação permite fazer a ponte entre a relaxação de sistema colocados fora de equilíbrio e a sua relaxação para o equilíbrio (mais detalhes podem ser consultados em [55]).

as colisões não podem ser assumidas como independentes. Não obstante, a quebra de independência não tem que implicar uma modificação no caráter do reservatório.

A acomodação deste caso em uma situação de Reservatório Interno foi levada a cabo por Mori e Kubo [37]. De acordo, a Eq. (4.1) foi generalizada para,

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = - \int_{t_0}^t \Gamma(t-t') v(t') dt' - k x(t) + \xi(t), \quad (4.6)$$

em que $\xi(t)$ obedece a uma distribuição Gaussiana,

$$\langle \langle \xi(t_2) \xi(t_1) \rangle \rangle = \frac{\gamma}{\tau} T \exp \left[-\frac{|t_1 - t_2|}{\tau} \right], \quad \Gamma(t_1 - t_2) = \frac{\gamma}{\tau_\Gamma} \exp \left[-\frac{|t_1 - t_2|}{\tau_\Gamma} \right], \quad (\alpha = \tau^{-1}). \quad (4.7)$$

A Eq. (4.7) permite a igualdade dos dois espectros quando $\tau_\Gamma = \tau$. Nos limites ($\tau \rightarrow 0, \tau_\Gamma \rightarrow 0$), a Eq. (4.7) fica $\langle \xi(t_2) \xi(t_1) \rangle = 2\gamma T \delta(t_2 - t_1)$, como Eq. (4.5), e a sistema de equações diferenciais estocásticas Eq. (5.17) é recuperado, $\eta(t) \equiv \xi_{\tau \rightarrow 0}(t)$.

Se tem então que, quando $\tau \neq \tau_\Gamma$, a fonte das flutuações não está relacionada com a origem da dissipação. **Fontes de flutuação que não têm qualquer relação com o fenômeno de dissipação a que o sistema está sujeito são denominados de reservatórios externos.** A Equação para a velocidade no caso mais simples de um reservatório externo é,

$$m \frac{dv}{dt} = -\gamma v(t) - k x(t) + \xi(t), \quad (4.8)$$

A situação mais direta a ser descrita por uma equação deste tipo é o caso de uma partícula num meio dissipativo sujeita a uma força aleatória colorida [38, 39, 40]. Mantendo a descrição

de partículas em fluidos, pode se considerar uma partícula carregada dentro de Hélio líquido a uma temperatura acima da transição superfluida⁶ — de forma a que o ruído térmico possa se assumir negligenciável — e sobre esta aplicar um campo elétrico Gaussianamente distribuído e com cor.

A definição de reservatório interno e externo permite entender que estes são basicamente distinguíveis a partir da forma como afetam a energia do sistema; enquanto um reservatório interno é sempre um reservatório de calor, o reservatório externo corresponde na maioria das vezes a um reservatório de trabalho, i.e., modifica a energia do sistema realizando trabalho sobre ele.

Discuto agora um ponto importante: a utilização do termo *Temperatura* para a quantidade T para um sistema em contato com um reservatório externo. Apesar de sob uma perspectiva Termodinâmica mais ortodoxa isso possa ser considerado um erro, mantereí tal denominação apoiado no fato de T ter unidades de energia, fornecendo uma escala típica para as flutuações da velocidade (como mostrarei no capítulo referente aos resultados) e da posição induzidas pelo reservatório (externo) na forma de trabalho positivo/negativo exercido sobre o sistema. Esse entendimento mais abrangente do conceito de temperatura tem sido por exemplo aplicado na estatística de vórtices supercondutores de onde um formalismo atérmico — totalmente análogo à Termodinâmica clássica — foi derivado. Neste caso, a temperatura reflete a incerteza na localização dos vórtices [42]. Além disso, definições alternativas de temperatura concorrentes

⁶Temperatura crítica para He⁴ é 2.17 kelvin e para o He³ é da ordem do milikelvin [31].

com a equipartição de energia e a relação de flutuação-dissipação foram também utilizados em dinâmica estocástica com reservatórios não-Gaussianos, nomeadamente Poissonianos [43]. Fica então defendida a utilização deste conceito em reservatórios externos, particularmente em reservatórios quantitativamente representados por um ruído telegráfico, que é o tema principal do trabalho que apresento.

Em um contexto de sistemas complexos, pode se interpretar a volatilidade de um mercado financeiro como a sua temperatura, ou então a dispersão de opiniões num sistema social também pode ser vista dessa forma.

4.1 O método de solução

Como escrevi, os problemas que abordarei na presente dissertação são descritos através do conjunto de equações

$$\begin{cases} m \frac{dv(t)}{dt} = -\gamma v(t) - k x(t) - \zeta_t \\ v(t) = \frac{dx(t)}{dt} \end{cases} . \quad (4.9)$$

que permitem determinar a evolução da velocidade, v , e da posição, x , de uma partícula de massa m .

A dissipação e o potencial confinante garantem a existência de uma solução estacionária plena. Na situação $k = 0$, a distribuição de velocidades relaxa a situação estacionária, com uma escala típica,

$$\tau_r \equiv \frac{m}{\gamma}. \quad (4.10)$$

mas o sistema apresenta distribuições dependentes no tempo para a posição, o que significa que a partícula difunde. Para $k \neq 0$ pode se definir uma segunda escala de tempo,

$$\tau_s \equiv \sqrt{\frac{m}{k}}.$$

Estes dois parâmetros — que posso considerar serem de Natureza dinâmica — definem em conjunto com a massa da partícula duas escalas de tempo características do problema com origem mecânica. Apenas a primeira escala definirá a relaxação do sistema; o segundo tempo, juntamente com o primeiro estabelece a escala das oscilações geradas pelo potencial harmônico. Nos dois problemas que aqui tratarei existirá uma nova escala que vem da cor do ruído, $\tau_n = \alpha^{-1}$.

Como referenciado na Capítulo 2, esta formulação no espaço das observáveis tem correspondência com uma formulação no espaço das probabilidades. Impondo condições iniciais para posição e velocidade, a Eq. (2.62) apresenta as seguintes formas:

- Se o ruído é gaussiano branco (reservatório interno), emerge a denominada equação de Kramers,

$$\frac{\partial f(x, v, t)}{\partial t} = -\frac{\partial [v f(x, v, t)]}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial v} \left[\frac{\gamma v + kx}{m} f(x, v, t) \right] + \frac{\gamma T}{m} \frac{\partial^2 f(x, v, t)}{\partial v^2}; \quad (4.11)$$

- Se o ruído é gaussiano colorido correspondendo a um reservatório externo, a distribuição de probabilidade corresponde a,

$$\frac{\partial}{\partial t} \int f'(x, v, \xi, t) d\xi = \int \left[-\frac{\partial}{\partial x} v + \frac{\partial}{\partial v} \frac{\gamma v + kx - \xi}{m} + \alpha \frac{\partial}{\partial \xi} + \alpha^2 \gamma T \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \right] f'(x, v, \xi, t) d\xi, \quad (4.12)$$

e,

$$f(x, v, t) = \int f'(x, v, \xi, t) d\xi. \quad (4.13)$$

- Para a situação de ruído telegráfico a equação de evolução da densidade de probabilidade

é,

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} f'(x, v, a, t) = \left[-\frac{\partial}{\partial x} v + \frac{\partial}{\partial v} \frac{\gamma v + kx - a}{m} \right] f'(x, v, a, t) + \mu f'(x, v, b, t) - \bar{\mu} f'(x, v, a, t) \\ \frac{\partial}{\partial t} f'(x, v, b, t) = \left[-\frac{\partial}{\partial x} v + \frac{\partial}{\partial v} \frac{\gamma v + kx - b}{m} \right] f'(x, v, b, t) + \bar{\mu} f'(x, v, a, t) - \mu f'(x, v, b, t) \end{cases}, \quad (4.14)$$

com,

$$f(x, v, t) = \sum_{\zeta} f'(x, v, \zeta, t). \quad (4.15)$$

Como se vê e comprovado por diferentes estudos em que usam-se simplificações como o superamortecimento do sistema e simetria do ruído (no caso telegráfico), as soluções para os casos externos aqui apresentados não são simples, na realidade não são atingíveis de forma exata. Sendo o problema que tenho em mãos mais complexo do aqueles até agora tratados, recorrerei ao tratamento do problema no espaço das observáveis.

4.2 Método de Laplace-Fourier e o teorema do valor final

A esta descrição no espaço das observáveis se encontra associada uma descrição no espaço das probabilidades tal como apontado na secção anterior. Numa perspectiva experimental, se está principalmente interessado nos momentos estatísticos. Além do mais, a partir dos momentos — ou dos cumulantes — é possível construir a função de densidade de probabilidade.

Para a determinação dos momentos, sem necessidade de recorrer ao espaço de probabilidade, considerarei a transformação de Laplace-Fourier,

$$\mathcal{O}(iq) \equiv \int \mathcal{O}(t) e^{-iqt} dt. \quad (4.16)$$

Para evitar incômodos relacionados com a integração ao longo do eixo da abcissa, a transformada de Laplace-Fourier é feita realizando um pequeno deslocamento de ε , tal que,

$$iq \rightarrow iq + \varepsilon, \quad (4.17)$$

sendo que no fim dos cálculos tomarei o limite $\varepsilon \rightarrow 0$. A Eq. (4.9) transformada fica então,

$$\begin{cases} m(iq + \varepsilon) \tilde{v}(iq + \varepsilon) = -\gamma \tilde{v}(iq + \varepsilon) - k \tilde{x}(iq + \varepsilon) + \tilde{\zeta}(iq + \varepsilon) \\ \tilde{v}(t) = (iq + \varepsilon) \tilde{x}(iq + \varepsilon) \end{cases}. \quad (4.18)$$

Substituindo a velocidade na equação provinda da evolução da velocidade obtenho a equação para a posição no espaço recíproco,

$$\tilde{x}(iq + \varepsilon) [m(iq + \varepsilon)^2 + \gamma(iq + \varepsilon) + k] = \tilde{\zeta}(iq + \varepsilon) \quad (4.19)$$

$$\tilde{x}(iq + \varepsilon) = \frac{\tilde{\zeta}(iq + \varepsilon)}{R(iq + \varepsilon)}.$$

A função $R(s)$ é fatorizável,

$$R(s) = m(s - \kappa_+)(s - \kappa_-), \quad (4.20)$$

onde os zeros valem,

$$\begin{aligned}\kappa_{\pm} &= -\frac{\theta}{2} \pm i\Omega \\ &= -\frac{\theta}{2} \pm i\sqrt{4\omega^2 - \theta^2},\end{aligned}\tag{4.21}$$

e,

$$\theta = \tau_r^{-1} = \frac{\gamma}{m}, \quad \omega^2 = \tau_o^{-2} = \frac{k}{m}.\tag{4.22}$$

É possível ver que serão estes zeros as quantidades fundamentais para a determinação dos momentos das diferentes quantidades dinâmicas e termoenergéticas.

Como disse anteriormente, este sistema atinge o estado estacionário. Nessas circunstâncias, a propriedade ergódica (fraca) para a qual médias no tempo são equivalentes a médias no espaço é válida,

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \bar{\mathcal{O}} = \lim_{\Xi \rightarrow \infty} \frac{1}{\Xi} \int_0^{\Xi} \mathcal{O}(t) dt.\tag{4.23}$$

O cálculo da média no tempo pode ser relacionado com a transformada de Laplace por via do teorema do valor final,

$$\bar{\mathcal{O}} = \lim_{\Xi \rightarrow \infty} \frac{1}{\Xi} \int_0^{\Xi} \mathcal{O}(t) dt = \lim_{z \rightarrow 0} z \int e^{-zt} \mathcal{O}(t) dt.\tag{4.24}$$

Introduzindo a Eq. (4.16) na Eq. (4.24) e recorrendo à propriedade ergódica se tem que no estado estacionário a seguinte relação é válida,

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \lim_{z \rightarrow 0, \varepsilon \rightarrow 0} z \int \frac{dq}{2\pi} \int dt e^{-zt + (iq + \varepsilon)t} \langle \mathcal{O}(iq + \varepsilon) \rangle.\tag{4.25}$$

Para situações em que estarei interessado em obter médias dependentes no tempo, posso continuar a utilizar a representação de Laplace-Fourier, porém sem aplicar o teorema do valor final,

$$\langle \mathcal{O}(t) \rangle = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int \frac{dq}{2\pi} e^{(iq+\varepsilon)t} \langle \mathcal{O}(iq+\varepsilon) \rangle. \quad (4.26)$$

As quantidades dinâmicas, posição e velocidade, ditarão o comportamento termoestatístico do sistema. Consequentemente, tendo em conta a Eq. (4.19), posso com a Eq. (4.24) ou com a Eq. (4.25) fazer a descrição completa do problema. Considero então a quantidade $\mathcal{O}(t)$ tal que no espaço de Fourier pode ser descrita como,

$$\tilde{\mathcal{O}}(iq_1 + \varepsilon) = h(iq_1 + \varepsilon) \tilde{x}(iq_1 + \varepsilon), \quad (4.27)$$

Por exemplo, para a velocidade tenho $h_v(s) = s$, para a posição $h_x(s) = 1$ e para o ruído $h_\zeta(s) = R(s)$. A n potência (inteira) dessa quantidade, que pode ser definida como,

$$[\mathcal{O}(t)]^n = \int \mathcal{O}(t_1) \dots \mathcal{O}(t_n) \delta(t-t_1) \dots \delta(t-t_n) dt_1 \dots dt_n. \quad (4.28)$$

a qual reescrevendo a função delta na sua forma integral corresponde a,

$$\begin{aligned} [\mathcal{O}(t)]^n &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int \tilde{\mathcal{O}}(iq_1 + \varepsilon) \dots \tilde{\mathcal{O}}(iq_n + \varepsilon) \exp \left[\sum_{l=1}^n (iq_l + \varepsilon) t \right] \frac{dq_1}{2\pi} \dots \frac{dq_n}{2\pi}. \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int \exp \left[\sum_{l=1}^n (iq_l + \varepsilon) t \right] [h(iq_1 + \varepsilon) \dots h(iq_n + \varepsilon)] \\ &\quad \times \tilde{x}(iq_1 + \varepsilon) \dots \tilde{x}(iq_n + \varepsilon) \frac{dq_1}{2\pi} \dots \frac{dq_n}{2\pi}. \end{aligned} \quad (4.29)$$

Ou seja, o valor médio $\langle \mathcal{O}(t)^n \rangle$ fica,

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O}(t)^n \rangle &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int \exp \left[\sum_{l=1}^n (i q_l + \varepsilon) t \right] \frac{h(i q_1 + \varepsilon) \dots h(i q_n + \varepsilon)}{R(i q_1 + \varepsilon) \dots R(i q_n + \varepsilon)} \\ &\quad \times \langle \tilde{\zeta}(i q_1 + \varepsilon) \dots \tilde{\zeta}(i q_n + \varepsilon) \rangle \frac{dq_1}{2\pi} \dots \frac{dq_n}{2\pi}. \end{aligned} \quad (4.30)$$

Para a determinação de valores no estado estacionário o momento de ordem n tem o seu cálculo muito mais simplificado, pois inserindo a Eq. (4.30) na equação do teorema do valor final obtenho,

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O}^n \rangle &= \lim_{z \rightarrow 0, \varepsilon \rightarrow 0} \int \frac{z}{z - \sum_{l=1}^n (i q_l + \varepsilon)} \frac{h(i q_1 + \varepsilon) \dots h(i q_n + \varepsilon)}{R(i q_1 + \varepsilon) \dots R(i q_n + \varepsilon)} \\ &\quad \times \langle \tilde{\zeta}(i q_1 + \varepsilon) \dots \tilde{\zeta}(i q_n + \varepsilon) \rangle \frac{dq_1}{2\pi} \dots \frac{dq_n}{2\pi}. \end{aligned} \quad (4.31)$$

Esta operação elimina todas os modos associados à aproximação ao estado estacionário. Analiticamente, isso representa que apenas combinações de pólos associados aos momentos q_l que conduzam a uma expressão final (antes do limite $z \rightarrow 0$) proporcional a $\frac{z}{z}$ dão uma solução não-nula. Termos proporcionais a $\left[\sum_{l=1}^{\ell} (i q_l + \varepsilon) \right]^{-1}$ são os únicos que podem conduzir a essa situação. Como é claro da forma da função $R(s)$, esse tipo de termos apenas podem vir dos momentos do ruído $\langle \tilde{\zeta}(i q_1 + \varepsilon) \dots \tilde{\zeta}(i q_n + \varepsilon) \rangle$. Na Figura 4.1, apresento a estrutura típica de pólos relacionada com a Eq. (4.30) para os casos estudados nesta dissertação.

Uma nota final; o mesmo esquema da Eq. (4.28) pode ser utilizado para definir variáveis que resultam do produto de quantidades diferentes. Por exemplo, mostrarei em capítulo posterior

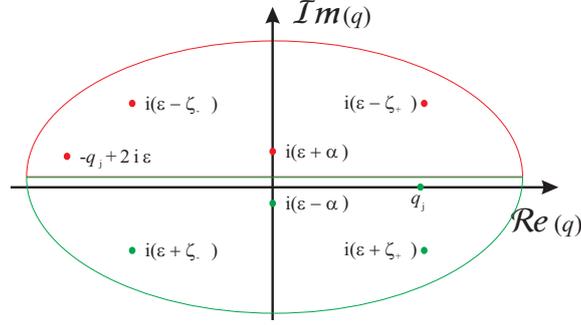


Figura 4.1: Estrutura típica dos pólos nos cálculos a serem efetuados no presente trabalho.

que a potência injetada num sistema deste tipo se define como,

$$j_{inj}(t) \equiv \varsigma(t) v(t) \quad (4.32)$$

$$= \int \varsigma(t_1) v(t_2) \delta(t - t_1) \delta(t - t_2) dt_1 dt_2,$$

de onde podemos prosseguir para a análise restante sem dificuldade.

4.2.1 Correlação de n tempos do ruído Gaussiano

Se ς é uma variável Gaussiana a sua forma no espaço recíproco de Laplace-Fourier também é Gaussiana e então o teorema de Isserlis-Wick é válido. Consequentemente, o principal objecto de cálculo para a obtenção de $\langle \tilde{\varsigma}(i q_1 + \varepsilon) \dots \tilde{\varsigma}(i q_n + \varepsilon) \rangle$ é o bloco de covariância $\langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle$ transformado,

$$\langle \tilde{\xi}(i q_1 + \varepsilon) \tilde{\xi}(i q_2 + \varepsilon) \rangle = \frac{\alpha [(i q_1 + \varepsilon) + (i q_2 + \varepsilon) + 2\alpha]}{(i q_1 + i q_2 + 2\varepsilon) [(i q_1 + \varepsilon) + \alpha] [(i q_2 + \varepsilon) + \alpha]} \gamma T. \quad (4.33)$$

No limite branco de $\alpha \rightarrow \infty$, $\xi \rightarrow \eta$ e fica,

$$\langle \tilde{\eta}(i q_1 + \varepsilon) \tilde{\eta}(i q_2 + \varepsilon) \rangle = \frac{2}{(i q_1 + i q_2 + 2\varepsilon)} \gamma T. \quad (4.34)$$

Das equações anteriores se vê o aparecimento dos termos $\left[\sum_{l=1}^{\ell} (i q_l + \varepsilon)\right]^{-1}$ que permitem a obtenção de uma solução finita no longo termo.

4.2.2 Correlação de n tempos do ruído telegráfico

No que concerne ao ruído dicotômico tenho,

$$\langle \zeta_1 \dots \zeta_n \rangle = \sum_{\zeta_1, \dots, \zeta_n} \zeta_1 \dots \zeta_n f(\zeta_1, \dots, \zeta_n), \quad (4.35)$$

onde $f(\zeta_1, \dots, \zeta_n)$ denomina a probabilidade conjunta. Se cada ζ_t representa o valor de um mesmo processo estocástico é possível usar a regra da cadeia e ter, para $t_1 > \dots > t_n$,

$$\langle \zeta_1 \dots \zeta_n \rangle = \sum_{\zeta_1, \dots, \zeta_n} \zeta_1 \dots \zeta_n f(\zeta_1 | \zeta_2) f(\zeta_2 | \zeta_3) \dots f(\zeta_{n-1} | \zeta_n) f(\zeta_n). \quad (4.36)$$

Dado que o ruído é dicotômico a soma será composta de 2^n parcelas. Por exemplo, para cálculo de $\langle \zeta_1 \dots \zeta_4 \rangle$ com tenho,

$$\begin{aligned} \langle \zeta_1 \dots \zeta_4 \rangle = & f_{\text{est}}(a) \{ a^4 f(a_1|a_2) f(a_2|a_3) f(a_3|a_4) + a b^3 f(b_1|b_2) f(b_2|b_3) f(b_3|a_4) \\ & + a^3 b [f(a_1|b_2) f(b_2|a_3) f(a_3|a_4) + f(a_1|a_2) f(a_2|b_3) f(b_3|a_4) + f(b_1|a_2) f(a_2|a_3) f(a_3|a_4)] \\ & + a^2 b^2 [f(b_1|b_2) f(b_2|a_3) f(a_3|a_4) + f(b_1|a_2) f(a_2|b_3) f(b_3|a_4) + f(a_1|b_2) f(b_2|b_3) f(b_3|a_4)] \} \\ & + f_{\text{est}}(b) \{ b^4 f(b_1|b_2) f(b_2|b_3) f(b_3|b_4) + a^3 b f(a_1|a_2) f(a_2|a_3) f(a_3|b_4) \\ & + a b^3 [f(b_1|b_2) f(b_2|a_3) f(a_3|b_4) + f(a_1|b_2) f(b_2|b_3) f(b_3|b_4) + f(b_1|a_2) f(a_2|b_3) f(b_3|b_4)] \\ & + a^2 b^2 [f(a_1|a_2) f(a_2|b_3) f(b_3|b_4) + f(a_1|b_2) f(b_2|a_3) f(a_3|b_4) + f(b_1|a_2) f(a_2|a_3) f(a_3|b_4)] \} \end{aligned} \quad (4.37)$$

Não obstante o ordenamento temporal já estar embutido na forma como está construída a equação anterior, quando se substituir a probabilidade de transição pelas respectivas funções, essa informação acabará por se diluir. Daí ser importante multiplicar o resultado obtido por um operador de ordenamento temporal que corresponde a um produtório de funções Theta de Heaviside que garanta o ordenamento pretendido. Isto é, para o caso anteriormente apresentado,

$$\langle \zeta_1 \dots \zeta_4 \rangle_{t_1 > t_2 > t_3 > t_4} \rightarrow \langle \zeta_1 \dots \zeta_4 \rangle \Theta [t_1 - t_2] \Theta [t_2 - t_3] \Theta [t_3 - t_4]. \quad (4.38)$$

Nos cálculos que realizarei, pretendo ter expressões genéricas que acomodem qualquer ordenamento que possa surgir no cálculos. Isso corresponde ao surgimento de $n!$ possibilidades de estrutura equivalente, *i.e.*, invariantes por permutação dos índices. Porém, desde que cada um dos ζ_i — que no espaço recíproco se traduz em $\tilde{\zeta}(i q_i + \varepsilon)$ — esteja associado à mesma variável e mesmo tempo t , os $n!$ termos são invariantes por permutação dos índices, o que simplifica enormemente o número de cálculos, sobretudo quando se tratam momentos de ordem superior. Em outros casos, poderão surgir outras formas de degenerescência que discutirei em devido tempo. Vale a pena frisar que, para o ruído dicotômico a aplicação do teorema de Isserlis-Wick não é válida. As expressões de $\langle \tilde{\zeta}_1 \dots \tilde{\zeta}_n \rangle$ são geralmente extensas. No entanto, pode se constatar que para $t_1 > \dots t_n$,

$$\langle \tilde{\zeta}(i q_1 + \varepsilon) \dots \tilde{\zeta}(i q_n + \varepsilon) \rangle \propto \prod_{i=1}^n \left[\sum_{j=1}^i (i q_j + \varepsilon) \right]^{-1} \prod_{l=1}^{n-1} \left[\sum_{j=1}^l (i q_j + \varepsilon) + \alpha \right]^{-1}. \quad (4.39)$$

Mais uma vez, do primeiro produtório surgem os termos que permitem a obtenção de resultados finitos para os momentos de tempo longo.

Capítulo 5

Resultados

5.1 Resultados para o ruído Gaussiano colorido¹

Antes de apresentar os resultados para o problema principal, farei a análise de um sistema que está a meio caminho entre o problema mais tradicional — o reservatório interno branco — e o problema de reservatório externo descrito pelo ruído telegráfico, que para além de ser de medida descontínua e também colorido. Tratarei então o sistema sujeito a reservatório externo Gaussiano colorido,

$$\begin{cases} m \frac{dv(t)}{dt} = -\gamma v(t) - kx(t) + \xi_t \\ v(t) = \frac{dx(t)}{dt} \end{cases}, \quad (5.1)$$

em que de acordo com a Eq. (4.7),

$$\langle\langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle\rangle = \alpha \gamma T \exp[-\alpha |t_1 - t_2|], \quad (5.2)$$

cuja expressão no espaço recíproco de Laplace-Fourier apresentei na Eq. (4.33). Daqui, usando o método de cálculo apresentado na Seção 4.1 posso escrever os cumulantes da posição e da

¹Os resultados desta seção foram apresentados no XXXVII *Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada* tendo recebido o prêmio de melhor poster em Física Estatística.

velocidade, nomeadamente recorrendo à Eq. (4.31).

Daí se retira que,

$$\langle x \rangle = 0, \quad \langle v \rangle = 0. \quad (5.3)$$

Para os segundos momentos (que iguala o segundo cumulante), tenho para a posição,

$$\begin{aligned} \langle\langle x^2 \rangle\rangle &= \frac{\alpha (\gamma + m \alpha)}{k + \alpha (\gamma + m \alpha)} \frac{T}{k} \\ &= \frac{\alpha \hat{\gamma} T}{\hat{k} k}, \end{aligned} \quad (5.4)$$

e para a velocidade,

$$\begin{aligned} \langle\langle v^2 \rangle\rangle &= \frac{\alpha^2}{k + \alpha (\gamma + m \alpha)} T \\ &= \frac{\alpha^2}{\hat{k}} T. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Nas Eqs. (5.4) e (5.5) tenho,

$$\hat{k} \equiv k + \alpha (\gamma + m \alpha), \quad (5.6)$$

e,

$$\hat{\gamma} \equiv \gamma + m \alpha. \quad (5.7)$$

O cálculo dos restantes cumulantes mostra $\langle\langle x^n \rangle\rangle = \langle\langle v^n \rangle\rangle = 0$ para $n \geq 3$. Isto confirma que a distribuição estacionária é Gaussiana tal como calculado através do método de Laplace-Fourier [40]. Este resultado não é inesperado de todo; não obstante o ruído ser colorido e o

sistema não-Markoviano [35] (pág. 252), o ruído continua sendo: *i*) Gaussiano, *ii*) aditivo. Então, no longo termo, sendo que as condições de fronteira para ambas as observáveis são condições naturais de fronteira e os termos deterministas nas equações diferenciais estocásticas lineares em x e v , a distribuição estacionária terá de ser uma dupla-Gaussiana,

$$p(x, v) = \frac{1}{Z} \exp [-\mathcal{B}_v v^2 - \mathcal{B}_x x^2], \quad (5.8)$$

onde,

$$\mathcal{B}_v = \frac{1}{2} \langle \langle v^2 \rangle \rangle^{-1}, \quad \mathcal{B}_x = \frac{1}{2} \langle \langle x^2 \rangle \rangle^{-1}. \quad (5.9)$$

No limite de ruído branco, *i.e.*, na aproximação de reservatório externo a reservatório interno se tem,

$$\lim_{\alpha \rightarrow \infty} \langle \langle x^2 \rangle \rangle = \frac{T}{k} \quad (5.10)$$

$$\lim_{\alpha \rightarrow \infty} \langle \langle v^2 \rangle \rangle = \frac{T}{m},$$

tal como esperado.

Com as Eqs. (5.4) e (5.5) calculo a energia média do sistema, \mathcal{E} , dada pela soma das médias da energia cinética, $\mathcal{K} = \langle K \rangle = \frac{1}{2} m \langle v^2 \rangle$, e da energia potencial, $\mathcal{V} = \langle V \rangle = \frac{1}{2} k \langle x^2 \rangle$

$$\begin{aligned} \mathcal{E} &\equiv \mathcal{K} + \mathcal{V} = \frac{\alpha (2m\alpha + \gamma)}{2[k + \alpha(\gamma + m\alpha)]} T \\ &= \frac{\alpha (2\hat{\gamma} - \gamma)}{2\hat{k}} T \end{aligned} \quad (5.11)$$

Com a equação anterior posso analisar as funções de resposta da energia relativamente aos outros parâmetros comparando esses resultados com a situação de reservatório interno [41].

Relativamente ao calor específico tenho,

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial T} = \frac{\alpha (2m\alpha + \gamma)}{2[k + \alpha(\gamma + m\alpha)]}, \quad (5.12)$$

e para as funções de resposta aos parâmetros mecânicos,

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k} = -\frac{\alpha (2m\alpha + \gamma)}{2[k + \alpha(\gamma + m\alpha)]^2} T = -\frac{\alpha (2\hat{\gamma} - \gamma)}{2\hat{k}^2} T, \quad (5.13)$$

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \gamma} = \frac{\alpha (k - m\alpha^2)}{2[k + \alpha(\gamma + m\alpha)]^2} T = \frac{\alpha [k - \alpha(\hat{\gamma} - \gamma)]}{2\hat{k}^2} T, \quad (5.14)$$

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial m} = \frac{\alpha^2 [2k + \alpha\gamma]}{2[k + \alpha(\gamma + m\alpha)]^2} T = \frac{\alpha^2 [2k + \alpha\gamma]}{2\hat{k}^2} T. \quad (5.15)$$

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \alpha} = \frac{m\alpha^2 \gamma + k(4m\alpha + \gamma)}{2[k + \alpha(\gamma + m\alpha)]^2} T = \frac{\alpha [k(4\hat{\gamma} - 3\gamma) + \alpha\gamma(\hat{\gamma} - \gamma)]}{2\hat{k}^2} T. \quad (5.16)$$

Chamo a atenção para o efeito mudança no carácter do reservatório através da introdução de cor:

- O calor específico deixa de ter o comportamento clássico para um sistema deste tipo,

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial T} = 1;$$

- As funções de resposta $\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k}$, $\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \gamma}$ e $\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial m}$ que no caso de reservatório interno são nulas assumem valores finitos diferentes de zero na passagem para reservatório externo;

- Se $\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k}$ e $\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial m}$ têm sempre o mesmo sinal negativo e positivo, respectivamente, já a resposta à modificação da dissipação pode inverter o sinal e está dependente do jogo entre a escala

temporal τ_s e α^{-1} . Esta situação é contra-intuitiva, pelo menos na questão de ser possível haver um aumento na energia média em decorrência de aumento da dissipação. Quando as duas escalas se igualam, se recupera o resultado de independência tal qual no limite $\alpha \rightarrow \infty$.

Quando se pretende caracterizar o sistema termoestatisticamente, se está principalmente interessado nas distribuições de longo curso das quantidades como energia, trabalho e energia. No caso de reservatórios externos o cálculo destas funções não é simples. Contudo, ao verificar que a distribuição estacionária da Eq. (5.8) é funcionalmente igual para o reservatório interno, é legítimo avaliar a hipótese de mapear um reservatório externo (gaussiano) em um reservatório interno — no qual os cálculos são mais simples — mesmo que somente para efeitos estatísticos ou probabilísticos.² Noutras palavras, e voltando aos exemplos dados para reservatórios internos e externos. Lanço a seguinte questão: É possível num contexto termoestatístico usar o caso do grão de pólen em um meio aquoso como modelo substituto do um sistema de massa m sujeito a dissipação criada pelo seu movimento em um meio que o envolve e sujeita a flutuações coloridas criadas por uma fonte externa?

Esta questão foi estimulada por outros trabalhos relacionados com ruído externo [44], nomeadamente em situações de natureza experimental em *dye lasers* [45] e giroscópio laser [46], assim como estudos sobre as consequências termodinâmicas da natureza do reservatório [47, 48], nomeadamente a aproximação ao zero absoluto. A esse respeito, vale a pena referir que para

²É preciso atentar que existe a questão da flutuação-dissipação que os distingue fisicamente.

reservatórios Poissonianos [49] bem como para o modelo de gás de rede de Katz-Lebowitz-Spohn [50], é possível violar a lei zero da Termodinâmica (tal qual formulada). Além disso, esta hipótese se enquadra no que van Kampen denominou por “abordagem de Langevin” [35] para um sistema, que foi também conjecturado para ruídos multiplicativos ou mesmo para reescrever problemas de natureza não estacionária em problemas estacionários.

De um lado, tenho o sistema sujeito a um reservatório externo com parâmetros m, T, γ, α e k , Eq. (5.1), cuja estatística pode ser reproduzida por um sistema de reservatório interno,

$$\begin{cases} m^* \frac{dv(t)}{dt} = -\gamma^* v(t) - k^* x(t) + \eta_t^* \\ v(t) = \frac{dx(t)}{dt} \end{cases}, \quad (5.17)$$

com novos parâmetros e $\langle \eta(t) \eta(t') \rangle = 2\gamma^* T^* \delta(t - t')$. Das médias da energia total e das energias cinética e potencial e impondo igualdade dos valores médios para os dois casos,

$$\begin{cases} \langle v^2 \rangle = \frac{\alpha^2}{k + \alpha(\gamma + m\alpha)} T = \frac{T^*}{m^*} \\ \langle x^2 \rangle = \frac{\alpha(\gamma + m\alpha)}{k + \alpha(\gamma + m\alpha)} \frac{T}{k} = \frac{T^*}{k^*} \\ \mathcal{E} = \frac{\alpha(2m\alpha + \gamma)}{2[k + \alpha(\gamma + m\alpha)]} T = T^* \end{cases}, \quad (5.18)$$

tenho as seguintes relações,

$$m^* \leftarrow m + \frac{\gamma}{2\alpha}, \quad T^* \leftarrow \frac{\alpha(2m\alpha + \gamma)}{k + \alpha(\gamma + m\alpha)} T, \quad k^* \leftarrow \frac{2m\alpha + \gamma}{2(m\alpha + \gamma)} k, \quad \gamma^* \leftarrow \gamma. \quad (5.19)$$

As relações na Eq. (5.19) mostram que o sistema substituto deve ter uma massa maior e que o reservatório deverá ser mais frio. Obviamente que essas relações quantitativas não são universais, mas a relação quantitativa entre os parâmetros do problema real e os da representação de reservatório interno deverão seguir a mesma linha para todo o caso. Das Eqs. (5.17), (5.8) e (5.9),

pode se confirmar que a Gaussianidade do estado estacionário é preservada, e por construção os momento de tempo longo da posição e velocidade, assim como da energia permanecem inalterados. Por este prisma, a hipótese de mapeamento (5.19) se apresenta significativa.

Por outro lado, a energia (no estado estacionário) resulta da sobreposição dos fluxos injetado, $J_{\text{inj}}(\Xi)$, e dissipado, $J_{\text{dis}}(\Xi)$,

$$\mathcal{E} \equiv \lim_{\Xi \gg \frac{m}{\gamma}} J_{\text{inj}}(\Xi) + J_{\text{dis}}(\Xi). \quad (5.20)$$

Em ambos os casos (reservatório externo e reservatório interno), $J_{\text{dis}}(\Xi)$ flui na forma de calor, enquanto $J_{\text{inj}}(\Xi)$ é o trabalho total feito pelo reservatório externo quando este corresponde a um reservatório de trabalho (no caso interno $J_{\text{inj}}(\Xi)$ continua a ser calor)³. Após o transiente, no instante Ξ ,

$$\mathcal{E} \equiv \lim_{\Xi \gg \frac{m}{\gamma}} \int_0^{\Xi} \langle v(t') \xi(t') \rangle dt' - \gamma \int_0^{\Xi} \langle [v(t')]^2 \rangle dt'. \quad (5.21)$$

Para o reservatório externo, no limite $\Xi \gg \frac{m}{\gamma}$,

$$J_{\text{inj}}(\Xi) = -\frac{m\alpha^2 - k}{[k + \alpha(\gamma + m\alpha)]^2} \alpha T + \frac{\alpha^2 \gamma T}{k + \alpha(\gamma + m\alpha)} \Xi, \quad (5.22)$$

e,

$$J_{\text{dis}}(\Xi) = \frac{2m\alpha(k + m\alpha^2) + \gamma(5m\alpha^2 - k - \alpha\gamma)}{2[k + \alpha(\gamma + m\alpha)]^2} \alpha T - \frac{\alpha^2 \gamma T}{k + \alpha(\gamma + m\alpha)} \Xi. \quad (5.23)$$

A soma dos termos independentes do tempo em \mathcal{E} [Eq. (5.20)] igualam a o valor da energia média do estado estacionário dado pela Eq. (5.11).

³Estes dois fluxos tem relação com as quantidades Π e Ψ que descrevem a produção de entropia, como foi mencionado no capítulo 2

Para um sistema de reservatório interno, nomeadamente um que esteja desempenhando o papel de reservatório análogo de um sistema de reservatório externo, se tem das Eqs. (5.20) and (5.21)

$[\xi(\Xi) \rightarrow \eta^*(\Xi)]$ [41],

$$\mathcal{E} = \frac{\gamma T^*}{m^*} \Xi + \left(T^* - \frac{\gamma T^*}{m^*} \Xi \right). \quad (5.24)$$

Mostrei através das equações gerais do método que as quantidades termoestatísticas, quando explicitadas no espaço recíproco, podem ser obtidas através da posição que claramente depende da natureza das flutuações [veja Eqs. (4.19) e (4.27)], também já sugerida em [51]. ⁴ Isto inclui a velocidade e os fluxos dependentes do tempo, $J_{\text{inj}}(\Xi)$ e $J_{\text{dis}}(\Xi)$. Mas qual é a extensão real dessa dependência?

⁴A diferença entre dinâmicas é também mostrada pela covariância da velocidade no estado estacionário,

$$C_v(s) \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \langle v(t') v(t' + s) \rangle dt'. \quad (5.25)$$

Para o caso de reservatório externo,

$$C_v(s) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \int dt' e^{(i q_2 + \varepsilon) s} \prod_{j=1}^2 \frac{dq_j}{2\pi} \frac{(i q_j + \varepsilon) e^{(i q_1 + \varepsilon) t'}}{m R(i q_j + \varepsilon)} \left\langle \prod_{l=1}^2 \tilde{\xi}(i q_l + \varepsilon) \right\rangle. \quad (5.26)$$

Usando a estrutura de pólos da figura 4.1 e após alguma álgebra,

$$C_v(s) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \int dt' e^{(i q_2 + \varepsilon) s} \prod_{j=1}^2 \frac{dq_j}{2\pi} \frac{(i q_j + \varepsilon) e^{(i q_1 + \varepsilon) t'}}{m R(i q_j + \varepsilon)} \left\langle \prod_{l=1}^2 \tilde{\eta}(i q_l + \varepsilon) \right\rangle, \quad (5.27)$$

com $\mathcal{T} = \frac{T}{\prod_{l=1}^2 (m + (-1)^l \gamma \tau + k \tau^2)}$, $\Omega \equiv \sqrt{4 \frac{k}{m} - \frac{\gamma^2}{m^2}}$.

Já quanto ao sistema de reservatório interno,

$$C_v = \mathcal{T} \left\{ e^{-\frac{\gamma}{2m}|s|} \left[(m + k \tau^2) \cos\left(s \frac{\Omega}{2}\right) - \frac{\gamma (m - k \tau^2)}{m^2 \Omega} \sin\left(s \frac{\Omega}{2}\right) \right] - e^{-\frac{|s|}{\tau} \gamma \tau} \right\}, \quad (5.28)$$

que resulta em,

$$C_{v, \tau=0} = e^{-\frac{\gamma}{2m}|s|} T \left[\frac{1}{m} \cos\left(s \frac{\Omega}{2}\right) - \frac{\gamma}{m \Omega} \sin\left(s \frac{\Omega}{2}\right) \right]. \quad (5.29)$$

À primeira vista, devido às propriedades impostas por um ruído branco $\eta^{(*)}$ e um ruído colorido ξ , se espera um comportamento bastante diferente para os fluxos (dependentes do tempo) em sistemas de reservatório interno e externo. Contudo, ao se aplicar o mapeamento da Eq. (5.19) nas Eqs. (5.22) e (5.23) para avaliar a diferença entre os fluxos dos dois tipos de sistemas obtenho a mesma expressão que consta na Eq. (5.24), bem como o próprio valor de E . De acordo com o que disse no parágrafo anterior esta equivalência é inesperada e contra-intuitiva.

Das Eqs. (5.20) and (5.21), pode se identificar os fluxos como quantidades proporcionais às flutuações acumuladas, *i.e.*, os fluxos têm um comportamento de grande desvio. Esta propriedade, juntamente como a equivalência por mapeamento permite dizer que:

Mediante as condições aqui apresentadas, para um sistema termoestatístico que atinja o estado estacionário, o valor médio dos grandes desvios das flutuações é na prática insensível à natureza do reservatório.

Na Figura 5.1 (painel do lado esquerdo) mostro a evolução de $J_{inj}(\Xi)$ e $J_{dis}(\Xi)$ para um sistema de reservatório externo [Eq. (5.1)], que concorda com o comportamento do seu análogo sujeito a reservatório interno definido nas Eqs. (5.17) and (5.19).

Encontro assim uma razão para uma análise mais profunda do verdadeiro impacto da natureza do reservatório nos fluxos que garantem o estado estacionário. Essa avaliação é especialmente importante para sistemas longe do limite termodinâmico para os quais as flutuações nas quantidades termoestatísticas são cruciais para uma descrição adequada.

Antes prosseguir para a apresentação dos resultados analíticos, devo notar que fisicamente, mais relevante do que os momentos são os cumulantes, sobretudo devido à sua extensividade. Nesse contexto, os cumulantes $\langle\langle J_{\text{inj},|\text{dis}|}^n(\Xi)\rangle\rangle$ crescem linearmente o tempo, pelo menos assintoticamente.

Excetuando as médias — cujos valores assintóticos têm de crescer igualmente de forma a que seja garantida a existência de um estado estacionário — não existem à primeira vista razão para que os restantes momentos sejam iguais. Em trabalhos anteriores, foi já verificado que os restantes momentos estatísticos dos fluxos para um tempo longo injetado e dissipado são iguais, para reservatórios gaussianos brancos (ou coloridos) bem como para ruídos de Poisson. A igualdade das funções de grandes desvios implica,

$$\lim_{\Xi \gg m/\gamma} \frac{1}{\Xi} \langle\langle J_{\text{inj}}^n(\Xi)\rangle\rangle = \lim_{\Xi \gg m/\gamma} \frac{1}{\Xi} |\langle\langle J_{|\text{dis}|}^n(\Xi)\rangle\rangle|. \quad (5.30)$$

Nesse sentido, efetuarei os cálculos dos restantes momentos para o fluxo dissipado já que as suas contas são mais simples e me focarei na quantidades assintótica que define o grande desvio,

$$\langle\langle \mathcal{J}^n(\Xi)\rangle\rangle \equiv \Xi \lim_{\Xi \gg m/\gamma} \frac{1}{\Xi} \langle\langle J^n(\Xi)\rangle\rangle. \quad (5.31)$$

Com este objetivo em mente, analiso a chamada função de grandes desvios dos fluxos, $L(\mathcal{J}(\Xi))$, de onde os respectivos cumulantes podem ser determinados. Caso o mapeamento seja válido em toda a extensão dos cumulantes, a função de grandes desvios do sistema análogo de reservatório interno seria[52, 53],

$$L^*(\mathcal{J}) = \frac{1}{Z_L} \exp \left[-\frac{(\mathcal{J} - \frac{\gamma T^*}{m^*} \Xi)^2}{4 T^* \mathcal{J}} \right] \Theta[\mathcal{J}], \quad (5.32)$$

para qualquer um dos fluxos.

Na realidade, mais do que focados na forma de $L(\mathcal{J}(\Xi))$, centro a minha atenção nos cumulantes que a geram. Isto significa que, em vez de utilizar métodos mais tradicionais para encontrar a função de grandes desvios[54], optei por calcular os cumulantes dos fluxos de forma sucessiva através da representação de Laplace-Fourier de maneira a que: *i*) evita a tarefa árdua e muitas vezes infrutífera relacionada com a definição do propagador, *ii*) permite a obtenção de resultados exatos, *iii*) propicia o conseguimento de resultados mesmo que os sistema apresentem não linearidades ou se encontrem sujeitos a reservatórios não-Gaussianos[53]. Tendo isto em mente, o cumulante de segunda ordem vale no case de reservatório Gaussiano,

$$\langle\langle \mathcal{J}^2(\Xi) \rangle\rangle^* = 2 \frac{\gamma T^{*2}}{m^*} \Xi = \frac{\gamma T^2 (2m + \gamma \tau)}{(m + \tau(\gamma + k\tau))^2} \Xi, \quad (5.33)$$

enquanto que para o sistema "original" de reservatório externo. Calculando,

$$\begin{aligned} \langle\langle J_{\text{inj}}^2(\Xi) \rangle\rangle &= \int_0^\Xi \int \prod_{j=1}^2 dt_j \frac{dq_{2j-1}}{2\pi} \frac{dq_{2j}}{2\pi} \frac{(iq_{2j} + \varepsilon)}{m^2 R(iq_{2j} + \varepsilon)} \\ &\times e^{(iq_{2j-1} + iq_{2j} + 2\varepsilon)t_j} \left\langle \prod_{l=1}^4 \tilde{\xi}(iq_l + \varepsilon) \right\rangle - \langle J(\Xi) \rangle^2, \end{aligned} \quad (5.34)$$

onde se pode aplicar o teorema de Isserlis-Wick a $\left\langle \prod_{l=1}^4 \tilde{\xi}(iq_l + \varepsilon) \right\rangle$, obtenho no limite de tempo longo,

$$\langle\langle \mathcal{J}^2(\Xi) \rangle\rangle = \frac{\gamma T^2 (2m + \gamma \tau)}{(m + \tau(\gamma + k\tau))^2} \Xi + \frac{\gamma^2 T^2 (3m + \tau(\gamma - k\tau))}{(m + \tau(\gamma + k\tau))^3} \tau \Xi. \quad (5.35)$$

As expressões de $\langle\langle \mathcal{J}^2(\Xi) \rangle\rangle^*$ e $\langle\langle \mathcal{J}^2(\Xi) \rangle\rangle$ são ligeiramente diferentes e não-mapeáveis. Por questões de clareza uso $\tau = \alpha^{-1}$.

A relação entre os fluxos médios equivalente à forma dada pela Eq. (5.35), *i.e.*,

$$\langle \mathcal{J}(\Xi) \rangle = \langle \mathcal{J}(\Xi) \rangle^* + j(m, \gamma, k, T, \tau) \tau \Xi,$$

era a situação à partida mais plausível, uma conjectura que os cálculos mostraram estar errada.

É possível tentar rearranjar a Eq. (5.19) de maneira a respeitar as flutuações de $\mathcal{J}(\Xi)$ — as flutuações das flutuações acumuladas — contudo todas se mostram infrutíferas, pois levam a um valor errado da energia média \mathcal{E} . Deste esforço, se entende que o problema se resume ao fato de o parâmetro de dissipação γ ser sempre invariante por mapeamento.

À parte das questões já analisadas, a hipótese de mapeamento [Eq. (5.19) para o caso desta dissertação] — ou “abordagem de Langevin” [35] — é importante em si, porque a sua validade permite a simplificação do tratamento da função de grandes desvios para um sistema de reservatório externo colorido, já que soluções de quantidades dependentes do tempo em problemas de reservatório externo são difíceis de obter e quase sempre obtidas por meios aproximativos [39]. Nestas circunstâncias, o limite de ruído branco de um reservatório colorido⁵ é sistematicamente visto como a aproximação preferencial de ordem zero a partir da qual as aproximações de ordem superior são definidas. A análise que apresentei indica outra proposta mais adequada: o reservatório interno análogo. Por exemplo, adotando uma expansão de Edgeworth para a função de grandes desvios,⁶

$$L_{\text{ExtRes}}(\mathcal{J}) = \exp \left[\sum_{n=1}^{\infty} \Delta_{\langle \mathcal{J}^n \rangle} \frac{1}{n!} \frac{\partial^n}{\partial \mathcal{J}^n} \right] L_0(\mathcal{J}), \quad (5.36)$$

⁵Equivalente a um sistema sujeito a reservatório interno, governado pela Eq. (5.17).

⁶ $\Delta_{\langle \mathcal{J}^n \rangle_c}$ é a diferença entre o cumulante de ordem n de $L_{\text{ExtRes}}(J)$ e da referência $L_0(J)$.

a melhor distribuição de referência, $L_0(\mathcal{J})$, é dada pela Eq. (5.32) em vez da sua versão “sem estrela” diretamente obtida da Eq. (5.17); considero esta abordagem melhor porque é capaz de incluir efeitos da cor logo na média.

Na Figura 5.1 (painel de baixo) apresento o cálculo da Eq. (5.36) até segunda ordem $n = 2$. Sublinho que a aproximação envolvendo cumulante de segunda ordem é na realidade uma aproximação de primeira ordem pois a distribuição de referência já inclui efeitos da cor na média.

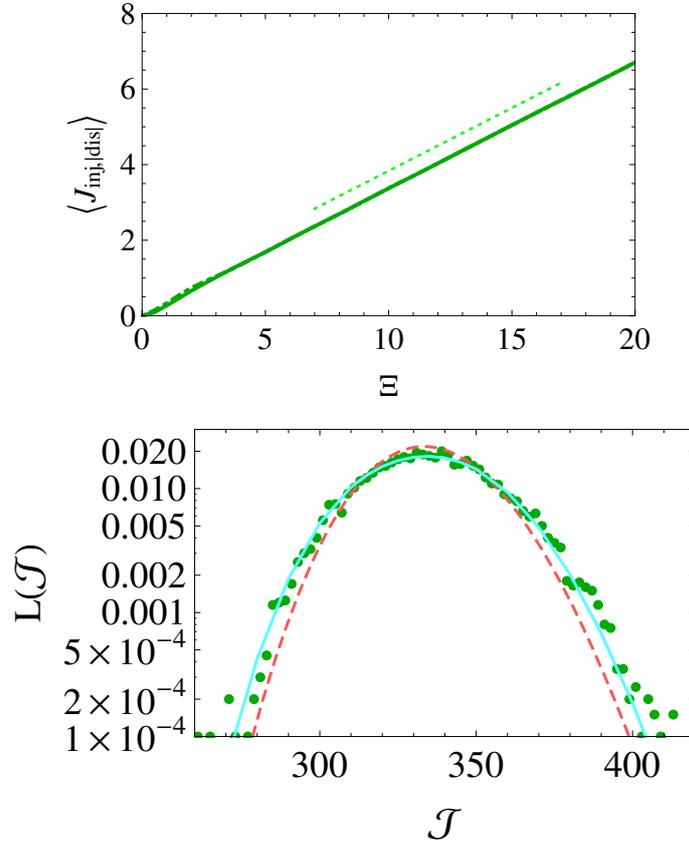


Figura 5.1: Simulação numérica com $m = \gamma = k = T = \tau = 1$. *Painel de cima*: Evolução do Fluxo total injetado/dissipado para um sistema de reservatório externo. Os fluxos instantâneos, que são os declives das linhas após o transiente, vale $1/3$, o mesmo que a linha pontilhada (verde). De acordo com a Eq. (5.19) o mesmo comportamento é encontrado para um sistema de reservatório interno com $m^* = 3/2$, $T^* = 1/2$ and $k^* = 3/4$. *Painel de baixo*: Distribuição de grandes desvios (LDF) do fluxo total (injetado) obtida por simulação (pontos) e a LDF para um sistema de reservatório interno dada pela Eq. (5.32) (linha pontilhada) para um tempo $\Xi = 1000$. Embora os picos sejam coincidentes, as larguras (e a forma) são diferentes. Na versão mapeada a variância vai como $\Xi/3$ [Eq. (5.33)], enquanto que nos cálculos feitos no sistema efetivo deverá evoluir como $4\Xi/9$ [Eq. (5.35)]. O resultado é claramente melhorado recorrendo à expansão de Edgeworth [Eq. (5.36)] como demonstra a linha a cheio.

Em resumo, posso afirmar que a hipótese de mapeamento de reservatórios externos em

reservatórios internos e vice-versa permitiram verificar que em uma abordagem de grandes desvios, desde que exista o estabelecimento de um estado estacionário, os fluxos médios — que garantem essa condição de estacionaridade — são funcionalmente insensíveis à Natureza das flutuações no sistema e por conseguinte à relação de flutuação-dissipação. Somente quando se analisam as flutuações dos fluxos, que na prática representam as flutuações das flutuações acumuladas, a relação de flutuação-dissipação fala mais alto e o cenário de equivalência se desfaz.

É possível propor outras relações de forma a que as flutuações do fluxo sejam mapeáveis. Porém, novas condições levam a um valor errado da energia do sistema. Além disso, a introdução de uma nova condição não tem qualquer implicação num mapeamento da dissipação do sistema, continuando a se verificar a igualdade $\gamma^* = \gamma$, que impede a ligação da dissipação às flutuações η^* . Noutras palavras, tão só se analisam as flutuações dos fluxos, emerge a diferença entre um reservatório externo e um reservatório interno.

Por outro lado, de resultados obtidos, se poderia depreender que, em um contexto de grandes desvios, a relação de flutuação-dissipação pode ser vista como uma propriedade ordem superior. Esta asserção pode ser contestada apontando que o resultado apresentado apenas demonstra um certo grau de insensibilidade do tratamento de grandes desvios relativamente às propriedades termoestatísticas. Contudo, tais argumentos são facilmente rebatidos lembrando que a função de grandes desvios dos fluxos é capaz de preservar a informação sobre as condições iniciais do sistema, nomeadamente a temperatura inicial[52], sendo assim uma função termoestatistic-

mente sensível.

5.2 Resultados para o Reservatório Dicotômico

Apresento agora os resultados para o problema principal da minha dissertação: a equação dinâmica quando o reservatório tem um perfil telegráfico.

5.2.1 Estatística da Velocidade

A existência de uma solução estacionária implica que o valor médio da velocidade em tempo longo deverá se anular. O cálculo do momento é feito através da equação,

$$\langle v \rangle = \int \frac{dq}{2\pi} \frac{i q + \varepsilon}{R(i q + \varepsilon)} \langle \zeta(i q + \varepsilon) \rangle, \quad (5.37)$$

de onde se verifica,

$$\langle v \rangle = 0. \quad (5.38)$$

É importante sublinhar que tal acontece independentemente da simetria ou assimetria das taxas de transição e amplitudes das duas componentes do ruído. Analiticamente essa nulidade surge do denominador, mais precisamente do termo ímpar $i q + \varepsilon$ na Eq. (5.37). A Equação (5.38) estabelece a condição *sine qua non* para a existência de um estado estacionário.

Já a variância ou segundo cumulante, $\langle\langle v^2 \rangle\rangle$, é igual a,

$$\langle\langle v^2 \rangle\rangle = \langle v^2 \rangle = \int \prod_{n=1}^2 \frac{dq_n}{2\pi} \frac{z}{z - \sum_{l=1}^2 (i q_l + \varepsilon)} \frac{(i q_n + \varepsilon)}{R(i q_n + \varepsilon)} \left\langle \prod_{l=1}^2 \tilde{\zeta}(i q_l + \varepsilon) \right\rangle. \quad (5.39)$$

A solução deste integral duplo dá,

$$\begin{aligned} \langle\langle v^2 \rangle\rangle &= \frac{\mathcal{B}\mathcal{D}\alpha}{\gamma \hat{k}} = \frac{(a-b)^2 p \bar{p} \alpha}{\gamma \hat{k}} \\ &= \frac{\Delta^2 P \alpha}{\gamma \hat{k}} = \frac{\Delta^2 \rho \mu}{\gamma \hat{k} \hat{\rho}}. \end{aligned} \quad (5.40)$$

O comportamento típico da variância da velocidade é apresentado na Figura 5.2.

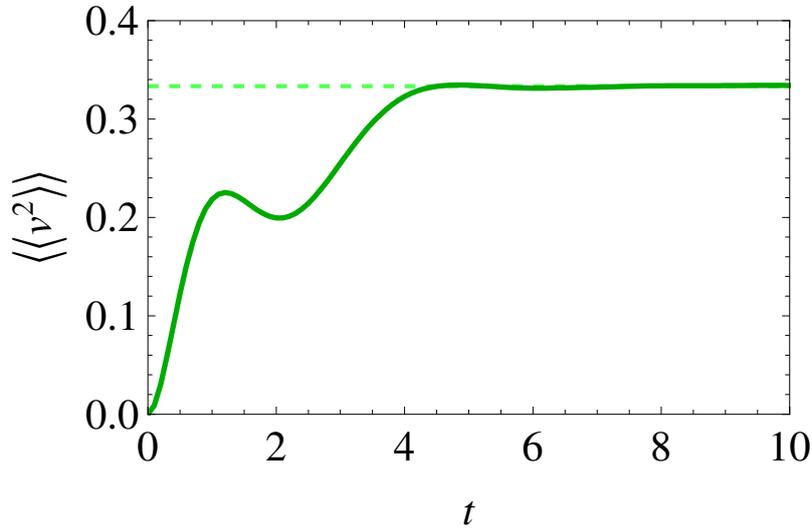


Figura 5.2: Evolução temporal de $\langle\langle v^2 \rangle\rangle$. A linha a cheio corresponde a simulação numérica com estatística sobre 10^6 amostras com os seguintes parâmetros numéricos: $m = k = \alpha = \gamma = 1$, $a = -b = 1$ e $\mu = \bar{\mu} = 1/2$. A linha tracejada representa o limite de tempo longo $\langle\langle v^2 \rangle\rangle = 1/3$.

De imediato, o valor da média quadrática da velocidade dá o valor da energia cinética média,

$$\langle K \rangle = \frac{1}{2} m \langle v^2 \rangle = \frac{\mathcal{B}\mathcal{D}\alpha m}{2\gamma \hat{k}}. \quad (5.41)$$

O estado estacionário deste sistema não pode ser expresso através de um funcional de Boltzmann, *i.e.*, a probabilidade de se encontrar a partícula com velocidade e posição não é dada por

uma exponencial da energia da partícula, porém é possível definir uma temperatura canônica. Dado o ruído bi-modal ser também conhecido da literatura de processos estocásticos como ruído telegráfico, denominarei a temperatura canônica deste sistema como a *Temperatura de Marconi* que verifica a igualdade,

$$\langle K \rangle = \frac{1}{2} \mathcal{T}. \quad (5.42)$$

Através dessa igualdade é sem dificuldade que se tem,

$$\begin{aligned} \mathcal{T} &\equiv \frac{\mathcal{BD}}{\gamma \hat{k}} (\hat{\gamma} - \gamma) = \frac{(a-b)^2 p \bar{p} (\hat{\gamma} - \gamma)}{\gamma \hat{k}} \\ &= \frac{\Delta^2 P (\hat{\gamma} - \gamma)}{\gamma \hat{k}} = \frac{\Delta^2 \rho (\hat{\gamma} - \gamma)}{\gamma \hat{k} \rho^2}. \end{aligned} \quad (5.43)$$

Analiso agora o limite em que α^{-1} tende a zero ($\mu \rightarrow \infty$), o que corresponde ao limite de ruído branco. Em um contexto termoestatístico, o estudo deste limite só faz sentido quando se mantém constante a temperatura de Marconi. Recorrendo às Eqs. (3.4) e (3.6), para que a temperatura se mantenha constante, a diferença de amplitude entre os dois ruídos,

$$\Delta \equiv a - b, \quad (a > b), \quad (5.44)$$

deverá evoluir como,⁷

$$\Delta = \mathcal{T}^{\frac{1}{2}} \sqrt{\frac{\gamma \hat{\rho} [k + \hat{\rho} \mu (\gamma + m \hat{\rho} \mu)]}{m \mu \rho}} \quad (5.45)$$

$$\sim \mathcal{T}^{\frac{1}{2}} \mu^{1/2}.$$

Como a existência de um estado estacionário implica que a velocidade média seja nula, o terceiro cumulante da velocidade é igual ao terceiro momento,

$$\langle\langle v^3 \rangle\rangle = \langle v^3 \rangle. \quad (5.46)$$

Os cálculos permitem obter,

$$\begin{aligned} \langle\langle v^3 \rangle\rangle &= 2 \frac{\mathcal{B} \mathcal{D} (\mathcal{B} - \mathcal{D}) \alpha^2 [3 k m - 2 \gamma \hat{\gamma}]}{\hat{\gamma} \hat{k} (2 \gamma^2 + k m) [4 k + \alpha (\gamma + \hat{\gamma})]} \\ &= 2 \frac{\Delta^3 \alpha^2 p [1 + p (2 p - 3)] [3 k m - 2 \gamma \hat{\gamma}]}{\hat{\gamma} \hat{k} (2 \gamma^2 + k m) [4 k + \alpha (\gamma + \hat{\gamma})]}. \end{aligned} \quad (5.47)$$

Na Figura 5.3 mostro o comportamento de $\langle\langle v^3 \rangle\rangle$ para um caso específico.

⁷A condição $a > b$ que imponho não interfere nas conclusões que aqui se apresentam, apenas simplificam a análise.

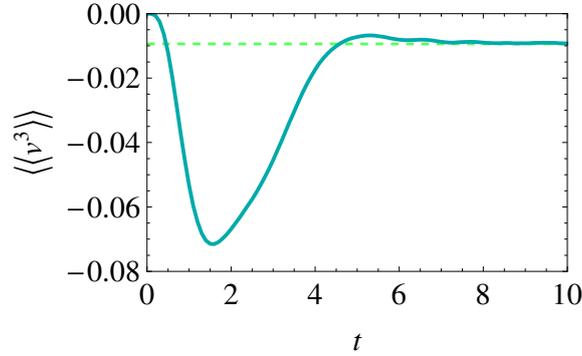


Figura 5.3: Evolução temporal de $\langle\langle v^3 \rangle\rangle$. A linha a cheio corresponde a simulação numérica com estatística sobre 10^6 amostras com os seguintes parâmetros numéricos: $m = k = \alpha = \gamma = 1$, $a = -b = 1$ e $\mu = 2/3$, $\bar{\mu} = 1/3$. A linha tracejada representa o limite de tempo longo $\langle\langle v^3 \rangle\rangle = -16/1701 = 9.4 \dots \times 10^{-3}$.

Na Eq. (5.47), é possível substituir o valor de Δ e estudar o comportamento de $\langle\langle v^3 \rangle\rangle$ quando a taxa de eventos, μ , tende para infinito. Nestas circunstâncias, o processo estocástico subjacente se aproxima da continuidade, daí ser expectável que, de acordo com a dinâmica do modelo, a velocidade e a posição exibam distribuições Gaussianas onde $\langle\langle v^n \rangle\rangle = \langle\langle x^n \rangle\rangle = 0$ para $n \geq 3$. Aqui mostro somente o evanescimento do cumulante de terceira ordem da velocidade; o aumento da ordem do cumulante apenas acrescenta complicações matemáticas (devido ao aumento da complexidade das expressões). Para a posição, as dependências são basicamente as mesmas, à parte dos parâmetros mecânicos que garantem a dimensão correta das equações.

Levando a cabo as substituições indicadas pelas Eqs (3.4) e (3.6),

$$\langle\langle v^3 \rangle\rangle \sim \frac{\mathcal{T}^{\frac{3}{2}} \mu^{5/2}}{\mu^3} \xrightarrow{\mu \rightarrow \infty} 0. \quad (5.48)$$

Com este limite calculado e invocando o teorema da função característica de Marcinkiewicz, temos evidência para crer na coincidência do limite branco com o gaussiano para a distribuição das velocidades. O referido teorema indica que apenas existem dois tipos de distribuição de probabilidade: a Gaussiana — com, no máximo, dois cumulantes não nulos — e todas as outras distribuições para as quais é necessário um número infinito de cumulantes não nulos. *Sendo que não impus no cálculo do limite Eq. (5.48) qualquer restrição quanto à simetria do ruído* tenho que, segundo Marcinkiewicz o limite $\langle\langle v^3 \rangle\rangle = 0$, sugere que os cumulantes de ordem superior à terceira serão também nulos no mesmo limite, como em verdade é possível verificar numericamente, ficando assegurada a Gaussianidade das distribuições.⁸

Para melhor apreciação do comportamento do terceiro cumulante apresento pode determinar-se a assimetria da distribuição,

$$\begin{aligned}
 A &\equiv \frac{\langle\langle v^3 \rangle\rangle}{\langle\langle v^2 \rangle\rangle^{3/2}}. \\
 &= \frac{2\gamma(2p-1)[3km - 2\gamma\hat{\gamma}]}{\hat{\gamma}(2\gamma^2 + km)[4k + \alpha(\gamma + \hat{\gamma})]} \sqrt{\frac{\alpha\gamma^3\hat{k}}{P}}.
 \end{aligned}
 \tag{5.49}$$

A primeira observação sobre a Eq. (5.49), permite comprovar que a assimetria da velocidade não depende da magnitude dos estados do ruído, o que é elementar pois $\langle\langle v^3 \rangle\rangle \propto \Delta^3$ e $\langle\langle v^2 \rangle\rangle \propto \Delta^2$. A segunda observação mostra uma dependência da assimetria em relação aos parâmetros mecânicos do problema assim como da cor do ruído. Fixando a atenção apenas na probabilidade

⁸Caso se tivesse feito referência a questões de simetria do ruído dicotômico, seria necessário diferenciar os cumulantes de ordem par e ímpar já que os últimos seriam por definição iguais a zero.

p , a assimetria seria tal qual aquela apresentada pelo o ruído: para a direita quando $p > 1/2$ e à esquerda em caso contrário. No entanto, o sinal da assimetria muda conforme o sinal do fator $[3 k m - 2 \gamma \tilde{\gamma}]$ na Eq. (5.49). Posso explorar as diferentes facetas desse fator e encontrar diferentes valores críticos dependendo da situação que se pretenda estudar.

$$\alpha^* = \max \left[\frac{3k}{2\gamma} - \frac{\gamma}{m}, 0 \right], \quad m^* = \max \left[\frac{2\gamma^2}{3k - 2\alpha\gamma}, 0 \right]. \quad (5.50)$$

Para $\alpha > \alpha^*$, a assimetria será contrária à indicada por p . Essa linha crítica pode ser expressa também em função da concavidade do potencial ou da constante de dissipação,

$$k^* = \frac{2\gamma(\gamma + m\alpha)}{3m}, \quad \gamma^* = \max \left[\frac{\sqrt{m(6k + m\alpha^2)} - m\alpha}{2}, 0 \right]. \quad (5.51)$$

Para $k < k^*$, $m < m^*$ ou $\gamma > \gamma^*$, a assimetria da distribuição se inverte relativamente ao comportamento imposto por p . Centro a atenção na questão dissipativa. A introdução de um ruído dicotômico com taxas desequilibradas implica na prevalência de um dos lados do ruído. De forma a que se atinja um estado estacionário a prevalência de um dos lados da força estocástica terá que ser compensada pela força conservativa — que é função da posição e que como mostrarei adiante tem sempre a mesma assimetria do ruído — e da força de dissipação — que é função da velocidade. Assim sendo, dependendo dos limites estabelecidos nas Eqs. (5.50) e (5.51) poderá ser necessário uma assimetria complementar àquela estabelecida pelo reservatório. Na Figura 5.4, represento o comportamento da assimetria para três situações com diferentes valores de α .

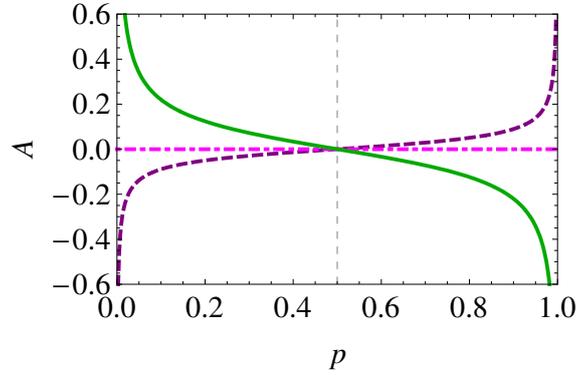


Figura 5.4: Assimetria da distribuição de $f(v)$ v probabilidade do estado a do ruído, p . Para todos os casos $m = k = \gamma = 1$, $a = -b = 1$. A linha a cheia (verde) corresponde a $\alpha = 1$, a linha tracejada (púrpura) tem $\alpha = 1/4$, e a linha tracejada-pontilhada (magenta) corresponde ao caso $\alpha = \alpha^* = 1/2$ para o qual a assimetria se inverte de acordo com a Eq. (5.50).

Para que a descrição estatística seja melhor estabelecida, apresentarei o quarto cumulante da velocidade, $\langle\langle v^4 \rangle\rangle$, que se relaciona com a aferição da distância para a Gaussiana, tendo obtido,

$$\begin{aligned} \langle\langle v^4 \rangle\rangle &= 3 \frac{\Delta^4 P \alpha [18 m k^3 \mathcal{F}_1 + 2 k^2 \mathcal{F}_2 + \alpha \hat{\gamma} k \mathcal{F}_2 + 3 \alpha^2 \gamma^2 \hat{\gamma}^2 (\hat{\gamma} + \gamma) \mathcal{F}_2]}{\gamma^2 \hat{k} \hat{\gamma} (3 \gamma^2 + 4 k m) [4 k + \alpha (\hat{\gamma} + \gamma)] [k m + \hat{\gamma} (\hat{\gamma} + \gamma)] [9 k + \alpha (\hat{\gamma} + 2 \gamma)]} \quad (5.52) \\ &\quad - 3 \frac{\Delta^4 P^2 \alpha^2}{\hat{k}^2 \gamma^2} \\ &= \langle v^4 \rangle - 3 \langle v^2 \rangle, \end{aligned}$$

onde se utilizam as seguintes funções,

$$\mathcal{F}_1 = \gamma^2 + 3\gamma\delta_\gamma + 8P\delta_\gamma^2,$$

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_2 = & 18\gamma^4 + 47\gamma^3\delta_\gamma + 63(1-P)\gamma^2\delta_\gamma^2 \\ & + 3(10-7P)\gamma\delta_\gamma^3 + 26P\delta_\gamma^4, \end{aligned}$$

(5.53)

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_3 = & 24\gamma^4 + 2(7-57P)\gamma^3\delta_\gamma + (65P+6)\gamma^2\delta_\gamma^2 \\ & + 2(3-P)\gamma\delta_\gamma^3 + 4P\delta_\gamma^4, \end{aligned}$$

$$\mathcal{F}_4 = (2-6P)\gamma + P\delta_\gamma.$$

De acordo com a notação estabelecida $\delta_\gamma \equiv \hat{\gamma} - \gamma = m\alpha$. A típica evolução do quarto cumulante é apresentada na Figura 5.5.

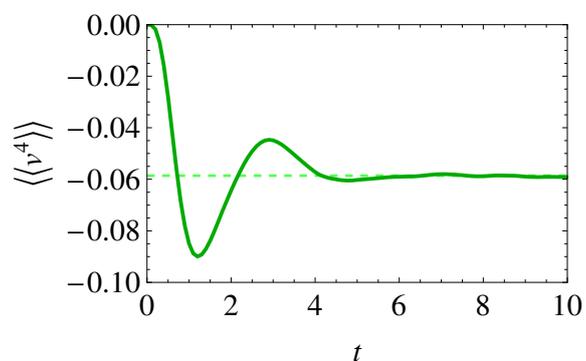


Figura 5.5: Evolução temporal de $\langle\langle v^4 \rangle\rangle$. A linha a cheio corresponde a simulação numérica com estatística sobre 10^6 amostras com os seguintes parâmetros numéricos: $m = k = \alpha = \gamma = 1$, $a = -b = 1$ e $\mu = \bar{\mu} = 1/2$. A linha tracejada representa o limite de tempo longo $\langle\langle v^4 \rangle\rangle = -16/273 = -0.0586\dots$

Da Eq. (5.53) se determina de forma direta a curtose,

$$C \equiv \frac{\langle\langle v^4 \rangle\rangle}{\langle\langle v^2 \rangle\rangle^2}. \quad (5.54)$$

Tal como decorre do comportamento de limite branco, a distribuição de velocidades convergirá para a Gaussiana,

$$\lim_{\mu \rightarrow \infty} C|_{\mathcal{T}} = 0. \quad (5.55)$$

A evolução para a Gaussiana é mostrada na Figura 5.6.

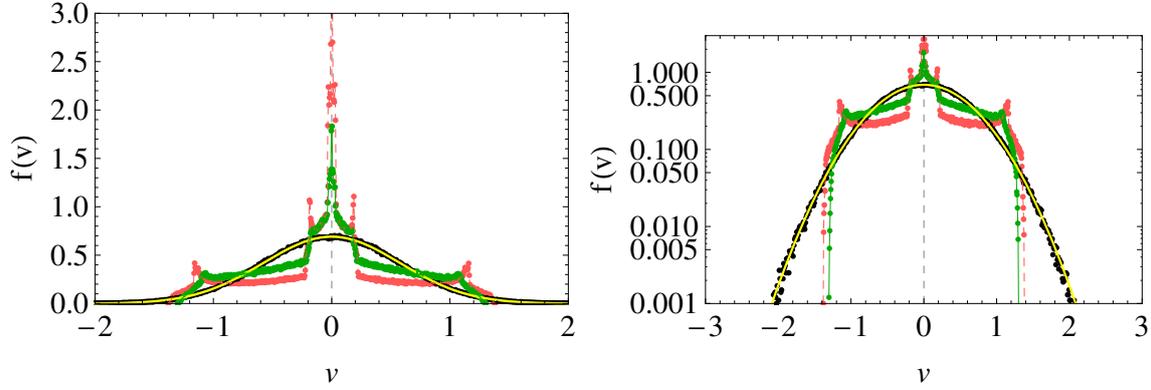


Figura 5.6: Distribuição estacionária $f(v)$ versus v obtidos por simulação numérica. Para todos os casos, $T = 1/3$, $m = k = \gamma = 1$, $p = \bar{p} = 1/2$ e $b = -a$. A verde $\alpha = 1$, $a = 1$; a vermelho pálido $\{\alpha = \alpha^\dagger = 0.5438\dots, a = 1.06188\dots\}$ e a preto $\{\alpha = 100, a = \sqrt{3367/100}\}$. A linha amarela representa uma gaussiana com variância $1/3$, que corresponde ao limite assintótico da distribuição $f(v)$ quando α tende para infinito. À direita o mesmo gráfico em log-linear.

Para baixos valores das taxas de transição, $f(v)$ tem formas peculiares que demonstram semelhança com distribuições fractais. Assim, $f(v)$ assume formas diferentes relativamente à sua comparação com a Gaussiana. Para um dado conjunto de valores mecânicos do problema, poderão existir três situações; para um dado valor $\alpha < \alpha^\dagger$, a distribuição de velocidades é leptocúrtica (super-Gaussiana), $C > 0$. Para $\alpha = \alpha^\dagger = 0.543811763\dots$, a curva da curtose toca pela primeira vez o eixo $C = 0$. Como a curtose é simétrica em p , tal acontece para $p^\dagger = p^\ddagger = 1/2$. A partir daí, existem regiões leptocúrticas para $p > p^\dagger$ e $p < p^\ddagger = p^\dagger + 1/2$, mas contém regiões platicúrticas (sub-Gaussiana). Neste caso, existem os dois pontos mesocúrticos, que não obstante representam situações de distribuição assimétrica, tal como mostrado na Figura 5.7.

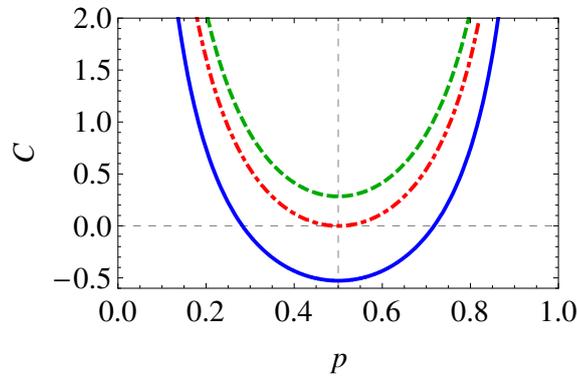


Figura 5.7: Curtose do sistema v probabilidade estacionária do estado a com $m = k = \gamma = 1$ e $b = -a = 1$. A linha a verde corresponde a $\alpha = 1$, a linha tracejada-pontilhada vermelho pálido tem $\alpha = \alpha^\dagger = 0.5438\dots$ e a linha tracejada marrom $\alpha = 45/100$.

Quando $\alpha = \alpha^\dagger$, a distribuição se torna mesocúrtica e é simétrica em p^\dagger , porém a distribuição continua a não ser Gaussiana. Isso fica claro a partir da Figura 5.6. Nos painéis da Figura 5.8 apresento o comportamento da curtose em função de α e p .

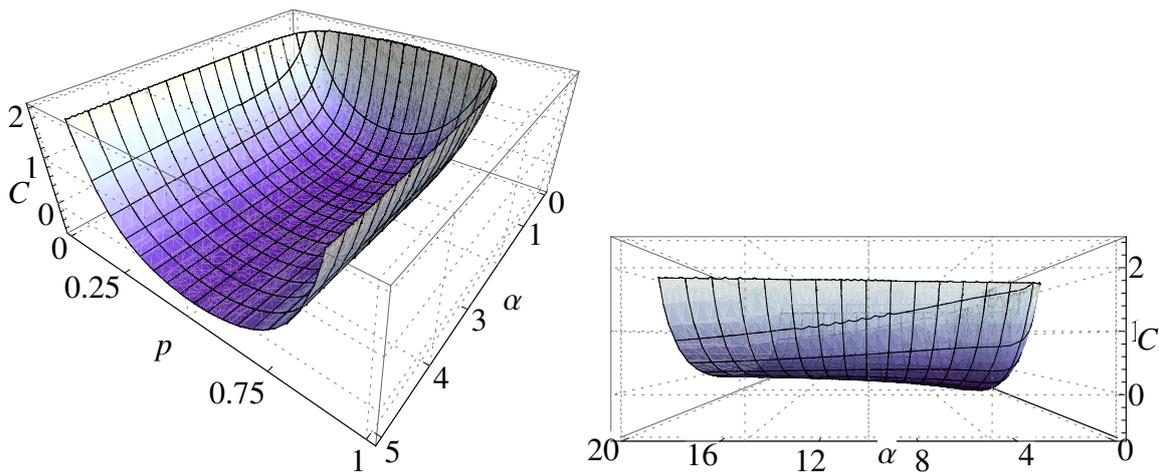


Figura 5.8: Curtose do sistema em função de α e de p assumindo os parâmetros $m = k = \gamma = 1$ e $b = -a = 1$.

5.2.2 Estatística da Posição

Embora a estrutura das equações dos momentos da posição no espaço de Laplace-Fourier seja muito semelhante à dos momentos da velocidade, a ausência de fatores $(i q + \varepsilon)$ no numerador das integrais introduz modificações óbvias na estatística desta quantidade. Começando pela média se verifica que o valor do estado estacionário reflete o balanço entre as amplitudes de cada um dos estados e suas respectivas probabilidades. Tenho então que,

$$\langle x \rangle = \int \frac{dq}{2\pi} \frac{1}{R(i q + \varepsilon)} \langle \tilde{\zeta}(i q + \varepsilon) \rangle, \quad (5.56)$$

que após a resolução da integral vale,

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \frac{\mathcal{A}}{k} \\ &= \frac{a p + b \bar{p}}{k}. \end{aligned} \quad (5.57)$$

Ou seja, contrariamente ao que acontece com a velocidade cujo valor no estado estacionário tem que ser igual a zero, a posição de equilíbrio não terá que sê-lo. Isto corresponde a dizer que começando o sistema em $x(t=0) = 0$ durante o transiente, haverá um deslocamento da posição média Eq. (5.57) passando as oscilações a ocorrer em torno dessa posição, que não corresponde ao mínimo do potencial confinante. Na Figura 5.9 apresento resultados computacionais para um caso.

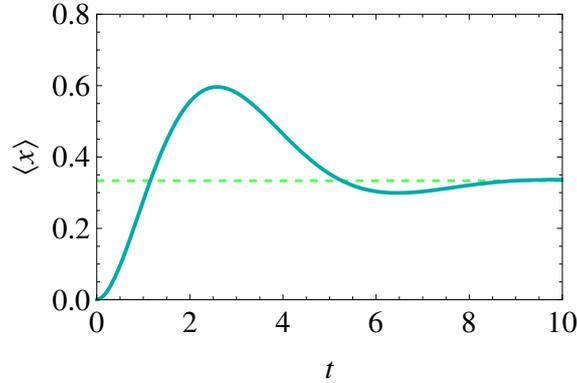


Figura 5.9: Evolução temporal de $\langle x \rangle$. A linha a cheio corresponde a simulação numérica com estatística sobre 10^6 amostras com os seguintes parâmetros numéricos: $m = k = \alpha = \gamma = 1$, $a = -b = 1$ e $\mu = 2/3$, $\bar{\mu} = 1/3$. A linha tracejada representa o limite de tempo longo $\langle x \rangle = 1/3$.

Do segundo momento se obtém o segundo cumulante — ou a variância — que caracteriza a magnitude das flutuações em torno do valor médio,

$$\begin{aligned} \langle\langle x^2 \rangle\rangle &= \frac{\mathcal{B}\mathcal{D}(\gamma + m\alpha)}{\gamma k [k + \alpha(\gamma + m\alpha)]} = \frac{\mathcal{B}\mathcal{D}\hat{\gamma}}{\gamma k \hat{k}} = \frac{(a-b)^2 p \bar{p} \hat{\gamma}}{\gamma k \hat{k}} \\ &= \frac{\Delta^2 P \hat{\gamma}}{\gamma k \hat{k}} = \frac{\hat{\gamma}}{k(\hat{\gamma} - \gamma)} \mathcal{T}, \end{aligned} \tag{5.58}$$

permitindo escrever esta quantidade em função da Temperatura de Marconi; no entanto, ao contrário do que acontece com o caso de um reservatório de calor clássico — mas em consonância com um reservatório gaussiano externo — o segundo cumulante da posição para um potencial harmônico não vale $\mathcal{T}k$. A apresento a evolução de $\langle\langle x^2 \rangle\rangle$ para o comportamento assintótico na Figura 5.10.

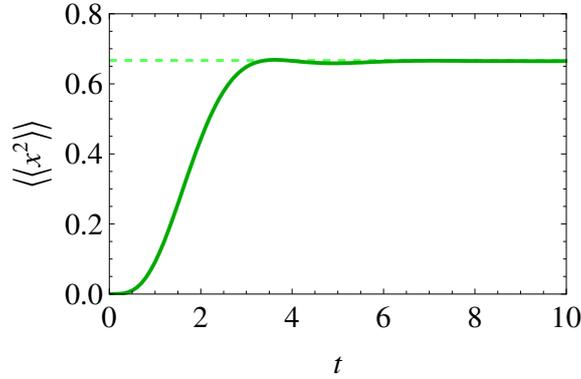


Figura 5.10: Evolução temporal de $\langle\langle x^2 \rangle\rangle$. A linha a cheio corresponde a simulação numérica com estatística sobre 10^6 amostras com os seguintes parâmetros numéricos: $m = k = \alpha = \gamma = 1$, $a = -b = 1$ e $\mu = \bar{\mu} = 1/2$. A linha tracejada representa o limite de tempo longo $\langle\langle x^2 \rangle\rangle = 2/3$.

Como a posição pode apresentar um valor não nulo, o terceiro momento não vale o terceiro cumulante sendo obtido pela expressão,

$$\langle x^3 \rangle = \langle\langle x^3 \rangle\rangle + 3 \langle\langle x^2 \rangle\rangle \langle x \rangle + \langle x \rangle^3, \quad (5.59)$$

onde se faz uso das Eqs. (5.57), (5.58) e do cálculo da integração tripla,

$$\langle x^3 \rangle = \int \prod_{n=1}^3 \frac{dq_n}{2\pi} \frac{z}{z - \sum_{l=1}^3 (i q_l + \varepsilon)} \frac{1}{R(i q_n + \varepsilon)} \left\langle \prod_{l=1}^3 \tilde{\zeta}(i q_l + \varepsilon) \right\rangle. \quad (5.60)$$

Juntanto todos os elementos, o terceiro cumulante fica,

$$\begin{aligned} \langle\langle x^3 \rangle\rangle &= -2 \frac{\mathcal{B} \mathcal{D} (\mathcal{B} - \mathcal{D}) [k m (5 \hat{\gamma} - 3\gamma) + 2 \hat{\gamma}^2 (\gamma + \hat{\gamma})]}{k \hat{\gamma} \hat{k} (k m + 2\gamma^2) [4k + \alpha (\hat{\gamma} + \gamma)]} \\ &= 2 \frac{\Delta^3 P (2p - 1) [k m (5 \hat{\gamma} - 3\gamma) + 2 \hat{\gamma}^2 (\gamma + \hat{\gamma})]}{k \hat{\gamma} \hat{k} (k m + 2\gamma^2) [4k + \alpha (\hat{\gamma} + \gamma)]} \end{aligned} \quad (5.61)$$

e a assimetria da distribuição da posição,

$$\begin{aligned}
 A &= \frac{\langle\langle x^3 \rangle\rangle}{\langle\langle x^2 \rangle\rangle^{3/2}} \\
 &= 2 \frac{(2p-1) [km(5\hat{\gamma} - 3\gamma) + 2\hat{\gamma}^2(\hat{\gamma} + \gamma)]}{k\hat{\gamma}\hat{k}(km + 2\gamma^2)[4k + \alpha(\hat{\gamma} + \gamma)]} \sqrt{\frac{\alpha\gamma^3 k\hat{k}}{P\hat{\gamma}^5}}.
 \end{aligned} \tag{5.62}$$

Na Figura 5.11, apresento a evolução de $\langle\langle x^3 \rangle\rangle$.

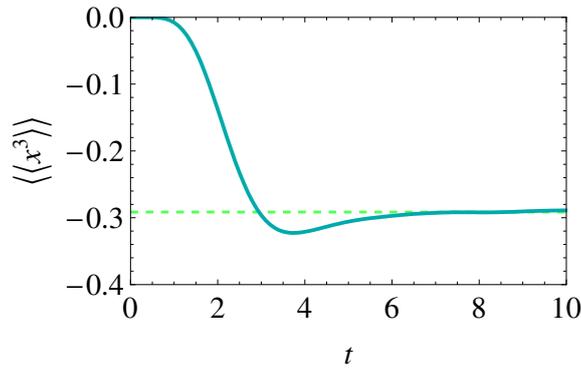


Figura 5.11: Evolução temporal de $\langle\langle x^3 \rangle\rangle$. A linha a cheio corresponde a simulação numérica com estatística sobre 10^6 amostras com os seguintes parâmetros numéricos: $m = k = \alpha = \gamma = 1$, $a = -b = 1$ e $\mu = 2/3$, $\bar{\mu} = 1/3$. A linha tracejada representa o limite de tempo longo $\langle\langle x^3 \rangle\rangle = -479/1701 = -0.2915\dots$

Para o caso da posição, o comportamento está dentro das expectativas (tem o mesmo comportamento do ruído) e não é passível de alteração por parte do jogo de parâmetros mecânicos. Mostro o comportamento da assimetria na Figura 5.12. Comparando a assimetria da posição com a da velocidade se pode verificar que a primeira quantidade tem uma distribuição mais assimétrica do que a segunda, para os mesmos parâmetros.

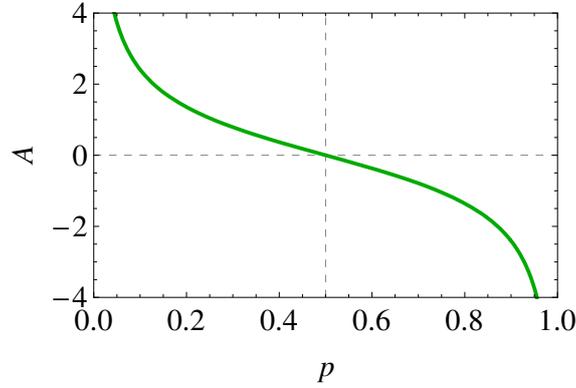


Figura 5.12: Assimetria da distribuição de $f(x)$ v probabilidade do estado a do ruído, p de acordo com a Eq. (5.61). Os parâmetros considerados foram os seguintes: $m = k = \gamma = 1$, $a = -b = 1$ e $\alpha = 1$.

Concluo a análise dos momentos avaliando distância para a Gaussianidade da posição por análise do quarto cumulante e da curtose, que respetivamente valem,

$$\langle\langle x^4 \rangle\rangle = 6 \frac{\Delta^4 P (\mathcal{G}_1 + k \hat{\gamma} \mathcal{G}_2 + 3k^3 m^2 \mathcal{G}_3 + k^2 m \mathcal{G}_4)}{k \gamma \hat{k}^2 \hat{\gamma} (3k + \hat{k}) (3\gamma^2 + 4km) [9k + \alpha (\hat{\gamma} + 2\gamma)] [\delta_\gamma^2 + 3\gamma \delta_\gamma + 2\gamma^2 + km]}, \quad (5.63)$$

e

$$C = 6 \frac{k \gamma (\mathcal{G}_1 + k \hat{\gamma} \mathcal{G}_2 + 3k^3 m^2 \mathcal{G}_3 + k^2 m \mathcal{G}_4)}{P \hat{\gamma}^3 (3k + \hat{k}) (3\gamma^2 + 4km) [9k + \alpha (\hat{\gamma} + 2\gamma)] [\delta_\gamma^2 + 3\gamma \delta_\gamma + 2\gamma^2 + km]}, \quad (5.64)$$

onde as função valem,

$$\mathcal{G}_1 = 3 (5P + 1) \alpha \hat{\gamma}^4 (\hat{\gamma} + \gamma)^2 (\hat{\gamma} + 2\gamma),$$

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_2 = & (170P + 33) \delta_\gamma^5 + 10 (110P + 21) \gamma \delta_\gamma^4 + (2411P + 445) \gamma^2 \delta_\gamma^3 \\ & + 7 (329P + 58) \gamma^3 \delta_\gamma^2 + 6 (181P + 31) \gamma^4 \delta_\gamma + 36 (6P + 1) \gamma^5, \end{aligned}$$

(5.65)

$$\mathcal{G}_3 = 3 (8P + 3) \delta_\gamma^2 + (144P + 35) \gamma \delta_\gamma + 8 (6P + 1) \gamma^2,$$

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_4 = & 19 (17P + 3) \delta_\gamma^4 + 3 (599P + 105) \gamma \delta_\gamma^3 + (2866P + 481) \gamma^2 \delta_\gamma^2 \\ & + (1740P + 277) \gamma^3 \delta_\gamma + 66 (6P + 1) \gamma^4. \end{aligned}$$

Na Figura 5.13 apresento a evolução de $\langle\langle x^4 \rangle\rangle$, na Figura 5.14 o comportamento da curtose com α e p e na Figura 5.15 os histogramas para os mesmos casos apresentados na Figura .

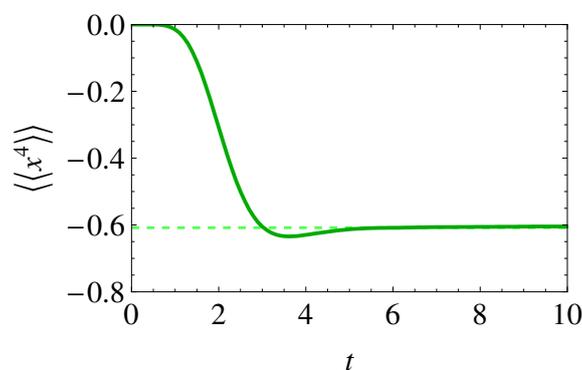


Figura 5.13: Evolução temporal de $\langle\langle x^4 \rangle\rangle$. A linha a cheio corresponde a simulação numérica com estatística sobre 10^6 amostras com os seguintes parâmetros numéricos: $m = k = \alpha = \gamma = 1$, $a = -b = 1$ e $\mu = \bar{\mu} = 1/2$. A linha tracejada representa o limite de tempo longo $\langle\langle x^4 \rangle\rangle = -166/273 = -0.608\dots$

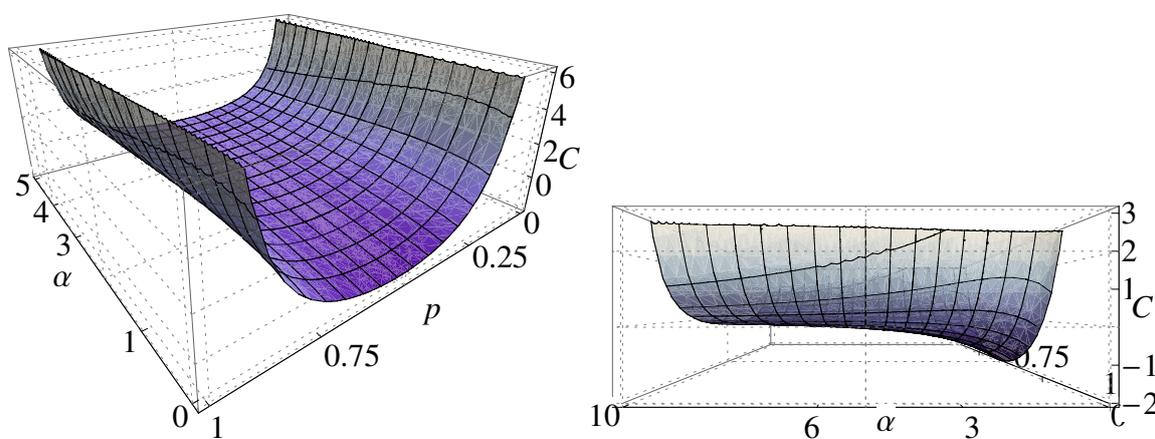


Figura 5.14: Evolução temporal de $\langle\langle x^4 \rangle\rangle$. A linha a cheio corresponde a simulação numérica com estatística sobre 10^6 amostras com os seguintes parâmetros numéricos: $m = k = \alpha = \gamma = 1$, $a = -b = 1$ e $\mu = \bar{\mu} = 1/2$. A linha tracejada representa o limite de tempo longo $\langle\langle x^4 \rangle\rangle = -166/273 = -0.608\dots$

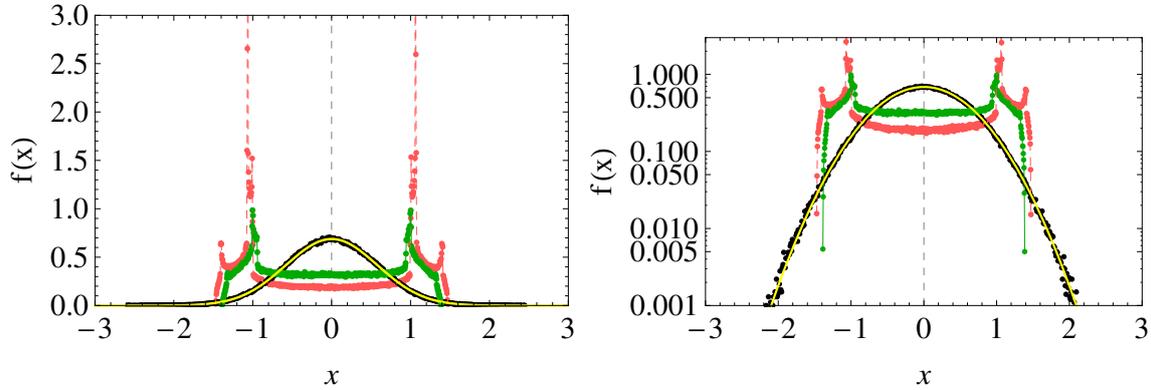


Figura 5.15: Distribuição estacionária $f(x)$ vs x obtidos por simulação numérica. Para todos os casos, $T = 1/3$, $m = k = \gamma = 1$, $p = \bar{p} = 1/2$ e $b = -a$. A verde $\alpha = 1$, $a = 1$; a vermelho pálido $\{\alpha = \alpha^\dagger = 0.5438\dots, a = 1.06188\dots\}$ e a preto $\{\alpha = 100, a = \sqrt{3367/100}\}$. A linha amarela representa uma gaussiana com variância $2/3$, que corresponde ao limite assintótico da distribuição $f(x)$ quando α tende para infinito. À direita o mesmo gráfico em log-linear.

A aparência da distribuição das posições e da velocidade pode ser entendida da seguinte; numa situação em que a escala de relaxação é suficientemente menor do que o inverso das taxas de transição pode considerar-se o valor de ζ constante. Desta forma, a solução da equação de movimento para as condições iniciais $x(0) = 0$, $v(0) = 0$, é,

$$x(t) = -\frac{\zeta}{k} + \exp\left[-\frac{\gamma t}{2m}\right] \left\{ \frac{\zeta}{k} \cos\left[\sqrt{\frac{k}{m} - \frac{\gamma^2}{4m^2}} t\right] + \frac{\gamma \zeta}{k\sqrt{4km - \gamma^2}} \sin\left[\sqrt{\frac{k}{m} - \frac{\gamma^2}{4m^2}} t\right] \right\}. \quad (5.66)$$

No regime definido, o sistema passará mais tempo numa região próxima de $-\zeta/k$, ou seja de $-a/k$ e $-b/k$ e aí será mais frequentemente encontrado quanto maior for a diferença entre τ_r e os tempos μ^{-1} e $\bar{\mu}^{-1}$. Daqui se explicam os picos próximos de ± 1 . Da mesma maneira que o pico em torno de zero na distribuição das probabilidades aumenta com o aumento da

diferença entre os tempos τ_r e $\mu^{-1} (\bar{\mu}^{-1})$. O vão entre os valores $-a/k$ e $-b/k$ é preenchido pela evolução eminentemente oscilatória da posição e velocidade. Relembre-se que a construção de um histograma de uma variável que segue uma função trigonométrica tem a forma,

$$p(\mathcal{O}) = \frac{1}{\pi\sqrt{1-\mathcal{O}^2}},$$

que tem o perfil em U demonstrado em duas distribuições.

À medida que τ_r e $\mu^{-1} (\bar{\mu}^{-1})$ se tornam próximas ou τ_r menor do que $\mu^{-1} (\bar{\mu}^{-1})$ a estrutura da distribuição vai desaparecendo até que no limite se tem uma Gaussiana perfeita para os dois casos.

5.3 Considerações Energéticas para o Reservatório Dicotômico

De acordo com a dinâmica do problema, variação de energia da partícula decorre da sobreposição das duas forças não-conservativas que atuam sobre ela, a força que dissipa calor e que é co-responsável pela emergência de um estado estacionário,

$$F_{\text{dis}}(t) = -\gamma v(t), \quad (5.67)$$

e uma força que injeta energia no sistema — proveniente do reservatório de trabalho — e que garante que este apresenta uma dinâmica estocástica (naturalmente difusiva) e a não relaxação para o estado de repouso,

$$F_{\text{inj}}(t) = \zeta(t). \quad (5.68)$$

Logo, a variação de energia cinética, K , e potencial, V , entre o instante inicial $t = 0$ e $t = \Xi$, corresponde ao trabalho realizado por estas duas forças, que caracterizam os dois fluxos,

$$\begin{aligned}
 E(\Xi) &\equiv K(\Xi) + V(\Xi) = \int_0^\Xi [-\gamma v(t)] v(t) dt + \int_0^\Xi \zeta(t) v(t) dt \\
 &= J_{\text{dis}}(\Xi) + J_{\text{inj}}(\Xi).
 \end{aligned}
 \tag{5.69}$$

Estas duas quantidades J são obviamente estocásticas, daí que apenas sejam devidamente caracterizadas por seus momentos estatísticos. Vale a pena frisar também que os resultados apresentados para esses momentos serão de valia em um posterior aprofundamento de uma análise entrópica do sistema em que os fluxos de injeção e dissipação estarão respectivamente relacionados com as entropias de troca e criação (Ψ e Π) descritas no capítulo 2.

No que se segue, considerarei a análise de longo curso de tal forma que Ξ é muito maior do que as escalas de relaxamento do problema, m/γ e α^{-1} . Consequentemente, os resultados que a seguir apresento se encontram expurgados de termos oscilatórios e/ou amortecidos que apenas são relevantes no transiente.

Sendo que o sistema atinge um estado de estacionário, após o transiente, a variação de energia criada pelo trabalho realizado pelo reservatório deverá ser compensado pela dissipação. No caso de ruído Gaussiano branco, foi demonstrado que o valor da energia total do estado estacionário corresponde a uma constante que surge por via da dissipação. Ou seja, algo contra-intuitivamente, o responsável pela construção da energia do sistema é a dissipação e não a

injeção.⁹ Porém, como mostrei no primeiro caso que compõe esta dissertação — o caso gaussiano colorido — também a injeção contribui para o valor de energia média. Também no caso dicotômico a existência de cor levará a tal comportamento. Dividirei a análise pelos diferentes momentos das duas quantidades.

Ainda antes de apresentar os resultados, dou algumas indicações relativamente ao modo como realizei a simplificação dos cálculos. No caso da potência injectada, é preciso ter atenção que a degenerescência no ordenamento temporal é extremamente limitada. O momento de ordem n do fluxo injetado é obtido através de,

$$\begin{aligned} \langle J_{\text{inj}}^n(\Xi) \rangle &= \prod_{l=1}^n \int_0^{\Xi} dt_l \int \frac{dq_{2l-1}}{2\pi} \frac{dq_{2l}}{2\pi} e^{[(i q_{2l-1} + i q_{2l} + 2\varepsilon)t_l]} \frac{(i q_{2l} + \varepsilon)}{R(i q_{2l} + \varepsilon)} \\ &\times \left\langle \prod_{l=1}^n \tilde{\zeta}(i q_{2l-1} + \varepsilon) \tilde{\zeta}(i q_{2l} + \varepsilon) \right\rangle. \end{aligned} \quad (5.70)$$

Isto é, para cada momento de ordem n existem $(2n)!$ ordenamentos possíveis. Contudo, é possível beneficiar da indistinguibilidade dos n pares de tempo responsáveis por $n!$ termos.

Já para o caso dos momentos do fluxo dissipado,

$$\begin{aligned} \langle J_{\text{dis}}^n(\Xi) \rangle &= \prod_{l=1}^n \int_0^{\Xi} dt_l \int \frac{dq_{2l-1}}{2\pi} \frac{dq_{2l}}{2\pi} e^{[(i q_{2l-1} + i q_{2l} + 2\varepsilon)t_l]} \frac{(i q_{2l-1} + \varepsilon)}{R(i q_{2l-1} + \varepsilon)} \frac{(i q_{2l} + \varepsilon)}{R(i q_{2l} + \varepsilon)} \\ &\times \left\langle \prod_{l=1}^n \tilde{\zeta}(i q_{2l-1} + \varepsilon) \tilde{\zeta}(i q_{2l} + \varepsilon) \right\rangle, \end{aligned} \quad (5.71)$$

existe um aumento da degenerescência, pois os ruídos $\tilde{\zeta}(i q_{2l-1} + \varepsilon)$ e $\tilde{\zeta}(i q_{2l} + \varepsilon)$ podem ser trocados dado que ambos se encontram associados à mesma quantidade (velocidade) resultando em $2^n n!$ termos equivalentes.

⁹É óbvio que não é possível desprezar o papel da injeção já que sem esta a dissipação também não ocorreria.

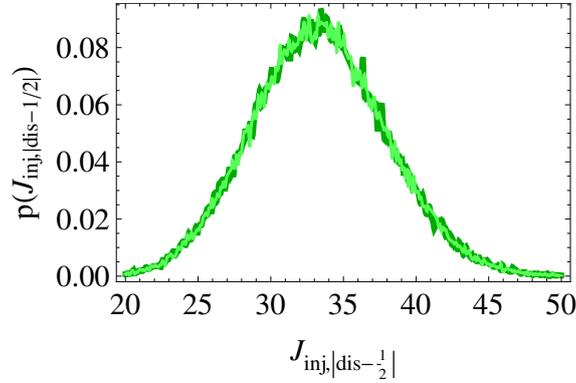


Figura 5.16: Distribuição empírica dos fluxos $J_{\text{inj}}(\Xi)$ e $J_{\text{dis}}(\Xi)$ para $m = k = \alpha = \gamma = 1$, $a = -b = 1$, $\mu = \bar{\mu} = 1/2$ e $\Xi = 1000$. Como verificado as duas distribuições são concorrentes. O ajuste de $1/2$ no fluxo dissipado serve apenas para eliminar valores constantes que se anulam no cálculo de J_{dis} .

Antes prosseguir para a apresentação dos resultados analíticos, devo notar que fisicamente, mais relevante do que os momentos são os cumulantes, sobretudo devido à sua extensividade. Nesse contexto, os cumulantes $\langle\langle J_{\text{inj},|\text{dis}}^n(\Xi) \rangle\rangle$ crescem linearmente o tempo, pelo menos assintoticamente.

Excetuando as médias — cujos valores assintóticos têm de crescer igualmente de forma a que seja garantida a existência de um estado estacionário — não existem à primeira vista para que os restantes momentos sejam iguais. Em trabalhos anteriores, foi já verificado que os restantes momentos estatísticos dos fluxos injetado e dissipado é igual, para reservatórios gaussianos brancos (ou coloridos) bem como para ruídos de Poisson. A igualdade das distribuições implica,

$$\lim_{\Xi \rightarrow \infty} \frac{1}{\Xi} \langle\langle J_{\text{inj}}^n(\Xi) \rangle\rangle = \lim_{\Xi \rightarrow \infty} \frac{1}{\Xi} |\langle\langle J_{\text{dis}}^n(\Xi) \rangle\rangle|. \quad (5.72)$$

Essa igualdade ilustrada por via numérica na Figura 5.16 também para o caso dicotômico. Nesse sentido, efetuarei os cálculos dos restantes momentos para o fluxo dissipado já que as suas contas são mais simples. Me focarei nas seguintes quantidades assintóticas,

$$\begin{aligned} \langle\langle \mathcal{J}^n(\Xi) \rangle\rangle &\equiv \Xi \lim_{\Xi \rightarrow \infty} \frac{1}{\Xi} \langle\langle \mathcal{J}^n(\Xi) \rangle\rangle \\ &= \Xi r_{\langle\langle \mathcal{J}^n(\Xi) \rangle\rangle}. \end{aligned} \quad (5.73)$$

Usando a representação de Laplace-Fourier, os dois fluxos médios são calculados a partir de,

$$\langle J_{\text{inj}}(\Xi) \rangle = \int_0^\Xi \int dt \frac{dq_1}{2\pi} \frac{dq_2}{2\pi} e^{[(i q_1 + i q_2 + 2\varepsilon)t]} \frac{(i q_2 + \varepsilon)}{R(i q_2 + \varepsilon)} \left\langle \prod_{l=1}^2 \tilde{\zeta}(i q_l + \varepsilon) \right\rangle, \quad (5.74)$$

$$\langle J_{\text{dis}}(\Xi) \rangle = -\gamma \int_0^\Xi \int dt \frac{dq_1}{2\pi} \frac{dq_2}{2\pi} e^{[(i q_1 + i q_2 + 2\varepsilon)t]} \frac{(i q_1 + \varepsilon)}{R(i q_1 + \varepsilon)} \frac{(i q_2 + \varepsilon)}{R(i q_2 + \varepsilon)} \left\langle \prod_{l=1}^2 \tilde{\zeta}(i q_l + \varepsilon) \right\rangle.$$

Tenho então para o fluxo injetado,

$$\begin{aligned} \langle J_{\text{inj}}(\Xi) \rangle &= \frac{\mathcal{B} \mathcal{D} \alpha}{\hat{k}} \Xi + E_{\text{inj}} = \frac{(a-b)^2 p \bar{p} \alpha}{\hat{k}} \Xi + E_{\text{inj}} \\ &= \frac{\gamma \mathcal{T}}{m} \Xi + \left[\frac{\Delta^2 P}{\hat{k}} (k - \alpha \delta_\gamma) + \frac{\mathcal{A}^2}{k} \right], \end{aligned} \quad (5.75)$$

e para o fluxo dissipado,

$$\begin{aligned}
\langle J_{\text{dis}}(\Xi) \rangle &= -\frac{\mathcal{B}\mathcal{D}\alpha}{\hat{k}}\Xi + E_{\text{dis}} = -\frac{(a-b)^2 p\bar{p}\alpha}{\hat{k}}\Xi + E_{\text{dis}} \\
&= -\frac{\gamma\mathcal{T}}{m}\Xi + \left\{ \frac{\Delta^2 P}{\gamma\hat{k}^2} [k(2\hat{\gamma} - \gamma) + \alpha(2\hat{\gamma}^2 - 2\gamma^2 + \gamma\hat{\gamma})] - \frac{\mathcal{A}^2}{2k} \right\}.
\end{aligned} \tag{5.76}$$

Se vê então que os fluxos médios crescem no tempo da mesma forma,

$$\begin{aligned}
\langle J_{\text{inj}}(\Xi) \rangle &= |\langle J_{\text{dis}}(\Xi) \rangle| = \frac{\gamma\mathcal{T}}{m}\Xi \\
&= \frac{(a-b)^2 P\alpha}{\hat{k}}\Xi.
\end{aligned} \tag{5.77}$$

E a soma dos termos independentes de Ξ vale,

$$\begin{aligned}
E_{\text{inj}} + E_{\text{dis}} &= \frac{m\Delta^2 P\alpha}{2\hat{k}} + \frac{\Delta^2 P\hat{\gamma}}{2\gamma\hat{k}} + \frac{\mathcal{A}^2}{2k} \\
&= \frac{1}{2}m\langle v^2 \rangle + \frac{1}{2}k\langle x^2 \rangle_c + \frac{1}{2}k\langle x \rangle^2.
\end{aligned}$$

O primeiro termo é claramente a energia cinética do estado estacionário e o segundo e terceiro termos correspondem à energia potencial; o terceiro termo é a energia potencial gerada pelo facto de um ruído assimétrico levar a partícula para uma posição média que não corresponde ao mínimo do potencial confinante e o segundo termo a energia potencial associada às oscilações e torno desse valor médio. Na Figura 5.17, pode se verificar a evolução dos fluxos com Ξ

da forma descrita pela Eq. (5.77). Para tempos grandes, a diferença entre os fluxos se torna constante e essa diferença é exatamente a energia.

É importante frisar um fato, olhando a Eq. (5.77) se vê que a estrutura de fluxo médio igual à constante dissipativa multiplicada pela temperatura (e tempo) dividindo pela massa se mantém, indicando uma certa universalidade desta relação independentemente do tipo e natureza do reservatório. Com isso, se verifica que a definição da temperatura de Marconi é corresponde à definição de escala de energia adequada para este problema.

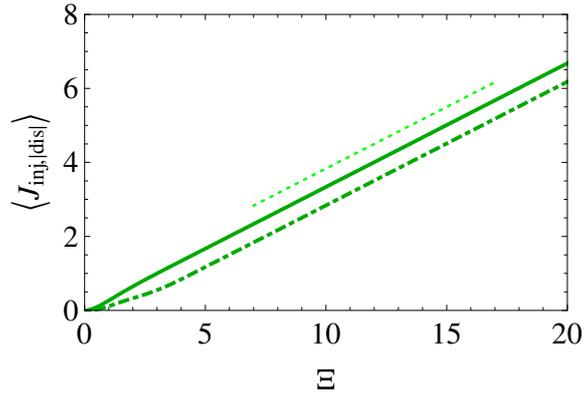


Figura 5.17: Evolução temporal da média dos fluxos $\langle J_{inj}(\Xi) \rangle$ (linha cheia) e $\langle J_{dis}(\Xi) \rangle$ (linha tracejada-pontilhada) obtida por simulação numérica de 10^6 amostras independentes com os seguintes parâmetros $m = k = \alpha = \gamma = 1$, $a = -b = 1$, $\mu = \bar{\mu} = 1/2$. A linha pontilhada representa o comportamento do crescimento assintótico dado pela Eq. (5.77), $\langle \mathcal{J}(\Xi) \rangle = \Xi/3$.

Para o caso $a = -b$ as funções de resposta são fáceis de encontrar.¹⁰ Relativamente ao calor específico tenho,

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathcal{T}} = \frac{2\hat{\gamma} - \gamma}{2(\hat{\gamma} - \gamma)}, \quad (5.78)$$

¹⁰A situação simétrica é considerada para que se possa ignorar o termo extra de energia potencial.

e para as funções de resposta aos parâmetros mecânicos e a cor do ruído,

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k} = -\frac{\Delta^2 P (2\hat{\gamma} - \gamma)}{2\gamma \hat{k}^2} = -\frac{2\hat{\gamma} - \gamma}{2(\hat{\gamma} - \gamma)\hat{k}} \mathcal{T}, \quad (5.79)$$

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \gamma} = -\frac{\Delta^2 P \alpha (k m + \gamma^2 + 4\hat{\gamma}\gamma + 2\hat{\gamma}^2)}{2\gamma^2 \hat{k}^2} = -\frac{k m + \gamma^2 + 4\hat{\gamma}\gamma + 2\hat{\gamma}^2}{2m\gamma \hat{k}} \mathcal{T}, \quad (5.80)$$

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial m} = -\frac{\Delta^2 P \alpha (2k + \alpha\gamma)}{2\gamma \hat{k}^2} = -\frac{2k + \alpha\gamma}{2m\hat{k}} \mathcal{T}. \quad (5.81)$$

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \alpha} = \frac{\Delta^2 P \alpha [2k m - 2(\hat{\gamma} - \gamma)\hat{\gamma} - \hat{\gamma}^2]}{2\gamma \hat{k}^2} = \frac{2k m - 2(\hat{\gamma} - \gamma)\hat{\gamma} - \hat{\gamma}^2}{2m\hat{k}} \mathcal{T}. \quad (5.82)$$

Deste conjunto de leis verifico que:

- O calor específico deixa de ter o comportamento clássico para um sistema deste tipo,

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial T} = 1;$$

- As funções de resposta $\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k}$, $\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \gamma}$ e $\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial m}$ que no caso de reservatório interno são nulas assumem valores finitos diferentes de zero na passagem para reservatório externo;
- As funções $\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k}$ e $\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial m}$ têm sempre o mesmo sinal, sendo que neste caso, ao contrário do que acontece para o reservatório Gaussiano externo, $\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial m}$ é negativa;
- Já para $\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \gamma}$ não existe inversão de sinal por comparação com o caso Gaussiano externo.

Estas relações são substancialmente diferentes daquelas encontradas para o primeiro modelo, mesmo quando se procuram escrever as relações parametrizadas em T^* .

Pelo que expus na página 5.3, o cálculo da variância,

$$\begin{aligned} \langle J_{\text{dis}}^2(\Xi) \rangle &= \prod_{l=1}^2 \int_0^{\Xi} dt_l \int \frac{dq_{2l-1}}{2\pi} \frac{dq_{2l}}{2\pi} e^{[(i q_{2l-1} + i q_{2l} + 2\varepsilon)t_l]} \frac{(i q_{2l-1} + \varepsilon)}{R(i q_{2l-1} + \varepsilon)} \frac{(i q_{2l} + \varepsilon)}{R(i q_{2l} + \varepsilon)} \\ &\times \left\langle \prod_{l=1}^2 \tilde{\zeta}(i q_{2l-1} + \varepsilon) \tilde{\zeta}(i q_{2l} + \varepsilon) \right\rangle, \end{aligned} \quad (5.83)$$

envolverá 3 tipos de termos diferentes, cada um com 16 parcelas.

Após alguma álgebra,

$$\begin{aligned} \langle\langle \mathcal{J}^2(\Xi) \rangle\rangle &= \frac{P \alpha [a^4 \mathcal{H}_{11} + 2 a b (a^2 \mathcal{H}_{12} + b^2 \mathcal{H}_{13}) + a^2 b^2 (\mathcal{H}_{14} + \mathcal{H}_{15}) + b^4 \mathcal{H}_{16}]_{\Xi}}{4 k \hat{k}^3} \quad (5.84) \\ &+ \frac{a^4 p \mathcal{H}_{21} + 4 a b P \alpha (a^2 \mathcal{H}_{22} + b^2 \mathcal{H}_{23}) + 2 a^2 b^2 P (\mathcal{H}_{24} + \alpha^2 \mathcal{H}_{25}) + b^4 \bar{p} \mathcal{H}_{26}}{k \gamma \hat{\gamma} \hat{k} [4k + \alpha(\hat{\gamma} + \gamma)]}_{\Xi} \\ &+ \frac{a^4 p \mathcal{H}_{31} + 4 a b P \alpha (a^2 \mathcal{H}_{32} + b^2 \mathcal{H}_{33}) + 2 a^2 b^2 P (\mathcal{H}_{34} + \alpha^2 \mathcal{H}_{35}) + b^4 \bar{p} \mathcal{H}_{36}}{k \alpha \gamma \hat{k} (\gamma^2 - \delta_{\gamma}^2 + 4 k m)}_{\Xi}, \end{aligned}$$

em que cada uma das funções são definidas como,

$$\mathcal{H}_{11} = k \hat{k} \bar{p}^2 + \hat{k}^2 p^2 + P k (k - \delta_{\gamma} \alpha),$$

$$\mathcal{H}_{12} = P \alpha [\alpha \hat{\gamma}^2 + k(5 \hat{\gamma} + 2\gamma)] - k \hat{k} \bar{p}^2 - \hat{k}^2 p^2,$$

$$\mathcal{H}_{13} = (2P - 1) k^2 + \alpha k [P(5 \hat{\gamma} + 2\gamma) - 2 \hat{\gamma} \bar{p}^2 - \hat{\gamma} p^2] + \bar{p} \hat{\gamma}^2 \alpha^2 \delta_p,$$

$$\mathcal{H}_{14} = \hat{k}^2 \bar{p}^2 + \hat{k}^2 p^2 - 2 P k \alpha \hat{\gamma},$$

$$\mathcal{H}_{15} = k^2 \delta_p^2 + k \alpha [(1 - 16P) \delta_\gamma + (1 - 12P) \gamma] - 4 \hat{\gamma}^2 P \alpha^2,$$

$$\mathcal{H}_{16} = \hat{k}^2 \bar{p}^2 + k \hat{k} p^2 + Pk(k - \delta_\gamma \alpha),$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{21} = & 4(\hat{\gamma} p + \gamma \bar{p}) k^3 + p k^2 \alpha [(4p^2 + 5) \delta_\gamma^2 + (8p + 1) \gamma \delta_\gamma + 10\gamma^2] \\ & + k \hat{\gamma} \alpha^2 [p(5p^2 + 1) \delta_\gamma^2 + 8p^2 \gamma^2 + 2m\alpha\gamma(6p^2 - 4P)] + p^3 \alpha^3 \hat{\gamma}^3 (\hat{\gamma} + \gamma) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{31} = & 4k^3 (\hat{\gamma} p - \gamma \delta_p) + [p(9p^2 + 10P - 3\bar{p}^2) k^2 \delta_\gamma^2 \alpha + 2(4p^3 + 9pP + 8\bar{p}P + \bar{p}^3) \gamma \delta_\gamma^2 \\ & + \gamma^2 (10\bar{p}^2 - p^2 + 5P)] + k \alpha^2 \hat{\gamma} [p(6p^2 + 2P - \bar{p}^2) \delta_\gamma^2 + \gamma(4p^3 + 8pP + 9\bar{p}P - 2\bar{p}^3) \delta_\gamma \\ & + 2\gamma^2 (5\bar{p}^3 - p^3 - pP + 4\bar{p}P)] + \alpha^3 \delta_\gamma^2 [(\hat{\gamma}^2 + 2\gamma\hat{\gamma}) p^3 + 2\hat{\gamma}\gamma pP + 4\gamma^2 \bar{p}^3], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{22} = & p^2 \alpha^2 \hat{\gamma}^3 (\hat{\gamma} + \gamma) + k \alpha \hat{\gamma} [5p^2 \delta_\gamma^2 + 4p\gamma^2 + 2(5p - 1)\gamma\delta_\gamma] \\ & + k^2 [4p^2 \delta_\gamma^2 + 2\gamma^2 + (4p + 1)\gamma\delta_\gamma], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{32} = & k^2 [\delta_p \gamma^2 - 4P \delta_\gamma \gamma + 4(1 + P) \delta_\gamma^2] + k \hat{\gamma} \alpha [p(2 + 3p) \delta_\gamma^2 \\ & + (p^2 - 3\bar{p}^2) \gamma^2 + (2p^2 - 2P + 3\bar{p}^2) \gamma \delta_\gamma] + \hat{\gamma}^2 \alpha^2 (\hat{\gamma} p - \gamma) (\hat{\gamma} p - 2\gamma \delta_p), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{23} &= \bar{p}^2 \alpha^2 \hat{\gamma}^3 (\hat{\gamma} + \gamma) + k \alpha \hat{\gamma} (4\bar{p}\gamma^2 + 2(4\bar{p} - p) \delta_\gamma \gamma + 5\bar{p}^2 \delta_\gamma^2) \\ &\quad + k^2 [2\gamma^2 + (4\bar{p} + 1) \gamma \delta_\gamma + 4\bar{p}^2 \delta_\gamma^2],\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{33} &= k^2 [(1 + 4P) \gamma \delta_\gamma + 4(1 + p) \bar{p} \delta_\gamma^2 - \delta_p \gamma^2] \\ &\quad + k \hat{\gamma} \alpha [\bar{p} (2 + 3\bar{p}) \delta_\gamma^2 + \gamma^2 (\bar{p}^2 - 3p^2) + \gamma \delta_\gamma (3p^2 - 2P + 2\bar{p}^2)] \\ &\quad + \hat{\gamma}^2 \alpha^2 (\hat{\gamma} \bar{p} - \gamma) (2\gamma \delta_p + \hat{\gamma} \bar{p}),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{24} &= P \alpha^2 \hat{\gamma}^3 (\hat{\gamma} + \gamma) + k \alpha \hat{\gamma} [(5P + 1) \delta_\gamma^2 + 5\gamma \delta_\gamma + 2\gamma^2] + 4k^3 m \\ &\quad + k^2 [(4P + 1) \delta_\gamma^2 + 9\gamma \delta_\gamma + 2\gamma^2],\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{34} &= 4k^3 \hat{\gamma} - k^2 \alpha (9\gamma^2 - 4P \gamma \delta_\gamma + 4P \delta_\gamma^2) \\ &\quad + P k \alpha^2 \hat{\gamma} (3\delta_\gamma^2 + 7\delta_\gamma \gamma - 2\gamma^2) + P \alpha^3 \hat{\gamma}^3 (\hat{\gamma} - 4\gamma),\end{aligned}$$

$$\mathcal{H}_{25} = 2P \alpha \hat{\gamma}^3 (\hat{\gamma} + \gamma) + k \hat{\gamma} (10P \delta_\gamma^2 + 5\gamma \delta_\gamma + 2\gamma^2) + 2k^2 m (\gamma + 4P \delta_\gamma),$$

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{35} &= \alpha \hat{\gamma}^3 [2\hat{\gamma} P + \gamma (1 - 8P)] + k \hat{\gamma} [6P \delta_\gamma^2 - (1 - 14P) \gamma \delta_\gamma + \delta_p^2 \gamma^2] \\ &\quad - 2k^2 m (\gamma \delta_p^2 + 4P \delta_\gamma),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{26} = & 4k^3(\hat{\gamma}\bar{p} + p\gamma) + \bar{p}\alpha k^2[(4\bar{p}^2 + 1)\delta_\gamma^2 + 10\gamma^2 + (8\bar{p} + 1)\gamma\delta_\gamma] \\ & + k\hat{\gamma}\alpha^2(\bar{p}(5\bar{p}^2 + 1)\delta_\gamma^2 + 2(p^2 - 2P + 7\bar{p}^2)\gamma\delta_\gamma + 8\bar{p}^2\gamma^2) + \bar{p}^3\alpha^3\hat{\gamma}^3(\hat{\gamma} + \gamma), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{36} = & 4(\gamma\delta_p + \hat{\gamma}\bar{p})k^3 + [\bar{p}(9\bar{p}^2 - 3p^2 + 10P)k^2\alpha\delta_\gamma^2 \\ & + 2(p^3 + 8pP + 9\bar{p}P + 4\bar{p}^3)\gamma\delta_\gamma + (10p^2 + 5P - \bar{p}^2)\gamma^2] \\ & + [\bar{p}(6\bar{p}^2 - p^2 + 2P)k\alpha^2\hat{\gamma}\delta_\gamma^2 + (4\bar{p}^3 - 2p^3 + 9pP + 8\bar{p}P)\gamma\delta_\gamma \\ & - 2(5p^3 + 4pP - \bar{p}P - \bar{p}^3)\gamma^2] \\ & + \hat{\gamma}^2\alpha^3[\delta_\gamma^2\bar{p}^3 + 2\bar{p}P\delta_\gamma\gamma + \gamma^2(4p^3 - 2\bar{p}P - \bar{p}^3)]. \end{aligned}$$

Na Figura 5.18, apresento o resultado da variância do fluxo e a convergência para um crescimento linear com o tempo.

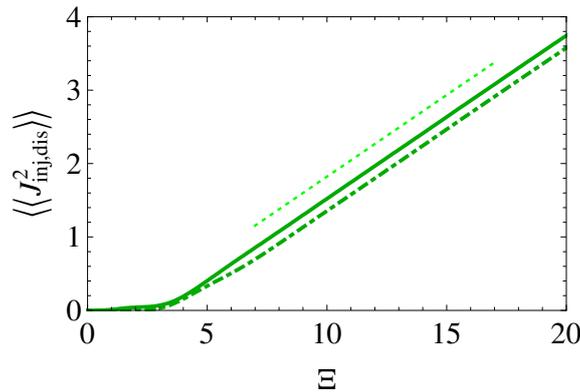


Figura 5.18: Evolução temporal da variância dos fluxos $\langle\langle J_{inj}^2(\Xi) \rangle\rangle$ (linha cheia) e $\langle\langle J_{dis}^2(\Xi) \rangle\rangle$ (linha tracejada-pontilhada) obtida por simulação numérica de 10^6 amostras independentes com os seguintes parâmetros $m = k = \alpha = \gamma = 1$, $a = -b = 1$, $\mu = \bar{\mu} = 1/2$. A linha pontilhada tem declive $8/36 = 0.2$ (2) como dado para a Eq. (5.84).

À medida que o sistema se aproxima de uma situação sujeita a ruído branco, se espera uma convergência para a fórmula do resultado do ruído branco Gaussiano. Essa análise é apresentada na Figura 5.19.

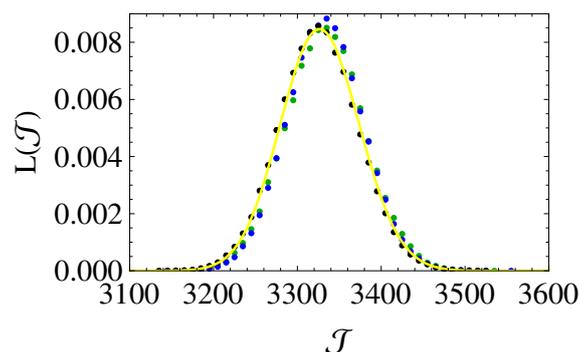


Figura 5.19: Distribuição dos grandes desvios dos fluxos (caso injetado) para $\Xi = 10^4$ obtida a partir do cálculo de 10^5 amostras independentes com os seguintes parâmetros $m = k = \gamma = 1$, $a = -b = 1$, $\mu = \bar{\mu} = 1/2$. Os casos apresentados correspondem a $\alpha = 1$ (verde), $\alpha = 10$ (azul) e $\alpha = 100$ (negro). A linha amarela corresponde ao limite Gaussiano branco dado pela Eq. (5.32).

Dado o claro aumento da complexidade das expressões para os restantes cumulantes se torna impraticável uma análise analítica mais apropriada. Consequentemente, completo os resultados analíticos para os dois primeiros cumulantes com resultados para o terceiro e quarto cumulantes obtidos de forma numérica. Esses resultados permitem o melhoramento da função de grandes desvios através da expansão de Edgeworth. A variação dos cumulantes do fluxo como função de α é apresentada na Figura 5.20. Para os restantes parâmetros fixo tal como indicado na legenda,

os dois cumulantes se mostraram bem descritos pelas seguintes funções,

$$r_{\langle\langle \mathcal{J}^3(\Xi) \rangle\rangle} = \frac{1}{50} \left[27.78 + 1.78 \left(\frac{2.03}{\alpha} \right)^{1.89} - 22.14 \left(\frac{2.03}{\alpha} \right)^{0.4} \right] \quad (5.85)$$

$$r_{\langle\langle \mathcal{J}^4(\Xi) \rangle\rangle} = \frac{1}{50} [-17.04 + 14.05 \alpha - 1.54 \alpha^2 + 0.098 \alpha^3 - 0.0027 \alpha^4]$$

Esses comportamentos estão representados na Figura 5.20 que mostra como a distribuição nunca é Gaussiana nem tende para tal.

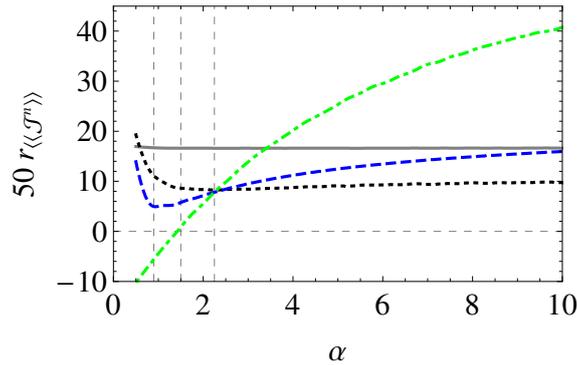


Figura 5.20: Coeficiente dos cumulantes do fluxo em função da cor do ruído telegráfico (multiplicada por 50) para os seguintes parâmetros $m = k = \gamma = 1$, $a = -b = 1$ e temperatura de Marconi $1/3$. A linha cheia (cinza) é a média, a linha pontilhada (negro) a variância, a linha azul tracejada corresponde ao terceiro cumulante e linha verde pontilhada-tracejada representa o quarto cumulante. O terceiro cumulante tem um mínimo para $\alpha \simeq 0.9$. Para $\alpha \simeq 1.5$ a distribuição muda a sua curtose.

Capítulo 6

Conclusões e Perspectivas Futuras

6.1 Conclusões

Nesta dissertação, realizei um estudo sobre a termoestatística de reservatório externos, isto é, reservatórios para os quais as flutuações induzidas no sistema têm uma origem diferente da dissipação criada pela interação entre o sistema e o meio envolvente, cujas eventuais flutuações são tomadas como insignificantes face às flutuações geradas externamente. Desta forma, não se verifica a relação de flutuação-dissipação, e estes reservatórios se comportam majoritariamente como reservatórios de trabalho.

Numa primeira fase, como ponto intermédio entre o tema principal e problemas de ruído branco, estudei o caso de um reservatório externo cujas flutuações são Gaussianas coloridas gerando um processo não-Markoviano, cuja relevância foi apresentada na Seção 5.1. Dada a Natureza aditiva e Gaussiana das flutuações a que o sistema se encontra sujeito e as condições de fronteira naturais, o sistema atinge uma distribuição estacionária funcionalmente equivalente ao peso de Boltzmann. Como esse resultado é também obtido na situação tradicional de re-

servatório interno, se colocou a questão: em que medida é possível utilizar um reservatório interno como análogo de um reservatório externo? Essa possibilidade seria acompanhada de enormes simplificações já que a obtenção de soluções (dependentes do tempo) em processos não-Markovianos está habitualmente restrita a técnicas aproximativas fazendo deste mapeamento entre os dois tipos de problemas uma clara vantagem. Para este caso, verifiquei que para além da questão da probabilidade, o mapeamento permite comprovar que a descrição dos fluxos injetado e dissipado de um sistema de não-equilíbrio tem uma forma funcionalmente universal, $\gamma \Theta \Xi/m$, em que Θ representa a temperatura efetiva do sistema, seja qual for o tipo de reservatório. Para o caso Gaussiano externo, Θ é dado por T^* na Eq. (5.19).

Verifiquei também que, usando técnicas aproximativas, o melhor ponto de partida para a função de grandes desvios dos fluxos de um sistema em contato com um reservatório externo não é o limite de ruído branco, mas sim o análogo interno. Lembrando que a igualdade de Jarzynski, *para trajetórias longas*, não é mais do que a função de grandes desvios da potência injetada no sistema por ação de uma força externa, a análise que levei a cabo fornece uma interpretação diferente de por que motivo a igualdade falha para reservatórios externos [57]. Colocando de maneira diferente, é impossível contornar a relação umbilical entre a dissipação e as flutuações de um sistema em um reservatório interno de forma que a função geradora da distribuição do trabalho realizado pela força externa que desloca o sistema de um estado A para um estado B é sempre igual à razão entre as funções de partição desses estados, qualquer que seja o reservatório.

Daí parti para o principal tema da dissertação: o estudo termoestatístico de um sistema amortecido sujeito a um ruído dicotômico também conhecido por telegráfico. O ruído telegráfico representa sob o ponto de vista matemático um caso especial já que apesar de ter medida descontínua, o seu processo estocástico não é branco, não se enquadrando por isso no teorema da composição da medida de Lévy-Itô que estabelece que qualquer ruído branco será resultado da sobreposição de uma parte contínua — relacionado com o processo de Wiener (gaussiano) — e uma parte descontínua que está enquadrada em um processo Poissoniano.

Sob o ponto de vista prático o ruído bimodal é relevante na discussão de uma série de fenômenos tais como: a cinética de marcadores proteicos em meios capilares; a dinâmica de íon de cálcio no plasma sanguíneo; propriedades de transporte em materiais amorfos; cromatografia; rotação molecular; o movimento browniano em meios flutuantes e catracas nanométricas (veja referências em 1).

Os resultados que aqui apresentei pretendem cobrir tópicos ausentes na literatura, nomeadamente a estatística de sistemas mecânicos dissipativos e amortecidos sujeitos a reservatórios dicotômicos (ruído telegráfico) obtendo a estatística de posição e velocidade no estado estacionário assim como a análise energética dependente do tempo. Os resultados foram obtidos por passagem ao espaço recíproco de Laplace-Fourier e aplicação do teorema do valor final, já que não estava interessado no comportamento do transiente, mas sim nas dependências de tempo longo. Esta formulação tem a vantagem perante os habituais tratamentos assentes na Equação-Mestra (ou Fokker-Planck) de não necessitar da explicitação do propagador, preser-

vando a possibilidade da evolução das quantidades.

Muito por conta de uma estrutura complexa das funções de distribuição de probabilidade da posição e da velocidade, não foi possível estabelecer uma forma fechada para esta quantidade. Tal não é surpreendente, pois em trabalhos anteriores levados a cabo por outros autores que analisam sistemas dicotômicos superamortecidos, se viu ser impossível a obtenção dessas funções. Não obstante, através do cálculo dos momentos, foi possível introduzir uma descrição estatística bastante completa, verificando que no limite em que as taxas de transição entre os dois estados do ruído tende para infinito, as distribuições de posição e velocidade convergem para a distribuição gaussiana. A partir da variância da velocidade e recorrendo à equipartição de energia, estabeleci a temperatura para um sistema dicotômico que designei de temperatura de Marconi.

Através dos cálculos efetuados verifiquei que a posição tem sempre o terceiro cumulante — que quantifica a assimetria da distribuição — de acordo com o ruído e a sua distribuição é sempre sub-Gaussiana (para componentes simétricas do ruído) a distribuição das velocidades tem características particulares; primeiramente a sua assimetria pode acompanhar a assimetria do ruído dependendo da relação entre a cor do ruído telegráfico e os parâmetros mecânicos do sistema, em segundo lugar para baixas taxas de transição $\alpha < 0.54 \dots$ a distribuição é super-Gaussiana, se aproximando da Gaussianidade para $\alpha \rightarrow \infty$ por baixo. Este é um resultado inesperado.

Feita uma análise estatística do problema para a posição e a velocidade, procedi a uma

análise dos fluxos injetado e dissipado. Através dessa análise verifiquei o conceito de temperatura de Marconi definido a partir da estatística da velocidade é a forma correta de caracterizar a energia do sistema dado que permite escrever o valor médio dos fluxos da mesma forma que é feito para problemas de não-equilíbrio com reservatórios internos.

6.2 Perspectivas futuras

O trabalho apresentado nesta dissertação não se encerra de forma alguma sobre si. Deixando de parte problemas de reservatório externo Gaussiano, me foco sobretudo em questões relacionadas com o problema do reservatório externo telegráfico. Em um sentido termoestatístico, existe diversas vertentes do problema a explorar:

- A implementação de um núcleo de memória para a dissipação de forma a que o reservatório dicotômico possa ser entendido como reservatório interno.
- A mais óbvia extensão está relacionada com a alteração do potencial confinante de linear (harmônico) para não-linear nomeadamente usando um potencial confinante do tipo Fermi-Pasta-Ulam, $V(x) = \frac{1}{2}k_1 x^2 + \frac{1}{3}k_2 x^3 + \frac{1}{4}k_3 x^4$. Algum trabalho foi realizado para o potencial bi-estável ($k_1 < 0, k_2 = 0$), mas este se centra acima de tudo no estudo de sistemas superamortecidos e numa lógica de processos estocásticos analisando por exemplo tempos de primeira passagem. Resta por isso, uma abordagem procurando descrever potências e fluxos na linha do que aqui foi feito;
- Determinação de relações de flutuação semelhantes às relações de Crooks ou Jarzynski

para sistemas sujeitos a reservatórios telegráficos. Como foi visto para o caso Gaussiano colorido, a natureza externa dos reservatórios de trabalho impede a aplicação direta das relações acima mencionadas. Porém, ao se analisar um sistema pequeno, as flutuações do trabalho realizado por uma (nova) força externa que leva o sistema do estado estacionário A, para um outro estado estacionário B, são importante. Assim, vale a pena analisar a distribuição desse trabalho e tentar entender como esta função (ou função geradora) se relaciona com quantidades análogas à energia livre do sistema;

- Determinação da relação entre os fluxos injetado e dissipado ($\langle J_{\text{inj}}(\Xi) \rangle$ e $\langle J_{\text{dis}}(\Xi) \rangle$) e as entropias de criação e troca (Π e Ψ), levando em consideração possíveis formas entrópicas alternativas que permitam resgatar a relação linear canônica entre calor e entropia tendo como coeficiente a Temperatura de Marconi.
- A análise de sistemas de várias partículas interagentes sujeitas a fontes telegráficas. Estudando as partículas acopladas existirá trabalho realizado de umas sobre as outras, o que corresponde a fluxos de energia. Se apenas estiverem em causa dois reservatórios pode se pensar em problemas de transmissão de energia através das várias partículas.
- Extensão do problema de uma situação de ruído de dois estados para uma situação de 3 estados, em particular a situação $a \neq 0, b \neq 0$ e $c = 0$.

Como referi na página 82, o conceito de temperatura pode ser visto de forma bastante mais ampla do que a baliza imposta pela Termodinâmica. Da mesma maneira, vários conceitos ter-

moestatísticos podem ser reinterpretados de acordo com o sistema em causa, sobretudo sistemas complexos com origem social e financeira. Em relação ao último problema, existiu recentemente ao primeira abordagem de reservatório interno para a descrição da variação de preços em um mercado financeiro. Apesar do seu interesse, é importante sublinhar que o problema, quando analisado a uma menor escala está mais próximo de um cabo de força entre compradores e vendedores do que um sistema de "partícula em meio aquoso". Ou seja, em uma dinâmica de alta frequência é empiricamente verificado que o sistema tem regimes de subida e descida que se assemelham bastante a um sistema sujeito a um ruído telegráfico. Para mercados de menor liquidez como o brasileiro, estes regimes são ainda mais claros, ao que se juntam períodos de pouca actividade devido à fraca liquidez. Este caso seria adequado para a aplicação do problema de três estados em sistemas complexos.

Bibliografia

- [1] Huang K 1987 *Statistical Mechanics* (New York: Willey)
- [2] Demirel Y 2002 *Nonequilibrium thermodynamics: transport and rate processes in physical and Biological systems* (Amsterdam: Elsevier)
- [3] Klages R, Just W and Jarzynski C (eds) 2013 *Nonequilibrium Statistical Physics of Small Systems: Fluctuation Relations and Beyond* (Weinheim: Wiley-VCH Verlag)
- [4] Lepri S, Livi R and Politi A 2003 *Phys. Rep.* **377** 1
- [5] Dhar A 2008 *Adv Physics* **57** 457
- [6] Chou T , Mallick K and Zia R K P 2011 *Rep. Prog. Phys.* **74** 116601
- [7] Seifert U 2012 *Rep. Prog. Phys.* **75** 126001
- [8] Evans D J, Cohen E G D and Morris G P 1993 *Phys. Rev. Lett.* **71** 2401
- [9] Gallavotti G and Cohen E G D 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 2696; *idem* 1995 *J. Stat. Phys.* **80** 931
- [10] Czernik T, Kula J, Łuczka J and Hänggi P 1997 *Phys. Rev. E* **55** 4057
- [11] Baule A and Cohen E G D 2009 *Phys. Rev. E* **79** 030103
- [12] Fujita K, Iwaki M, Iwane A H, Marcucci L and Yanagida T 2012 *Nat. Commun.* **3** 956
- [13] Coeffly W T, Garanin D A and McCarthy D J 2001 *Adv. Chem. Phys.* **117** 483

- [14] Druzhinina T S, Hoepfener S and Schubert U S 2010 *Nano Lett.* **10** 4009
- [15] Balandin A A 2011 *Nat. Materials* **10** 569
- [16] Schnell S K, Vlugt T J H, Simon J-M, Bedeaux D and Kjelstrup S 2011 *Chem. Phys. Lett.* **504** 199
- [17] Levy A and Kosloff R 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 070604
- [18] Osiak M, Khunsin W, Armstrong E, Kennedy T, Sotomayor Torres C M, Ryan K M and O'Dwyer C 2013 *Nanotechnology* **24** 065401
- [19] Applebaum D 2004 *Lévy Processes and Stochastic Calculus* (Cambridge: Cambridge University Press)
- [20] Weiss G H 1976 *J. Stat. Phys.* **15** 157
- [21] Julicher F, Ajdari A and Prost J 1997 *Rev. Mod. Phys.* **69** 1269
- [22] Doering C R and Gadova J C 1992 *Phys. Rev. Lett.* **69** 2318
- [23] Balakrishnan V, van den Broeck C and Hänggi P 1988 *Phys. Rev. A* **38** 4213
- [24] Łuczka J, Czernik T and Hänggi P 1997 *Phys. Rev. E* **56** 3968
- [25] Müller M J I, Klumpp S and Lipowsky R 2010 *Biophys. J.* **98** 2610
- [26] Gitterman A 1995 *Physica A* **221** 330
- [27] Kolomeisky A B and Fisher M E 2007 *Annu. Rev. Phys. Chem.* **58** 675
- [28] Pfister G and Scher H 1978 *Adv. Phys.* **27** 747
- [29] Giddings J and Eyring H 1955 *J. Phys. Chem.* **59** 416
- [30] Cáceres M O and Budini A A 1997 *J. Phys. A* **30** 8427
- [31] Chaikin P M and Lubensky T C 1995 *Principles of Condensed Matter Physics* (Cambridge: Cambridge University Press)

- [32] Williams D 1991 *Probability with Martingales* (Cambridge: Cambridge University Press)
- [33] Gardiner C W 1985 *Handbook of Stochastic Methods for Physics, Chemistry and Natural Sciences* (Berlin: Springer-Verlag)
- [34] Novotny L, Bian R X and Xie X S 1997 *Phys. Rev. Lett.* **79** 645
- [35] van Kampen N G 2007 *Stochastic Processes in Physics and Chemistry* (Amsterdam: Elsevier)
- [36] Nyquist H 1928 *Phys. Rev.* **32** 110
Onsager L 1931 *Phys. Rev.* **37** 405
Kubo R 1966 *Rep. Prog. Phys.* **29** 255
Marini U, Marconi B, Puglisi A, Rondoni L and Vulpiani A 2008 *Phys. Rep.* **461** 111
- [37] Mori H 1965 *Prog. Theo. Phys.* **33** 423
Kubo R (ed) 1966 *1965 Tokyo Summer Lectures in Theoretical Physics* (New York: Benjamin)
- [38] Dykman M I 1990 *Phys. Rev. A* **42** 2020
- [39] Several examples can be found in: Moss F and McClintock P V E (eds) 2009 *Noise in Nonlinear Dynamical Systems* (Cambridge: Cambridge University Press)
- [40] Soares-Pinto D O and Morgado W A M 2006 *Physica A* **365** 289
- [41] Morgado W A M and Duarte Queirós S M 2014 *Phys. Rev. E* **90** 022110
- [42] Nobre F D, Souza A M C and Curado E M F 2012 *Phy. Rev. E* **86** 061113
Curado E M F, Souza A M C, Nobre F D and Andrade R F S 2014 *Phy. Rev. E* **89** 022117
- [43] Morgado W A M and Duarte Queirós S M and Soares-Pinto D O 2001 *J. Stat. Mech.* P06010
Morgado W A M and Guerreiro T 2012 *Physica A* **391** 3816

- [44] Dykman M I, Mori E, Ross J and Hunt P M 1994 *J. Chem. Phys.* **100** 5735
Fiasconaro A and Spagnolo B 2009 *Phys. Rev. E* **80** 041110
Tzemos A C and Ghikas D P K 2013 *Phys. Lett. A* **377** 2307
Dechant A and Lutz E 2013 Connecting Active and Passive Microrheology in Living Cells *Preprint* arXiv:1307.6466
- [45] Lett P, Short R and Mandel L 1984 *Phys. Rev. Lett.* **52** 341
Zhu S, Yu A W and Roy R 1986 *Phys. Rev. A* **34** 4333
Fox R F and Roy R 1987 *Phys. Rev. A* **34** 1838
Yu W, Agrawal G P and R. Roy 1987 *Opt. Lett.* **12** 806
- [46] Vogel K, Risken H, Schleich W, James M, Moss F and McClintock P V E 1987 *Phys. Rev. A* **35** 463
Vogel K, Leiber Th, Risken H, Hanggi P and Schleich W 1987 *Phys. Rev. A* **35** 4882
- [47] Dechant A, Lutz E, Kessler D A and Barkai E 2014 *Phys. Rev. X* **4** 011022
- [48] Torrontegui E and Kosloff R 2013 *Phys. Rev. E* **88** 032103
- [49] Morgado W A M and Duarte Queirós S M 2012 *Phys. Rev. E* **86** 041108
- [50] Dickman R and Motai R 2014 *Phys. Rev. E* **89** 032134
- [51] Mehl J, Lander B, Bechinger C, Blickle V and Seifert U 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 220601
- [52] Farago J 2002 *J. Stat. Phys.* **107** 781
Lee J S, Kwon C and Park H 2013 *Phys. Rev. E* **87** 020104(R)
- [53] Morgado W A M and Duarte Queirós S M 2014 *Phys. Rev. E* **90** 022110
- [54] Touchette H 2009 *Phys. Rep.* **478** 1
- [55] Risken H 1989 *The Fokker-Planck Equation* (Berlin: Springer)
- [56] C. Jarzynski 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 2690
idem 1997 *Phys. Rev. E* **56** 5018

- [57] Schulz M and Trimper S 2008 Modified Jarzynski Relation for non-Markovian Noise
Preprint arXiv:0807.3681
Mai T and Dhar A 2007 *Phys. Rev. E* **75** 061101
Speck T and Seifert U 2007 *J. Stat. Mech.* L09002
- [58] Barik D, Ghosh P K, Ray D S 2006 Langevin dynamics with dichotomous noise direct simulation and applications *J. Stat. Mech.* P03010