
UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

JEAN HIDEAKI YAMADA PASSOS

POSSÍVEL ORIGEM DE TERMOS EM
EQUAÇÕES DE FOKKER-PLANCK
NÃO-LINEARES

Maringá, Agosto de 2021.

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

JEAN HIDEAKI YAMADA PASSOS

POSSÍVEL ORIGEM DE TERMOS EM
EQUAÇÕES DE FOKKER-PLANCK
NÃO-LINEARES

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Estadual de Maringá como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Renio dos Santos Mendes

Co-Orientador: Prof. Dr. Max Javier Jáuregui Rodríguez

Maringá, Agosto de 2021.

Dados Internacionais de Catalogação-na-Publicação (CIP)
(Biblioteca Central - UEM, Maringá - PR, Brasil)

P289p

Passos, Jean Hideaki Yamada

Possível origem de termos em equações de Fokker-Planck não-lineares / Jean Hideaki Yamada Passos. -- Maringá, PR, 2021.
55 f.

Orientador: Prof. Dr. Renio dos Santos Mendes.

Coorientador: Prof. Dr. Max Javier Jáuregui Rodríguez.

Dissertação (Mestrado) - Universidade Estadual de Maringá, Centro de Ciências Exatas, Departamento de Física, Programa de Pós-Graduação em Física, 2021.

1. Equações de Fokker-Planck não-lineares. 2. Teorema H. 3. Equação de Dean-Kawasaki. 4. Entropia de Tsallis. 5. Formas entrópicas. I. Mendes, Renio dos Santos, orient. II. Rodríguez, Max Javier Jáuregui, coorient. III. Universidade Estadual de Maringá. Centro de Ciências Exatas. Departamento de Física. Programa de Pós-Graduação em Física. IV. Título.

CDD 23.ed. 530.1

JEAN HIDEAKI YAMADA PASSOS

POSSÍVEL ORIGEM DE TERMOS EM EQUAÇÕES DE FOKKER-PLANCK NÃO-LINEARES

Dissertação apresentada à Universidade Estadual de Maringá, como requisito parcial para a obtenção do título de mestre.

Aprovado em: Maringá, 31 de agosto de 2021.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Renio dos Santos Mendes
Universidade Estadual de Maringá – UEM

Prof. Dr. Max Javier Jáuregui Rodríguez
Universidade Estadual de Maringá – UEM

Prof. Dr. Fernando Dantas Nobre
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas – CBPF

Prof. Dr. Luiz Roberto Evangelista
Universidade Estadual de Maringá – UEM
Programa de Pós-Graduação em Física – PFI

Agradecimentos

Agradeço a Deus pela minha família e pela minha saúde.

A minha mãe, Ana, sem seu suporte, trabalho, carinho e dedicação eu não conseguiria ter chegado aonde cheguei.

A minha irmã, Larissa, pelo suporte e companheirismo e encorajamento.

A meu pai, Leonardo, pelo suporte e companheirismo, apesar da longa distância que nos separa.

Aos meus orientadores, Renio e Max, cuja enorme paciência, dedicação e trabalho duro foram essenciais na minha formação e na realização desse trabalho. Tive muita sorte de ter dois orientadores tão inteligentes, dedicados e trabalhadores.

Agradeço também à UEM e aos professores tanto da graduação quanto da pós-graduação, que foram essenciais para eu chegar aqui.

Agradecimentos à CAPES pelo apoio financeiro.

Resumo

Partindo de uma equação de Dean-Kawasaki geral, obtemos uma equação de Fokker-Planck generalizada não-local e não-linear que envolve forças que têm sua origem no potencial do tipo n -corpos ψ_q . Mostramos que, considerando expressões convenientes para esses potenciais de muitos corpos, diferentes equações de Fokker-Planck não-lineares podem ser obtidas, incluindo várias que têm sido investigadas na literatura. Em particular, esse estudo revela uma possível origem para os termos não-lineares em equações de Fokker-Planck. Além disso, mostramos um formalismo que nos permite encontrar facilmente equações de Fokker-Planck generalizadas e teoremas H associados a partir de funcionais tipo energia livre. Em particular, verificamos um teorema H para a equação de Fokker-Planck generalizada não-local e mostramos que parte do termo de energia no funcional tipo energia livre pode ser formalmente interpretado como uma forma entrópica se escolhermos convenientemente a expressão dos potenciais ψ_q .

Palavras-chave: Equações de Fokker-Planck não-lineares, Teorema H, Formas Entrópicas, Equação de Dean-Kawasaki, Entropia de Tsallis.

Abstract

Starting from a general Dean-Kawasaki equation, we obtain a non-local and non-linear generalized Fokker-Planck equation that involves forces which have their origin on n -body potentials ψ_q . We show that, considering convenient expressions for these multiple-body potentials, different non-linear Fokker-Planck equations can be obtained, including several that have been investigated in the literature. In particular, this study reveals a possible origin for the non-linear terms in Fokker-Planck equations. Moreover, we show a framework that allows us to easily find generalized Fokker-Planck equations and associated H theorems starting from free-energy-like functionals. In particular, we verify an H theorem for the generalized non-local Fokker-Planck equation and we show that part of the energy term of the free-energy-like functional can be formally interpreted as an entropic form if we conveniently choose the expression of the potentials ψ_q .

Keywords: Non-linear Fokker-Planck equations, H-Theorem, Entropic Forms, Dean-Kawasaki Equation, Tsallis Entropy.

Introdução		8
1	Equações de Langevin e de Fokker-Planck	10
1.1	Equação de Langevin	10
1.2	Equação de Fokker-Planck	11
1.2.1	Solução estacionária da equação de Fokker-Planck	14
1.2.2	Teorema H	15
1.2.3	Equação de Fokker-Planck tridimensional	16
1.3	Equação de Fokker-Planck relacionada à equação de meios porosos	17
1.3.1	Solução estacionária	17
1.3.2	Teorema H	18
2	Equação de Dean-Kawasaki geral	20
2.1	Equação de Dean-Kawasaki	20
2.2	Equação de Dean-Kawasaki geral	21
3	Origem de termos não-lineares em equações de Fokker-Planck generalizadas	26
3.1	Equação de Fokker-Planck generalizada	26
3.2	Potenciais de contato constantes	27
3.3	Potenciais de contato dependentes da posição	29
4	Teorema H para equações de Fokker-Planck generalizadas	32
4.1	Um teorema H generalizado	32
4.2	Casos particulares	33
4.2.1	Equação de Fokker-Planck linear	33

4.2.2	Equação de Fokker-Planck não-linear relacionada à equação de meios porosos	34
4.2.3	Equações de Fokker-Planck não-lineares	36
4.2.4	Formas entrópicas dependendo da posição	37
5	Energia livre, entropia e energia interna	40
5.1	Teorema H para a equação de Fokker-Planck generalizada (3.4)	40
5.2	Significado dos termos do funcional F	41
5.2.1	Potenciais de contato constantes	42
5.2.2	Potenciais de contato dependendo da posição	43
6	Conclusões e perspectivas	45
	Apêndice A Função de correlação dos ruídos ξ e ξ'	47
	Apêndice B Solução estacionária da equação de Fokker-Planck generalizada	50
	Referências bibliográficas	52

A equação de Fokker-Planck é uma equação de grande importância na mecânica estatística. Tanto que, ela continua sendo investigada extensivamente, mais notavelmente através de generalizações. Um primeiro exemplo a ser citado é a equação de Fokker-Planck não-linear baseada na equação de meios porosos [1]. Essa equação possui uma solução estacionária que também pode ser obtida otimizando a forma entrópica de Tsallis sujeita a vínculos convenientes [2]. A conexão entre essa forma entrópica e a equação de Fokker-Planck não linear é reforçada por um teorema H [1]. Investigações similares focando na verificação de um teorema H associado com outras generalizações da equação de Fokker-Planck podem ser encontradas na literatura [3–5]. Essas investigações usualmente consideram funcionais tipo energia livre convenientes cuja derivada temporal são não-positivas para soluções bem comportadas das equações de Fokker-Planck e cada um dos termos possui um mínimo em uma solução estacionária. Análogo ao caso da equação de Fokker-Planck usual, os termos no funcional energia livre são identificados como uma parte energia interna e como uma forma entrópica.

Várias investigações sobre equações de Fokker-Planck não-lineares consideram a introdução de termos genéricos [6–16]. Embora, do ponto de vista formal, o uso desses termos seja plausível, sua origem em conexão com sistemas específicos merece um estudo detalhado. Além disso, em conexão com teoremas H , cada um desses termos pode ser associado a uma parte de um funcional tipo energia livre. Como os termos desse funcional são usualmente separados em duas classes, isto é, como uma energia interna ou como uma forma entrópica, o conhecimento da origem dos termos na equação de Fokker-Planck pode revelar a origem de algumas formas entrópicas. Isso também mereceria ser objeto de estudo.

De modo a realizar essas investigações, primeiro faremos uma breve revisão sobre as equações de Langevin e de Fokker-Planck. Importantemente ligadas à essa equação, estão a sua solução estacionária e seu teorema H , os quais também investigamos no Capítulo 1.

Como um primeiro exemplo de generalização da equação de Fokker-Planck, analisamos brevemente uma equação de Fokker-Planck relacionada à equação meios porosos, encontrando sua solução estacionária e teorema H .

No segundo capítulo, apresentamos brevemente a equação de Dean-Kawasaki, a qual é equivalente a um sistema de equações de Langevin. Originalmente essa equação considera somente interações entre duas partículas. No entanto, mostramos que essa equação também pode ser obtida em um caso mais geral, considerando interações de n -corpos.

Partindo da equação de Dean-Kawasaki geral encontrada no Capítulo 2, chegaremos, no Capítulo 3, em uma equação de Fokker-Planck generalizada que em geral é não-linear e não-local. A partir da aplicação de potenciais de contato nessa equação, encontraremos uma possível origem para os termos não-lineares em equações de Fokker-Planck não-lineares.

No Capítulo 4 mostramos um procedimento que nos permite obter sem muito esforço equações de Fokker-Planck generalizadas e teoremas H associados. Em particular, recuperamos vários resultados sobre equações de Fokker-Planck não lineares que aparecem frequentemente na literatura; por exemplo, a equação de Fokker-Planck linear, a relacionada à equação de meios porosos, e um exemplo desenvolvido em um artigo que foi submetido para publicação.

No Capítulo 5, verificamos um teorema H para a equação de Fokker-Planck generalizada não-local obtida no Capítulo 3. Essa análise indica um funcional tipo energia livre associado a essa equação. Considerando interações de contato, mostramos que parte desse funcional que tem origem nas interações pode ser interpretado como uma forma entrópica. Em particular, com essa abordagem conseguimos obter formas entrópicas de Tsallis e generalizações delas, as quais podem depender da posição.

Finalmente, no Capítulo 6, apresentamos as nossas conclusões finais. Além disso, há dois apêndices que contêm alguns cálculos complementares.

Equações de Langevin e de Fokker-Planck

Nesse capítulo revisaremos alguns conceitos e resultados que serão importantes para o desenvolvimento dos próximos capítulos.

1.1 Equação de Langevin

Ao estudar o movimento browniano unidimensional, notamos que as forças que atuam sobre a partícula são duas, uma dissipativa F_d e uma aleatória F_a , as quais são originadas pelo impacto da partícula com as moléculas do meio. Vamos considerar que a força dissipativa é proporcional à velocidade da partícula, ou seja, $F_d = -\alpha v$ em que α é o coeficiente de atrito e v é a velocidade da partícula [17]. A segunda lei de Newton aplicada à partícula nos proporciona a equação

$$m \frac{dv(t)}{dt} = -\alpha v(t) + F_a(t), \quad (1.1)$$

em que m é a massa da partícula. Vamos considerar que a força aleatória $F_a(t)$ satisfaz as seguintes condições:

$$\begin{aligned} \langle F_a(t) \rangle &= 0 \\ \langle F_a(t) F_a(t') \rangle &= B \delta(t - t'), \end{aligned} \quad (1.2)$$

em que B é uma constante positiva. A primeira condição diz que a média da força aleatória é nula, e a segunda condição significa que as colisões da partícula com as moléculas do meio são independentes. A equação (1.1) pode ser reescrita como

$$\frac{dv}{dt} = -\gamma v + \zeta(t), \quad (1.3)$$

em que $\gamma = \alpha/m$ e $\zeta(t) = F_a(t)/m$. Além disso, o ruído $\zeta(t)$ é uma variável estocástica com as seguintes propriedades

$$\begin{aligned}\langle \zeta(t) \rangle &= 0 \\ \langle \zeta(t)\zeta'(t) \rangle &= \Gamma\delta(t-t'),\end{aligned}\tag{1.4}$$

em que $\Gamma = B/m^2$.

A equação (1.3) é um exemplo de uma equação de Langevin. Uma equação de Langevin genérica tem a seguinte forma:

$$\frac{dx}{dt} = f(x) + \zeta(t),\tag{1.5}$$

em que $f(x)$ é uma função que chamaremos simplesmente de “força” e $\zeta(t)$ é uma variável estocástica que satisfaz as condições (1.4), a qual chamaremos de ruído branco. A equação de Langevin (1.5) pode aparecer em contextos diferentes do estudo do movimento browniano; por exemplo no estudo de circuitos elétricos.

1.2 Equação de Fokker-Planck

A equação de Fokker-Planck é uma equação diferencial que descreve a evolução temporal da densidade de probabilidades de um sistema. Ela pode ser vista como uma equação de difusão com um termo de força adicional. Vamos obter a equação de Fokker-Planck para uma distribuição de probabilidade $P(x, t)$, em que x é a posição de uma partícula que obedece a equação de Langevin (1.5). Uma maneira de fazer isso é partindo de uma discretização da equação (1.5). Para isso definimos intervalos de tempo τ tais que $t = n\tau$, $x(t) = x(n\tau) = x_n$, $f(x(t)) = f(x_n) = f_n$ e $\zeta(t) = \zeta(n\tau) = \zeta_n$, e por conseguinte, temos de forma aproximada que

$$\frac{dx(t)}{dt} \approx \frac{x(t+\tau) - x(t)}{\tau} = \frac{x_{n+1} - x_n}{\tau}.\tag{1.6}$$

Substituindo isso na equação (1.5), obtemos

$$x_{n+1} = x_n + \tau f_n + \tau \zeta_n.\tag{1.7}$$

Além disso, o ruído ζ_n satisfaz as condições

$$\begin{aligned}\langle \zeta_n \rangle &= 0 \\ \langle \zeta_i \zeta_j \rangle &= \frac{\Gamma}{\tau} \delta_{ij}.\end{aligned}\tag{1.8}$$

em que $\Gamma > 0$ e o símbolo δ_{ij} é chamado de delta de Kronecker. Tem-se $\delta_{ij} = 1$ se $i = j$; caso contrário tem-se $\delta_{ij} = 0$.

A função característica da variável aleatória x_n é dada por

$$g_n(k) = \langle e^{ikx_n} \rangle = \int e^{ikx_n} P_n(x_n) dx_n, \quad (1.9)$$

em que $P_n(x_n) = P(x_n, n\tau)$. Logo, usando a equação (1.7), vamos ter

$$g_{n+1}(k) = \langle e^{ikx_{n+1}} \rangle = \langle e^{ik(x_n + \tau f_n + \tau \zeta_n)} \rangle \quad (1.10)$$

e, uma vez que x_n e ζ_n são independentes,

$$g_{n+1}(k) = \langle e^{ik(x_n + \tau f_n)} \rangle \langle e^{ik\tau \zeta_n} \rangle. \quad (1.11)$$

Fazendo uma expansão até a primeira ordem em τ , o primeiro termo do lado direito da igualdade fica

$$\langle e^{ik(x_n + \tau f_n)} \rangle \approx \langle e^{ikx_n} \rangle + ik\tau \langle e^{ikx_n} f_n \rangle. \quad (1.12)$$

Por outro lado, o segundo termo do lado direito da igualdade (1.11), após fazer uma expansão até a segunda ordem em τ , resulta em

$$\begin{aligned} \langle e^{ik\tau \zeta_n} \rangle &\approx \langle 1 + ik\tau \zeta_n + \frac{(ik\tau)^2}{2} \zeta_n^2 \rangle \\ &\approx 1 + ik\tau \langle \zeta_n \rangle + \frac{(ik\tau)^2}{2} \langle \zeta_n^2 \rangle \end{aligned} \quad (1.13)$$

e, usando as propriedades do ruído (1.8), teremos

$$\langle e^{ik\tau \zeta_n} \rangle \approx 1 - \frac{k^2 \tau \Gamma}{2}. \quad (1.14)$$

Substituindo as equações (1.12) e (1.14) na equação (1.11) e ignorando os termos de ordem superiores a τ^2 , obtemos

$$\begin{aligned} g_{n+1}(k) &= \langle e^{ikx_n} \rangle + \tau \left(ik \langle f_n e^{ikx_n} \rangle - \frac{\Gamma k^2}{2} \langle e^{ikx_n} \rangle \right) \\ &= g_n(k) + \tau \left(ik \langle f_n e^{ikx_n} \rangle - \frac{\Gamma k^2}{2} \langle e^{ikx_n} \rangle \right). \end{aligned} \quad (1.15)$$

Considerando que

$$\frac{g_{n+1}(k) - g_n(k)}{\tau} \approx \frac{dg(k)}{dt}, \quad (1.16)$$

em que $g(k) = \langle e^{ikx} \rangle$, podemos voltar ao caso contínuo, e nesse caso a equação (1.15) se torna

$$\frac{dg(k)}{dt} = ik \langle f e^{ikx} \rangle - \frac{\Gamma k^2}{2} \langle e^{ikx} \rangle. \quad (1.17)$$

O primeiro termo do lado direito é dado de forma explícita por

$$\begin{aligned} ik\langle f e^{ikx} \rangle &= ik \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{ikx} P(x, t) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \frac{\partial}{\partial x} (e^{ikx}) P(x, t) dx. \end{aligned} \quad (1.18)$$

Realizando uma integração por partes, concluímos que

$$ik\langle f e^{ikx} \rangle = - \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \frac{\partial}{\partial x} [f(x) P(x, t)] dx, \quad (1.19)$$

em que foi usada a condição de que a distribuição está localizada $P(\pm\infty, t) \rightarrow 0$.

Por outro lado, verificamos que

$$\begin{aligned} -k^2 \langle e^{ikx} \rangle &= -k^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} P(x, t) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (e^{ikx}) P(x, t) dx. \end{aligned} \quad (1.20)$$

Realizando integração por partes duas vezes, obtemos

$$-k^2 \langle e^{ikx} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t) dx, \quad (1.21)$$

em que foram usadas as condições $P(\pm\infty, t) \rightarrow 0$ e $\frac{\partial P}{\partial x}(\pm\infty, t) \rightarrow 0$. Substituindo as equações (1.19) e (1.21) na equação (1.17), averiguamos que

$$\frac{dg(k)}{dt} = - \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \frac{\partial}{\partial x} [f(x) P(x, t)] dx + \frac{\Gamma}{2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t) dx. \quad (1.22)$$

Lembrando que

$$g(k) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} P(x, t) dx, \quad (1.23)$$

podemos obter imediatamente

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = - \frac{\partial}{\partial x} [f(x) P(x, t)] + D \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t), \quad (1.24)$$

que é a equação de Fokker-Planck para a distribuição de probabilidade $P(x, t)$, com $D = \Gamma/2$. O primeiro termo do lado direito, o qual contém a força $f(x)$, é chamado de termo de arraste. O segundo termo, que envolve a segunda derivada de $P(x, t)$, é chamado de termo difusivo. Em particular, no caso em que $f(x) = 0$, notamos que a equação de Fokker-Planck se reduz à equação de difusão usual.

1.2.1 Solução estacionária da equação de Fokker-Planck

A equação de Fokker-Planck (1.24) pode ser reescrita como uma equação de continuidade

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial J(x, t)}{\partial x}, \quad (1.25)$$

em que

$$J(x, t) = f(x)P(x, t) - D\frac{\partial}{\partial x}P(x, t) \quad (1.26)$$

é a corrente de probabilidade. No regime estacionário, a densidade de probabilidade $P(x, t) = P_s(x)$ será independente de t , conseqüentemente $J(x, t)$ também será independente de t . Nesse caso, como o lado esquerdo da equação (1.26) se anula, a corrente de probabilidade também não deve depender de x , ou seja, $J(x, t)$ deve ser constante. Além disso, assumindo que a distribuição de probabilidade é localizada e, por conseguinte, $P_s(\pm\infty) \rightarrow 0$ e $\frac{dP_s}{dx}(\pm\infty) \rightarrow 0$, segue da equação (1.26) que a corrente de probabilidade $J(x, t)$ deve ser nula.

Dessa maneira, a solução estacionária $P_s(x)$ deve satisfazer a equação

$$J(x, t) = 0 = f(x)P_s(x) - D\frac{d}{dx}P_s(x). \quad (1.27)$$

Para resolver essa equação diferencial, isolamos $P_s(x)$ e integramos ambos os lados em x . Assim, obtemos

$$\ln P_s(x) = \frac{1}{D} \int_0^x f(x')dx' + \text{constante}. \quad (1.28)$$

Definindo o potencial $V(x)$ como

$$V(x) = - \int_0^x f(x')dx', \quad (1.29)$$

vamos ter

$$\ln P_s(x) = -\frac{1}{D}V(x) + \text{constante} \quad (1.30)$$

e, por conseguinte,

$$P_s(x) = Ne^{-\frac{V(x)}{D}}, \quad (1.31)$$

em que N é uma constante que pode ser obtida a partir da condição de normalização de $P_s(x)$. De fato, da equação

$$\int_{-\infty}^{\infty} P_s(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} Ne^{-\frac{V(x)}{D}} dx = 1 \quad (1.32)$$

segue que

$$N = \frac{1}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{V(x)}{D}} dx}. \quad (1.33)$$

Portanto a solução estacionária $P_s(x)$ fica

$$P_s(x) = \frac{e^{-\frac{V(x)}{D}}}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{V(x')}{D}} dx'} . \quad (1.34)$$

1.2.2 Teorema H

A partir da dinâmica microscópica das partículas de um gás, o teorema H de Boltzmann dá uma justificativa à segunda lei da termodinâmica e permite concluir que a distribuição de Maxwell-Boltzmann é a distribuição de equilíbrio. Para uma equação de Fokker-Planck (1.24), podemos verificar um resultado análogo, que também é conhecido como Teorema H , com o qual também poderemos concluir que toda solução converge para a solução estacionária dada na equação (1.34) conforme o tempo evolui, no caso em que ela seja a única solução estacionária. Em outras palavras, ela será a solução de equilíbrio.

Para verificar o teorema H , associado à equação (1.24), vamos considerar o funcional

$$F[P] = \int_{-\infty}^{\infty} P(x, t) \ln \frac{P(x, t)}{P_s(x)} dx , \quad (1.35)$$

que é a divergência de Kullback-Leibler da distribuição $P(x, t)$ em relação a $P_s(x)$. Pode-se provar que esse funcional é sempre não-negativo, e é igual a zero se e somente se $P(x, t) = P_s(x)$ para quase todo x [18]. Além disso, substituindo a equação (1.34) na equação (1.35), podemos verificar que o funcional $F[P]$ pode ser reescrito na forma

$$F[P] = \frac{1}{D} \int_{-\infty}^{\infty} V(x) P(x, t) dx - \int_{-\infty}^{\infty} P(x, t) \ln \frac{1}{P(x, t)} dx + \text{constante} . \quad (1.36)$$

Daqui notamos que o funcional $F[P]$, a menos de um fator constante, possui a forma de uma energia livre, pois a primeira integral pode ser interpretada como uma energia interna, e a segunda como a forma entrópica de Boltzmann-Gibbs.

Derivando a equação (1.36) em relação ao tempo, obtemos

$$\frac{dF[P]}{dt} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial P(x, t)}{\partial t} \left(\frac{V(x)}{D} + \ln P(x, t) + 1 \right) dx . \quad (1.37)$$

Substituindo a equação de Fokker-Planck (1.24) no lugar de $\partial P/\partial t$, temos

$$\frac{dF[P]}{dt} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x} \left[-f(x)P(x, t) + D \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} \right] \left(\frac{V(x)}{D} + \ln P(x, t) + 1 \right) dx . \quad (1.38)$$

Logo, realizando uma integração por partes e considerando que a densidade P está localizada,

ou seja, $P(x, t)$ e $\frac{\partial P}{\partial x}$ tendem para zero quando $x \rightarrow \infty$, obtemos

$$\frac{dF[P]}{dt} = - \int_{-\infty}^{\infty} \left[-f(x)P(x, t) + D \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} \right] \left(\frac{1}{D} \frac{dV(x)}{dx} + \frac{1}{P(x, t)} \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} \right) dx. \quad (1.39)$$

Como $dV(x)/dx = -f(x)$, segue que

$$\frac{dF[P]}{dt} = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{DP(x, t)} \left[f(x)P(x, t) - D \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} \right]^2 dx. \quad (1.40)$$

Portanto, como $\Gamma > 0$, e por conseguinte, $D > 0$, obtemos

$$\frac{d}{dt} F[P] \leq 0, \quad (1.41)$$

o qual é o conteúdo do teorema H .

1.2.3 Equação de Fokker-Planck tridimensional

A equação de Fokker-Planck (1.24) foi obtida a partir de uma equação de Langevin unidimensional. Se considerássemos uma equação de Langevin tridimensional, ou equivalentemente, três equações de Langevin unidimensionais, fazendo um procedimento similar podemos obter

$$\frac{\partial P(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot [f(\mathbf{x})P(\mathbf{x}, t)] + D\nabla^2 P(\mathbf{x}, t), \quad (1.42)$$

que pode ser chamada de equação de Fokker-Planck tridimensional. Aqui e nas expressões seguintes, \mathbf{x} e $f(\mathbf{x})$ representam vetores. A equação (1.42) também pode ser reescrita como

$$\frac{\partial P(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{x}, t). \quad (1.43)$$

em que $\mathbf{J}(\mathbf{x}, t) = f(\mathbf{x})P(\mathbf{x}, t) - D\nabla P(\mathbf{x}, t)$ é a corrente de probabilidade, que também é um vetor.

A solução estacionária da equação de Fokker-Planck tridimensional deve satisfazer a condição $\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{x}, t) = 0$. No entanto, daqui não podemos concluir em geral que $\mathbf{J}(\mathbf{x}, t) = 0$, pois $\mathbf{J}(\mathbf{x}, t) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{x})$, em que $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ é um vetor arbitrário, também satisfaz essa condição.

Uma solução estacionária satisfazendo a condição $\mathbf{J}(\mathbf{x}, t) = 0$ pode ser obtida de forma análoga à equação (1.34). Nesse caso vamos encontrar que

$$P_s(\mathbf{x}) = \frac{e^{-\frac{V(\mathbf{x})}{D}}}{\int_{\mathbb{R}^3} e^{-\frac{V(\mathbf{x}')}{D}} d\mathbf{x}'}, \quad (1.44)$$

em que o potencial $V(\mathbf{x})$ é definido pela equação $f(\mathbf{x}) = -\nabla V(\mathbf{x})$.

A equação de Fokker-Planck tridimensional (1.42) também tem um teorema H associado,

o qual pode ser verificado de forma análoga ao caso unidimensional derivando o funcional

$$F[P] = \int_{\mathbb{R}^3} P(\mathbf{x}, t) \ln \frac{P(\mathbf{x}, t)}{P_s(\mathbf{x})} dx \quad (1.45)$$

em relação ao tempo.

1.3 Equação de Fokker-Planck relacionada à equação de meios porosos

Uma generalização não linear da equação de difusão usual é a equação de meios porosos [19]

$$\frac{\partial P(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = D \nabla^2 P^q(\mathbf{x}, t). \quad (1.46)$$

Interpretando $P(\mathbf{x}, t)$ como uma densidade de probabilidade, essa equação também pode ser vista como uma equação de Fokker-Planck não linear. Acrescentando um termo de arraste no lado direito dessa equação, obtemos [1, 20]

$$\frac{\partial P(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot [f(\mathbf{x})P(\mathbf{x}, t)] + D \nabla^2 P^q(\mathbf{x}, t). \quad (1.47)$$

notamos imediatamente que quando $q \rightarrow 1$ essa equação recai na equação de Fokker-Planck usual (1.42).

1.3.1 Solução estacionária

A equação de Fokker-Planck não linear (1.47) pode ser reescrita na forma

$$\frac{\partial P(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{x}, t), \quad (1.48)$$

em que $\mathbf{J}(\mathbf{x}, t) = f(\mathbf{x})P(\mathbf{x}, t) - D \nabla P^q(\mathbf{x}, t)$ é a corrente de probabilidade. Vamos encontrar a solução estacionária da equação (1.47) que satisfaz a condição $J(\mathbf{x}, t) = 0$. A partir dessa condição, constatamos que

$$D \nabla P_s^q(\mathbf{x}) = P_s(\mathbf{x})f(\mathbf{x}). \quad (1.49)$$

Assumindo que a força $f(\mathbf{x})$ provém de um potencial $V(\mathbf{x})$, temos que $f(\mathbf{x}) = -\nabla V(\mathbf{x})$ e, por conseguinte, verificamos que

$$D \nabla P_s^q(\mathbf{x}) = -P_s(\mathbf{x})\nabla V(\mathbf{x}). \quad (1.50)$$

Usando a identidade

$$\nabla P_s^q(\mathbf{x}) = \frac{q}{q-1} P_s(\mathbf{x}) \nabla P_s^{q-1}(\mathbf{x}), \quad (1.51)$$

obteremos

$$\nabla P_s^{q-1}(\mathbf{x}) = -\frac{q-1}{qD} \nabla V(\mathbf{x}). \quad (1.52)$$

Segue daqui que

$$P_s(\mathbf{x}) = \left(K - \frac{q-1}{qD} V(\mathbf{x}) \right)^{\frac{1}{q-1}}, \quad (1.53)$$

em que K é uma constante de integração. Supondo que $K = N^{q-1}$, podemos obter ainda que

$$P_s(\mathbf{x}) = N \left[1 + (q-1) \frac{(-V(\mathbf{x}))}{qDN^{q-1}} \right]_+^{\frac{1}{q-1}}, \quad (1.54)$$

em que a notação $[y]_+$ indica $[y]_+ = 0$ se $y < 0$. Considerando a definição da função q -exponencial [21]

$$\exp_q \xi = \begin{cases} [1 + (1-q)\xi]_+^{1/(1-q)} & \text{para } q \neq 1 \\ \exp \xi & \text{para } q = 1, \end{cases} \quad (1.55)$$

a solução estacionária finalmente pode ser escrita de forma compacta como

$$P_s(\mathbf{x}) = N \exp_{2-q} \left[-\frac{V(\mathbf{x})}{qDN^{q-1}} \right]. \quad (1.56)$$

Notamos que no caso em que $q \rightarrow 1$, a equação (1.56) recupera a equação (1.44).

1.3.2 Teorema H

O teorema H para a equação de Fokker-Planck relacionada à equação de meios porosos é encontrada usando o funcional do tipo energia livre

$$F_q[P] = \frac{1}{D} \int_{\mathbb{R}^3} V(\mathbf{x}) P(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} - \int_{\mathbb{R}^3} P(\mathbf{x}, t) \ln_q \frac{1}{P(\mathbf{x}, t)} d\mathbf{x}, \quad (1.57)$$

em que a primeira integral pode ser vista como uma energia interna, e a segunda como a forma entrópica de Tsallis de ordem q . O símbolo \ln_q representa a função q -logaritmo, que é a inversa da q -exponencial, e é definida por

$$\ln_q \xi = \begin{cases} \frac{\xi^{1-q} - 1}{1-q} & \text{para } q \neq 1 \\ \ln \xi & \text{para } q = 1, \end{cases} \quad (1.58)$$

para todo $\xi > 0$ [21]. Em particular, notamos que a forma entrópica de Tsallis recupera a forma entrópica de Boltzmann-Gibbs quando $q \rightarrow 1$.

Calculando a derivada de $F_q[P]$ em relação a t , vamos ter

$$\frac{dF_q[P]}{dt} = \int_{\mathbb{R}^3} \left(\frac{V(\mathbf{x})}{D} \frac{\partial P(\mathbf{x}, t)}{\partial t} - \frac{\partial P(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \ln_q \frac{1}{P(\mathbf{x}, t)} + P^{q-1}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \right) d\mathbf{x}. \quad (1.59)$$

Colocando o termo $\partial P/\partial t$ em evidência e usando a equação (1.47), encontramos

$$\frac{dF_q[P]}{dt} = \int_{\mathbb{R}^3} \left(\frac{V(\mathbf{x})}{D} - \ln_q \frac{1}{P(\mathbf{x}, t)} + P^{q-1}(\mathbf{x}, t) \right) \nabla \cdot [-f(\mathbf{x})P(\mathbf{x}, t) + D\nabla P^q(\mathbf{x}, t)] d\mathbf{x}. \quad (1.60)$$

Realizando integração por partes e aplicando o teorema da divergência (ignorando os termos de superfície), vamos ter

$$\frac{dF_q[P]}{dt} = - \int_{\mathbb{R}^3} \nabla \cdot \left(\frac{V(\mathbf{x})}{D} - \ln_q \frac{1}{P(\mathbf{x}, t)} + P^{q-1}(\mathbf{x}, t) \right) \cdot [-f(\mathbf{x})P(\mathbf{x}, t) + D\nabla P^q(\mathbf{x}, t)] d\mathbf{x}. \quad (1.61)$$

Simplificando o primeiro parênteses, vamos obter

$$\frac{dF_q[P]}{dt} = - \int_{\mathbb{R}^3} \left(\frac{1}{D} \nabla V(\mathbf{x}) + qP^{q-2}(\mathbf{x}, t) \nabla P(\mathbf{x}, t) \right) \cdot [-f(\mathbf{x})P(\mathbf{x}, t) + D\nabla P^q(\mathbf{x}, t)] d\mathbf{x}. \quad (1.62)$$

Usando $f(\mathbf{x}) = -\nabla V(\mathbf{x})$ e notando que $qP^{q-2}\nabla P = (\nabla P^q)/P$, obtemos que

$$\frac{dF_q[P]}{dt} = - \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{D} \left(-f(\mathbf{x}) + \frac{D}{P(\mathbf{x}, t)} \nabla P^q(\mathbf{x}, t) \right) \cdot [-f(\mathbf{x})P(\mathbf{x}, t) + D\nabla P^q(\mathbf{x}, t)] d\mathbf{x}. \quad (1.63)$$

Simplificando essa expressão, encontramos o teorema H para a equação de Fokker-Planck relacionada à equação de meios porosos,

$$\frac{dF_q[P]}{dt} = - \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{DP(\mathbf{x}, t)} |f(\mathbf{x})P(\mathbf{x}, t) - D\nabla P^q(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x} \leq 0. \quad (1.64)$$

Além desse resultado, pode-se mostrar [5] que $F_q[P] \geq F_q[P_s]$ para todo $q > 0$.

Equação de Dean-Kawasaki geral

Neste capítulo, obteremos uma generalização da equação de Dean-Kawasaki considerando que a interação entre as partículas é devida a um potencial de interação tipo n -corpos.

2.1 Equação de Dean-Kawasaki

Consideremos inicialmente um sistema de N partículas em um banho térmico, que interagem via um potencial $\phi(\mathbf{X}_i - \mathbf{X}_j)$, em que \mathbf{X}_i é o vetor posição da partícula i . Esse potencial, por exemplo pode descrever interações coulombianas, interações tipo Lennard-Jones ou repulsões tipo esferas duras. As partículas se movem devido ao ruído branco térmico e à força devido ao potencial dos seus vizinhos. Nesse contexto, o sistema é descrito pelas equações de Langevin

$$\dot{\mathbf{X}}_i = -\nabla\phi(\mathbf{X}_i - \mathbf{X}_j) + \boldsymbol{\eta}_i(t), \quad i = 1, \dots, N, \quad (2.1)$$

nas quais consideramos $\nabla\phi(0) = \mathbf{0}$ e cada vetor $\boldsymbol{\eta}_i$ é um ruído branco satisfazendo as condições $\langle \boldsymbol{\eta}_i(t) \rangle = 0$ e $\langle \boldsymbol{\eta}_{ia}(t)\boldsymbol{\eta}_{jb}(t') \rangle = 2D\delta_{ij}\delta_{ab}\delta(t - t')$, $i, j \in \{1, \dots, N\}$, $a, b \in \{1, 2, 3\}$.

Em 1996, David S. Dean [22] considerou uma densidade global para as partículas como sendo

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{X}_i(t) - \mathbf{x}) \quad (2.2)$$

e mostrou que essa densidade satisfaz a seguinte equação

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \cdot \{[\rho(\mathbf{x}, t)]^{1/2} \boldsymbol{\chi}(\mathbf{x}, t)\} + \nabla \cdot \left[\rho(\mathbf{x}, t) \int_{\mathbb{R}^3} \rho(\mathbf{y}, t) \nabla \phi(\mathbf{x} - \mathbf{y}) d\mathbf{y} \right] + D\nabla^2 \rho(\mathbf{x}, t), \quad (2.3)$$

em que $\boldsymbol{\chi}(\mathbf{x}, t)$ é um ruído branco global com função de correlação $\langle \boldsymbol{\chi}_a(\mathbf{x}, t) \boldsymbol{\chi}_b(\mathbf{y}, t') \rangle = 2D\delta(t-t')\delta_{ab}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{y})$. O primeiro termo do lado direito da igualdade é um termo estocástico, pois contém o ruído; o segundo termo surge do potencial de dois corpos e pode ser visto como um termo de arraste; e o último termo pode ser entendido como um termo difusivo. A equação (2.3) pode ser vista como uma equação de Langevin para a evolução da densidade global $\rho(\mathbf{x}, t)$, a qual é conhecida como equação de Dean-Kawasaki [22]. Ela também pode ser obtida de outras maneiras [23, 24].

2.2 Equação de Dean-Kawasaki geral

Vamos considerar um sistema de partículas de dois tipos, \mathcal{A} e \mathcal{B} , tal que a magnitude da interação entre as partículas de tipo \mathcal{B} é desprezível quando comparada com a interação entre partículas de tipos diferentes. A posição da i -ésima partícula de tipo \mathcal{A} será denotada por \mathbf{X}_i e suas componentes por X_{i1}, X_{i2} e X_{i3} . Com essas condições, podemos aproximar as partículas de tipo \mathcal{B} como um meio cuja interação com a i -ésima partícula de tipo \mathcal{A} é dada em termos da força de arraste $-\alpha\dot{\mathbf{X}}_i$, $\alpha > 0$, e uma força estocástica $\boldsymbol{\eta}_i(t)$. Então, as equações de movimento para as N partículas de tipo \mathcal{A} são dadas por

$$m_i\ddot{\mathbf{X}}_i = -\alpha\dot{\mathbf{X}}_i + \alpha\boldsymbol{\eta}_i(t) + \alpha\mathbf{A}_i, \quad i = 1, \dots, N, \quad (2.4)$$

em que $\boldsymbol{\eta}_1(t), \dots, \boldsymbol{\eta}_N(t)$ são ruídos brancos tais que $\langle \boldsymbol{\eta}_i(t) \rangle = 0$ e $\langle \boldsymbol{\eta}_{ia}(t) \boldsymbol{\eta}_{jb}(t') \rangle = 2D\delta_{ij}\delta_{ab}\delta(t-t')$ com $i, j \in \{1, \dots, N\}$, $a, b \in \{1, 2, 3\}$ e $D > 0$ constante, e $\alpha\mathbf{A}_i$ é a soma das forças efetivas sobre a i -ésima partícula originada pela interação com a outra partícula do tipo \mathcal{A} e por possíveis agentes externos.

De agora em diante consideraremos as partículas do tipo \mathcal{A} como as únicas partículas do sistema. Se o sistema é super-amortecido, podemos ignorar as acelerações das partículas e, nesta situação, as equações (2.4) tornam-se no seguinte sistema de equações de Langevin:

$$\dot{\mathbf{X}}_i = \mathbf{A}_i + \boldsymbol{\eta}_i(t), \quad i = 1, \dots, N. \quad (2.5)$$

Vamos considerar que a “força” \mathbf{A}_i é originada de dois potenciais, nomeadamente um potencial externo V e uma interação tipo n -corpos ϕ_n , satisfazendo a condição $\phi_n(\mathbf{y}_{\pi(1)}, \dots, \mathbf{y}_{\pi(n)}) = \phi_n(\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_n)$ para qualquer permutação π do conjunto $\{1, \dots, n\}$. Então, temos

$$\mathbf{A}_i = -\nabla V(\mathbf{X}_i) - \frac{1}{(n-1)!} \sum_{j_1=1}^N \cdots \sum_{j_{n-1}=1}^N \nabla_i \phi_n(\mathbf{X}_i, \mathbf{X}_{j_1}, \dots, \mathbf{X}_{j_{n-1}}), \quad i = 1, \dots, N. \quad (2.6)$$

na qual, para facilitar a notação, consideramos $\nabla_i \phi_n(\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_n) = 0$ sempre que quaisquer coordenadas \mathbf{y}_i e \mathbf{y}_j sejam iguais. Seguindo o trabalho de D. S. Dean [22], definimos a

densidade para uma única partícula

$$\rho_i(\mathbf{x}, t) = \delta(\mathbf{X}_i(t) - \mathbf{x}), \quad i = 1, \dots, N. \quad (2.7)$$

Então, dada uma função arbitrária duas vezes continuamente diferenciável $f(\mathbf{x})$, notamos que

$$f(\mathbf{X}_i(t)) = \int_{\mathbb{R}^3} f(\mathbf{x}) \delta(\mathbf{X}_i(t) - \mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_{\mathbb{R}^3} f(\mathbf{x}) \rho_i(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x}. \quad (2.8)$$

Aplicando a fórmula de Itô [25], obtemos

$$\frac{df(\mathbf{X}_i(t))}{dt} = \nabla f(\mathbf{X}_i(t)) \cdot \frac{d\mathbf{X}_i(t)}{dt} + \frac{(\sqrt{2D})^2}{2} \nabla^2 f(\mathbf{X}_i(t)), \quad (2.9)$$

na qual podemos substituir a equação de Langevin (2.1) em $\frac{d\mathbf{X}_i(t)}{dt}$:

$$\frac{df(\mathbf{X}_i(t))}{dt} = \nabla f(\mathbf{X}_i(t)) \cdot \{\mathbf{A}_i + \boldsymbol{\eta}_i(t)\} + \frac{(\sqrt{2D})^2}{2} \nabla^2 f(\mathbf{X}_i(t)). \quad (2.10)$$

Usando a equação (2.8), teremos

$$\begin{aligned} \frac{df(\mathbf{X}_i(t))}{dt} &= \nabla f(\mathbf{X}_i) \cdot \mathbf{A}_i(\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_i, \dots, \mathbf{X}_n) + \nabla f(\mathbf{X}_i) \cdot \boldsymbol{\eta}_i(t) + D \nabla^2 f(\mathbf{X}_i) \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \rho_i(\mathbf{x}, t) [\nabla f(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{A}_i(\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{x}, \dots, \mathbf{X}_n) + \nabla f(\mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\eta}_i(t) + D \nabla^2 f(\mathbf{x})] d\mathbf{x} \end{aligned} \quad (2.11)$$

e, reorganizando os termos dessa equação, temos

$$\begin{aligned} \frac{df(\mathbf{X}_i(t))}{dt} &= \int_{\mathbb{R}^3} [\rho_i(\mathbf{x}, t) \mathbf{A}_i(\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{x}, \dots, \mathbf{X}_n) + \rho_i(\mathbf{x}, t) \boldsymbol{\eta}_i(t)] \cdot \nabla f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \\ &\quad + D \int_{\mathbb{R}^3} \rho_i(\mathbf{x}, t) \nabla^2 f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Integrando por partes o primeiro termo do lado direito da igualdade e usando o teorema da divergência, podemos desprezar os termos de superfície, uma vez que consideramos que a densidade $\rho_i(\mathbf{x}, t) \rightarrow 0$ quando $|\mathbf{x}| \rightarrow \infty$. Com isso encontramos

$$\begin{aligned} &\int_{\mathbb{R}^3} [\rho_i(\mathbf{x}, t) \mathbf{A}_i(\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{x}, \dots, \mathbf{X}_n) + \rho_i(\mathbf{x}, t) \boldsymbol{\eta}_i(t)] \cdot \nabla f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \\ &= - \int_{\mathbb{R}^3} f(\mathbf{x}) \nabla \cdot [\rho_i(\mathbf{x}, t) \mathbf{A}_i(\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{x}, \dots, \mathbf{X}_n) + \rho_i(\mathbf{x}, t) \boldsymbol{\eta}_i(t)] d\mathbf{x}. \end{aligned} \quad (2.13)$$

De forma análoga, o segundo termo do lado direito da equação 2.13) pode ser integrado por

partes duas vezes, obtendo assim

$$D \int_{\mathbb{R}^3} \rho_i(\mathbf{x}, t) \nabla^2 f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = D \int_{\mathbb{R}^3} f(\mathbf{x}) \nabla^2 \rho_i(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x}. \quad (2.14)$$

Substituindo as equações (2.13) e (2.14) em (2.12), obtemos

$$\begin{aligned} \frac{df(\mathbf{X}_i(t))}{dt} = & \\ & \int_{\mathbb{R}^3} f(\mathbf{x}) \{ \nabla \cdot [-\rho_i(\mathbf{x}, t) \mathbf{A}_i(\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{x}, \dots, \mathbf{X}_n)] - \nabla \cdot [\rho_i(\mathbf{x}, t) \boldsymbol{\eta}_i(t)] + D \nabla^2 \rho_i(\mathbf{x}, t) \} d\mathbf{x}. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Por outro lado, derivando a equação (2.8) notamos que

$$\frac{df(\mathbf{X}_i(t))}{dt} = \int_{\mathbb{R}^3} f(\mathbf{x}) \frac{\partial \rho_i}{\partial t} d\mathbf{x}. \quad (2.16)$$

Assim, como a função $f(\mathbf{x})$ é arbitrária, segue das equações (2.15) e (2.16) que

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} = -\nabla \cdot [\rho_i(\mathbf{x}, t) \mathbf{A}_i(\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{x}, \dots, \mathbf{X}_n)] - \nabla \cdot [\rho_i(\mathbf{x}, t) \boldsymbol{\eta}_i(t)] + D \nabla^2 \rho_i(\mathbf{x}, t). \quad (2.17)$$

Substituindo a expressão de \mathbf{A}_i dada na equação (2.6), obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_i}{\partial t} = & -\nabla \cdot [\rho_i(\mathbf{x}, t) \boldsymbol{\eta}_i(t)] + D \nabla^2 \rho_i(\mathbf{x}, t) + \nabla \cdot [\rho_i(\mathbf{x}, t) V(\mathbf{x})] \\ & + \frac{1}{(n-1)!} \nabla \cdot \left[\rho_i(\mathbf{x}, t) \sum_{j_1=1}^N \cdots \sum_{j_{n-1}=1}^N \nabla \phi_n(\mathbf{x}, \mathbf{X}_{j_1}, \dots, \mathbf{X}_{j_{n-1}}) \right], \end{aligned} \quad (2.18)$$

para qualquer $i = 1, \dots, N$.

Definindo a densidade global

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^N \rho_i(\mathbf{x}, t) \quad (2.19)$$

e somando a equação (2.18) sobre os índices i , temos que

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} = & -\sum_{i=1}^N \nabla \cdot [\rho_i(\mathbf{x}, t) \boldsymbol{\eta}_i(t)] + D \nabla^2 \rho(\mathbf{x}, t) + \nabla \cdot [\rho(\mathbf{x}, t) \nabla V(\mathbf{x})] \\ & + \frac{1}{(n-1)!} \nabla \cdot \left[\rho(\mathbf{x}, t) \sum_{j_1=1}^N \cdots \sum_{j_{n-1}=1}^N \nabla \phi_n(\mathbf{x}, \mathbf{X}_{j_1}, \dots, \mathbf{X}_{j_{n-1}}) \right]. \end{aligned} \quad (2.20)$$

O último termo do lado direito da igualdade pode ser reescrito de uma forma mais conveniente de tal forma que as variáveis $\mathbf{X}_{j_1}, \dots, \mathbf{X}_{j_{n-1}}$ não apareçam explicitamente. Para isso, primeiramente notamos que

$$\begin{aligned} & \sum_{j_1=1}^N \cdots \sum_{j_{n-1}=1}^N \nabla \phi_n(\mathbf{x}, \mathbf{X}_{j_1}, \dots, \mathbf{X}_{j_{n-1}}) \\ &= \sum_{j_1=1}^N \cdots \sum_{j_{n-1}=1}^N \int_{\mathbb{R}^3} \delta(\mathbf{X}_{j_1}(t) - \mathbf{y}_1) d\mathbf{y}_1 \cdots \int_{\mathbb{R}^3} \delta(\mathbf{X}_{j_{n-1}}(t) - \mathbf{y}_{n-1}) \nabla \phi_n(\mathbf{x}, \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_{n-1}) d\mathbf{y}_{n-1}. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Usando a equação (2.7), concluímos que

$$\begin{aligned} \sum_{j_1=1}^N \cdots \sum_{j_{n-1}=1}^N \nabla \phi_n(\mathbf{x}, \mathbf{X}_{j_1}, \dots, \mathbf{X}_{j_{n-1}}) &= \sum_{j_1=1}^N \cdots \sum_{j_{n-1}=1}^N \int_{\mathbb{R}^3} \rho_{j_1}(\mathbf{y}_1, t) d\mathbf{y}_1 \cdots \\ &\cdots \int_{\mathbb{R}^3} \rho_{j_{n-1}}(\mathbf{y}_{n-1}, t) \nabla \phi_n(\mathbf{x}, \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_{n-1}) d\mathbf{y}_{n-1}. \end{aligned} \quad (2.22)$$

Finalmente, realizando as somas das densidades e usando a equação (2.19), verificamos que

$$\begin{aligned} & \sum_{j_1=1}^N \cdots \sum_{j_{n-1}=1}^N \nabla \phi_n(\mathbf{x}, \mathbf{X}_{j_1}, \dots, \mathbf{X}_{j_{n-1}}) \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \rho(\mathbf{y}_1, t) d\mathbf{y}_1 \cdots \int_{\mathbb{R}^3} \rho(\mathbf{y}_{n-1}, t) \nabla \phi_n(\mathbf{x}, \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_{n-1}) d\mathbf{y}_{n-1} \end{aligned} \quad (2.23)$$

Substituindo esse termo na equação (2.18), obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= - \sum_{i=1}^N \nabla \cdot [\rho_i(\mathbf{x}, t) \boldsymbol{\eta}_i(t)] + D \nabla^2 \rho(\mathbf{x}, t) + \nabla \cdot [\rho(\mathbf{x}, t) \nabla V(\mathbf{x})] \\ &+ \frac{D}{(n-1)!} \nabla \cdot \left[\rho(\mathbf{x}, t) \int_{\mathbb{R}^3} \rho(\mathbf{y}_1, t) d\mathbf{y}_1 \cdots \int_{\mathbb{R}^3} \rho(\mathbf{y}_{n-1}, t) \nabla \phi_n(\mathbf{x}, \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_{n-1}) d\mathbf{y}_{n-1} \right]. \end{aligned} \quad (2.24)$$

A equação (2.24) ainda não é uma equação exclusiva para $\rho(\mathbf{x}, t)$, pois ainda aparecem explicitamente as funções $\rho_i(\mathbf{x}, t)$. Redefinindo o ruído como

$$\xi(\mathbf{x}, t) = - \sum_{i=1}^N \nabla \cdot (\rho_i(\mathbf{x}, t) \boldsymbol{\eta}_i(t)), \quad (2.25)$$

notamos que ξ continua sendo um ruído gaussiano pois é uma combinação linear de ruídos gaussianos. Pode-se verificar que a função de correlação de ξ é dada por (ver apêndice A)

$$\langle \xi(\mathbf{x}, t) \xi(\mathbf{y}, t') \rangle = 2D \delta(t - t') (\nabla_x \cdot \nabla_y) [\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \rho(\mathbf{y}, t)]. \quad (2.26)$$

Agora vamos considerar um ruído global gaussiano ξ' , definido como

$$\xi'(\mathbf{x}, t) = \nabla \cdot (\boldsymbol{\chi}(\mathbf{x}, t) \rho^{\frac{1}{2}}(\mathbf{x}, t)), \quad (2.27)$$

em que $\boldsymbol{\chi}$ é um ruído branco global não-correlacionado tal que

$$\langle \boldsymbol{\chi}_a(\mathbf{x}, t) \boldsymbol{\chi}_b(\mathbf{y}, t') \rangle = 2D \delta(t - t') \delta_{ab} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}). \quad (2.28)$$

Como os ruídos ξ e ξ' são ruídos gaussianos, então eles são caracterizados pela suas funções de correlação. Pode-se mostrar que esses ruídos têm a mesma função de correlação (ver apêndice A) e por conseguinte eles são estatisticamente idênticos. Com isso, podemos reescrever a equação (2.24) como

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} = & \nabla \cdot \{ [\rho(\mathbf{x}, t)]^{1/2} \boldsymbol{\chi}(\mathbf{x}, t) \} + D \nabla^2 \rho(\mathbf{x}, t) + \nabla \cdot [\rho(\mathbf{x}, t) \nabla V(\mathbf{x})] \\ & + \frac{1}{(n-1)!} \nabla \cdot \left[\rho(\mathbf{x}, t) \int_{\mathbb{R}^3} \rho(\mathbf{y}_1, t) d\mathbf{y}_1 \cdots \int_{\mathbb{R}^3} \rho(\mathbf{y}_{n-1}, t) \nabla \phi_n(\mathbf{x}, \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_{n-1}) d\mathbf{y}_{n-1} \right]. \end{aligned} \quad (2.29)$$

Essa equação é uma equação de Langevin para a evolução da densidade de partículas do sistema $\rho(\mathbf{x}, t)$. O primeiro termo do lado direito da igualdade é o termo de ruído (envolve termos de $\boldsymbol{\chi}(\mathbf{x}, t)$), o segundo termo da igualdade é o termo difusivo, o terceiro termo é o termo de arraste que depende do potencial externo $V(\mathbf{x})$, e o último termo é o termo de arraste que envolve o potencial de interação entre n -corpos ϕ_n . Além disso, ela pode ser vista como uma generalização da equação de Dean-Kawasaki (2.3), a qual pode ser obtida como um caso particular quando $V(\mathbf{x}) = \text{constante}$, $n = 2$ e $\phi_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \phi_2(\mathbf{x} - \mathbf{y})$. Essa equação é inédita e será o ponto de partida para o que faremos nos próximos capítulos.

Origem de termos não-lineares em equações de Fokker-Planck generalizadas

Neste capítulo, vamos obter uma equação de Fokker-Planck generalizada, a partir da equação de Dean-Kawasaki generalizada, obtida no capítulo anterior. Vamos também mostrar que há uma conexão entre os potenciais de interação de muitos corpos e os termos não-lineares dessa equação.

3.1 Equação de Fokker-Planck generalizada

Nesta seção, verificaremos que a equação de Dean-Kawasaki generalizada pode assumir a forma de uma equação de Fokker-Planck generalizada. Vamos mostrar que essa equação apresenta termos não lineares, os quais estão intimamente conectados com os potenciais de interação entre as partículas.

Começamos definindo a densidade de probabilidade $p(\mathbf{x}, t) = \rho(\mathbf{x}, t)/N$ e introduzindo o potencial de n -corpos

$$\psi_n(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) = \frac{N^{n-1}}{(n-1)!} \phi_n(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) \quad (n \geq 2). \quad (3.1)$$

Com essas definições, a equação generalizada de Dean-Kawasaki (2.29) pode ser reescrita

como

$$\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial t} = & \frac{1}{\sqrt{N}} \nabla \cdot [\sqrt{p(\mathbf{x}, t)} \boldsymbol{\chi}(\mathbf{x}, t)] + D \nabla^2 p(\mathbf{x}, t) + \nabla \cdot [p(\mathbf{x}, t) \nabla V(\mathbf{x})] \\ & + \nabla \cdot \left[p(\mathbf{x}, t) \int_{\mathbb{R}^3} p(\mathbf{y}_1, t) d\mathbf{y}_1 \cdots \int_{\mathbb{R}^3} p(\mathbf{y}_{n-1}, t) \nabla \psi_n(\mathbf{x}, \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_{n-1}) d\mathbf{y}_{n-1} \right], \end{aligned} \quad (3.2)$$

Notamos que o primeiro termo do lado direito dessa equação pode ser desprezado se N for suficientemente grande. Considerando essa hipótese e usando $\psi_1(\mathbf{x}) = V(\mathbf{x})$, a equação (3.2) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial t} = & \nabla \cdot [p(\mathbf{x}, t) \nabla \psi_1(\mathbf{x})] \\ & + \nabla \cdot \left[p(\mathbf{x}, t) \int_{\mathbb{R}^3} p(\mathbf{y}_1, t) d\mathbf{y}_1 \cdots \int_{\mathbb{R}^3} p(\mathbf{y}_{n-1}, t) \nabla \psi_n(\mathbf{x}, \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_{n-1}) d\mathbf{y}_{n-1} \right] + D \nabla^2 p(\mathbf{x}, t). \end{aligned} \quad (3.3)$$

Além disso, ela pode ser vista como um caso particular da equação

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \sum_{q=1}^n \nabla \cdot \left[p(\mathbf{x}, t) \int_{\mathbb{R}^3} p(\mathbf{y}_1, t) d\mathbf{y}_1 \cdots \int_{\mathbb{R}^3} p(\mathbf{y}_{q-1}, t) \nabla \psi_q(\mathbf{x}, \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_{q-1}) d\mathbf{y}_{q-1} \right] + D \nabla^2 p(\mathbf{x}, t), \quad (3.4)$$

em que o termo com $q = 1$ deve ser considerado sem integração. Essa equação integro-diferencial tem a forma de uma equação de Fokker-Planck generalizada, que tem termos de arraste não-lineares, os quais em geral são também não-locais, se $n \geq 2$. Enfatizamos que alguns dos potenciais ψ_q podem ser iguais a zero e o número de termos n na equação (3.4) pode ser arbitrariamente grande.

A equação (3.4) é inédita e ela será a peça central do nosso trabalho. Porém, em vez de discutir aspectos gerais da equação (3.4), vamos nos focar em obter casos particulares dessa equação, os quais serão não-lineares mas locais. Nosso interesse é justificado pelo fato de que essas equações, as quais aparecem comumente na literatura, possuem termos não-lineares cujas possíveis origens não são explicadas.

3.2 Potenciais de contato constantes

Como um primeiro caso mais simples, vamos considerar na equação (3.4), $n = 2$ e um potencial de interação de 2 corpos dado por $\psi_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = 2D_2\delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)$, com D_2 constante, que pode ser visto como uma interação de contato. Se $D_2 > 0$ ($D_2 < 0$), o potencial de contato ψ_2 descreve uma interação repulsiva (atrativa). Com $n = 2$, a equação (3.4) se reduz

a

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \nabla \cdot [p(\mathbf{x}, t) \nabla \psi_1(\mathbf{x})] + \nabla \cdot \left[p(\mathbf{x}, t) \int_{\mathbb{R}^3} p(\mathbf{y}_1, t) \nabla \psi_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}_1) d\mathbf{y}_1 \right] + D_1 \nabla^2 p(\mathbf{x}, t). \quad (3.5)$$

Substituindo ψ_1 e ψ_2 , vamos obter que

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \nabla \cdot [p(\mathbf{x}, t) \nabla V(\mathbf{x})] + 2D_2 \nabla \cdot [p(\mathbf{x}, t) \nabla p(\mathbf{x}, t)] + D_1 \nabla^2 p(\mathbf{x}, t), \quad (3.6)$$

e, notando que $p(\mathbf{x}, t) \nabla p(\mathbf{x}, t) = \nabla p^2(\mathbf{x}, t)/2$, segue que

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \nabla \cdot [p(\mathbf{x}, t) \nabla V(\mathbf{x})] + D_1 \nabla^2 p(\mathbf{x}, t) + D_2 \nabla^2 p^2(\mathbf{x}, t). \quad (3.7)$$

O último termo do lado direito dessa equação é do tipo difusivo se $D_2 > 0$. Em contraste, se $D_2 < 0$, esse termo é anti-difusivo no sentido que ele favorece a concentração da probabilidade. Se $|D_2|$ é suficientemente pequeno, o último termo da equação (3.7) pode ser ignorado e obtemos a equação de Fokker-Planck linear usual (1.42), em que D_1 é proporcional à temperatura absoluta do sistema. Por outro lado, se D_1 é suficientemente pequeno, o termo difusivo usual pode ser ignorado e obtemos a equação de Fokker-Planck não linear relacionada à equação de meios porosos (1.47). A equação (3.7) possui várias aplicações; por exemplo, na descrição de dinâmicas de vórtices superamortecidos [26]. Nesse caso, a constante $D_2 > 0$ pode ser relacionada a uma temperatura generalizada, que tem sido investigada nas referências [27–29]. Adicionalmente, a equação (3.7) possui uma solução estacionária que é dada em termos da função W-Lambert, a qual foi investigada em [12]. Como um último exemplo da investigação relacionada à equação (3.7), mas considerando um termo de arraste nulo ($V = 0$), mencionamos o estudo de dois regimes difusivos da equação de difusão resultante [30].

Um caso mais geral da equação (3.7) pode ser obtido da equação (3.4) considerando potenciais de contato da seguinte forma

$$\psi_q(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_q) = \frac{qD_q}{q-1} \prod_{i=1}^{q-1} \delta(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_{i+1}) \quad (q \geq 2), \quad (3.8)$$

em que D_q é uma constante. De fato, se incorporarmos esses potenciais de contato na equação (3.4), encontramos

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \nabla \cdot [p(\mathbf{x}, t) \nabla V(\mathbf{x})] + \sum_{q=2}^n \frac{qD_q}{q-1} \nabla \cdot [p(\mathbf{x}, t) \nabla p^{q-1}(\mathbf{x}, t)] + D_1 \nabla^2 p(\mathbf{x}, t). \quad (3.9)$$

Usando a identidade

$$p(\mathbf{x}, t) \nabla p^{q-1}(\mathbf{x}, t) = \frac{q-1}{q} \nabla p^q(\mathbf{x}, t), \quad (3.10)$$

vamos obter

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \nabla \cdot [p(\mathbf{x}, t) \nabla V(\mathbf{x})] + \sum_{q=1}^n D_q \nabla^2 p^q(\mathbf{x}, t). \quad (3.11)$$

Desse resultado, notamos que a origem do termo não linear de ordem q na equação (3.11) se deve à existência de um potencial de contato de q -corpos ψ_q , tendo a forma dada na equação (3.8). Em geral, os sinais das constantes D_q são arbitrários. Os termos contendo $D_q > 0$ são do tipo difusivo, enquanto que os termos associados com $D_q < 0$ são anti-difusivos. Potenciais de contato como o apresentados na equação (3.8) com valores de q não inteiros têm sido estudados na referência [31].

3.3 Potenciais de contato dependentes da posição

Similarmente à equação (3.8), podemos considerar potenciais de contato de q -corpos que dependem da posição das partículas

$$\psi_q(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_q) = \frac{q D_q(\mathbf{x}_1)}{q-1} \prod_{i=1}^{q-1} \delta(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_{i+1}) \quad (q \geq 2), \quad (3.12)$$

que contém o potencial dado na equação (3.8) como um caso particular. Se introduzimos esses potenciais na equação (3.4), podemos verificar que essa equação pode ser reescrita como

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \nabla \cdot [p(\mathbf{x}, t) \nabla V(\mathbf{x})] + \sum_{q=2}^n \frac{q}{q-1} \nabla \cdot \{p(\mathbf{x}, t) \nabla [D_q(\mathbf{x}) p^{q-1}(\mathbf{x}, t)]\} + D_1 \nabla^2 p(\mathbf{x}, t). \quad (3.13)$$

Segue daqui que

$$\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial t} = & \nabla \cdot [p(\mathbf{x}, t) \nabla V(\mathbf{x})] \\ & + \sum_{q=2}^n \nabla \cdot \left[\frac{q}{q-1} p^q(\mathbf{x}, t) \nabla D_q(\mathbf{x}) + \frac{q}{q-1} D_q(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}, t) \nabla p^{q-1}(\mathbf{x}, t) \right] + D_1 \nabla^2 p(\mathbf{x}, t). \end{aligned} \quad (3.14)$$

Usando novamente a identidade (3.10) e definindo

$$V_q(\mathbf{x}) = \begin{cases} V(\mathbf{x}) & \text{se } q = 1 \\ \frac{q D_q(\mathbf{x})}{q-1} & \text{se } q \geq 2 \end{cases} \quad (3.15)$$

encontramos a equação

$$\frac{\partial p(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \sum_{q=1}^n \nabla \cdot (p^q(\mathbf{x}, t) \nabla V_q(\mathbf{x}) + D_q(\mathbf{x}) \nabla p^q(\mathbf{x}, t)). \quad (3.16)$$

Essa equação inédita pode ser formalmente vista como uma equação tipo Fokker-Planck generalizada, em que o potencial $V_q(\mathbf{x})$ é um potencial efetivo que depende da posição através da função $D_q(\mathbf{x})$. Os termos da equação (3.16) podem ser arranjados de formas diferentes. Em particular, se $D_q > 0$ para $q \geq 2$, temos

$$\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial t} &= \nabla \cdot (p(\mathbf{x}, t) \nabla V(\mathbf{x})) + D_1 \nabla^2 p(\mathbf{x}, t) \\ &+ \sum_{q=2}^n \nabla \cdot \left[\frac{D_q^{1/(q-1)}(\mathbf{x})}{D_q^{1/(q-1)}(\mathbf{x})} \left(\frac{q}{q-1} p^q(\mathbf{x}, t) \nabla D_q(\mathbf{x}) + D_q(\mathbf{x}) \nabla p^q(\mathbf{x}, t) \right) \right] \\ &= \nabla \cdot (p(\mathbf{x}, t) \nabla V(\mathbf{x})) + D_1 \nabla^2 p(\mathbf{x}, t) \\ &+ \sum_{q=2}^n \nabla \cdot \left\{ \frac{1}{D_q^{1/(q-1)}(\mathbf{x})} [p^q(\mathbf{x}, t) \nabla D_q^{q/(q-1)}(\mathbf{x}) + D_q^{q/(q-1)}(\mathbf{x}) \nabla p^q(\mathbf{x}, t)] \right\}. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Portanto,

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \nabla \cdot (p(\mathbf{x}, t) \nabla V(\mathbf{x})) + D_1 \nabla^2 p(\mathbf{x}, t) + \sum_{q=2}^n \nabla \cdot \left[\frac{1}{D_q^{1/q-1}(\mathbf{x})} \nabla (D_q^{1/q-1}(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}, t))^q \right]. \quad (3.18)$$

Vamos fazer alguns comentários sobre os aspectos qualitativos relacionados às equações (3.4) e (3.16). Primeiramente, notamos que se $D_q(\mathbf{x})$ é constante, a equação (3.16) recupera a equação (3.11) com seus termos difusivos lineares e não-lineares. Além disso, quando as funções $D_q(\mathbf{x})$ não são constantes, a equação (3.16) contém dois tipos de termos. Um deles, $\nabla \cdot [D_q(\mathbf{x}) \nabla p^q(\mathbf{x}, t)]$, pode ser visto como difusivo com um coeficiente de difusão variável $D_q(\mathbf{x})$. O outro termo, $\nabla \cdot (p^q(\mathbf{x}, t) \nabla V_q(\mathbf{x}))$, pode ser interpretado como um termo de arraste não linear, em que a “força” $-\nabla V_q(\mathbf{x})$ é multiplicada por $p^q(\mathbf{x}, t)$. Essa análise qualitativa sugere que a equação (3.4) pode ser vista como contendo uma mistura de termos difusivos e de arraste. Em geral, os potenciais $V_q(\mathbf{x})$ podem ser atrativos, repulsivos ou uma combinação dos dois. Os casos repulsivos favorecem processos difusivos, enquanto que os casos atrativos favorecem comportamentos anti-difusivos.

Uma outra consequência interessante da equação (3.16) pode ser obtida se $V_q(\mathbf{x}) = c_q \tilde{V}(\mathbf{x})$ para $q = 1, \dots, n$, em que $\tilde{V}(\mathbf{x})$ é uma certa função. Nesse caso, a equação (3.16) pode ser reescrita como

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \nabla \cdot [\Phi(p) \nabla \tilde{V}(\mathbf{x}) + \tilde{D}(\mathbf{x}, p) \nabla p(\mathbf{x}, t)], \quad (3.19)$$

em que

$$\Phi(p) = \sum_{q=1}^n c_q p^q(\mathbf{x}, t) \quad \text{e} \quad \tilde{D}(\mathbf{x}, p) = D_1 + \tilde{V}(\mathbf{x}) \sum_{q=2}^n (q-1) c_q p^{q-1}(\mathbf{x}, t). \quad (3.20)$$

Notamos que o termo de “força” $-\nabla\tilde{V}(\mathbf{x})$ está multiplicado por uma função $\Phi(p)$ que em geral pode ser diferente de p . De fato, uma vez que os coeficientes c_q não são fixos, $\Phi(p)$ pode ser uma função bem geral de p . Em contrapartida, $\tilde{D}(\mathbf{x}, p)$ também tem uma dependência geral em p mas relacionado com $\Phi(p)$. Com efeito, da equação (3.20), notamos que

$$\tilde{D}(\mathbf{x}, p) = D_1 + \tilde{V}(\mathbf{x}) \left[\Phi'(p) - \frac{1}{p} \Phi(p) \right]. \quad (3.21)$$

Equações de Fokker-Planck generalizadas como a vista na equação (3.19) têm sido parte do núcleo de várias investigações [4,5]. Neste capítulo, indicamos a rota para obter esses tipos de equações começando de uma equação de Dean-Kawasaki generalizada em que interações de muitos corpos são consideradas.

Teorema H para equações de Fokker-Planck generalizadas

Neste capítulo, visamos encontrar um teorema H generalizado e mostrar alguns exemplos que são casos particulares. Vamos ver que com esse teorema H podemos obter com facilidade vários resultados conhecidos na literatura.

4.1 Um teorema H generalizado

Dada uma função $\rho = \rho(\mathbf{x}, t)$ não-negativa com $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$ e $t \geq 0$, vamos considerar um funcional

$$F[\rho] = \int_{\mathbb{R}^3} \phi(\rho, \mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (4.1)$$

em que ϕ é uma função continuamente diferenciável. Queremos verificar um teorema H associado com a equação diferencial parcial

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\omega(\rho, \mathbf{x}) \nabla \frac{\delta F[\rho]}{\delta \rho} \right), \quad (4.2)$$

em que $\omega(\rho, \mathbf{x})$ é uma função não-negativa [32]. A motivação inicial para verificar tal teorema, é que, como veremos adiante, a equação (4.2) contém equações de Fokker-Planck lineares e não-lineares como casos particulares. Portanto, a verificação de um teorema H associado com essa equação seria uma unificação de vários resultados já disponíveis na literatura [1, 3–5, 33, 34]. Ao verificar o teorema H para a equação (4.2), fica automaticamente verificado o teorema H para os seus respectivos casos particulares.

Da equação (4.1), notamos que a derivada funcional de $F[\rho]$ é dada por

$$\frac{\delta F[\rho]}{\delta \rho} = D_1 \phi(\rho, \mathbf{x}), \quad (4.3)$$

em que $D_1 \phi$ denota a derivada parcial de ϕ em relação à sua primeira variável. Assim, derivando (4.1) em relação a t , temos que

$$\frac{dF[\rho]}{dt} = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\delta F[\rho]}{\delta \rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} d\mathbf{x}. \quad (4.4)$$

Substituindo (4.2) em (4.4) e integrando por partes, obtemos

$$\begin{aligned} \frac{dF[\rho]}{dt} &= \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\delta F[\rho]}{\delta \rho} \nabla \cdot \left(\omega(\rho, \mathbf{x}) \nabla \frac{\delta F[\rho]}{\delta \rho} \right) d\mathbf{x} \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \nabla \cdot \left(\omega(\rho, \mathbf{x}) \frac{\delta F[\rho]}{\delta \rho} \nabla \frac{\delta F[\rho]}{\delta \rho} \right) d\mathbf{x} - \int_{\mathbb{R}^3} \omega(\rho, \mathbf{x}) \left| \nabla \frac{\delta F[\rho]}{\delta \rho} \right|^2 d\mathbf{x}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Assumindo que, para todo $t \geq 0$, o termo $\left(\omega(\rho, \mathbf{x}) \frac{\delta F[\rho]}{\delta \rho} \nabla \frac{\delta F[\rho]}{\delta \rho} \right)$ tende a zero suficientemente rápido, conforme $|\mathbf{x}| \rightarrow \infty$, segue do teorema do divergente que

$$\frac{dF[\rho]}{dt} = - \int_{\mathbb{R}^3} \omega(\rho, \mathbf{x}) \left| \nabla \frac{\delta F[\rho]}{\delta \rho} \right|^2 d\mathbf{x} \leq 0, \quad (4.6)$$

uma vez que a função $\omega(\rho, \mathbf{x})$ é não-negativa por definição. Essa desigualdade pode ser interpretada como um teorema H associado com a equação (4.2).

Notamos que a equação (4.6) foi obtida independentemente da expressão do funcional $F[\rho]$. Assim, diferentes escolhas desse funcional vão nos levar a diferentes equações de Fokker-Planck generalizadas via a equação (4.2), as quais por construção terão um teorema H associado.

4.2 Casos particulares

Nesta seção, vamos recuperar equações de Fokker-Planck típicas (lineares e não-lineares) e seus teoremas H associados como casos particulares das equações (4.2) e (4.6).

4.2.1 Equação de Fokker-Planck linear

Seja $\rho = \rho(\mathbf{x}, t)$ uma densidade de probabilidade, em que $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$ e $t \geq 0$. Vamos considerar o funcional

$$F[\rho] = \int_{\mathbb{R}^3} \rho(\mathbf{x}, t) \ln \frac{\rho(\mathbf{x}, t)}{\rho_s(\mathbf{x})} d\mathbf{x}, \quad (4.7)$$

em que

$$\rho_s(\mathbf{x}) = \frac{e^{-V(\mathbf{x})}}{\int_{\mathbb{R}^3} e^{-V(\mathbf{x}')} d\mathbf{x}'}, \quad (4.8)$$

e V é uma função tal que $e^{-V(\mathbf{x})}$ é integrável. O funcional $F[\rho]$ é a divergência de Kullback-Leibler [35] de ρ em relação a ρ_s (ver equação (1.35)). Se $\omega(\rho, \mathbf{x}) = \rho(\mathbf{x}, t)D(\mathbf{x})$, com D sendo uma função não-negativa, podemos obter da equação (4.2) a equação de Fokker-Planck linear com coeficiente de difusão variável. De fato, nesse caso, teremos

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\rho(\mathbf{x}, t)D(\mathbf{x})\nabla \frac{\delta}{\delta \rho} \left[- \int_{\mathbb{R}^3} \rho(\mathbf{x}, t) \ln \frac{\rho_s(\mathbf{x})}{\rho(\mathbf{x}, t)} d\mathbf{x} \right] \right). \quad (4.9)$$

Como

$$\frac{\delta}{\delta \rho} \left[- \int_{\mathbb{R}^3} \rho(\mathbf{x}, t) \ln \frac{\rho_s(\mathbf{x})}{\rho(\mathbf{x}, t)} d\mathbf{x} \right] = - \ln \frac{\rho_s(\mathbf{x})}{\rho(\mathbf{x}, t)} + 1, \quad (4.10)$$

a equação (4.9) pode ser reescrita na forma

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\rho(\mathbf{x}, t)D(\mathbf{x})\nabla \left[- \ln \frac{\rho_s(\mathbf{x})}{\rho(\mathbf{x}, t)} + 1 \right] \right). \quad (4.11)$$

Após expandir o \ln e substituir ρ_s , encontramos

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \cdot \left[\rho(\mathbf{x}, t)D(\mathbf{x}) \left(\nabla V(\mathbf{x}) + \nabla \left\{ \ln \int_{\mathbb{R}^3} e^{-V(\mathbf{x}')} d\mathbf{x}' \right\} + \nabla \ln \rho(\mathbf{x}, t) \right) \right], \quad (4.12)$$

mas, notamos imediatamente que o gradiente do termo entre chaves é igual a zero, de modo que finalmente obtemos

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \cdot [-\rho(\mathbf{x}, t)A(\mathbf{x}) + D(\mathbf{x})\nabla \rho(\mathbf{x}, t)], \quad (4.13)$$

em que $A(\mathbf{x}) = -D(\mathbf{x})\nabla V(\mathbf{x})$. Essa equação recupera a equação de Fokker-Planck linear usual (1.42) quando $D(\mathbf{x})$ é uma função constante. Pode se mostrar que ρ_s é a solução estacionária da equação (4.13) [33]. A equação (4.6) nos informa imediatamente que, como já é conhecido, há um teorema H associado com essa equação de Fokker-Planck, desde que apenas consideremos soluções ρ tais que $\rho(\mathbf{x}, t)$ e $\nabla \rho(\mathbf{x}, t)$ tendem para zero rápido o suficiente conforme $|\mathbf{x}| \rightarrow \infty$.

4.2.2 Equação de Fokker-Planck não-linear relacionada à equação de meios porosos

Substituindo a expressão de $\rho_s(\mathbf{x})$ dada na equação (4.8), na equação (4.7), obtemos que

$$F[\rho] = \int_{\mathbb{R}^3} V(\mathbf{x})\rho(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} - \int_{\mathbb{R}^3} \rho(\mathbf{x}, t) \ln \frac{1}{\rho(\mathbf{x}, t)} d\mathbf{x} + \text{constante}, \quad (4.14)$$

em que a primeira integral do lado direito pode ser interpretada como uma energia interna, e a segunda como uma forma entrópica de Boltzmann-Gibbs, tal como $F = U - \theta S$. Podemos ignorar o termo constante uma vez que estamos interessados em derivadas de $F[\rho]$. Nessa direção, a equação (4.14) pode ser generalizada pelo funcional

$$F_q[\rho] = \int_{\mathbb{R}^3} V(\mathbf{x})\rho(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} - \int_{\mathbb{R}^3} \rho(\mathbf{x}, t) \ln_q \frac{1}{\rho(\mathbf{x}, t)} d\mathbf{x}, \quad (4.15)$$

em que \ln_q representa a função q -logaritmo, definida na equação (1.58). Notamos que o funcional $F_q[\rho]$ também tem a forma de uma energia livre, porém aparecendo a forma entrópica de Tsallis no lugar da de Boltzmann-Gibbs.

Usando $F_q[\rho]$ no papel de $F[\rho]$ na equação (4.2), e também considerando $\omega(\rho, \mathbf{x}) = \rho(\mathbf{x}, t)D(\mathbf{x})$, em que D é uma função não-negativa, obtemos

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\rho(\mathbf{x}, t)D(\mathbf{x})\nabla \frac{\delta F_q[\rho]}{\delta \rho} \right). \quad (4.16)$$

A partir da equação (4.15), temos que

$$\frac{\delta F_q[\rho]}{\delta \rho} = V(\mathbf{x}) - \ln_q \frac{1}{\rho(\mathbf{x}, t)} + \rho^{q-1}(\mathbf{x}, t). \quad (4.17)$$

Substituindo isso na equação (4.16) obtemos que

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= \nabla \cdot [\rho(\mathbf{x}, t)D(\mathbf{x}) (\nabla V(\mathbf{x}) + \rho^{q-2}(\mathbf{x}, t)\nabla \rho(\mathbf{x}, t) + (q-1)\rho^{q-2}(\mathbf{x}, t)\nabla \rho(\mathbf{x}, t))] \\ &= \nabla \cdot [\rho(\mathbf{x}, t)D(\mathbf{x})\nabla V(\mathbf{x}) + q\rho^{q-1}(\mathbf{x}, t)\nabla \rho(\mathbf{x}, t)]. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Portanto,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \cdot \{-\rho(\mathbf{x}, t)A(\mathbf{x}) + D(\mathbf{x})\nabla[\rho(\mathbf{x}, t)]^q\}, \quad (4.19)$$

em que $A(\mathbf{x}) = -D(\mathbf{x})\nabla V(\mathbf{x})$. Notamos imediatamente que essa equação é uma generalização da equação de Fokker-Planck linear (4.13). A equação (4.19) é a equação de Fokker-Planck associada à equação de meios porosos [36] com coeficiente de difusão variável, a qual recupera a equação (1.47) quando $D(\mathbf{x}) = \text{constante}$.

O teorema H associado com a equação (4.19) segue diretamente da equação (4.6) com o funcional F_q no lugar de F , desde que apenas consideremos soluções $\rho(\mathbf{x}, t)$ da equação (4.19) tais que $\rho(\mathbf{x}, t)$, $[\rho(\mathbf{x}, t)]^q$ e $\nabla \rho(\mathbf{x}, t)$ tendem a zero rápido o suficiente conforme $|\mathbf{x}| \rightarrow \infty$.

Realizando um procedimento similar ao feito na subseção 1.3.1, podemos obter que a

solução estacionária da equação (4.19) é dada por

$$\rho_s(\mathbf{x}) = N \exp_{2-q} \left[-\frac{V(\mathbf{x})}{qN^{q-1}} \right], \quad (4.20)$$

em que N é uma constante de normalização e \exp_q é a q -exponencial definida na equação (1.55). Sicuro *et al* [5] (ver também [3, 4]) provaram que $F_q[\rho] \geq F_q[\rho_s]$ para qualquer densidade de probabilidade ρ satisfazendo a equação (4.19) se $q > 0$.

4.2.3 Equações de Fokker-Planck não-lineares

Podemos obter uma situação mais geral quando consideramos

$$\omega(\rho(\mathbf{x}, t), \mathbf{x}) = D(\mathbf{x})\Psi(\rho(\mathbf{x}, t)), \quad (4.21)$$

em que D e Ψ são funções não-negativas, e

$$F[\rho] = \int_{\mathbb{R}^3} \rho(\mathbf{x}, t)V(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \int_{\mathbb{R}^3} \eta(\rho(\mathbf{x}, t)) d\mathbf{x}, \quad (4.22)$$

com V e η sendo funções arbitrárias. Nesse caso, a derivada funcional de $F[\rho]$ é dada por

$$\frac{\delta F[\rho]}{\delta \rho} = V(\mathbf{x}) - \eta'(\rho). \quad (4.23)$$

Logo,

$$\nabla \frac{\delta F[\rho]}{\delta \rho} = \nabla V(\mathbf{x}) - \eta''(\rho(\mathbf{x}, t))\nabla \rho(\mathbf{x}, t). \quad (4.24)$$

Usando as equações (4.21) e (4.24) na equação (4.2), obtemos a equação

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \cdot [-\Psi(\rho(\mathbf{x}, t))A(\mathbf{x}) + D(\mathbf{x})\Omega(\rho(\mathbf{x}, t))\nabla \rho(\mathbf{x}, t)], \quad (4.25)$$

em que $A(\mathbf{x}) = -D(\mathbf{x})\nabla V(\mathbf{x})$ e

$$\Omega(\rho(\mathbf{x}, t)) = -\Psi(\rho(\mathbf{x}, t))\eta''(\rho(\mathbf{x}, t)). \quad (4.26)$$

Para cada escolha da função η na equação (4.22), obtemos uma equação tipo Fokker-Planck (4.25), que possui um teorema H associado por construção, como consequência da equação (4.6). Por exemplo, se $\Psi(\rho) = \rho$ e $\eta(\rho) = \rho \ln(1/\rho)$, a equação (4.25) se torna a equação (4.13). Ou então se $\Psi(\rho) = \rho$ e $\eta(\rho) = \rho \ln_q(1/\rho)$, a equação (4.25) recai na equação (4.19).

Se quisermos considerar a equação (4.25) como uma equação de Fokker-Planck, o coeficiente $\Omega(\rho(\mathbf{x}, t))$ deve ser não-negativo para cada $t \geq 0$ e $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$. Essa condição é satisfeita

em particular se η é uma função concava, como pode ser facilmente concluído de (4.26). Por outro lado, se a equação (4.25) é uma equação de Fokker-Planck com Ω e Ψ sendo funções arbitrárias não-negativas, então, definindo

$$\zeta(\rho(\mathbf{x}, t)) = \frac{\Omega(\rho(\mathbf{x}, t))}{\Psi(\rho(\mathbf{x}, t))}, \quad (4.27)$$

a equação (4.25) pode ser reescrita como

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \cdot [\Psi(\rho(\mathbf{x}, t))D(\mathbf{x})\nabla V(\mathbf{x}) + D(\mathbf{x})\Psi(\rho(\mathbf{x}, t))\zeta(\rho(\mathbf{x}, t))\nabla \rho(\mathbf{x}, t)], \quad (4.28)$$

que pode ser obtida diretamente da equação (4.2) usando $\omega(\rho(\mathbf{x}, t), \mathbf{x}) = D(\mathbf{x})\Psi(\rho(\mathbf{x}, t))$ e $F[\rho]$ dada em equação (4.22) com uma função η tal que $\eta''(\rho(\mathbf{x}, t)) = -\zeta(\rho(\mathbf{x}, t))$. Se a função η existe, então a equação (4.25) tem um teorema H associado como fruto da equação (4.6). Uma vez que duas definições diferentes para as funções Ψ e Ω podem gerar a mesma razão $\Omega(\rho(\mathbf{x}, t))/\Psi(\rho(\mathbf{x}, t))$, duas equações de Fokker-Planck diferentes da forma dada em (4.25) podem ter teoremas H associados com o mesmo funcional F da forma dada em (4.22). Essa afirmação foi provada por Schwämmle *et al.* [3, 4] e, mais recentemente por Sicuro *et al.* [5].

4.2.4 Formas entrópicas dependendo da posição

Num estudo recente [34], propusemos uma equação de Fokker-Planck que tem a seguinte forma

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \nabla \cdot \left[-\mathcal{A}(\mathbf{x})\rho(\mathbf{x}, t) + \mathcal{D}(\mathbf{x})\nabla \left(\frac{\rho(\mathbf{x}, t)}{\mathcal{C}(\mathbf{x})} \right)^\nu \right], \quad (4.29)$$

em que $\mathcal{C}(\mathbf{x})$ e $\mathcal{D}(\mathbf{x})$ são funções não-negativas. Notamos que essa equação recupera a equação (4.19) no caso particular em que $\mathcal{C}(\mathbf{x}) = 1$. Vamos mostrar que a equação (4.29) pode ser obtida da equação (4.2) considerando

$$\omega(\rho, \mathbf{x}) = \frac{\mathcal{D}(\mathbf{x})}{\mathcal{C}(\mathbf{x})}\rho(\mathbf{x}, t), \quad (4.30)$$

e o funcional

$$F[\rho] = \int_{\mathbb{R}^3} V(\mathbf{x})\rho(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} - \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\mathcal{C}^{1-\nu}(\mathbf{x})\rho^\nu(\mathbf{x}, t) - \rho(\mathbf{x}, t)}{1-\nu} d\mathbf{x}, \quad (4.31)$$

em que $V(\mathbf{x})$ é uma função que pode estar relacionada com as funções $\mathcal{C}(\mathbf{x})$, $\mathcal{D}(\mathbf{x})$ e $\mathcal{A}(\mathbf{x})$.

A derivada funcional de $F[\rho]$ é dada por

$$\frac{\delta F}{\delta \rho} = V(\mathbf{x}) - \frac{\nu \mathcal{C}^{1-\nu}(\mathbf{x})\rho^{\nu-1}(\mathbf{x}, t) - 1}{1-\nu}. \quad (4.32)$$

E tomando o gradiente disso, verificamos que

$$\nabla \frac{\delta F}{\delta \rho} = \nabla V(\mathbf{x}) - \nabla \left[\frac{\nu (\mathcal{C}^{-1}(\mathbf{x})\rho(\mathbf{x}, t))^{\nu-1}}{1-\nu} \right]. \quad (4.33)$$

No último termo do lado direito, podemos multiplicar $[\mathcal{C}^{-1}(\mathbf{x})\rho(\mathbf{x}, t)]^{-1}[\mathcal{C}^{-1}(\mathbf{x})\rho(\mathbf{x}, t)]$ e usar a relação

$$\mathcal{C}^{-1}(\mathbf{x})\rho(\mathbf{x}, t)\nabla[\mathcal{C}^{-1}(\mathbf{x})\rho(\mathbf{x}, t)]^{\nu-1} = \frac{\nu-1}{\nu}\nabla[\mathcal{C}^{-1}(\mathbf{x})\rho(\mathbf{x}, t)]^{\nu}. \quad (4.34)$$

Com isso, teremos

$$\nabla \frac{\delta F}{\delta \rho} = \nabla V(\mathbf{x}) + [\mathcal{C}^{-1}(\mathbf{x})\rho(\mathbf{x}, t)]^{-1}\nabla[\mathcal{C}^{-1}(\mathbf{x})\rho(\mathbf{x}, t)]^{\nu}. \quad (4.35)$$

Logo, substituindo isso na equação (4.2) vamos ter

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \cdot \left\{ \frac{\mathcal{D}(\mathbf{x})}{\mathcal{C}(\mathbf{x})}\rho(\mathbf{x}, t)\nabla V(\mathbf{x}) + \mathcal{D}(\mathbf{x})\nabla[\mathcal{C}^{-1}(\mathbf{x})\rho(\mathbf{x}, t)]^{\nu} \right\}, \quad (4.36)$$

Desse modo, se $V(\mathbf{x})$ satisfaz a condição

$$\nabla V(\mathbf{x}) = -\frac{\mathcal{C}(\mathbf{x})\mathcal{A}(\mathbf{x})}{\mathcal{D}(\mathbf{x})}, \quad (4.37)$$

obtemos a equação (4.29). Uma solução estacionária da equação de (4.29) é dada por (ver Apêndice B)

$$\rho_s(\mathbf{x}) = N\mathcal{C}(\mathbf{x}) \exp_q \left[-\frac{V(\mathbf{x})}{(2-q)N^{1-q}} \right], \quad (4.38)$$

em que $q = 2 - \nu$ e N é uma constante de normalização. A partir dessa expressão, podemos interpretar $\mathcal{C}(\mathbf{x})$ como uma densidade de estados.

Há um teorema H associado com a equação (4.29) que segue automaticamente da equação (4.6) se consideramos soluções ρ de (4.29) tais que $\rho(\mathbf{x}, t)$, $[\rho(\mathbf{x}, t)]^{\nu}$ e $\nabla\rho(\mathbf{x}, t)$ tendem para zero suficientemente rápido conforme $|\mathbf{x}| \rightarrow \infty$. Isto foi verificado de outra maneira no trabalho de [34]. Além disso, pode-se mostrar que $F[\rho] \geq F[\rho_s]$ para todas as soluções ρ da equação (4.29) se $\nu > 0$ (ver Apêndice B).

O funcional $F[\rho]$ dado na equação (4.31) pode ser escrito como $F[\rho] = U[\rho] - S[\rho]$, em que

$$U[\rho] = \int_{\mathbb{R}^3} V(\mathbf{x})\rho(\mathbf{x}, t)d\mathbf{x} \quad (4.39)$$

e

$$S[\rho] = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\mathcal{C}^{1-\nu}(\mathbf{x})\rho^{\nu}(\mathbf{x}, t) - \rho(\mathbf{x}, t)}{1-\nu} d\mathbf{x}. \quad (4.40)$$

O funcional $U[\rho]$ pode ser visto como uma energia interna, pois é a média de um potencial

efetivo $V(\mathbf{x})$ o qual foi definido pela equação (4.37). Por outro lado, o funcional $S[\rho]$ é uma generalização da forma entrópica de Tsallis de ordem ν , a qual é recuperada quando $\mathcal{C}(\mathbf{x}) = 1$. Curiosamente essa forma entrópica generalizada depende explicitamente da posição. Além disso, usando a função q -logaritmo, o funcional $S[\rho]$ pode ser escrito como

$$S[\rho] = - \int_{\mathbb{R}^3} \rho(\mathbf{x}, t) \ln_{2-\nu} \frac{\rho(\mathbf{x}, t)}{\mathcal{C}(\mathbf{x})} d\mathbf{x}, \quad (4.41)$$

o qual pode ser conectado com uma generalização da divergência de Kullback-Leibler, no caso em que $\mathcal{C}(\mathbf{x})$ seja uma densidade de probabilidade.

Energia livre, entropia e energia interna

Neste capítulo, vamos fazer uso do formalismo visto no capítulo 4 para obter um teorema H associado à equação de Fokker-Planck generalizada (3.4). Vamos mostrar que os termos do funcional de energia livre podem ser interpretados como energia interna ou como entropia de forma conveniente.

5.1 Teorema H para a equação de Fokker-Planck generalizada (3.4)

Vamos verificar que a equação de Fokker-Planck generalizada (3.4) pode ser obtida da equação (4.2) considerando $\omega(p, \mathbf{x}) = p(\mathbf{x}, t)$ e

$$F[p] = \sum_{q=1}^n \frac{1}{q} \int_{\mathbb{R}^3} p(\mathbf{y}_1, t) d\mathbf{y}_1 \dots \int_{\mathbb{R}^3} p(\mathbf{y}_q, t) \psi_q(\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_q) d\mathbf{y}_q - D_1 \int_{\mathbb{R}^3} p(\mathbf{x}, t) \ln \frac{1}{p(\mathbf{x}, t)} d\mathbf{x}, \quad (5.1)$$

lembrando que $\psi_1(\mathbf{x}) = V(\mathbf{x})$ é um potencial externo. Para isso, primeiramente vamos nos focar no termo

$$I_q = \int_{\mathbb{R}^3} p(\mathbf{y}_1, t) d\mathbf{y}_1 \dots \int_{\mathbb{R}^3} p(\mathbf{y}_q, t) \psi_q(\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_q) d\mathbf{y}_q. \quad (5.2)$$

Notamos que a derivada funcional de I_q é dada por

$$\begin{aligned}
\frac{\delta I_q}{\delta p} &= \int_{\mathbb{R}^3} p(\mathbf{y}_2, t) d\mathbf{y}_2 \dots \int_{\mathbb{R}^3} p(\mathbf{y}_q, t) \psi_q(x, \mathbf{y}_2, \dots, \mathbf{y}_q) d\mathbf{y}_q + \dots \\
&\quad \dots + \int_{\mathbb{R}^3} p(\mathbf{y}_1, t) d\mathbf{y}_1 \dots \int_{\mathbb{R}^3} p(\mathbf{y}_{q-1}, t) \psi_q(\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_{q-1}, x) d\mathbf{y}_{q-1} \\
&= \int_{\mathbb{R}^3} p(\mathbf{y}_2, t) d\mathbf{y}_2 \dots \int_{\mathbb{R}^3} p(\mathbf{y}_q, t) \psi_q(x, \mathbf{y}_2, \dots, \mathbf{y}_q) d\mathbf{y}_q + \dots \\
&\quad \dots + \int_{\mathbb{R}^3} p(\mathbf{y}_1, t) d\mathbf{y}_1 \dots \int_{\mathbb{R}^3} p(\mathbf{y}_{q-1}, t) \psi_q(x, \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_{q-1}) d\mathbf{y}_{q-1},
\end{aligned} \tag{5.3}$$

em que, na segunda igualdade, temos usado o fato que $\psi_q(\mathbf{y}_{\pi(1)}, \dots, \mathbf{y}_{\pi(q)}) = \psi_q(\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_q)$ para qualquer permutação π do conjunto $\{1, \dots, q\}$. Logo

$$\frac{\delta I_q}{\delta p} = q \int_{\mathbb{R}^3} p(\mathbf{y}_1, t) d\mathbf{y}_1 \dots \int_{\mathbb{R}^3} p(\mathbf{y}_{q-1}, t) \psi_q(\mathbf{x}, \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_{q-1}) d\mathbf{y}_{q-1}. \tag{5.4}$$

Usando isso no cálculo da derivada funcional de $F[p]$, obtemos

$$\frac{\delta F}{\delta p} = \sum_{q=1}^n \int_{\mathbb{R}^3} p(\mathbf{y}_1, t) d\mathbf{y}_1 \dots \int_{\mathbb{R}^3} p(\mathbf{y}_{q-1}, t) \psi_q(\mathbf{x}, \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_{q-1}) d\mathbf{y}_{q-1} + D_1 \ln p(\mathbf{x}, t) + D_1. \tag{5.5}$$

Segue daqui que

$$\nabla \frac{\delta F}{\delta p} = \sum_{q=1}^n \int_{\mathbb{R}^3} p(\mathbf{y}_1, t) d\mathbf{y}_1 \dots \int_{\mathbb{R}^3} p(\mathbf{y}_{q-1}, t) \nabla \psi_q(\mathbf{x}, \mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_{q-1}) d\mathbf{y}_{q-1} + \frac{D_1}{p(\mathbf{x}, t)} \nabla p(\mathbf{x}, t). \tag{5.6}$$

Finalmente, substituindo isso na equação (4.2), vamos obter imediatamente a equação (3.4). Dessa maneira, a equação de Fokker-Planck generalizada (3.4) tem um teorema H associado por construção (ver equação (4.6)), desde que os potenciais confinantes ψ_q são tais que $p \frac{\delta F}{\delta p} \nabla \frac{\delta F}{\delta p}$ tende a zero rapidamente o suficiente conforme $|\mathbf{x}| \rightarrow \infty$.

5.2 Significado dos termos do funcional F

Da equação (5.1), notamos que, à primeira vista, o funcional $F[p]$ tem a estrutura de um funcional tipo energia livre. Desse modo, os termos contendo os potenciais ψ_q podem ser vistos como diferentes contribuições para uma energia interna, uma vez que o último termo é o produto da constante $-D_1$ e a forma entrópica de Boltzmann-Gibbs.

A fim de entender o significado dos termos contidos no funcional $F[p]$ dado na equação (5.1), vamos considerar alguns casos particulares relacionados com as equações de Fokker-Planck generalizadas vistas nas seções 3.2 e 3.3.

5.2.1 Potenciais de contato constantes

Consideremos inicialmente $n = 2$ e $\psi_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = 2D_2\delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)$. Nesse caso, a equação (5.1) se reduz a

$$F[p] = \int_{\mathbb{R}^3} V(\mathbf{x})p(\mathbf{x}, t)d\mathbf{x} + D_2 \int_{\mathbb{R}^3} p^2(\mathbf{x}, t)d\mathbf{x} - D_1 \int_{\mathbb{R}^3} p(\mathbf{x}, t) \ln \frac{1}{p(\mathbf{x}, t)}d\mathbf{x}. \quad (5.7)$$

Como o segundo termo do lado direito foi obtido usando o potencial de contato de dois corpos ψ_2 , ele pode ser visto como uma energia interna. Contudo, o mesmo termo também é relacionado à forma entrópica de Tsallis com parâmetro $q = 2$, uma vez que

$$S_2 = \int_{\mathbb{R}^3} p(\mathbf{x}, t) \ln_2 \frac{1}{p(\mathbf{x}, t)}d\mathbf{x} = 1 - \int_{\mathbb{R}^3} p^2(\mathbf{x}, t)d\mathbf{x}. \quad (5.8)$$

Assim, se $D_2 > 0$, o funcional tipo energia livre $F[p]$ também pode ser visto, a menos de uma constante aditiva, como composto por uma energia interna (o primeiro termo no lado direito da equação (5.7)) e duas formas entrópicas, nomeadamente uma forma de Boltzmann-Gibbs (ou de Tsallis com parâmetro $q = 1$) e uma forma entrópica de Tsallis com parâmetro $q = 2$.

A análise discutida acima pode ser estendida para um valor arbitrário de $n \geq 2$ usando o potencial de q -corpos

$$\psi_q(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_q) = \frac{qD_q}{q-1} \prod_{i=1}^{q-1} \delta(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_{i+1}) \quad (q \geq 2), \quad (5.9)$$

o qual já foi definido na equação (3.8). Nesse caso, a equação (5.1) pode ser reescrita como

$$F = \int_{\mathbb{R}^3} V(\mathbf{x})p(\mathbf{x}, t)d\mathbf{x} + \sum_{q=2}^n D_q \int_{\mathbb{R}^3} \frac{p^q(\mathbf{x}, t)}{q-1}d\mathbf{x} - D_1 S_1. \quad (5.10)$$

Como, para $q \geq 2$, a forma entrópica de Tsallis é dada por

$$S_q = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{p^q(\mathbf{x}, t) - p(\mathbf{x}, t)}{1-q}d\mathbf{x} = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{p^q(\mathbf{x}, t)}{1-q}d\mathbf{x} - \frac{1}{1-q}, \quad (5.11)$$

vamos obter que

$$F = U - \sum_{q=1}^n D_q S_q + \text{constante}, \quad (5.12)$$

em que $U = \int_{\mathbb{R}^3} V(\mathbf{x})p(\mathbf{x}, t)d\mathbf{x}$ e S_q é a forma entrópica de Tsallis.

Na equação (5.12), todos os termos do lado direito têm como origem os potenciais ψ_q , com a exceção da contribuição de $q = 1$. Conseqüentemente, cada termo contendo S_q com $q \geq 2$ pode ser visto como uma parte da energia interna. Em contraste, uma vez que cada S_q é uma forma entrópica de Tsallis [2], o funcional $F[p]$ pode ser formalmente visto como sendo

composto de uma energia interna U e uma combinação linear de várias formas entrópicas de Tsallis com índices inteiros. Para considerar essa combinação linear como uma forma entrópica, cada constante D_q deve ser positiva.

Como um comentário, em um estudo fenomenológico hipotético, podemos considerar começando de um funcional $F[p]$, dado na equação (5.12). Nesse caso, a equação (4.2) com $\omega(p, \mathbf{x}) = p$ nos leva à equação tipo Fokker-Planck (3.11). Então, do ponto de vista operacional, chamar as quantidades S_q como formas entrópicas ou energias na equação (5.12) é completamente irrelevante. Nesse cenário, somos incapazes de determinar a origem das formas entrópicas S_q com índices $q = 2, 3, 4, \dots$, ou seja, não podemos decidir se S_q é uma forma entrópica verdadeira ou se ela provém de um potencial de interação de q -corpos.

5.2.2 Potenciais de contato dependendo da posição

Como um caso mais geral, podemos considerar que os potenciais de q -corpos ψ_q são dados por

$$\psi_q(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_q) = \frac{qD_q(\mathbf{x}_1)}{q-1} \prod_{i=1}^{q-1} \delta(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_{i+1}) \quad (q \geq 2), \quad (5.13)$$

os quais já foram definidos na equação (3.12). Nesse caso, analogamente ao procedimento feito para encontrar a equação (5.12), o funcional $F[p]$ da equação (5.1) pode ser reescrito como

$$F[p] = \int_{\mathbb{R}^3} V(\mathbf{x})p(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} - \sum_{q=1}^n \mathcal{S}_q + \text{constante}, \quad (5.14)$$

em que

$$\mathcal{S}_q = \begin{cases} D_1 S_1 & \text{se } q = 1 \\ \int_{\mathbb{R}^3} \frac{D_q(\mathbf{x})p^q(\mathbf{x}, t) - p(\mathbf{x}, t)}{1 - q} d\mathbf{x} & \text{se } q \neq 1. \end{cases} \quad (5.15)$$

Partindo desse funcional $F[p]$, podemos obter a equação tipo Fokker-Planck (3.18) por meio da equação (4.6), como esperado. Também verificamos que a equação (5.14) recupera a equação (5.12) se D_q é uma função constante para $q \geq 2$. Portanto, para ver \mathcal{S}_q como uma generalização da forma entrópica de Tsallis S_q , dada na equação (5.11), a função D_q deve ser positiva (ver também equação (4.40)). Nessa direção, notamos que o funcional $F[p]$ pode ser formalmente visto como sendo composto por uma energia interna usual e uma soma de formas entrópicas generalizadas \mathcal{S}_q . Uma vez que, no geral, as funções D_q são não constantes, \mathcal{S}_q com $q \geq 2$ pode curiosamente depender da posição. Assim, se considerarmos \mathcal{S}_q como uma forma entrópica, ela daria diferentes pesos para diferentes estados (posições). Por exemplo, para otimizar \mathcal{S}_q somente sujeito ao vínculo de normalização $\int_{\mathbb{R}^3} p d\mathbf{x} = 1$, vamos considerar

o funcional

$$\tilde{\mathcal{S}}_q = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{D_q(\mathbf{x})p^q(\mathbf{x}, t) - p(\mathbf{x}, t)}{1 - q} d\mathbf{x} - \alpha \left(\int_{\mathbb{R}^3} p(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} - 1 \right), \quad (5.16)$$

em que α é um multiplicador de Lagrange. Igualando a derivada funcional de $\tilde{\mathcal{S}}_q$ a zero, teremos a equação

$$\frac{qD_q(\mathbf{x})p^{q-1}(\mathbf{x}, t) - 1}{1 - q} - \alpha = 0. \quad (5.17)$$

Resolvendo essa equação, verificaremos imediatamente que $p(\mathbf{x}) \propto [D_q(\mathbf{x})]^{1/(1-q)}$ no lugar de obter uma função constante.

No nosso estudo, o funcional $F[p]$ dado na equação (5.1) está relacionado a uma equação de Dean-Kawasaki generalizada. Devido a isso os termos contendo ψ_q com $q \geq 2$ são médias de energias de interação e, por conseguinte, eles podem ser claramente vistos como contribuições para uma energia interna. Entretanto, as discussões apresentadas acima sugerem que esses termos podem ser formalmente interpretados como formas entrópicas. Se não sabemos a origem do funcional $F[p]$, como no caso de um estudo fenomenológico, somos incapazes de traçar a origem dos termos contendo ψ_q com $q \geq 2$. Consequentemente, não podemos decidir se esses termos são parte de uma energia interna ou se são verdadeiras formas entrópicas. Nessa situação, somos livres de empregar a nomenclatura que aparenta ser mais conveniente para tais termos.

Conclusões e perspectivas

Começamos esse trabalho considerando um conjunto de partículas interagentes contidas em um meio e sujeitas à presença de um possível campo externo. Como é bem conhecida, a densidade de partículas é a solução da equação de Dean-Kawasaki se considerarmos a interação entre dois corpos entre as partículas. Com o intuito de englobar interações mais gerais, consideramos outras contribuições de muitos corpos. Como consequência, chegamos à equação de Dean-Kawasaki geral (2.29). Essa equação estocástica pode ser reduzida a uma equação de Fokker-Planck não-linear (3.4), que também é não-local para uma interação geral de muitos corpos, quando a dependência explícita do ruído é ignorada. Adicionalmente, identificamos que essa equação contém várias equações de Fokker-Planck não lineares como casos particulares.

Com o objetivo de verificar um teorema H para a equação de Fokker-Planck não local (3.4), mostramos um formalismo com o qual podemos obter equações de Fokker-Planck generalizadas a partir de funcionais que lembram uma energia livre. Além disso, as equações obtidas possuem um teorema H associado por construção. Em particular, esse formalismo nos permitiu reobter imediatamente teoremas H para diversas equações de Fokker-Planck não-lineares, os quais foram parte principal de vários estudos na literatura. Por outro lado, também obtivemos uma equação de Fokker-Planck não linear cujo teorema H indicou a possibilidade de identificar uma forma entrópica que generaliza a forma entrópica de Tsallis. Curiosamente essa forma entrópica depende explicitamente da posição, a qual mereceria estudos adicionais sobre suas implicações e aplicações.

A equação de Fokker-Planck não-local (3.4) é uma equação que depende explicitamente do potencial de interação $\psi_q(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_q)$. Cada ψ_q é um potencial de q -corpos e, para $q \geq 2$, conduz a um termo não-linear de ordem q na equação de Fokker-Planck não-local. Uma

escolha imediata mas relevante para ψ_q é um potencial de contato constante (ver equação (3.8)). Nesse caso, cada termo contendo ψ_q na equação (3.4) se reduz a termos locais e não-lineares proporcionais a $\nabla^2 p^q$, que podem ser vistos como um tipo de termo de arraste de q -corpos. Esse termo é difusivo se o potencial ψ_q descreve uma interação de contato repulsiva. Em contraste, se esse potencial é atrativo, o termo proporcional a $\nabla^2 p^q$ é anti-difusivo. Assim como o termo difusivo com $\nabla^2 p$ pode ser relacionado à forma entrópica de Boltzmann-Gibbs, via um teorema H , cada termo difusivo não-linear proporcional a $\nabla^2 p^q$, no caso repulsivo, pode ser formalmente conectado com uma forma entrópica generalizada. De fato, verificamos que essa forma entrópica pode ser identificada com a forma entrópica de Tsallis de ordem q . Essa possibilidade é interessante porque um termo que tem sua origem puramente em um potencial de interação pode ser visto como vindo de uma forma entrópica pura. Fora do contexto da equação de Dean-Kawasaki generalizada (2.29), poderíamos considerar começar de uma equação de Fokker-Planck fenomenológica onde a origem dos termos é desconhecida. Nesse caso, considerar a origem de cada termo como sendo devido a uma forma entrópica ou ao resultado de interações vai ser convenientemente escolhido dependendo do foco do estudo. De fato, para $q = 2$ esse aspecto qualitativo tem sido objeto de discussão na literatura [26, 37, 38]. Porém, vale ressaltar que essa escolha deve ser consistente com a dinâmica do sistema.

Uma situação mais geral ocorre se os potenciais ψ_q , para $q \geq 2$, descrevem uma interação de contato que depende da posição (ver equação (3.12)). Nesse caso, além de termos difusivos não-lineares da forma $\nabla \cdot (D_q \nabla p^q)$, obtemos uma equação de Fokker-Planck generalizada com termos de arraste não-lineares da forma $\nabla \cdot (p^q \nabla V_q)$, em que V_q pode ser interpretado como um potencial (ver equação (3.16)). Portanto, em contraste ao caso linear usual, o fator multiplicando a força $-\nabla V_q$ é p^q em vez de p . Interessantemente, também mostramos que se os potenciais V_q são proporcionais a uma função comum \tilde{V} , termos de arraste da forma $\nabla \cdot [\Phi(p) \nabla \tilde{V}]$ podem ser identificados na equação de Fokker-Planck generalizada. Nesse caso, $\Phi(p)$ pode ser uma função bastante geral de p e \tilde{V} pode ser visto como um potencial. Esse tipo de equação de Fokker-Planck tem sido estudada em vários trabalhos [3–5], mas sem muita ponderação sobre a origem da função $\Phi(p)$.

A equação de Fokker-Planck discutida no último capítulo, quando D_q são funções positivas não-constantes, podem ser relacionadas a um funcional tipo energia livre via um teorema H . Esse funcional pode ser visto como composto de uma energia interna usual e uma soma de várias formas entrópicas generalizadas \mathcal{S}_q (ver equação (5.14)). A forma entrópica generalizada \mathcal{S}_q , para valores inteiros de $q \geq 2$, generaliza a forma entrópica de Tsallis S_q e, curiosamente, depende explicitamente da posição através da função D_q (ver equação (5.15) e comparar com a equação (4.40)). Portanto, \mathcal{S}_q dá diferentes pesos para diferentes estados (posições). Especialmente, a extremização de \mathcal{S}_q somente sujeita ao vínculo de normalização de p resulta em $p(\mathbf{x}) \propto [D_q(\mathbf{x})]^{1/(1-q)}$ em vez de uma função constante.

Função de correlação dos ruídos ξ e ξ'

O ruído ξ é definido como:

$$\xi(\mathbf{x}, t) = - \sum_{i=1}^N \nabla \cdot (\boldsymbol{\eta}_i(t) \rho_i(\mathbf{x}, t)). \quad (\text{A.1})$$

Para manipular com mais facilidade os termos, vamos reescrever a equação em função de suas componentes:

$$\xi(\mathbf{x}, t) = - \sum_{i=1}^N \sum_{a=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_a} (\eta_{ia}(t) \rho_i(\mathbf{x}, t)). \quad (\text{A.2})$$

Multiplicando $\xi(\mathbf{x}, t)$ por um $\xi(\mathbf{y}, t')$, definido como

$$\xi(\mathbf{y}, t') = - \sum_{i=1}^N \nabla_{\mathbf{y}} \cdot (\boldsymbol{\eta}_i(t') \rho_i(\mathbf{y}, t')) = - \sum_{i=1}^N \sum_{b=1}^3 \frac{\partial}{\partial y_b} (\eta_{ib}(t') \rho_i(\mathbf{y}, t')), \quad (\text{A.3})$$

obtemos

$$\xi(\mathbf{x}, t) \xi(\mathbf{y}, t') = \sum_{i,j=1}^N \sum_{a,b=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_a} \frac{\partial}{\partial y_b} [\eta_{ia}(t) \eta_{jb}(t') \rho_i(\mathbf{x}, t) \rho_j(\mathbf{y}, t')]. \quad (\text{A.4})$$

Os termos de ruído η_{ia} e η_{jb} independem de x , portanto

$$\xi(\mathbf{x}, t) \xi(\mathbf{y}, t') = \sum_{i,j=1}^N \sum_{a,b=1}^3 \eta_{ia}(t) \eta_{jb}(t') \frac{\partial}{\partial x_a} \frac{\partial}{\partial y_b} [\rho_i(\mathbf{x}, t) \rho_j(\mathbf{y}, t')]. \quad (\text{A.5})$$

Calculando o valor médio, encontramos

$$\langle \xi(\mathbf{x}, t) \xi(\mathbf{y}, t') \rangle = \sum_{i,j=1}^N \sum_{a,b=1}^3 \langle \eta_{ia}(t) \eta_{jb}(t') \rangle \frac{\partial}{\partial x_a} \frac{\partial}{\partial y_b} [\rho_i(\mathbf{x}, t) \rho_j(\mathbf{y}, t')], \quad (\text{A.6})$$

em que podemos usar sua propriedade $\langle \eta_{ia}(t) \eta_{jb}(t') \rangle = 2T \delta_{ij} \delta_{ab} \delta(t - t')$:

$$\langle \xi(\mathbf{x}, t) \xi(\mathbf{y}, t') \rangle = \sum_{i,j=1}^N \sum_{a,b=1}^3 2T \delta_{ij} \delta_{ab} \delta(t - t') \frac{\partial}{\partial x_a} \frac{\partial}{\partial y_b} [\rho_i(\mathbf{x}, t) \rho_j(\mathbf{y}, t')]. \quad (\text{A.7})$$

Em seguida, a função delta δ_{ij} é somada em i, j , a δ_{ab} atua sobre as derivadas de respectivos índices a, b e $\delta(t - t')$ atua em t' :

$$\langle \xi(\mathbf{x}, t) \xi(\mathbf{y}, t') \rangle = \sum_{i=1}^N \sum_{a=1}^3 2T \delta(t - t') \frac{\partial}{\partial x_a} \frac{\partial}{\partial y_a} [\rho_i(\mathbf{x}, t) \rho_i(\mathbf{y}, t')]. \quad (\text{A.8})$$

Fazendo uso da propriedade da delta de Dirac

$$\rho_i(\mathbf{x}, t) \rho_i(\mathbf{y}, t) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \rho_i(\mathbf{x}, t) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \rho_i(\mathbf{y}, t), \quad (\text{A.9})$$

verificamos que

$$\langle \xi(\mathbf{x}, t) \xi(\mathbf{y}, t') \rangle = 2T \delta(t - t') \sum_{i=1}^N \sum_{a=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_a} \frac{\partial}{\partial y_a} [\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \rho_i(\mathbf{x}, t)], \quad (\text{A.10})$$

então, finalmente podemos somar os índices i e reescrever os termos a como ∇

$$\langle \xi(\mathbf{x}, t) \xi(\mathbf{y}, t') \rangle = 2T \delta(t - t') (\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \nabla_{\mathbf{y}}) [\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \rho(\mathbf{x}, t)]. \quad (\text{A.11})$$

Essa é a função de correlação do ruído ξ .

Agora, para calcular a função de correlação do ruído branco global ξ' , o procedimento é análogo ao usado para calcular a função de correlação do ruído ξ . Relembrando que o ruído ξ' é definido por

$$\xi'(\mathbf{x}, t) = \nabla \cdot (\boldsymbol{\eta}(\mathbf{x}, t) \rho^{\frac{1}{2}}(\mathbf{x}, t)) \quad (\text{A.12})$$

Reescrevendo em termos de suas componentes e multiplicando por $\xi'(\mathbf{y}, t')$, chegamos a

$$\xi'(\mathbf{x}, t) \xi'(\mathbf{y}, t') = \sum_{a,b=1}^3 \eta_a(\mathbf{x}, t) \eta_b(\mathbf{y}, t') \frac{\partial}{\partial x_a} \frac{\partial}{\partial y_b} [\rho^{\frac{1}{2}}(\mathbf{x}, t) \rho^{\frac{1}{2}}(\mathbf{y}, t')], \quad (\text{A.13})$$

encontrando o valor esperado

$$\langle \xi'(\mathbf{x}, t) \xi'(\mathbf{y}, t') \rangle = \sum_{a,b=1}^3 \langle \eta_a(\mathbf{x}, t) \eta_b(\mathbf{y}, t') \rangle \frac{\partial}{\partial x_a} \frac{\partial}{\partial y_b} [\rho^{\frac{1}{2}}(\mathbf{x}, t) \rho^{\frac{1}{2}}(\mathbf{y}, t')]. \quad (\text{A.14})$$

A seguir, substituindo a propriedade do ruído global (2.28), constatamos que

$$\langle \xi'(\mathbf{x}, t) \xi'(\mathbf{y}, t') \rangle = \sum_{a,b=1}^3 2T \delta(t - t') \delta_{a,b} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \frac{\partial}{\partial x_a} \frac{\partial}{\partial y_b} [\rho^{\frac{1}{2}}(\mathbf{x}, t) \rho^{\frac{1}{2}}(\mathbf{y}, t')], \quad (\text{A.15})$$

e atuando as funções delta de Dirac em seus respectivos índices, obtemos

$$\langle \xi'(\mathbf{x}, t) \xi'(\mathbf{y}, t') \rangle = \sum_{a=1}^3 2T \delta(t - t') \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \frac{\partial}{\partial x_a} \frac{\partial}{\partial y_a} [\rho^{\frac{1}{2}}(\mathbf{x}, t) \rho^{\frac{1}{2}}(\mathbf{x}, t')]. \quad (\text{A.16})$$

Finalmente, somos levados a

$$\langle \xi'(\mathbf{x}, t) \xi'(\mathbf{y}, t') \rangle = 2T \delta(t - t') (\nabla_x \cdot \nabla_y) [\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \rho(\mathbf{x}, t)]. \quad (\text{A.17})$$

Portanto, ambos os ruídos ξ (A.11) e ξ' (A.17) são estatisticamente idênticos pois possuem a mesma função de correlação.

Solução estacionária da equação de Fokker-Planck generalizada

Uma solução estacionária para a equação (4.29) deve satisfazer a equação

$$-\mathcal{A}(\mathbf{x})\rho_s(\mathbf{x}) + \mathcal{D}(\mathbf{x})\nabla \left(\frac{\rho_s(\mathbf{x})}{\mathcal{C}(\mathbf{x})} \right)^\nu = 0, \quad (\text{B.1})$$

em que temos assumido que a função ρ_s e suas derivadas são localizadas, ou seja, tendem a zero conforme $|\mathbf{x}| \rightarrow +\infty$. Segue daqui que

$$\mathcal{D}(\mathbf{x})\nabla \left(\frac{\rho_s(\mathbf{x})}{\mathcal{C}(\mathbf{x})} \right)^\nu = \mathcal{A}(\mathbf{x})\rho_s(\mathbf{x}). \quad (\text{B.2})$$

Usando a identidade (para o caso $\nu \neq 1$)

$$\nabla \left(\frac{\rho_s(\mathbf{x})}{\mathcal{C}(\mathbf{x})} \right)^\nu = \frac{\nu}{\nu-1} \frac{\rho_s(\mathbf{x})}{\mathcal{C}(\mathbf{x})} \nabla \left(\frac{\rho_s(\mathbf{x})}{\mathcal{C}(\mathbf{x})} \right)^{\nu-1}, \quad (\text{B.3})$$

encontramos

$$\nabla \left(\frac{\rho_s(\mathbf{x})}{\mathcal{C}(\mathbf{x})} \right)^{\nu-1} = \frac{\nu-1}{\nu} \frac{\mathcal{C}(\mathbf{x})\mathcal{A}(\mathbf{x})}{\mathcal{D}(\mathbf{x})}. \quad (\text{B.4})$$

Identificando o potencial $V(\mathbf{x})$, caracterizado pela equação (4.37), e integrando ambos os lados, podemos obter

$$\rho_s(\mathbf{x}) = \mathcal{C}(\mathbf{x}) \left[K - \frac{\nu-1}{\nu} V(\mathbf{x}) \right]^{\frac{1}{\nu-1}}, \quad (\text{B.5})$$

em que K é uma constante de integração. Usando a q -exponencial, definida na equação (1.55), essa equação pode ser reescrita como

$$\rho_s(\mathbf{x}) = N\mathcal{C}(\mathbf{x}) \exp_{2-\nu} \left[-\frac{V(\mathbf{x})}{\nu N^{\nu-1}} \right], \quad (\text{B.6})$$

em que $K = N^{\nu-1}$. No caso em que $\nu = 1$, a equação (B.2) se simplifica para

$$\nabla \ln \left(\frac{\rho_s(\mathbf{x})}{\mathcal{C}(\mathbf{x})} \right) = \frac{\mathcal{C}(\mathbf{x})\mathcal{A}(\mathbf{x})}{\mathcal{D}(\mathbf{x})} \quad (\text{B.7})$$

e conseqüentemente

$$\rho_s(\mathbf{x}) = N\mathcal{C}(\mathbf{x}) \exp^{-V(\mathbf{x})}, \quad (\text{B.8})$$

em que N é uma constante de normalização.

Para verificar que a solução estacionária ρ_s minimiza o funcional de energia livre $F[\rho]$ dado na equação (4.31), vamos mostrar que $F[\rho] \geq F[\rho_s]$. Para isso, primeiramente notamos que o potencial $V(\mathbf{x})$ pode ser escrito a partir da equação (B.5) como

$$V(\mathbf{x}) = \frac{\nu}{\nu-1} \left\{ K - \left[\frac{\rho_s(\mathbf{x})}{\mathcal{C}(\mathbf{x})} \right]^{\nu-1} \right\}. \quad (\text{B.9})$$

Então, o funcional $F[\rho]$ pode ser reescrito como

$$\begin{aligned} F[\rho] &= \int_{\mathbb{R}^3} V(\mathbf{x})\rho(\mathbf{x})d\mathbf{x} - \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\mathcal{C}^{1-\nu}(\mathbf{x})\rho^\nu(\mathbf{x}) - \rho(\mathbf{x})}{1-\nu} d\mathbf{x} \\ &= \frac{\nu K - 1}{\nu - 1} + \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\mathcal{C}^{1-\nu}(\mathbf{x})}{\nu - 1} [\rho^\nu(\mathbf{x}) - \nu\rho(\mathbf{x})\rho_s^{\nu-1}(\mathbf{x})] d\mathbf{x}. \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

Analogamente, temos que

$$F[\rho_s] = \frac{\nu K - 1}{\nu - 1} - \int_{\mathbb{R}^3} \rho_s^\nu(\mathbf{x})\mathcal{C}^{1-\nu}(\mathbf{x})d\mathbf{x}. \quad (\text{B.11})$$

Segue daqui que

$$\begin{aligned} F[\rho] - F[\rho_s] &= \int_{\mathbb{R}^3} \mathcal{C}^{1-\nu}(\mathbf{x}) \left[\frac{\rho^\nu(\mathbf{x}) - \nu\rho(\mathbf{x})\rho_s^{\nu-1}(\mathbf{x})}{\nu - 1} + \rho_s^\nu(\mathbf{x}) \right] d\mathbf{x} \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \mathcal{C}^{1-\nu}(\mathbf{x})\rho_s^\nu(\mathbf{x}) \left[\frac{\frac{\rho^\nu(\mathbf{x})}{\rho_s^\nu(\mathbf{x})} - \nu\frac{\rho(\mathbf{x})}{\rho_s(\mathbf{x})}}{\nu - 1} + 1 \right] d\mathbf{x} \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \mathcal{C}^{1-\nu}(\mathbf{x})\rho_s^\nu(\mathbf{x})g\left(\frac{\rho}{\rho_s}\right) d\mathbf{x}, \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

em que

$$g(z) = \frac{z^\nu - \nu z}{\nu - 1} + 1, \quad z \geq 0. \quad (\text{B.13})$$

Considerando $\nu > 0$, notamos que a função $g(z)$ tem um mínimo global no ponto 1 e conseqüentemente $g(z) \geq g(1) = 0$ para todo $z \geq 0$. Usando essa consideração e a equação (B.12), concluímos que $F[\rho] \geq F[\rho_s]$.

Referências Bibliográficas

- [1] Plastino, A. & Plastino, A. Non-extensive statistical mechanics and generalized Fokker-Planck equation. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* **222**, 347 – 354 (1995).
- [2] Tsallis, C. Possible generalization of Boltzmann-Gibbs statistics. *Journal of Statistical Physics* **52**, 479–487 (1988).
- [3] Schwämmle, V., Nobre, F. D. & Curado, E. M. F. Consequences of the H theorem from nonlinear Fokker-Planck equations. *Phys. Rev. E* **76**, 041123 (2007).
- [4] Schwämmle, V., Curado, E. M. & Nobre, F. D. A general nonlinear Fokker-Planck equation and its associated entropy. *The European Physical Journal B* **58**, 159–165 (2007).
- [5] Sicuro, G., Rapčan, P. & Tsallis, C. Nonlinear inhomogeneous Fokker-Planck equations: Entropy and free-energy time evolution. *Phys. Rev. E* **94**, 062117 (2016).
- [6] Casas, G. A., Nobre, F. D. & Curado, E. M. F. Entropy production and nonlinear Fokker-Planck equations. *Phys. Rev. E* **86**, 061136 (2012).
- [7] Yamano, T. General nonlinear Fokker-Planck equations with multiple potentials: H-theorem and constraints. *Eur. Phys. J. Plus* **133**, 439 (2018).
- [8] Plastino, A. R., Curado, E. M. F., Nobre, F. D. & Tsallis, C. From the nonlinear Fokker-Planck equation to the Vlasov description and back: Confined interacting particles with drag. *Phys. Rev. E* **97**, 022120 (2018).
- [9] Barbu, V. Generalized solutions to nonlinear Fokker-Planck equations. *Journal of Differential Equations* **261**, 2446–2471 (2016).

- [10] Ribeiro, M. S., Nobre, F. D. & Tsallis, C. Probability distributions and associated nonlinear Fokker-Planck equation for the two-index entropic form $S_{q,\delta}$. *Phys. Rev. E* **89**, 052135 (2014).
- [11] Mendes, R. S., Lenzi, E. K., Malacarne, L. C., Picoli, S. & Jauregui, M. Random walks associated with nonlinear Fokker-Planck equations. *Entropy* **19** (2017).
- [12] Ribeiro, M. S., Casas, G. A. & Nobre, F. D. Multi-diffusive nonlinear Fokker-Planck equation. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **50**, 065001 (2017).
- [13] Marin, D., Ribeiro, M., Ribeiro, H. & Lenzi, E. A nonlinear Fokker-Planck equation approach for interacting systems: Anomalous diffusion and Tsallis statistics. *Physics Letters A* **382**, 1903–1907 (2018).
- [14] Asgarani, S. Families of Fokker-Planck equations and the associated entropic form for a distinct steady-state probability distribution with a known external force field. *Phys. Rev. E* **91**, 022104 (2015).
- [15] dos Santos, M., Lenzi, M. & Lenzi, E. Nonlinear Fokker-Planck equations, H – theorem, and entropies. *Chinese Journal of Physics* **55**, 1294–1299 (2017).
- [16] Casas, G. A. & Nobre, F. D. Nonlinear Fokker-Planck equations in super-diffusive and sub-diffusive regimes. *Journal of Mathematical Physics* **60**, 053301 (2019).
- [17] Tomé, T. & Oliveira, M. J. *Dinâmica estocástica e irreversibilidade* (EDUSP, São Paulo, 2014), 2 edn.
- [18] van Erven, T. & Harremoës, P. Rényi divergence and Kullback-Leibler divergence. *IEEE Transactions on Information Theory* **60**, 3797–3820 (2014).
- [19] Muskat, M. *The flow of homogeneous fluids through porous media* (McGraw-Hill, New York, 1937).
- [20] Tsallis, C. & Bukman, D. J. Anomalous diffusion in the presence of external forces: Exact time-dependent solutions and their thermostistical basis. *Phys. Rev. E* **54**, R2197–R2200 (1996).
- [21] Tsallis, C. *Introduction to nonextensive statistical mechanics: Approaching a complex world* (Springer, New York, 2009).
- [22] Dean, D. S. Langevin equation for the density of a system of interacting Langevin processes. *Journal of Physics A: Mathematical and General* **29**, L613 (1996).
- [23] Chavanis, P.-H. Generalized stochastic Fokker-Planck equations. *Entropy* **17**, 3205–3252 (2015).

- [24] Chavanis, P.-H. The generalized stochastic Smoluchowski equation. *Entropy* **21** (2019).
- [25] Le Gall, J. *Brownian motion, martingales, and stochastic calculus* (Springer, Switzerland, 2016).
- [26] Andrade, J. S., da Silva, G. F. T., Moreira, A. A., Nobre, F. D. & Curado, E. M. F. Thermostatistics of overdamped motion of interacting particles. *Phys. Rev. Lett.* **105**, 260601 (2010).
- [27] Souza, A. M., Andrade, R. F., Nobre, F. D. & Curado, E. M. Thermodynamic framework for compact q-Gaussian distributions. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* **491**, 153–166 (2018).
- [28] Ribeiro, M. S. & Nobre, F. D. Repulsive particles under a general external potential: Thermodynamics by neglecting thermal noise. *Phys. Rev. E* **94**, 022120 (2016).
- [29] Curado, E. M. F., Souza, A. M. C., Nobre, F. D. & Andrade, R. F. S. Carnot cycle for interacting particles in the absence of thermal noise. *Phys. Rev. E* **89**, 022117 (2014).
- [30] Lenzi, E. K., Mendes, R. S. & Tsallis, C. Crossover in diffusion equation: Anomalous and normal behaviors. *Phys. Rev. E* **67**, 031104 (2003).
- [31] Vieira, C. M., Carmona, H. A., Andrade, J. S. & Moreira, A. A. General continuum approach for dissipative systems of repulsive particles. *Phys. Rev. E* **93**, 060103 (2016).
- [32] Frank, T. D. *Nonlinear Fokker-Planck equations: fundamentals and applications* (Springer, Berlin, 2005).
- [33] Risken, H. *The Fokker-Planck equation: methods of solution and applications* (Springer, Berlin, 1996), 2 edn.
- [34] Jauregui, M., Lucchi, A. L. F., Passos, J. H. Y. & Mendes, R. S. Stationary solution and H -theorem for a generalized Fokker-Planck equation. *Phys. Rev. E* **104**, 034130 (2021).
- [35] Kullback, S. & Leibler, R. A. On information and sufficiency. *Ann. Math. Statist.* **22**, 79 (1951).
- [36] Herbert Spohn. Surface dynamics below the roughening transition. *J. Phys. I France* **3**, 69–81 (1993).
- [37] Levin, Y. & Pakter, R. Comment on “thermostatistics of overdamped motion of interacting particles”. *Phys. Rev. Lett.* **107**, 088901 (2011).
- [38] Andrade, J. S., da Silva, G. F. T., Moreira, A. A., Nobre, F. D. & Curado, E. M. F. Andrade et al. reply. *Phys. Rev. Lett.* **107**, 088902 (2011).